

DESENVOLVEN TECNOLOXÍA CLOUD CONTRA A MALARIA

- ***Galicia e Castela-León desenvolven o primeiro Cloud internacional entre Centros de Supercomputación para a busca de novos fármacos.***
- ***Empregouse "OpenNebula", o software desenvolvido en España para computación Cloud.***

Santiago, 29 de Outubro de 2010. - O Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) e a Fundación Centro de Supercomputación de Castela e León (FCSCCL), realizaron a **primeira experiencia internacional de cloud de Computación de Altas Prestacións (HPC) entre centros de supercomputación**, para dar resposta á solicitude urxente do grupo "Scientists Against Malaria" (Científicos contra a Malaria), unha organización virtual de investigadores de diferentes disciplinas e pequenas compañías innovadoras que colaboran na **busca de novos fármacos contra a malaria**. O traballo enmárcase dentro do Proxecto Europeo do Sétimo Programa Marco SYNERGY, un de cuxos obxectivos é **consolidar estratexias de traballo colaborador no campo do deseño de fármacos asistido por ordenador**.

O grupo de investigación do Dr. Hugo Gutierrez de Terán, da Fundación Pública Galega de Medicina Xenómica, (FPGMX) e membro do Scientists Against Malaria, solicitou realizar, mediante diferentes métodos computacionais, o cribado virtual dunha **quimioteca de 350.000 compostos químicos orixinais**, a estudar sobre unha diana terapéutica seleccionada para posteriormente desenvolver, a partir dos achados, novos fármacos contra o parasito Plasmodium, causante desta enfermidade. *"Actualmente o estudo está en fase de análise de resultados, concretamente as nosas propostas de cribado virtual están a ser validadas bioloxicamente, polo que de momento non podemos avanzar máis detalles,"* sinala Gutiérrez de Terán.

MAIS DE UN MILLON DE MOLECULAS

O obxectivo é xerar unha lista de posibles moléculas candidatas para pasar a ensaio biolóxico, empregando de forma paralela dúas metodoloxías independentes de acoplamento ligando-receptor ou docking. (No campo do Modelado Molecular, este é un método que predí a orientación preferida dunha molécula, ao estar unida a outra, co fin de formar un complexo estable. O coñecemento da orientación preferida á súa vez pode ser usada para predicir a forza da asociación ou a afinidade de enlace entre dúas moléculas).

Como parte previa a este estudo, os investigadores do grupo do Dr. Gutierrez de Terán xeraron unha colección das especies moleculares posibles para cada un dos compostos químicos, considerando todos os posibles isómeros (compostos coa mesma composición atómica pero diferente fórmula estrutural) tautómeros (dous isómeros que se diferencian só na posición dun grupo funcional) e estados de protonación (adición dun protón a un átomo ou a unha molécula) que deu lugar a unha **colección procesada de 1,238.000 moléculas**. Este tipo de cálculos esixe gran cantidade de recursos computacionais, que só poden ser realizados en centros de supercomputación.

UN CLOUD Á MEDIDA

O CESGA, para non prexudicar o traballo doutros usuarios do centro e ante a urxencia da solicitude, que requiría gran cantidade de recursos de cálculo, decidiu desenvolver un cloud computacional híbrido en colaboración co FCSCCL, aproveitando o marco do acordo

de cooperación asinado meses atrás entre os presidentes das comunidades autónomas de Galicia e Castela-León. Na súa cláusula décimo quinta considérase de interese a colaboración entre ambos "os" dous centros como elemento fundamental no apoio ao desenvolvemento de programas de investigación e innovación tecnolóxica nas súas respectivas Autonomías en particular e España en xeral, mediante o uso do cálculo intensivo".

Esta é a primeira experiencia internacional na que dous Centros de Supercomputación crean un Cloud HPC conxunto utilizando equipamento de computación e almacenamento distribuído entre ambas as dúas institucións. Para a interconexión dos centros utilizouse a rede de investigación e académica RedIris, que proporcionou o ancho de banda necesario para a experiencia.

Os técnicos do CESGA empregaron o cloud desenvolvido no marco do Proxecto NUBA, estendéndoo ao equipamento da FCSC. A xestión de ambos os dous centros realizouse utilizando o software para computación Cloud desenvolvido en España "OpenNebula", que xestiona os nodos de ambas as dúas localizacións, despregando maquinaas virtuais indistintamente nunha ou outra en función criterios de optimización dos recursos de computación. Segundo Ignacio Martín Llorente, membro do Proxecto OpenNebula, "esta é a primeira experiencia internacional de cloud híbrido entre centros de supercomputación de modo que a infraestrutura do centro partner se poida usar para satisfacer picos de demanda".

A colaboración entre ambos os dous centros na implementación deste cloud, ademais de supoñer un apoio fundamental no desenvolvemento da investigación de grupos internacionais, supón un paso máis na investigación das tecnoloxías cloud para servizos de computación, xa que se xerou sobre a base de proxectos en curso dentro do propio centro. O éxito da experiencia abre a porta a novas colaboracións puntuais entre centros nacionais e internacionais, o que permitiría satisfacer demandas moi esixentes de computación para proxectos de investigación case inmediatamente.

O Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) é unha Fundación participada pola Xunta de Galicia e polo Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC). Dende a súa creación en 1993, o CESGA ten a misión de contribuír ao avance da ciencia e a técnica mediante a investigación e aplicación de computación e comunicacións de altas prestacións, en colaboración con outras institucións, para beneficio da sociedade.

A Fundación do Centro de Supercomputación de Castela e León (FCSC) é unha entidade pública creada en 2008 pola Xunta de Castela e León e a Universidade de León, que ten por obxecto a mellora das tarefas de investigación de: a universidade, os centros de investigación e as empresas de Castela e León.

Máis información:

www.cesga.es

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

www.synergy-ist.eu

www.opentox.org

Contacto:

promocion@cesga.es

+34 981 569 810 - 235