



► 19 Julio, 2016



Modesto Orozco, presidente de Nostrum BioDiscovery y Víctor Guallar, asesor científico de la biotecnológica.

> **BIOTECNOLOGÍA**

Supercomputación para una nueva generación de fármacos

Nace Nostrum Biodiscovery, una 'spin-off' basada en tecnología 'in-house' de supercomputación para facilitar el lanzamiento de nuevos medicamentos. Por **Paula Clemente**

Ya existen formas de modelar detonaciones nucleares sin tener que hacer pruebas reales, simular explosiones de supernovas en el espacio o saber de qué manera un tsunami podría afectar a una ciudad. Y, en el mundo de la salud, ya es posible perfeccionar el diseño racional de fármacos, algo que evita el método tradicional de *prueba-error* y lo sustituye por el conocimiento de lo que hará una

sustancia específica en el cuerpo de recepción. Y todo lo consigue –o ayuda a conseguirlo– la supercomputación. De hecho, ha sido la clave en Nostrum Biodiscovery, una *spin-off* nacida hace bien poco en Barcelona centrada en acelerar el desarrollo de fármacos mediante nuevas generaciones de superordenadores.

A grandes rasgos, el Instituto de Investigación Biomédica –IRB Barcelona– y el Barcelona Supercom-

puting Center-Centro Nacional de Supercomputación –BSC-CNS– han unido necesidad y conocimiento –con el apoyo y ayuda económica de la Fundación Botín– para crear una serie de herramientas tecnológicas dirigidas a la simulación computacional para facilitar el lanzamiento al mercado de nuevos fármacos y moléculas biotecnológicas. Llevado a la práctica, tal como explican dos embajadores de los

principales entes involucrados, Modesto Orozco del IRB y Víctor Guallar del BSC-CNS, se traduce en la licencia de varias tecnologías «que actúan sobre distintas etapas del proceso de diseño de fármacos».

Por ejemplo, podrían incidir en el diseño racional de los mismos. Con esta técnica, «el número de moléculas que se tienen que diseñar para encontrar un fármaco activo se reduce por dos y tres órdenes de

magnitud», explica Modesto Orozco, «las moléculas que vas a sintetizar las racionaliza un ordenador». No es algo nuevo en la industria farmacéutica. Lo que es nuevo es explotar al máximo la supercomputación para afinar los resultados. En el desarrollo de un fármaco «se tiene una fase inicial en la que se identifica una diana que se quiere tratar», especifica Víctor Guallar, «la diana es básicamente una proteína, una enzima que quieres que funcione más o menos –normalmente inhibirla– para cambiar el metabolismo de algunas células». Para ello, prosigue, se busca una molécula o una biomolécula, que interactuará con el centro activo de alguna pieza de la diana para que ésta no funcione más. Y para conseguirlo se necesitan muchas pruebas y librerías de centenares de miles de moléculas. Esto se puede hacer de una forma experimental –experimentos caros, difíciles y costosos– o de forma computacional, de manera que el ordenador lo haga todo. «Permite, por ejemplo, reducir el número de pruebas experimentales a 500 moléculas que el ordenador ha identificado que compatibilizan bien con la diana», concluye Guallar.

Todo se debe a que desde el programa conjunto de investigación que dirigía el doctor Modesto Orozco en el IRB se dieron cuenta de que no solo eran capaces de generar conocimiento, sino que posiblemente eran capaces de transferirlo. «Nos pareció una buena manera de vehicular esa transferencia», explica, «además, tenemos un empuje por parte de los inversores».

A modo de conclusión, por su lado, el investigador del BSC-CNS explica que los métodos tradicionales siguen el enfoque del típico juego para niños pequeños que se basa en encajar piezas cuadradas en huecos cuadrados y redondas, en redondos. «Lo que nosotros queremos y lo que nuestra tecnología puede aportar», acaba Víctor Guallar, «es hacer que las dos partes se vayan moviendo y ver cómo la pieza cuadrada podría adaptarse a un hueco redondo y, la redonda, a un cuadrado».