

## ¿Nuevos laboratorios científicos?

# De la pipeta al computador

*Gracias a los avances en computación, se han generado posibilidades de cálculos asociados a distintas áreas del conocimiento, en las que el investigador puede no sólo contar con programas que simulen situaciones reales para su estudio, sino también -algo que empieza a movilizar la idea de hacer ciencia- poder disponer de miles de datos científicos para la búsqueda de soluciones en temas como salud, geografía y ambiente.*

Un laboratorio es conocido como el lugar donde se hacen trabajos técnicos o investigaciones científicas. Si se juzga por la idea construida desde la escuela, reforzada por las viejas narraciones cinematográficas, un laboratorio es un lugar cerrado, casi siempre en penumbras, donde se logran combinaciones que atentan con cabelleras bien peinadas, y en el que de manera solitaria algún día el científico dice ¡Eureka!.

No es difícil imaginar la humilde casa de Padua en la que Galileo buscaba demostrar la validez del nuevo sistema universal copernicano con tablas astronómicas en papel, modelos de madera y piedritas que simulaban astros y estrellas. O el laboratorio donde Watson y Crick dejaron sus horas para luego descubrir la estructura molecular de los ácidos nucleicos, con cientos de imágenes capturadas en rayos X de ADN cristalizado. Pero si hoy nos acercamos a pequeños espacios donde alguien pareciera jugar con una computadora, con la mirada fija en un monitor que despliega figuras tridimensionales, es mejor no apresurarse a sacar conclusiones, probablemente se trate de un científico que maneja nuevas pipetas o estudia

*Uno de los últimos retos para los computistas ha sido crear las condiciones para almacenar la ingente cantidad de datos científicos que se derivan de los últimos estudios, principalmente los relacionados con astrofísica, física de altas energías y genética.*



genes; y, algo más cómodamente sentado probablemente podría encontrarse trabajando con decenas de colegas en cualquier parte del mundo y estudiando problemas típicos de un laboratorio.

Hoy día, gracias a los avances en computación, se han generado posibilidades de cálculos asociados a distintas áreas del conocimiento, en las que el científico puede no sólo contar con programas que simulen situaciones reales para su estudio, sino también -algo que empieza a

movilizar la idea de hacer ciencia- poder disponer de miles de datos científicos para la búsqueda de soluciones en temas como salud, geografía y ambiente.

Uno de los últimos retos para los computistas ha sido crear las condiciones para almacenar la ingente cantidad de datos científicos que se derivan de los últimos estudios, principalmente los relacionados con astrofísica, física de altas energías y genética. Según un análisis dado a conocer recientemente por más de treinta investigadores pertenecientes al “Grupo de la Ciencia 2020”, la informática se convierte en un potencial que podría revolucionar el modo en que se dirige la ciencia gracias a que responde progresivamente a las posibilidades de análisis de grandes cantidades de información científica.

Este desafío de guardar grandes cantidades de datos científicos ha puesto a los computistas a pensar en soluciones que hace unas décadas no eran imaginadas fácilmente: una gran red que conecta a cientos de computadoras en el mundo podría ayudar a ampliar las capacidades para almacenar los miles de millones de bytes que se requieren en estudios científicos recientes, como por ejemplo el Proyecto Genoma Humano.

Gracias a las posibilidades ofrecidas por Internet, actualmente se buscan mecanismos para compartir los distintos recursos de computación de los que disponen los centros de investigación en el mundo y se hacen las primeras pruebas para el manejo distribuido de grandes bases de datos. Esto plantea una condición de ubicuidad de equipos, permitiendo al investigador calcular, y acceder a datos, sin que importe la ubicación geográfica y física de las operaciones.

