



INFORMÁTICA Los supercomputadores van a ser un instrumento indispensable para realizar los cálculos pesados, de millones de datos, que son precisos para ciertas investigaciones biomédicas. El *Mare Nostrum*, un supercomputador gestionado por el Barcelona Supercomputing Center-

Centro Nacional de Supercomputación, cumple esta misión. A diferencia de otros superordenadores del mundo se ha concebido con un uso polivalente, pero con un fuerte compromiso en el área de biomedicina. Ha sido el más potente de Europa y ahora se trabaja para que vuelva a situarse a la cabeza.

'Mare Nostrum', el supercomputador científico

Patricia Morén Barcelona

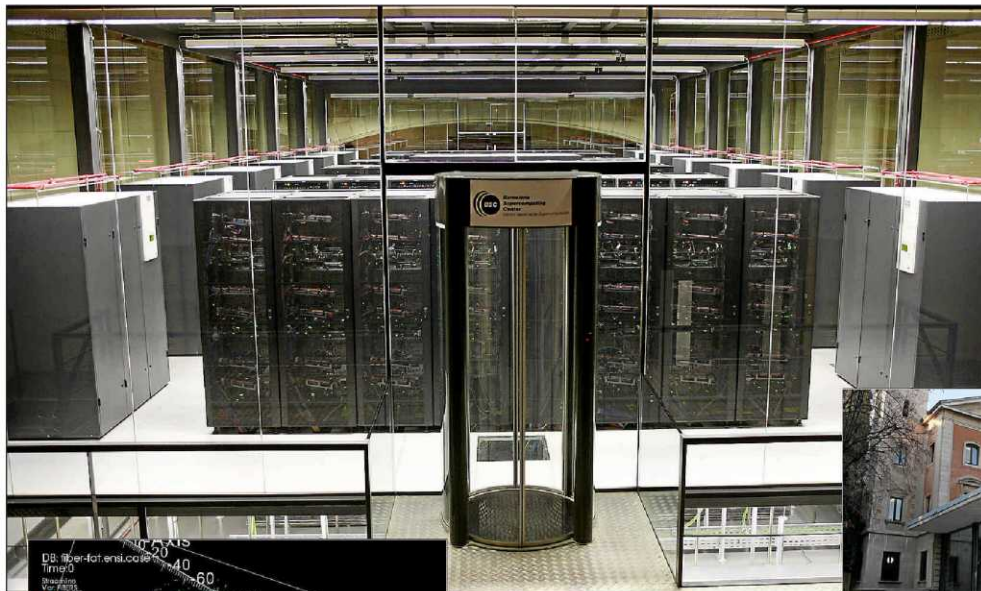
En una antigua iglesia de Barcelona laten 10.240 procesadores con una capacidad de cálculo final de 94,21 Teraflops. La suma de todos estos procesadores -los mismos de un PC corriente- conforman el *Mare Nostrum*, un supercomputador capaz de rendir como 10.240 PCs funcionando a pleno rendimiento y de realizar en un segundo los mismos cálculos que se harían en 25 millones de años con una sola calculadora.

Al inicio, en 2005, fue el más potente de Europa y el cuarto del mundo. Sin embargo, en la última lista del TOP500, de noviembre de 2008, había caído hasta el número 40 del mundo. Al margen de estos rankings, hoy existe un compromiso por parte del Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS), que lo gestiona, y el Ministerio de Ciencia e Innovación de volver a situarlo entre los primeros, a través del programa estratégico Prace (*Partnership for Advanced Computing in Europe*). El objetivo del Prace es decidir qué supercomputadores europeos -cinco- ofrecerán altas prestaciones de forma permanente. El *Mare Nostrum* es uno de los candidatos.

Esta supermáquina está al servicio de la ciencia y, de una forma destacable, de los proyectos de biomedicina. Pertenecen al BSC-CSN, fundado en 2005 y que dirige el catedrático Mateo Valero. El BSC-CSN se constituyó a partir de un consorcio participado por el entonces Ministerio de Educación y Ciencia con un 51 por ciento, la Generalitat con un 37 por ciento y la Universidad Politécnica de Cataluña con el 12 por ciento.

