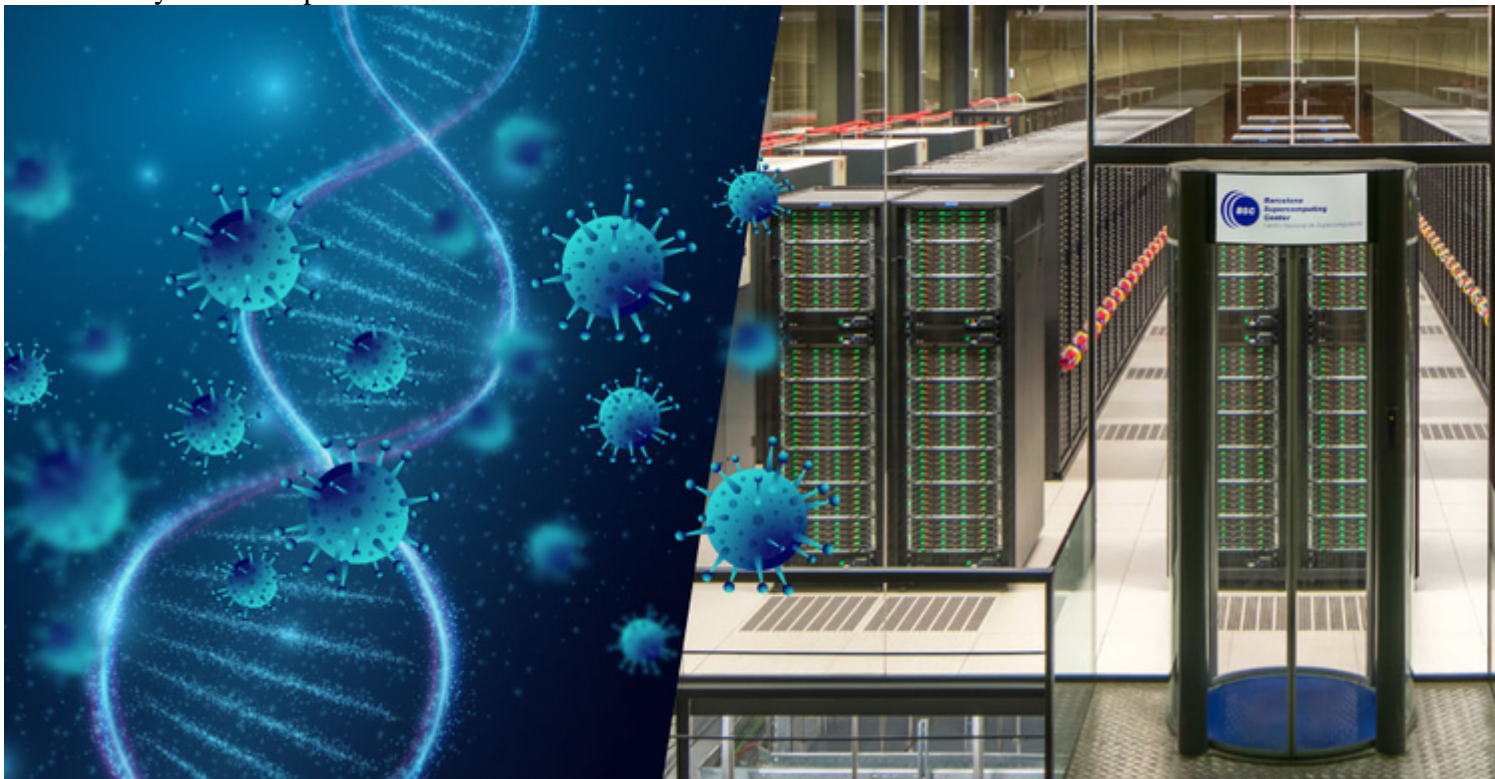


[Inicio](#) > El BSC utiliza la bioinformática, la inteligencia artificial y la capacidad de cálculo del superordenador MareNostrum en la lucha contra el coronavirus

[El BSC utiliza la bioinformática, la inteligencia artificial y la capacidad de cálculo del superordenador MareNostrum en la lucha contra el coronavirus](#)

Última actualización el 27 de octubre/El BSC investiga sobre el genoma del virus y participa en la búsqueda de vacunas y fármacos para combatirlo.



