

## DESARROLLAN TECNOLOGÍA CLOUD CONTRA LA MALARIA

- **Galicia y Castilla-León desarrollan el primer Cloud internacional entre Centros de Supercomputación para la búsqueda de nuevos fármacos.**
- **Se empleó "OpenNebula", el software desarrollado en España para computación Cloud.**

**Santiago, 29 de Octubre de 2010.-** El Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) y la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCCL), han realizado la **primera experiencia internacional de cloud de Computación de Altas Prestaciones (HPC) entre centros de supercomputación**, para dar respuesta a la solicitud urgente del grupo "Scientists Against Malaria" (Científicos contra la Malaria), una organización virtual de investigadores de diferentes disciplinas y pequeñas compañías innovadoras que colaboran en la **búsqueda de nuevos fármacos contra la malaria**. El trabajo se enmarca dentro del **Proyecto Europeo del Séptimo Programa Marco SYNERGY**, uno de cuyos objetivos es **consolidar estrategias de trabajo colaborativo en el campo del diseño de fármacos asistido por ordenador**.

El grupo de investigación del Dr. Hugo Gutierrez de Terán, de la Fundación Pública Galega de Medicina Xenómica, (FPGMX) y miembro del Scientists Against Malaria, solicitó realizar, mediante diferentes métodos computacionales, el cribado virtual de una quimioteca de 350.000 compuestos químicos originales, a estudiar sobre una diana terapéutica seleccionada para posteriormente desarrollar, a partir de los hallazgos, nuevos fármacos contra el parásito Plasmodium, causante de esta enfermedad. *"Actualmente el estudio está en fase de análisis de resultados, concretamente nuestras propuestas de cribado virtual están siendo validadas biológicamente, por lo que de momento no podemos avanzar más detalles"*, señala Gutiérrez de Terán.

El objetivo es generar una lista de posibles moléculas candidatas para pasar a ensayo biológico, empleando de forma paralela dos metodologías independientes de acoplamiento ligando-receptor o docking. (En el campo del Modelado Molecular, este es un método que predice la orientación preferida de una molécula, al estar unida a otra, con el fin de formar un complejo estable. El conocimiento de la orientación preferida a su vez puede ser usada para predecir la fuerza de la asociación o la afinidad de enlace entre dos moléculas).

Como parte previa a este estudio, los investigadores del grupo del Dr. Gutierrez de Terán generaron una colección de las especies moleculares posibles para cada uno de los compuestos químicos, considerando todos los posibles isómeros (*compuestos con la misma composición atómica pero diferente fórmula estructural*) tautómeros (*dos isómeros que se diferencian sólo en la posición de un grupo funcional*) y estados de protonación (*adición de un protón a un átomo o a una molécula*) que dio lugar a una **colección procesada de 1,238.000 moléculas**. Este tipo de cálculos exige gran cantidad de recursos computacionales, que solo pueden ser realizados en centros de supercomputación.

### UN CLOUD A MEDIDA

El CESGA, para no perjudicar el trabajo de otros usuarios del centro y ante la urgencia de la solicitud, que requería gran cantidad de recursos de cálculo, decidió desarrollar un cloud computacional híbrido en colaboración con el FCSCCL, aprovechando el marco del acuerdo de cooperación firmado meses atrás entre los presidentes de las comunidades

autónomas de Galicia y Castilla-León. En su cláusula decimoquinta se considera de interés la colaboración entre ambos centros *“como elemento fundamental en el apoyo al desarrollo de programas de investigación e innovación tecnológica en sus respectivas Autonomías en particular y España en general, mediante el uso del cálculo intensivo”*.

Esta es la primera experiencia internacional en la que dos Centros de Supercomputación crean un Cloud HPC conjunto utilizando equipamiento de computación y almacenamiento distribuido entre ambas instituciones. Para la interconexión de los centros se utilizó la red de investigación y académica RedIris, que proporcionó el ancho de banda necesario para la experiencia.

Los técnicos del CESGA emplearon el cloud desarrollado en el marco del Proyecto NUBA, extendiéndolo al equipamiento de la FCSC. La gestión de ambos centros se realizó utilizando el software para computación Cloud desarrollado en España “OpenNebula”, que gestiona los nodos de ambas localizaciones, desplegando las máquinas virtuales indistintamente en una u otra en función criterios de optimización de los recursos de computación. Según Ignacio Martín Llorente, miembro del Proyecto OpenNebula, *“Esta es la primera experiencia internacional de cloud híbrido entre centros de supercomputación de modo que la infraestructura del centro partner se pueda usar para satisfacer picos de demanda”*.

La colaboración entre ambos centros en la implementación de este cloud, además de suponer un apoyo fundamental en el desarrollo de la investigación de grupos internacionales, supone un paso más en la investigación de las tecnologías cloud para servicios de computación, ya que se ha generado en base a proyectos en curso dentro del propio centro. El éxito de la experiencia abre la puerta a nuevas colaboraciones puntuales entre centros nacionales e internacionales, lo que permitiría satisfacer demandas muy exigentes de computación para proyectos de investigación casi inmediatamente.

El **Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)** es una Fundación participada por la Xunta de Galicia y por el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Desde su creación en 1993, el CESGA tiene la misión de contribuir al avance de la ciencia y la técnica mediante la investigación y aplicación de computación y comunicaciones de altas prestaciones, en colaboración con otras instituciones, para beneficio de la sociedad.

La **Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSC)** es una entidad pública creada en 2008 por la Junta de Castilla y León y la Universidad de León, que tiene por objeto la mejora de las tareas de investigación de: la universidad, los centros de investigación y las empresas de Castilla y León.

Más información:

[www.cesga.es](http://www.cesga.es)

<http://www.fcsc.es/>

[www.synergy-ist.eu](http://www.synergy-ist.eu)

[www.opentox.org](http://www.opentox.org)

Contacto:

[promocion@cesga.es](mailto:promocion@cesga.es)

+34 981 569 810 - 235