

## **Forschung in Rekord-Zeit dank Cloud Computing**

Cloud Computing hilft Forschenden der ETH Zürich bei Strukturbestimmung von Proteinen zur Bekämpfung hochgefährlicher Bakterien

Zürich, Schweiz, 12. 05. 2011 – Forscher der ETH Zürich, das Start-Up Unternehmen CloudBroker und IBM Schweiz demonstrieren gemeinsam, wie Cloud Computing Spitzenforschung beschleunigen kann.

In einer Simulation konnten Forscher des Institute of Molecular Systems Biology der ETH Zürich neue Erkenntnisse über die Struktur bestimmter Proteine von für den Menschen gefährlichen Streptokokken-Bakterien erzielen. Diese Erkenntnisse sind wichtig zum Beispiel für die Entwicklung neuer Antibiotika. Sie werden dringend benötigt für eine bessere Behandlung von oft lebensgefährlichen Erkrankungen durch multiresistente Bakterien.

Dank Cloud Computing konnte die zur Berechnung der dreidimensionalen Protein-Modelle benötigte Rechnerleistung schnell zur Verfügung gestellt werden. „Ohne Cloud Computing hätte dieses Experiment mehrere Monate gedauert. Nun bekamen wir die Ergebnisse innerhalb von nur zwei Wochen“, erklärt ETH-Forscher Dr. Lars Malmström, der die entsprechenden Forschungsarbeiten leitet.

Für das Experiment unter der Schirmherrschaft des Systembiologie-Konsortiums SystemsX setzte das Team rund um Dr. Malmström auf die Open-Source Lösung Rosetta, eine Suite für die Berechnung und Vorhersage dreidimensionaler Proteinstrukturen. Das ETH Spin-Off CloudBroker war dafür verantwortlich, Software und Infrastruktur über ihre Plattform optimal zu verbinden und zu betreiben. „Die Forscher benötigen einen direkten Zugang zu ihrer Software in der Cloud, ohne über die darunterliegende Infrastruktur nachdenken zu müssen“, sagt Dr. Wibke Sudholt, CEO bei CloudBroker. „Wir haben Rosetta deswegen als einen Service auf unserer Cloud-Plattform zur Verfügung gestellt.“

IBM schliesslich stellte die nötigen Cloud Computing Ressourcen für das Experiment zur Verfügung. „Aus der IBM Smart Cloud Enterprise hatte das Team Zugriff auf nahezu 250.000 Stunden Rechenzeit auf insgesamt 1.000 parallelen Prozessoren. Das war ein Supercomputer aus der Wolke, aufgesetzt und betriebsbereit innerhalb weniger Stunden“, so Roland Reifler, der Verantwortliche bei IBM Schweiz für das Projekt.

Diese enorme Rechenkapazität war nötig, da die Berechnung von dreidimensionalen Proteinstrukturen hoch komplex ist. So identifizierte das ETH-Team 249 für das Experiment vielversprechende Bakterien-Proteine. Für jedes dieser Proteine existieren zehntausende verschiedene mögliche Strukturen. Insgesamt berechnete die Rosetta-as-a-Service Lösung ca. 2.3 Millionen Modelle. Dazu musste die Plattform über 30'000 einzelne Rechenpakete verwalten und verteilen. „Das war eine enorme Herausforderung. Wir haben das intelligente Queueing- und Datenmanagement-System unserer CloudBroker Plattform dafür noch weiter ausgebaut“, sagt Sudholt. Jetzt könne man anderen Instituten aber einen vollautomatischen Service zur Verfügung stellen, so Sudholt weiter.

Für die Forschung ergibt sich dadurch ein weiterer Vorteil. „Ergebnisse und Experimente lassen sich mit exakt den gleichen Einstellungen und Vorgaben

wiederholen und überprüfen. Für effizientes wissenschaftliches Arbeiten ist das extrem wichtig“, erklärt Malmström. Ausserdem bietet das Cloud Computing Modell für Forschungsinstitutionen die Möglichkeit, IT-Infrastruktur jeweils für bestimmte Experimente mit hohem Bedarf an Rechenleistung flexibel einzukaufen: Sie können Rechenkapazität bei Bedarf buchen und bekommen sie schnell zur Verfügung gestellt. So müssen die Forschenden sie nicht selber aufbauen oder unterhalten und können sich besser auf ihre Forschung konzentrieren.

Das mache High-Performance-Computing aus der Cloud auch interessant für weitere Forschungsbereiche und kleinere, spezialisierte Laboratorien, so Roland Reifler von IBM.

Über CloudBroker:

Die CloudBroker GmbH ist ein Start-Up Unternehmen mit Sitz in Zürich, das Cloud Computing auch für wissenschaftlich-technische Anwendungen attraktiv macht. Es wurde im November 2008 als Spin-off Unternehmen der ETH Zürich gegründet. Die Firma baut ihre Plattform auf existierenden öffentlichen Clouds auf, wie sie auch von IBM angeboten wird, und übernimmt die Installation, Konfiguration und das Austesten der entsprechenden High Performance Computing-Software, sowie das gesamte Management von Nutzern, Applikationen, Infrastruktur, Computing und Daten.

Über ETH Zürich:

Die ETH Zürich steht für exzellente Lehre, wegweisende Grundlagenforschung und die Anwendung der Ergebnisse zum Nutzen der Gesellschaft. 1855 gegründet, zählt die ETH Zürich heute rund 16'000 Studierende aus mehr als 80 Ländern, davon 3500 Doktorierende. Als eine der weltweit führenden technisch-naturwissenschaftlichen Hochschulen, bietet sie Forschenden ein inspirierendes Umfeld und ihren Studierenden eine umfassende Ausbildung. 21 Nobelpreisträger, die an der ETH Zürich studiert, gelehrt oder geforscht haben, unterstreichen den hervorragenden Ruf der Hochschule.

Über IBM:

Seit einem Jahrhundert bringt IBM Innovationen hervor und fördert aktiv die Entwicklung neuer Technologien. Dank ihrer kompletten Palette an Hardware, Software und Dienstleistungen kann IBM ihren Kunden das gesamte IT Spektrum anbieten. Unter dem Motto „Let's build a smarter planet“ entwickelt IBM Technologien und Lösungen, die ein nachhaltiges Wachstum mit begrenzten Ressourcen ermöglichen.

Weitere Links zum Thema:

1. Homepage des Institute of Molecular Systems Biology, ETH Zürich: <http://www.imsb.ethz.ch/>
2. Homepage „SystemsX“, Schweizer Forschungsinitiative für Systembiologie: <http://www.systemsx.ch/about-us/what-is-systemsxch/>
3. Homepage CloudBroker GmbH: <http://www.cloudbroker.com>
4. IBM Smart Cloud Enterprise Übersicht: <http://www.ibm.com/services/us/igs/cloud-development/>

Nicola Fantini  
CloudBroker GmbH  
Technoparkstrasse 1 CH-8005 ZurichSwitzerland  
[nicola.fantini@cloudbroker.com](mailto:nicola.fantini@cloudbroker.com)  
Mobile: +41 79 355 02 17 Phone: +41 44 633 79 34