Almacena y analiza datos clínicos de pacientes de COVID-19 para la creación de herramientas que asistan a los clínicos en el diagnóstico y tratamiento de la enfermedad

Utiliza la inteligencia artificial, el procesamiento de lenguaje natural y técnicas de *big data* para analizar la propagación y el impacto social de la epidemia.

El supercomputador MareNostrum 4 está a disposición de la comunidad científica para la lucha contra el coronavirus.

El Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC) colabora en la lucha contra el coronavirus desde diferentes vertientes: la aplicación de la bioinformática para la investigación sobre el virus y sus posibles tratamientos, el uso de la inteligencia artificial y el procesamiento del lenguaje natural y técnicas de *big data* para analizar datos sobre la propagación y el impacto de la epidemia y el uso del superordenador MareNostrum 4 para combatir el coronavirus.

1. Bioinformática para buscar tratamientos

Desde la vertiente de la bioinformática, el BSC es un ejemplo de cómo la bioinformática y los superordenadores son hoy en día una herramienta indispensable de los centros de investigación que cuentan con laboratorios experimentales para acelerar el combate del coronavirus. La bioinformática se utiliza para la investigación sobre el virus y sus posibles tratamientos, analizando el genoma del coronavirus y sus sucesivas mutaciones, y para la búsqueda de fármacos y terapias inmunitarias (anticuerpos y vacunas).

Genómica

Comprender cómo ha evolucionado el virus a lo largo de distintas epidemias (como la epidemia SARS en 2003, MERS en 2012, o la actual Covid-19) es importante porque nos permite intentar entender cómo es posible que el virus pase de una especie a otra y qué cambios tiene que experimentar para llegar a hacerlo. Nos da luz sobre su modo de transmisión y los mecanismos que utiliza para interactuar con nuestro sistema de defensas o el de otras especies animales. Esta resulta crucial a la hora de buscar tratamientos y para la prevención y predicción de brotes futuros.

Este tipo de estudio se realiza sobre información disponible en bases de datos públicas que albergan secuencias genómicas de las diferentes mutaciones del virus y de diferentes especies animales. La información se analiza con programas informáticos diseñados expresamente para ello, algunos desarrollados en el propio BSC y otros por otros equipos. El proceso de estos datos requiere gran capacidad de cálculo y por ello se utilizan los recursos de computación de altas prestaciones del superordenador MareNostrum 4, del Barcelona Supercomputing Center.

Búsqueda de tratamientos

Otro frente de la investigación es la búsqueda de tratamientos contra las enfermedades causadas por coronavirus a partir de simulaciones informáticas que reproducen “in silico” las posibles vías por la que se puede atacar el virus.

Este proceso se conoce en el mundo de la investigación como “*docking*” o acoplamiento y consiste en simular en el ordenador las interacciones entre el virus y moléculas que podrían servir para fabricar vacunas, tratamientos con anticuerpos o tratamientos con fármacos.

Para ello, se utiliza como base el conocimiento generado en la investigación del genoma del virus, información sobre las estructuras de sus proteínas del virus y datos sobre fármacos y otras moléculas inorgánicas, que están almacenadas en librerías informáticas en las que se pueden encontrar millones de compuestos químicos, generados durante años y anotados con los resultados obtenidos en experimentos anteriores.

La búsqueda o cribado de fármacos por ordenador es muy útil para acelerar el proceso de encontrar y validar tratamientos y vacunas para enfermedades, puesto que recorta en gran medida el tiempo y la inversión necesarios para la primera fase de esta investigación. Cualquier tratamiento o vacuna que los modelos informáticos predicen que puede tener éxito, posteriormente tiene que ser validada en laboratorios experimentales, en experimentación con animales y en investigaciones clínicas, y refinada en constante colaboración entre los diferentes participantes de la investigación.

Para realizar este trabajo, los investigadores del BSC utilizan diferentes programas informáticos entre ellos PELE, un método desarrollado en el centro, que es uno de los sistemas más competitivos del mercado en este sector. Este software y la potencia del superordenador MareNostrum 4 permiten realizar miles de experimentos computacionales optimizando la unión de fármacos y proteínas de una manera rápida y efectiva.