***La tecnología GRID permite hacer de la Internet un gran computador omnipresente, ya que los cálculos son ubicados según la disponibilidad de los recursos.***



*Hoeger: “Si se interconectan recursos de computación las universidades ahorrarían comprar más máquinas que las necesarias”.*

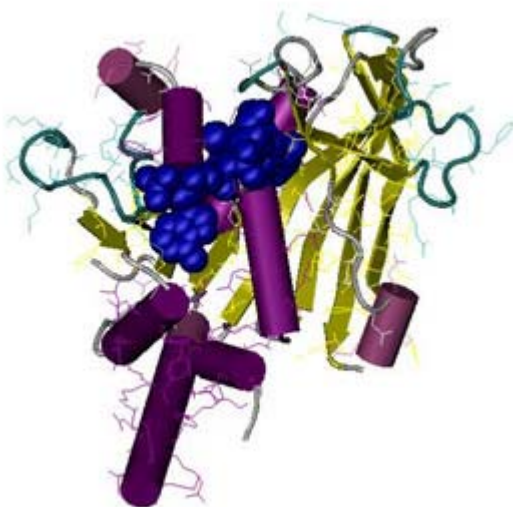
Una de las tecnologías que está detrás de todo esto se conoce como GRID, término que los expertos asocian con las experiencias de las redes de distribución de electricidad. La tecnología GRID permite hacer de la Internet un gran computador omnipresente, ya que los cálculos son ubicados según la disponibilidad de los recursos. De esta forma, inmensos archivos de datos son distribuidos en cientos de computadores, manipulados como si estuvieran en un solo equipo, lo que facilita las aplicaciones en distintas investigaciones científicas.

Recientemente se anunció el éxito de las primeras pruebas de colaboración entre la Unión Europea y varios Centros de América Latina para compartir recursos e infraestructuras computacionales que permiten manejar grandes bases de datos, y utilizar un gran número de computadores dispuestos por varias decenas de centros distribuidos en los dos continentes. Estas pruebas se realizan en el contexto del Proyecto EELA (E-infraestructura compartida entre Europa y América Latina), el cual busca crear redes de colaboración para apoyar el desarrollo y prueba de aplicaciones

avanzadas asociadas inicialmente a Biomedicina, Física de Altas Energías, Educación y Clima.

Herbert Hoeger, profesor de la Universidad de Los Andes y enlace nacional con las primeras pruebas de la tecnología GRID con Europa y América Latina, explica que la idea es activar una experiencia inicialmente aplicada a la investigación académica, similar a lo que actualmente ocurre con la Web, a través de la cual la información es distribuida en todo el mundo. “El GRID es similar a la Web pero en términos de distribución de los recursos de computación. Si un investigador tiene que usar un montón de programas para hacer análisis en una determinada área de estudio, probablemente no tenga los recursos necesarios para almacenar y procesar la información. Entonces el ideal es que si se conecta a la GRID, pueda compartir recursos computacionales que están en red, correr programas y almacenar datos en otros lugares”.

Este asunto implica, más allá de la disposición a utilizar herramientas ofrecidas por la informática, un espíritu de colaboración de los distintos centros de investigación académica en el mundo



En Mérida se realizan estudios computacionales que analizan grandes cantidades de datos sobre el parásito de la malaria

para fortalecer la capacidad de respuesta en la actividad científica. Así explica Hoeger que “actualmente se encuentra un montón de recursos subutilizados en el mundo. En las universidades hay miles de laboratorios de informática en donde, por ejemplo, las máquinas no se usan de noche. Si se interconectan estos recursos las universidades se ahorrarían la inversión para comprar más máquinas que las necesarias porque se puede hacer uso de equipos ociosos internos y externos. Se trata de un mundo de posibilidades para hacer uso de la informática en la investigación académica, a partir de la cual el investigador podría mejorar su productividad”.

Actualmente las primeras experiencias pilotos de computación distribuida se encuentran en proceso de maduración y empiezan las primeras discusiones sobre los términos de intercambio y estudios sobre implicaciones de seguridad. Las pruebas efectivas iniciales del Proyecto EELA incluyen a México, Brasil y, con mucho orgullo Venezuela, cuyo enlace se realiza a través del Centro Nacional de Cálculo Científico de la Universidad de Los Andes (CeCalCULA), estructura que funciona en el Parque Tecnológico de Mérida.

La inserción de CeCalCULA en el proyecto EELA aprovecha la estructura de Internet2 financiada por el proyecto Reacciun2 del Centro Nacional de Tecnologías e Información (CNTI) y centros de educación superior como la Universidad de Los Andes.

