

Gemma Ribas

En només deu anys de vida el Barcelona Supercomputing Center, el Centre Nacional de Supercomputació (BSC-CNS), s'ha consolidat com a centre de referència en diverses àrees de la ciència i la tecnologia. A diferència d'altres centres de supercomputació, que ofereixen exclusivament serveis de computació a altres usuaris, el BSC-CNS combina aquesta activitat amb un intens treball de recerca pròpia.

Els grans ordinadors ja són una eina imprescindible per ajudar a avançar la recerca. El creixement exponencial de la seva potència els fa cada vegada més atractius per als investigadors, i permeten el plantejament de preguntes cada vegada més ambicioses. Simulacions, grans càlculs i anàlisi de dades són els usos principals d'aquestes màquines, que com a concepte no disten dels ordinadors personals, però sí que en disten en capacitat d'execució: el superordinador MareNostrum, emblema del BSC, és capaç de calcular en una hora el que necessitaria sis anys en un ordinador com el que podem tenir a casa.

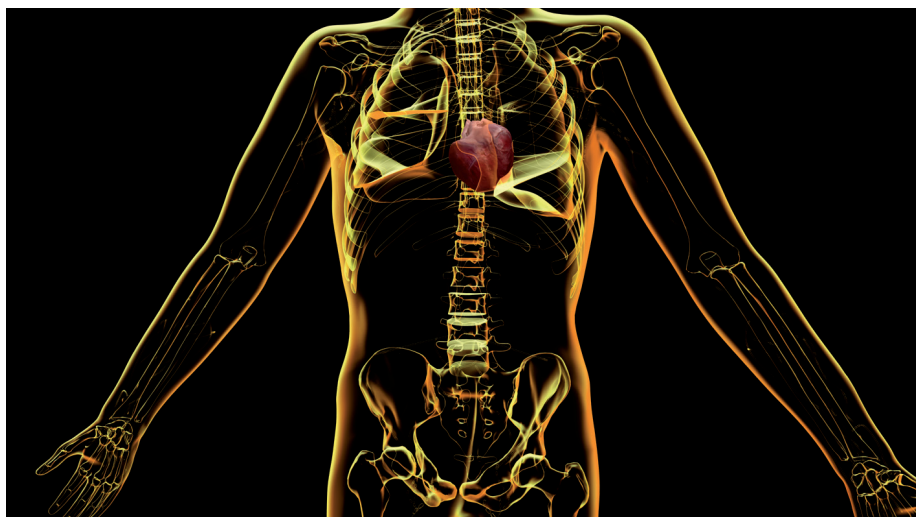
Les aportacions de la computació d'altres prestacions a les ciències de la vida van obtenir el seu màxim reconeixement oficial el 2013, quan l'Acadèmia Sueca va atorgar el Premi Nobel de Química a Martin Karplus, Michael Levitt i Arieh Warshel per la seva feina pionera en la creació de programes informàtics per entendre i predir els processos químics. «Els químics solien crear models de molècules amb pals i boles —afirmaven els responsables del guardó en la nota de premsa que acompanyava l'anunci dels guanyadors. Avui la modelització es fa en computadors. Els models computacionals que reflecteixen la vida real s'han convertit en crucials per a la majoria dels avenços actuals en la química».

Des que a la dècada dels setanta Karplus, Levitt i Warshel van començar a utilitzar la computació per entendre i predir processos químics, els algorismes de modelització molecular i la



seva aplicació a sistemes bioquímics han evolucionat en paral·lel a la capacitat de càlcul dels ordinadors i han permès aplicar aquestes metodologies a sistemes biològics de milions d'àtoms i a l'estudi de mètodes d'acoblament molecular per al disseny de nous fàrmacs. S'estan fent simulacions que arriben a l'escala de mil·lèsimes de segon i que permeten descriure processos rellevants a escala biològica, com el plegament de proteïnes. Una altra gran línia de recerca que ha crescut al galop dels grans

computadors és el de les anomenades ciències «òmiques». Una sola cadena completa de genoma ocupa 120 Gb i, com és sabut, els estudis per relacionar malalties amb determinats gens requereixen comparar i analitzar genomes de cèl·lules sanes i malaltes de centenars de pacients. El BSC-CNS ha posat a disposició de la comunitat científica un sistema d'emmagatzematge que allotja el European Genome Archive: dades òmiques de més de cent mil pacients procedents de vuit-cents estudis de





recerca per ser utilitzades de manera segura per a futures investigacions.

Però com es comentava a l'inici, el valor del centre no es limita a les seves màquines o la seva capacitat de computar i emmagatzemar.

El BSC-CNS va néixer amb vocació de fer recerca i ja aplega més de quatre-cents investigadors d'un gran ventall de disciplines. En l'àmbit de les anomenades ciències de la vida, treballa en quatre grans línies: modelització molecular i bioinformàtica, genòmica compu-

tacional, interacció i acoblament de proteïnes i modelització electrònica i atòmica de proteïnes. S'han desenvolupat eines informàtiques per predir les interaccions entre proteïnes i entre proteïnes i fàrmacs; s'ha creat Model, una extensa biblioteca de dinàmica molecular de les proteïnes representatives, i també el programari Smufin, un innovador mètode per analitzar genomes de tumors, reconegut per ser un dels més ràpids i complets.

La recerca en ciències de la vida a través de les noves i cada vegada més potents eines informàtiques a disposició de la comunitat científica persegueix dues grans finalitats: aprofundir en la comprensió teòrica dels mecanismes biològics i apropar la recerca i l'activitat clínica. Amb la vista posada en la medicina de precisió, generalitzar un sistema en què noves eines atorguin als professionals de la salut la capacitat d'analitzar els seus pacients a escala genòmica i en diferents fases del tractament serà una realitat a curt termini. Aquestes anàlisis genòmiques permetran poder trobar teràpies específiques i més eficients en l'àmbit de la clínica, i al mateix temps ajudaran a entendre millor les bases genètiques i moleculars de les malalties. •



Gemma Ribas (Figueres, 1970) és llicenciada en ciències de la informació i en ciències polítiques i sociologia per la Universitat Autònoma de Barcelona i màster en comunicació de les organitzacions per la Universitat de Barcelona. Des de 2012 treballa en tasques de comunicació al Barcelona Supercomputing Center, el Centre Nacional de Super-

computació, i s'ha especialitzat en divulgació de temes de ciència i tecnologia. Prèviament, ha exercit com a periodista en diferents mitjans de comunicació escrits i audiovisuals, d'assessora de comunicació i relacions amb els mitjans de comunicació per a entitats empreses i en gabinets de comunicació d'administracions públiques.