En el BSC, la investigación sobre el virus y sus posibles tratamientos se desarrolla en estrecha colaboración entre los grupos de Alfonso Valencia, investigador ICREA, director del Departamento de Ciencias de la Vida del BSC y líder del grupo de biología computacional, Víctor Guallar, también investigador ICREA y responsable del equipo de Modelado electrónico y atómico de proteínas y máximo impulsor del software PELE y Toni Gabaldón, investigador ICREA y responsable del grupo de genómica comparada. Todos ellos trabajan en cooperación con el equipo de sistemas del BSC, que les garantiza los recursos computacionales necesarios.

- **1.1 Proyectos relacionados con la búsqueda de fármacos y vacunas**

Actualmente tres son los proyectos que canalizan la investigación que se lleva a cabo en el centro sobre el coronavirus y sus posibles tratamientos: EXSCALATE4CoV (E4C), financiado por la Comisión Europea en el marco del programa H2020, un proyecto de colaboración con los centros de investigación IrsiCaixa y CreSa-IRTA con apoyo de Grifols y un proyecto en colaboración con el Instituto de Química Avanzada de Catalunya (IQA) y Nostrum Biodiscovery (NBD), financiado por el fondo COVID-19 del Instituto de Salud Carlos III.

E4C pone más énfasis en la investigación básica y la investigación aplicada para la búsqueda de fármacos, la colaboración con IrsiCaixa y CreSa está más centrada en la búsqueda de terapias inmunológicas apoyada en la investigación genómica y las herramientas bioinformáticas y la colaboración con IQA y NBD se centra en la investigación sobre antiretrovirales que puedan inhibir el coronavirus causante de la COVID-19 y otros coronavirus posteriores.

- **1.2 Participación en iniciativas colectivas para generar más conocimiento biomédico sobre la enfermedad**

A). Investigadores del Departamento de Ciencias de la Vida participan en el [mapa de la enfermedad COVID-19](#), una plataforma para reunir y ordenar la información científica sobre el virus. Se trata de un esfuerzo de investigadores de 25 países para reunir y organizar el conocimiento generado hasta el momento sobre el mapa molecular de virus y los mecanismos de interacción entre el virus SARS-CoV-2 y el huésped, guiado por aportes de expertos en el dominio y basados en trabajos publicados. Su objetivo es organizar la información disponible para facilitar una mejor comprensión de la enfermedad y ayudar en el desarrollo de diagnósticos y terapias eficientes.

El repositorio [se dio a conocer a través de la web de la revista Nature](#) y es una colaboración de investigadores clínicos, científicos expertos en ciencias de la vida, biólogos computacionales y científicos de datos, fundamental para poder simular en ordenadores el comportamiento del virus a nivel molecular y contribuir así a la búsqueda de vacunas y tratamientos.

B). Coordinación del nuevo centro europeo de excelencia de HPC y medicina personalizada PerMedCoE.

La Comisión Europea ha aprobado la iniciativa del BSC de coordinar un Centro de Excelencia de Aplicaciones HPC en medicina personalizada (PerMedCoE). El objetivo de este centro es combinar de modo ágil modelos computacionales de procesos bioquímicos y celulares con validaciones experimentales.

En el caso de la investigación sobre el SARS-CoV-2, el BSC se encargará de crear simulaciones que reproduzcan el comportamiento de las células humanas en su interacción con el virus, basándose, entre otros,

en los conocimientos organizados en el Mapa de la Enfermedad COVID-19.

En este centro de excelencia participan también en centro de supercomputación CSC de Finlandia, el Real Instituto de Tecnología de Suecia, el centro IBM Research de Zurich (Suiza), el Laboratorio Europeo de Biología Molecular (EMBL), el Centro de Regulación Genómica de Barcelona, el Instituto Curie (Francia), el Hospital Universitario de Heidelberg (Alemania), el centro de medicina molecular Max Delbrück (Alemania), la Universidad de Luxemburgo, la Universidad de Lubliana (Eslovenia) y las empresas ATOS España y Elem Biotech (spin off del BSC)

2. Creación de herramientas que asistan a los clínicos en el diagnóstico y tratamiento de la enfermedad

La evolución de la pandemia está generando la producción de abundante material clínico procedente de la asistencia sanitaria a enfermos de COVID-19. El correcto almacenaje y análisis de estos datos hará posible generar conocimiento que puede ser de gran ayuda para la comprensión de la enfermedad y la actividad de los profesionales de la asistencia sanitaria.