### Experiencia para estudiar la malaria

Venezuela participa, a través de CeCalCULA, en el Proyecto Internacional Wisdom Data Challenge en el que Francia y distintos países latinoamericanos hacen uso de la tecnología GRID para analizar miles de datos que permiten comprender la interacción de drogas con el parásito responsable de la malaria, enfermedad que afecta a más de un millón de personas en América Latina.

Raúl Isea, responsable del Proyecto en Venezuela, explica que la tecnología GRID es la herramienta de cálculo factible para poder lograr simulaciones computacionales que permitan descartar una gama de familias muy grandes y reducir los riesgos de error para determinar cuáles podrían ser las vacunas efectivas o no. “Los estudios tradicionales para el desarrollo de medicamentos actúan en forma aleatoria. Lo que queremos con el proyecto en el que estamos involucrados es realizar estudios computacionales con ciertos niveles de rigurosidad con meses de cálculos consecutivos, tomando la mayor cantidad de compuestos y probándolos en el computador. Así se detecta si los compuestos pueden tener una actividad interesante para inhibir la enfermedad. Y luego brindar posibilidades para que los ensayos in vitro logren un estudio más dirigido o focalizado”.

En el caso de Venezuela, se realizan los estudios de cálculo con el *plasmodium vivax*, la especie más peligrosa en América Latina, responsable de producir malaria en aproximadamente 80 mil personas anuales. Estos cálculos hacen suponer que se trata de un laboratorio virtual que podría facilitar los próximos estudios experimentales para el desarrollo de productos médicos contra la malaria, reduciendo los riesgos. “Si sabemos cuáles son las proteínas a las cuales pueden llegar las drogas conocidas por estudios experimentales, ensayamos sobre un banco de datos de drogas que se han desarrollado con una determinada conformación y detectamos cuál combinación de esas drogas interacciona con las proteínas que nosotros hemos puesto y que pueden ser blanco para el desarrollo de la malaria” explica Isea.

La experiencia es liderada por el investigador francés Vincent Bretton, quien vio en el poder de cómputo que se manifiesta a través de Internet la posibilidad de masificar los cálculos en estos estudios. “Este es el segundo cálculo a gran escala que se hace de forma internacional -comenta Isea. Primero se realizó en diez o veinte compuestos en determinadas proteínas. Pero en esta oportunidad podemos ensayar en más de mil compuestos, gracias a la facilidad que permite la interconexión

de recursos de computación con la tecnología GRID. Ahora hay mayor capacidad de almacenamiento y cómputo para estos estudios”. Los resultados de este estudio interdisciplinario con investigadores en distintos países, sólo podrán medirse en gigabytes.

### ¿Nueva ciencia?

Ya se asoman los términos de terabytes y posiblemente petabytes para referirse a la impensada cantidad de datos electrónicos que se han derivado de la reciente actividad científica. Ha llegado a estimarse que sólo en el último año la cantidad de datos científicos supera todos los años anteriores desde que comenzó la ciencia. Más allá de la capacidad de almacenar datos, se empieza a hablar de nuevas necesidades surgidas por el acceso y forma de procesar la información científica. ¿Una nueva manera de hacer ciencia?

Mientras tanto, los propulsores de esta tendencia en Venezuela apuestan a que la comunidad científica se una al proyecto GRID. “Se convierte, definitivamente, en una herramienta al servicio de nuestros investigadores. Una tremenda oportunidad para nuestra comunidad académica”, expresa el director de CeCalCULA, Luis Núñez. “Debemos ayudar a crecer esta propuesta. Lo más importante de este esfuerzo, es su espíritu colaborativo y la posibilidad de escalar a medida que otros centros del país se sumen y coloquen sus equipos a la disposición del colectivo”.

Texto: Ysabel Briceño

Ilustración: Taima Pérez

Fotos: Archivo CInnovación

Ciudad Innovación

[www.cptm.ula.ve/ciudadinnovacion](http://www.cptm.ula.ve/ciudadinnovacion)

Ciudad Innovación / en red  
Un espacio de divulgación científica y tecnológica  
desarrollado por el

  
Parque Tecnológico  
Mérida - Venezuela  
[www.cptm.ula.ve](http://www.cptm.ula.ve)