



MARENOSTRUM, AL SERVICIO DE LA CIENCIA

Supercomputadores en la lucha contra el Covid-19

La enorme capacidad de cómputo de estos equipos permite a los investigadores acelerar la búsqueda de fármacos contra el virus y abordar complejos estudios de genoma para entender mejor la enfermedad. **Por M. Prieto**

Cuando pensamos en los científicos que están buscando un tratamiento para el coronavirus nos imaginamos investigadores enfundados en trajes de protección trabajando en laboratorios. Y es correcto. Pero hay mucho más detrás. La investigación farmacológica sería imposible sin el poder de la supercomputación. Y ahora, cuando se trabaja contra el crono, estos grandes ordenadores se han convertido en un aliado indispensable de los científicos.

En estas máquinas con enorme potencia de cálculo se pueden hacer simulaciones que acortan a semanas el plazo de investigaciones que antes duraban meses. “Nosotros no vamos a curar el coronavirus, pero sin nuestra labor la investigación sería mucho más lenta y compleja”, resume Alfonso Valencia, director del Departamento de Ciencias de la Vida del Barcelona Supercomputing Center. Aquí se aloja el Mare Nostrum, el mayor de estos ordenadores en España, cuya potencia está al servicio de varios proyectos enmarcados en la batalla que se libra frente al coronavirus.

“Desde hace años, algunos científicos llevan a cabo experimentos con ordenadores donde se simulan las características de todo tipo de células/organismos o, por ejemplo, de un virus”, dice Juan De Zuriarrain Perez-Urruti, experto en supercomputación de IBM. La idea es reproducir el virus, o parte de él, y ver cómo lo combaten distintas simulaciones de combinaciones químicas, que podrían llegar a convertirse en medicamentos.

“Esta forma de trabajo se conoce como la experimentación *in silicio* y utiliza super-



La experimentación 'in silicio' es un procedimiento clave en la industria farmacéutica.

computadores que comprueban el funcionamiento de millones de compuestos químicos hasta dar con uno válido, en plazos de tiempo imposibles de alcanzar con la experimentación manual”, ahonda Juan De Zuriarrain.

En España, estos superordenadores se están utilizando en investigaciones para encontrar un tratamiento para el coronavirus. No sólo el Marenostrum. El Centro de Biología Molecular Severo Ochoa, perteneciente a la Universidad Autónoma de Madrid y al Consejo Superior de Investigaciones Científicas, también trabaja en esta línea. Mediante simulación en el

superordenador IBM Power 9, los biotecnólogos del centro están analizando la posible validez de diferentes moléculas de fármacos ya en el mercado. “Este equipo nos ha permitido multiplicar por diez la capacidad computacional del laboratorio, abordando experimentos que antes no podíamos plantear”, explica Paulino Gómez-Puertas, científico del Severo Ochoa.

Así funciona

La tecnología les permite simular una copia exacta tridimensional de la proteasa, una proteína que puede ser clave a la hora de dar con un trata-

Permiten cientos de miles de simulaciones de compuestos antes de las pruebas en el laboratorio

El BSC y el Centro de Biología Molecular Severo Ochoa son algunos ejemplos en España

miento, puesto que ya se ha demostrado ser diana terapéutica, por ejemplo, de fármacos para enfermos de Sida.

Una técnica de dinámica molecular permite simular de manera muy realista cómo se mueve esta proteasa en un ámbito acuoso. A partir de ahí, se prueba cómo encaja el fármaco. “Podemos probar en el superordenador millones de fármacos virtuales para ver si son candidatos a un tratamiento futuro de la enfermedad”, explica Gómez-Puertas.

Los científicos pueden trabajar con dos bases de datos: una con millones de moléculas conocidas y otra con moléculas de fármacos aprobados

y ya en el mercado. La primera opción no es válida en estos momentos porque vamos contrarreloj. Así que la clave ahora en la investigación mundial es probar con las moléculas de fármacos aprobados para ver cuál puede encajar en la proteasa y desactivar el virus.

“Estamos hablando de cálculos con centenares de miles de compuestos, de ahí la importancia del cribado computacional. Sería inabordable hacerlo solo con la experimentación en el laboratorio”, dice por su parte Alfonso Valencia.

Una vez que se detectan posibles candidatos, como ya



Superordenador MareNostrum del BSC.

ESTE AÑO LLEGARÁ UN NUEVO SUPERORDENADOR

MareNostrum, la joya en España

La llegada del MareNostrum a Barcelona en 2004 situó a España en la liga de los grandes superordenadores. El MareNostrum 4, que ha costado 34 millones de euros, es el más potente de España, con un rendimiento pico de 13,7 Petaflops. Entre los proyectos que se ejecutan hay investigaciones sobre el cambio climático, las ondas gravitacionales, la vacuna contra el Sida, terapias de radiación contra el cáncer y

simulaciones sobre la producción de energía de fusión. Barcelona acogerá uno de los ocho superordenadores de nueva generación que está impulsando la Unión Europea, un proyecto en el que se invertirán hasta 100 millones de euros. La nueva máquina, que se llamará MareNostrum 5, tendrá una potencia de 200 Petaflops, 200.000 billones de operaciones por segundo, arrancará a finales de 2020.

se está haciendo en distintos proyectos, es el turno de los investigadores de laboratorio para testar su validez. "Hay muchos consorcios del mundo trabajando en esto y existen grupos abordando pruebas experimentales", dice Valencia, quien destaca que los grupos computacionales como el Barcelona Supercomputing Center comparten sus avances con la comunidad internacional.

Por ejemplo, BSC trabaja con centros de varios países en un proyecto financiado por la Comunidad Europea, el EXSCALATE4CoV (E4C), centrado precisamente en el empleo de la supercomputación para el diseño inteligente de fármacos. Además, está presente en otros consorcios locales, por ejemplo con el Sida IrsiCaixa, que investiga vacunas.

Entender la epidemia

El BSC tiene otra línea de acción: ayudar a los investigadores a entender la epidemia

Estos equipos ayudan también a entender la epidemia desde el punto de vista del genoma

Esta vía de investigación requiere cálculos de probabilidades muy pesados

desde el punto de vista del genoma, lo que requiere cálculos probabilísticos muy pesados que se pueden realizar gracias a la enorme potencia de cálculo del Mare Nostrum. Valencia explica que para los investigadores es clave entender cómo evoluciona el virus, cómo cambia o cómo se transmite entre especies para "prever futuros episodios".

Los proyectos computacionales que aborda la comunidad científica internacional en la batalla contra el corona-

virus se suceden en todo el mundo. Por ejemplo, en Estados Unidos los investigadores del Laboratorio Nacional de Oak Ridge han podido simular 8.000 compuestos en cuestión de días. Si este procedimiento se hubiera desarrollado con un ordenador convencional, el proceso habría tardado meses. Utilizando Summit, los investigadores han identificado 77 moléculas pequeñas de compuestos de medicamentos que han demostrado tener potencial para dañar la capacidad de Covid-19 de atacar e infectar células huésped.

Summit es el superordenador más poderoso e inteligente del mundo, con un rendimiento pico de 200 petaflops, una potencia mayor que la de un millón de computadoras portátiles de alta gama. Esto le permite examinar miles y miles de variables, y crear modelos y simulaciones para ayudar a encontrar respuestas a los problemas más complejos del mundo.