El BSC colabora con hospitales, centros de salud y especialidades médicas en la recogida, almacenaje y ordenación de estos datos (fundamentalmente imágenes e historias clínicas) y en la creación de herramientas para buscar patrones que puedan ser útiles a la hora de realizar diagnósticos y asistir a los clínicos en las decisiones sobre tratamientos.

Así mismo, se están estudiando medidas y procedimientos para aseverar que estos modelos predictivos incluyan [el impacto del sexo y el género](#) en la enfermedad.

- Creación de modelos predictivos de evolución de la enfermedad en pacientes de Covid-19 basados en textos clínicos e IA, en colaboración con el Hospital Clínic, el Hospital Universitario 12 de Octubre y el Hospital Virgen del Rocío.

El Departamento de Ciencias de la Vida está trabajando en la creación de modelos predictivos basados en Inteligencia Artificial para pronosticar el avance de la enfermedad en pacientes de COVID 19. Para desarrollar estas herramientas, se utiliza como base la información contenida en los informes clínicos de los millares de pacientes de Covid 19 que han atendido estos hospitales. Los trabajos consisten en estandarizar la información contenida en los documentos clínicos (información demográfica, tests, resultados de laboratorio y de diagnóstico por la imagen, tratamientos e informes clínicos de cada paciente en diferentes momentos de su enfermedad) y entrenar un modelo basado en IA (redes neuronales de aprendizaje profundo), que buscará patrones comunes y generará predicciones sobre la evolución de nuevos pacientes.

La colaboración con el Hospital Clínic está ya plenamente activa, y las colaboraciones con los hospitales 12-O y Virgen del Rocío están pendientes de cerrar detalles formales. El proyecto está abierto a la incorporación de nuevos centros hospitalarios.

Desde abril hasta la actualidad, el equipo encargado del proyecto (Text Mining) ha realizado pruebas de concepto de modelos predictivos con los datos de 2.000 pacientes que abrió a la comunidad científica la cadena HM Hospitales. Estos modelos han dado resultados muy prometedores y se está a la espera de recibir los datos de los hospitales colaboradores en el proyecto en formato ISARIC, para poder validarlos con sets de mayores dimensiones. En total, se espera reunir datos de más de 15.000 pacientes.

La iniciativa se desarrolla en el marco del Plan de Tecnologías del Lenguaje impulsado por la Secretaría de Digitalización e Inteligencia Artificial del Ministerio de Economía.

- En una línea parecida, el grupo de High Performance Artificial Intelligence participa en el proyecto CIBERES-UCI-COVID, liderado por el Hospital Clínico y financiado por el Instituto de Salud Carlos III. El objetivo de este estudio es utilizar los datos de pacientes de COVID que han tenido que ser ingresados en UCIs, para identificar factores de riesgo y ayudar a los clínicos a realizar sus pronósticos. Hasta el momento ha reunido los informes clínicos de 2.000 pacientes y el análisis de los datos está a punto de comenzar.
- Los investigadores del Departamento de Ciencias de la Vida vinculados al Instituto Nacional de Bioinformática, participan en la plataforma común de datos sobre COVID-19 impulsada por la Unión Europea para asegurar una respuesta rápida y coordinada a la crisis sanitaria provocada por la COVID-19. La plataforma común de datos pretende agregar y compartir todos los datos generados en investigación frente al coronavirus para acelerar en el desarrollo de soluciones frente al virus y la enfermedad. Se incluirán datos ómicos (los provenientes de disciplinas como la genómica, la proteómica, la metabolómica), datos de secuenciación, clínicos y epidemiológicos. La colaboración española en este proyecto se realiza a través del Instituto de Salud Carlos III (ISCIII) y el Instituto Nacional de Bioinformática (INB), liderado por el BSC. Esta plataforma es una de las iniciativas impulsadas en el marco del plan de acción 'ERAvsCORONA' lanzado por la Comisión Europea para apoyar la investigación, coordinar esfuerzos y buscar sinergias en el ámbito de la investigación e innovación.
- El BSC aloja y analiza tomografías pulmonares de pacientes de COVID-19 de la plataforma europea de inteligencia artificial IA4EU. Esta actuación forma parte del proyecto REACT, que tiene como objetivo poner a disposición de la comunidad europea de inteligencia artificial un mínimo de 40.000 TACS (compuestos de 5.000 imágenes cada uno) para impulsar la creación de algoritmos de inteligencia artificial que asistan a los clínicos a la hora de diagnosticar si un paciente está afectado por la COVID-19, de determinar la severidad del caso y predecir su evolución. El proyecto se realiza en colaboración con asociaciones de profesionales de radiología y el BSC ejercerá la coordinación técnica de las diferentes soluciones propuestas.
- El grupo de High performance computational mechanics está utilizando su simulador del corazón Alya Red para estudiar los posibles efectos de tratamientos utilizados contra la COVID-19 en el sistema cardiovascular. Concretamente, se está estudiando a) el efecto de los fármacos antipalúdicos en varios corazones humanos con una variedad de comorbilidades que pueden estar presentes en la población infectada y b) la hemodinámica compleja asociada con el síndrome norte-sur, en relación con la terapia de oxigenación de membrana extracorpórea venoso-arterial en pacientes con insuficiencia respiratoria profunda. Las investigaciones se llevan a cabo en colaboración con la spin-off del BSC Elem Biotech.

