

Caso de Estudio ALICE2

Mylims: Una destacada experiencia para el tratamiento de datos y la manipulación de espectros de Resonancia Magnética Nuclear, abierta, gratuita y en línea

A través de las redes avanzadas de América Latina, RedCLARA y Europa, GEANT, un grupo de investigadores desarrolló una aplicación abierta a toda la comunidad científica. A cinco años de su origen la iniciativa ha sido

aplicada con grandes resultados en ámbitos como el café y la medicina, cuenta con usuarios habituales, es utilizada en el área de la educación y ha sido el punto de partida para otros proyectos.

“Esta plataforma permite que los datos adquiridos sean compartidos, pero no únicamente los datos, sino también el análisis de estos datos. Para eso es necesario poder extraer de la manera más eficiente, la información obtenida con los experimentos de RMN (Resonancia Magnética Nuclear). Esa información permite entender a escala atómico la composición de una muestra. De esta manera permitimos que equipos que valen más de mil millones de pesos trabajen de manera continua y no únicamente durante los horarios hábiles”, explica el químico e investigador Julien Wist quien con el apoyo de Luc Patiny desde Suiza y Edgar Daza y Cristian Blanco en Colombia, ideó y echó a andar Mylims (My Laboratory Information Management System- Mi Sistema de Administración de Información de Laboratorio).

La iniciativa pone a disposición de la comunidad académica una poderosa herramienta que permite procesar de forma libre, abierta y desde cualquier computador conectado a Internet, los datos, manipular los espectros, interpretar los resultados



y luego compararlos con los espectros obtenidos por otros usuarios y que son almacenados en bases de datos.

Las aplicaciones de Mylims abarcan trabajos en el campo de la química y la medicina. De esta forma, según Wist el tener acceso a este tipo de información permite por ejemplo la identificación de los compuestos presentes en una mezcla, comparar dos mezclas entre sí o diagnosticar enfermedades. *“Nuestro grupo ha podido construir un sistema experto para detectar fraudes en el café y ha detectado varios casos reales para*

la industria nacional (Almacafé). También permite comparar extractos de células sanas y extractos de células leucémicas (colaboración con el grupo de Ismael Samudio, Javeriana Bogotá), y esperamos que permita encontrar cuales compuestos, biomarcadores, son responsables o evidencian la enfermedad. Además ya existen diagnósticos pre-natales por RMN y hay varios exámenes que detectan enfermedades a partir de la orina usando RMN para identificar anomalías, gracias al trabajo pionero de un grupo de científicos del Imperial College de Londres”, agrega.

¿Los resultados de esta experiencia?

Wist afirma: "Existen alrededor de doscientos usuarios que trabajan todos los días con nuestro sistema. Existen desarrolladores que quieren subirse a bordo y usar nuestra herramienta para unificar el análisis de datos espectroscópicos. Existen cursos virtuales basados en nuestra herramienta y usando nuestros datos. Tres empresas financian nuestro esfuerzo. Tenemos un proyecto financiado en Europa que implica 6 grupos de 6 países para seguir desarrollando en el tema de RMN de sólidos. Son más de dos mil clics diarios sobre nuestras herramientas, somos primeros en google (nmrdb.org es donde tenemos descritas las herramientas del lims) delante de programas muy reconocidos, nuestro artículo sobre simulación de espectros fue el más descargado de la revista *Journal of Magnetic Resonance* durante dos meses, el poster de mi estudiante Andrés Mauricio Castillo fue premiado el año pasado... ¡y todavía nos gusta lo que hacemos!"



Red en uso

Para el desarrollo del proyecto, el equipo utilizó la conexión de la red nacional de Colombia, RENATA con RedCLARA: "Este procedimiento no tendría ningún sentido sin una red veloz. Estamos hablando de espectros de resonancia que pueden pesar hasta 128 Mb y la idea es trabajar con ellos en red es decir que se tienen en el momento que subir y descargar idealmente en menos de segundos y eso no sería posible sin una red de ultra alta velocidad" señala Julien Wist y agrega "queremos aprovechar la computación sobre grids para poder predecir una cierta cantidad de propiedades para cada molécula, esto también requiere de una conectividad buena".

mylims.org

El sitio cuenta con un tour guiado, información sobre su uso (aplicable a ambientes de e- educación) y un apartado de preguntas frecuentes que incluye información sobre el funcionamiento de la plataforma, los requerimientos del sistema y los ejercicios.

Más información:

<http://www.mylims.org>
<http://www.nmrlab.org/>

RENATA: <http://www.renata.edu.co/index.php/component/content/article/5-noticias/2525-colombia-tiene-una-de-las-mas-altas-cobertura-en-banda-ancha-de-america-latina-hecho-que-tenemos-que-aprovechar-para-educar-y-hacer-ciencia.html>

Es muy importante mantener una red de alta velocidad de transmisión de datos que permita la conexión entre los diferentes actores del proceso de análisis de muestras utilizando RMN en Colombia. Una red dedicada permite subir los archivos al servidor mylims y hacer el análisis de manera rápida. También nos permite el rápido acceso a la base de datos de manera que se puedan contrastar los resultados con los ya obtenidos por usuarios anteriores.



Cristian Blanco Tirado, Profesor de la Escuela de Química y Rector Universidad Industrial de Santander (UIS), Colombia.

Estamos trabajando por el desarrollo de la ciencia para reducir la brecha entre los países en desarrollo y los desarrollados y una red de Internet eficiente realmente ayuda. La capacidad de cálculos en mallas computacionales ofrecidos por GEANT-RedCLARA fue importante para el desarrollo del proyecto. Hoy no hay más opción que ofrecer una excelente conexión no solo para la investigación sino también para la formación de estudiantes.



Luc Patiny, PhD, Director de Información Química Escuela Politécnica Federal de Lausana (EPFL), Suiza.

ALICE2 es un proyecto financiado por la Unión Europea

Proyecto implementado por RedCLARA