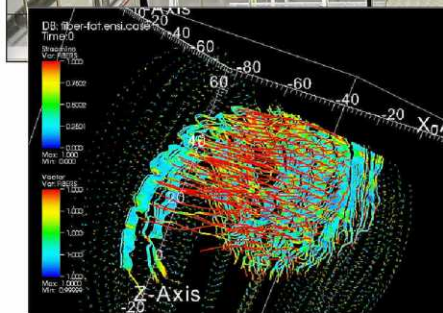
Investigación externa

Este centro de supercomputación cuenta con 220 empleados, de los que 180 se dedican a la investigación, aunque sólo el 20 por ciento de la que se realiza con el supercomputador es interna; la mayor parte, el 80 por ciento, corresponde a proyectos externos, explica Oriol Riu, *site manager* del



Las 'supercifras'

- 120m2 de superordenador
- 170m2 de cubículo
- 94,21 Teraflops de capacidad de cálculo
- 10.240 procesadores
- 480 Terabytes de almacenaje en disco duro
- 600 proyectos de investigación hasta ahora



Un recinto singular

El supercomputador *Mare Nostrum* se halla en el interior de un cubículo de vidrio de 170 m2 (en la imagen superior), en la capilla neorrománica de Torre Girona, de principios del siglo XX, y que fue desacralizada para darle otros usos no religiosos (imagen derecha). Esta potente tecnología se está empezando a utilizar para hacer simuladores de imágenes médicas, como ésta del corazón, con los que se espera poder ensayar una cirugía antes de llevarla a la práctica (imagen izquierda).

ponen a las áreas de química y matemáticas (20 por ciento), física y astronomía (20 por ciento) e ingeniería (otro 20 por ciento).

Usos en biomedicina

En el programa de biología computacional del IRB Barcelona-BSC trabajan, a su vez, varios grupos: el de David Torrents, dedicado a la secuenciación genómica, metagenomas y explotación de bases de datos; el de Patrick Aloy, de reconstrucción de sistemas moleculares de células cancerosas y desbalances genéticos en Alzheimer; el de Juan Fernández de Recio, de predicción de complejos de proteína; el del propio Orozco, de estudios de ácidos nucleídos de flexibilidad de proteínas y diseño de nuevos fármacos, y el de Victor Guallar, que estudia los mecanismos de acción de las proteínas de transporte electrónico. Y esto es sólo el principio. El BSC-CSN, el Hospital de San Pablo y el Centro de Visión por Computador de la Universidad Autónoma de Barcelona han impulsado un proyecto para hacer un simulador cardíaco para ensayar cirugías cardíacas antes de practicarlas en pacientes, según José María Cela, director de aplicaciones computacionales en ciencias e ingeniería del BSC-CNS.

BSC-CSN.

El supercomputador no se detiene ningún día del año. Los investigadores se conectan a él por control remoto y está pensado para estudios en los que se deben realizar cálculos pesados. ¿Cómo se decide qué grupos pueden utilizarlo? Un comité de acceso, de composición multidisciplinar, y de 44 miembros, recibe y estudia cada

cuatro meses las solicitudes de los científicos.

Una de las características del *Mare Nostrum* es que se concebido para un uso, aunque su aplicación a las ciencias de la vida y la biomedicina ocupa un lugar destacado. "Es el centro de supercomputación del mundo que tiene un compromiso más fuerte con la biomedicina", mientras que los otros

ordenadores más potentes del mundo se han centrado en hacer predicciones meteorológicas y en usos militares. Así, Japón tiene un supercomputador puntero, pero exclusivamente dedicado a simular terremotos, y Estados Unidos, otro que sólo simula explosiones atómicas, ha expuesto Modesto Orozco, profesor de la Universidad de Barcelona y director

del programa conjunto del Instituto de Biología Computacional del IRB Barcelona-BSC (del BSC-CSN y el Instituto de Investigación Biomédica, de Barcelona).

Según Orozco, los estudios de biomedicina suponen el 40 por ciento de todos los proyectos a los que presta su apoyo el supercomputador (más de 600 hasta ahora); el resto corres-

EL LABORATORIO EXPERIMENTAL DE BIOINFORMÁTICA, UN APOYO

Otra característica singular del supercomputador del BSC-CSN es que se apoya en una plataforma concebida para validar todas las simulaciones y predicciones que se efectúan con él. Es el Laboratorio Experimental de Bioinformática, que dirige Montse Soler y fue creado en 2008, por una iniciativa conjunta del IRB Barcelona-BSC. Está integrado por diez personas, entre las que figuran biotecnólogos, bioquímicos y químicos. Un laboratorio de este tipo, usado para apoyar los cálculos y predicciones de un supercomputador, es un modelo original, según las fuentes consultadas. Este laboratorio trabaja, entre otras funciones, con el grupo de Patrick Aloy en la validación de redes proteicas implicadas en enfermedades como el cáncer de colon, el de mama y el Alzheimer y, en breve, tras poco más de un año en funcionamiento, prevé empezar a publicar sus estudios.



Montse Soler, Chiara Castellazzi, Guillermo Suñé, Kathryn Collinet, Rodrigo Arroyo y Clara Berenguer, del Laboratorio Experimental de Bioinformática, del IRB-Barcelona-BSC.