3. Inteligencia artificial para analizar la propagación y el impacto social de la epidemia

- El grupo de Biología Computacional del Departamento de Ciencias de la Vida trabaja en el desarrollo de un **sistema de información geográfico de acceso público sobre la expansión de los brotes de Covid 19, que integra diferentes fuentes de datos procedentes de administraciones públicas**, para ayudar al análisis de la expansión de la pandemia y a la toma de decisiones relacionada con la gestión de nuevos brotes de COVID-19.

La plataforma reúne datos de salud, movilidad y geolocalización procedentes del Ministerio de Sanidad, el Ministerio de Transportes, Movilidad y Agenda Urbana, el Instituto Nacional de Estadística, el Instituto de Salud Carlos III, las agencias de salud catalana y vasca, entre otros.

El análisis de los datos se realiza con sistemas de redes que buscan las relaciones entre ellos, con el objetivo de obtener una mejor comprensión de la propagación de la enfermedad. Con los resultados, se realizan informes para las autoridades sanitarias y se desarrollan herramientas para nutrir los modelos epidemiológicos destinados a apoyar la toma de decisiones. El proyecto se lleva a cabo a petición del Instituto de Salud Carlos III.

- El mismo grupo participa en la creación del **Observatorio Epidemiológico de Catalunya**, que utilizará técnicas de Big Data e Inteligencia Artificial para generar una nueva colección de modelos epidemiológicos que ayuden a las instituciones públicas de salud a prevenir, detectar precozmente y mitigar la propagación de epidemias.

Esta iniciativa suma esfuerzos de la Generalitat de Catalunya, instituciones médicas y de salud (Hospital Germans Trias i Pujol y Fundación Lucha contra el Sida), centros punteros de investigación tecnológica (BSC, CIDA, Eurecat, URV y CSIC), operadoras de telefonía móvil (Telefónica, Orange y GSMA) y la Mobile World Capital Barcelona.

La tarea del BSC consistirá en colaborar en el desarrollo de un modelo pandémico para la futura prevención, incluyendo todas las fuentes de datos, y también en el almacenamiento de datos, computación, gestión datos de salud y computación de datos meteorológicos.

- El grupo de Data pre and post processing del BSC, el Hospital Clínic y el centro de Investigación en Economía y Salud de la UPF están desarrollando modelos predictivos de ocupación de camas en centros sanitarios. Los modelos están basados en *machine learning* y ofrecen predicciones de ocupación a una semana vista, tanto de las camas hospitalarias como centros relacionados (ej, instalaciones extraordinarias para hacer frente a la COVID-19). El objetivo de esta herramienta es planificar la logística sanitaria, tanto en fases agudas de la pandemia como en el retorno a los hospitales de pacientes afectados por otras enfermedades. Actualmente los están utilizando el Hospital Clínic, el Hospital de Bellvitge y la Xarxa Santa Tecla.
- Investigadores del departamento de Aplicaciones para la Ciencia y la Ingeniería colaboran con la adaptación del simulador de enfermedades infecciosas 'EpiGraph', a las características de la COVID-19 para simular la propagación de la actual pandemia en España. El simulador fue desarrollado en la Universidad Carlos III de Madrid por el profesor David Singh y la investigadora Cristina Marinescu, actual investigadora del equipo de Smart Cities del BSC. Ambos han realizado su actualización al COVID-19, con la supervisión del Centro Nacional de Epidemiología (CNE) y el Consorcio Centro de Investigación Biomédica en Red (CIBER) y lo están enriqueciendo con financiación del programa impulsado por el Instituto de Salud Carlos III. El simulador une cuatro modelos, cada uno nutrido con datos diferentes: epidemiológico, interacciones sociales, movilidad a través de transporte y meteorológico. La herramienta pretende ayudar a los profesionales de la salud en la toma de decisiones relacionadas con la pandemia ya que crea escenarios de la propagación del virus en diferentes niveles de restricciones de movilidad, ante panoramas de vacunación selectiva y otros.

