Unidad CRIS de Investigación Biofísica en Cáncer

Investigador Principales: Dr. Alberto Ocaña, Dr. Jorge Reñé
Centro: Fundación para la Investigación Biomédica del Hospital Clínico San Carlos (IdISSC), Madrid - Universidad Complutense de Madrid (UCM)
Tipo de Tumor: General

Introducción

A pesar de los avances en investigación, muchos tumores siguen siendo hoy en día muy difíciles de tratar. En muchos casos, los científicos ya conocen los mecanismos que utilizan las células tumorales para crecer y sobrevivir. Sin embargo, entender estos procesos no siempre es suficiente para poder frenarlos.

Las proteínas que controlan estos mecanismos no son estructuras rígidas y simples. Muchas tienen regiones inestables, cambiantes, o se agrupan formando complejos con cientos de proteínas distintas. Son sistemas dinámicos, a veces difíciles de estudiar y de atacar con los fármacos actuales.

Por eso, aunque sepamos qué falla en el cáncer, no siempre conseguimos diseñar tratamientos eficaces. Las herramientas tradicionales no permiten explorar en profundidad estas zonas más complejas u ocultas de la biología tumoral.

Y aquí es donde entra la supercomputación.

Gracias a la capacidad de procesamiento de los superordenadores, es posible analizar enormes cantidades de información biológica y simular el comportamiento de estas proteínas y complejos en detalle. Esto permite descubrir nuevos puntos débiles del cáncer que hasta ahora pasaban desapercibidos.

En un contexto donde muchos pacientes no tienen opciones terapéuticas eficaces, necesitamos nuevas estrategias que permitan diseñar fármacos de forma más rápida, más precisa y más inteligente.

El proyecto

La Unidad CRIS de Investigación Biofísica en Cáncer nace precisamente con ese objetivo: **utilizar la potencia de la supercomputación para transformar la forma en la que se descubren tratamientos contra el cáncer**.

Liderado por los Dres. Jorge Reñé Espinosa y Alberto Ocaña, el proyecto parte de una idea clave: si somos capaces de analizar en profundidad los mecanismos moleculares del cáncer, podremos identificar nuevas vulnerabilidades y diseñar terapias dirigidas de manera mucho más eficaz.

Uno de los grandes objetivos es identificar los puntos débiles del cáncer: regiones inestables en proteínas, o agrupaciones formadas por cientos de proteínas distintas, que son clave para el funcionamiento del tumor pero que, hasta ahora, no podían ser atacadas con fármacos. Estas agrupaciones funcionan como pequeños talleres dentro de la célula, donde se concentran las piezas necesarias para que las células tumorales reparen su ADN dañado y sigan creciendo. Los primeros esfuerzos del equipo se centran en dos proteínas relacionadas con esa reparación, llamadas PARP1 y WRN, en las que ya se han detectado indicios de este tipo de puntos débiles.

Para ello, el equipo trabaja con enormes cantidades de información biológica y estructural procedente de distintos tipos de tumores. Toda esta información se integra y se analiza mediante sistemas de supercomputación, capaces de procesar datos a una velocidad y escala imposibles para un ordenador convencional.

Aquí es donde las simulaciones computacionales juegan un papel fundamental. Gracias a ellas, los investigadores pueden recrear estos sistemas en el ordenador, observar cómo funcionan y probar, de forma virtual, nuevas moléculas que puedan interferir en ellos.

Esto cambia completamente las reglas del juego. En lugar de depender únicamente de ensayos experimentales largos y costosos, los científicos pueden explorar miles de opciones en el entorno digital y seleccionar las más prometedoras antes de llevarlas al laboratorio.

Para llevar esta estrategia a la práctica, **el proyecto se organiza en tres objetivos concretos** que se desarrollarán a lo largo de sus cuatro años de trabajo:

1. **Analizar con supercomputación grandes bases de datos** de pacientes con cáncer (información genética, de proteínas y otros datos biológicos) para descubrir nuevas proteínas que formen agrupaciones clave en el tumor, y estudiar en profundidad su estructura y su comportamiento.
2. **Localizar** mediante simulaciones las **regiones inestables** de proteínas como PARP1 y WRN que permiten la formación de estas agrupaciones, y diseñar pequeños fragmentos de proteína, llamados péptidos, capaces de bloquear ese proceso.
3. **Buscar**, mediante análisis virtuales a gran escala, **fármacos** capaces de encajar en estos puntos débiles recién descubiertos, y comprobar con nuevas simulaciones su capacidad para bloquearlos de forma

selectiva y duradera.

Además, el proyecto se desarrolla en un entorno único: en relación con la Unidad CRIS de Nuevas Terapias Experimentales, donde investigadores, oncólogos y bioinformáticos trabajan de forma conjunta directamente en el entorno del hospital. Esta colaboración permite acelerar el paso de los descubrimientos científicos a los pacientes, integrando la innovación tecnológica directamente en el desarrollo de tratamientos.

Esta nueva Unidad de supercomputación tendrá una capacidad de procesamiento única en España, equipada con sistemas avanzados y cientos de núcleos de cálculo. Un equipo de investigadores postdoctorales y predoctorales se dedicará en exclusiva a este proyecto durante sus cuatro años de desarrollo. Esto permitirá abordar problemas complejos y avanzar en el diseño de nuevos fármacos con una rapidez sin precedentes.

Impacto esperado

Este proyecto abre la puerta a una nueva forma de entender y tratar el cáncer. Gracias a la supercomputación, será posible diseñar terapias más eficaces y seguras, dirigidas a mecanismos que hasta ahora eran muy difíciles de abordar. Y, lo que es igual de importante, hacerlo en menos tiempo.

En definitiva, se trata de transformar el proceso de descubrimiento de fármacos: pasar de un modelo tradicional a uno más preciso, predictivo y personalizado. Porque cuando la tecnología y la biología avanzan juntas, las oportunidades para los pacientes también lo hacen.