- Investigadores de los Departamentos de Aplicaciones Computacionales para la Ciencia y la Ingeniería y Ciencias de la Computación han dado **asistencia a la Secretaría de Estado de Digitalización e Inteligencia Artificial en el desarrollo de la aplicación de rastreo de contactos** de coronavirus que el mes de julio se puso en marcha en la isla de la Gomera.

El BSC ha colaborado con estudios académicos y asesoramiento sobre a) la interoperabilidad de diferentes aplicaciones de rastreo, b) el modelado de algoritmos de *risk scoring*, c) el diseño funcional de la infraestructura y d) recomendaciones respecto la arquitectura del sistema.

El asesoramiento se realizó después de meses de investigar los protocolos y características de las aplicaciones de traceo que diferentes gobiernos europeos estaban implantando, así como aspectos relativos a la privacidad, la interoperabilidad, los *backends*, y medidas para ponderar el riesgo real de contagio a través de parámetros relativos al contacto electrónico.

El BSC tiene previsto colaborar con la Generalitat de Catalunya en el desarrollo de su versión de la aplicación de rastreo.

- El departamento de Ciencias de la Tierra está realizando múltiples estudios para cuantificar cómo las medidas de confinamiento han afectado la calidad del aire en España. Los estudios se realizan siguiendo diferentes metodologías, entre ellas modelos basados en *machine learning* muestran la relación real que existe entre la reducción de las emisiones y la mejora de la calidad del aire, a base de tener en cuenta los eventuales efectos que la meteorología podría haber tenido en este último parámetro.

Las innovaciones contenidas en esta metodología han sido el origen de nuevas colaboraciones del BSC con el **Centro Europeo de Previsiones Meteorológicas a Medio Plazo** (ECMWF, por sus siglas en inglés), la entidad encargada del Servicio de Vigilancia Atmosférica del programa de la Unión Europea **Copernicus**.

Sus resultados se están utilizando en diferentes aplicaciones, como los modelados de emisiones y calidad de Copernicus, incluyendo el [servicio de información europea sobre la calidad del aire en apoyo de la crisis COVID-19](#) y las actividades que se realizan desde esta entidad para dar apoyo a los usuarios de las políticas europeas en temas de calidad del aire.

También se utilizan en estudios de IS Global que analizarán el efecto que la reducción de emisiones ha tenido en la salud de los ciudadanos.

- El mismo departamento ha desarrollado un **servicio de alertas de olas de calor con semanas de antelación a escala europea para las poblaciones vulnerables**, dentro del proyecto 2S24E Climate Services for Clean Energy, uno de cuyos objetivos es ayudar a la población general y a los proveedores de energía a prepararse para eventos de calor extremo.
- El grupo de investigación Inteligencia Artificial de Altas Prestaciones (HPAI) del BSC colabora con UNICEF en un proyecto que pretende analizar el impacto socio-económico del virus de manera local y global, haciendo hincapié en el distanciamiento social. El objetivo es encontrar indicadores, patrones y estadísticas de impacto que sirvan a la ONU y a los responsables locales para tomar mejores mediciones y más rápidas.
- El mismo equipo de expertos en inteligencia artificial del BSC colabora con investigadores mexicanos y otros investigadores del centro en la creación de un sistema de recogida y análisis de datos, para ayudar en la toma de decisiones para hacer frente al COVID-19. El proyecto se lleva a cabo en colaboración con las ciudades México DF, Nuevo León y Jalisco: <http://dash.covid19.geoint.mx/>

-

El servicio de apoyo al usuario del BSC ha asistido al Gobierno de España y a la Generalitat en el cribado de contratos públicos de compra para localizar material sanitario (especialmente respiradores) adquiridos por centros que no se dedican a la atención sanitaria y que puedan ser susceptibles de ser trasladados centros de salud. En total se han cribado más de 850.000 documentos con tecnologías de big data y el servicio sigue abierto.

- El grupo de Social Link Analytics coordina una iniciativa para realizar un análisis de los tweets emitidos en España relacionados con la COVID-19. Se ha hecho un seguimiento diario de la evolución del sentimiento de la ciudadanía en relación con la evolución de la pandemia.
- Investigadores del grupo de Social Link Analytics colaboran en un proyecto que investiga las dinámicas de difusión en redes sociales de noticias falsas sobre salud en España. El objetivo es comprender los mecanismos de su difusión, con el fin de desarrollar y divulgar pautas que sirvan para contrarrestar ese fenómeno. El estudio está liderado por la Universidad de Navarra y ha sido seleccionado para obtener financiación del programa de Programa de Ayudas a Equipos de Investigación Científica 2019 la Fundación BBVA.

MareNostrum 4 y apoyo a los usuarios del superordenador

El superordenador MareNostrum 4 aporta la capacidad de cálculo necesaria para acelerar las investigaciones en marcha contra el coronavirus.

El departamento de Operaciones del BSC proporciona apoyo en el uso de MareNostrum 4, tanto a investigadores internos como externos. Durante los últimos 6 meses entre todos los proyectos listados se han consumido más de **39,5 millones de horas de cómputo** en investigaciones relacionadas con la lucha contra el coronavirus.

Los usuarios externos han podido utilizar las infraestructuras del BSC por la vía de la asignación de horas de cálculo reservadas al BSC o por la vía de las convocatorias a investigadores que se realizan a través de la Red Española de Supercomputación (RES) o la red europea PRACE.

- **PRACE** abrió el mes de marzo una convocatoria extraordinaria para las investigaciones en COVID-19.

A través de esta convocatoria accedió a MareNostrum el proyecto del grupo del catedrático de química y física de la Universidad de Valencia, Iñaki Tuñón, que llevó a cabo un proyecto para simular la reactividad química de la proteasa del SARS-COV-2 y obtener información que ayude al diseño de fármacos que sirvan para inhibirla y, por tanto, impedir que el virus se replique.

Este equipo usó durante dos meses y medio (de abril a junio) más de 12.000 procesadores (un 7,3 % de la capacidad de MareNostrum). En total ha usado **23,4 millones de horas de procesador** para realizar más de 400 simulaciones.

- La Red Española de Supercomputación (**RES**) ha reservado un 50% de los recursos en sus últimas dos convocatorias, 2020-2 y 2020-3, (lo que incluye **un 20% del superordenador MareNostrum 4**) para investigaciones relacionadas con la pandemia.

A través de la convocatoria 2020-2, que fue evaluada en el mes de junio, han obtenido acceso a las infraestructuras de supercomputación del BSC los siguientes proyectos relacionados con la lucha contra el SARS-Cov-2:

Title	Leader Name	Leader Institution	Khours
Exploring COVID19 Infectious Mechanisms and Host Selection Process	Modesto Orozco	Institut de Recerca Biomèdica (IRB)	4839
In silico toxicology prediction for compounds binding to the SARS-CoV-2 protease	Victor Guallar Tasies	Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS)	3600
Structural analysis by cryo EM of SARS Cov-2 Spike in complex with human neutralizing antibodies	José María Carazo	Centro Nacional de Biotecnología	140
Simulating COVID-19 propagation at a European-level	David Expósito Singh	Universidad Carlos III de Madrid (UC3M)	9300
Searching for small compounds as stabilizers of the inactive spike protein in SARS-COV-2	F. Javier Luque	Universitat de Barcelona	3367
Identification and Design of drugs for SARS-CoV2 nsp1 and the nsp1:40S ribosome complex	Francesco Luigi Gervasio	University College London	4942
Phenotypic targeting of COVID-19 spike protein ACE2 interface for safe drug delivery	Giuseppe Battaglia	Institute for Bioengineering of Catalonia (IBEC)	3664,56
Molecular dynamics simulations of the interaction between the SARS-Cov-2 virus and surfaces of different materials	Jordi Faraudo	Institut de Ciencia de Materials de Barcelona, ICMAB-CSIC	300
Droplet characterization of coughing and breathing	Pedro Martí Gómez-Aldaraví	Universitat Politècnica de València	135
Performance evaluation of Individual protection equipment using High Fidelity Simulations	Antonio Gil Megías	Universitat Politècnica de València	135

Semiconductor oxide surface applications: catalytic, sensor and biological evaluation	Juan Andrés Bort	Universitat Jaume I (UJI)	167
MultiScale Simulations of the Activity of 3CL Protease of SARS-CoV-2	Iñaki Tuñón	Universitat de València	8400
Revealing the molecular mechanisms of catalysis and inhibition of SARS-CoV-2 Mpro: towards the design of a COVID-19 antiviral drug.	Vicent Moliner	Universitat Jaume I (UJI)	381,3
Evaluation of the pH-dependence of the SARS-Cov-2 main protease by molecular dynamics simulations.	Sergio Madurga Diez	Universitat de Barcelona	133
Computational chemistry from static and dynamic approaches to block the protease of COVID	Albert Poater	Universitat de Girona	2000
Ultra-wide screening of ligand binding targets locking the SARS-cov-2 Glycoprotein S in the down conformation (COVID-LOCK)	Ivan Coluzza	CICbiomaGUNE	2200

En la convocatoria 2020-3, que fue evaluada en el mes de octubre, se asignaron 11 actividades de investigación relacionadas con la lucha contra el coronavirus. Estas 11 actividades fueron aprobadas con una asignación de 35 Millones de horas de computo.

Title	Leader Name	Institution	Khours
Computer Design of Inhibitors of SARS-CoV-2 Mpro by QM/MM Simulations: Towards the Design of Efficient COVID-19 Antiviral Drugs	Vicent Moliner	Universitat Jaume I (UJI)	1108
Droplet characterization of coughing and breathing	Pedro Martí	Universitat Politècnica de València	130
Exploring Covid19 Infectious Mechanisms and Host Selection Process	Modesto Orozco López	Institut de Recerca Biomèdica (IRB)	7000

Exploring peptide/MHC dissociation landscapes using Hierarchical Natural Move Monte Carlo	Jordi Villà Freixa	Universitat Internacional de Catalunya	700
High-throughput model exploration of multi-scale simulations of SARS-CoV-2 infection	Alfonso Valencia	Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS)	5000
Identification and Design of drugs for SARS-CoV2 nsp1 and the nsp1:40S ribosome complex	Francesco Luigi Gervasio	University College London	500
In silico toxicology prediction for compounds binding to the SARS-CoV-2 protease (continued)	Victor GUALLAR	Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS)	3600
MultiScale Simulations of the Activity of 3CL Protease of SARS-CoV-2	Iñaki Tuñón	Universitat de València	8500
Numerical investigation of turbulent dispersion of infectious aerosol clouds generated by sneezes and other violent respiratory events.	Alexandre Fabregat Tomas	Universitat Rovira i Virgili	3000
Searching for small compounds as stabilizers of the inactive spike protein in SARS-COV-2	Fco. Javier Luque Garriga	Universitat de Barcelona	2516
Turbulent dispersion and surface deposition of pathogen-laden droplets in enclosed rooms.	Alexandre Fabregat Tomas	Universitat Rovira i Virgili	3000

Además de los comentados, también utilizan las instalaciones del BSC los siguientes proyectos:

- Alojamiento de un set de datos de imágenes médicas de Rx de tórax (BIMCV-COVID-19) para colaborar en el desarrollo de herramientas de inteligencia artificial de código abierto que ayude a la detección precoz de infección por COVID-19 y neumonía. El set de datos ha sido elaborado por la Unidad Mixta de Imagen Biomédica FISABIO-CIPF con datos procedentes de diferentes hospitales afiliados al Banco de Imágenes Médicas de la Comunidad Valenciana (BIMCV).
- Simulaciones de dinámica molecular y diseño de secuencias para la optimización de anticuerpos contra el SARS-COV-2. Colaboración entre investigadores del Departamento de Físico-química de la Universidad de Barcelona en Centro Nacional de Biotecnología y la Universidad de Edimburgo.

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

Source URL (retrieved on 18 Mayo 2021 - 12:41): <https://www.bsc.es/es/noticias/noticias-del-bsc/el-bsc-utiliza-la-bioinform%C3%A1tica-la-inteligencia-artificial-y-la-capacidad-de-c%C3%A1lculo-del>