

Congreso Internacional de Supercómputo 2025, volumen 2.

El Supercómputo en la Ciencia de Frontera

La investigación científica ha experimentado un cambio fundamental en las últimas décadas. Ha ido de un modelo experimental al "cuarto paradigma" de la ciencia, caracterizado por la presencia de datos masivos y el modelado con computadoras. En este escenario, el supercómputo se ha consolidado como un agente epistemológico determinante, en el que no se trata de procesar datos a gran velocidad, sino de abrir metodologías científicas para simular la realidad y descifrar la complejidad de la naturaleza y de la biología humana. Las instituciones de educación superior desempeñan un papel estratégico en este contexto, tanto en el desarrollo de recursos e infraestructura como en la formación de especialistas que apuntalan el progreso y los avances frente a los desafíos tecnológicos.

Este número de la *Revista TIES* da testimonio del impacto del supercómputo y la inteligencia artificial en la resolución de problemas complejos. A través de una narrativa que atraviesa la nanoescala, los sistemas ambientales y el desarrollo de tecnologías, este número ilustra cómo la simulación numérica y los modelos predictivos impactan nuestra relación con el entorno y la salud humana.

La primera frontera se sitúa en la escala molecular con el artículo "Descifrando el lenguaje de las proteínas: modelos de lenguaje a gran escala para el diseño y optimización de nuevas macromoléculas", en el que Diego Pérez Villanueva, Luz Mariana González Vega, Diego Muñoz y Sergio Romero Romero, abordan un problema de la bioquímica computacional. Tradicionalmente, la ingeniería de proteínas se ha limitado a la evolución dirigida o la mutación racional, procesos que pueden resultar lentos y costosos. Las personas autoras muestran cómo los modelos de lenguaje de gran tamaño (LLM), basados en la arquitectura Transformer y entrenados automáticamente con millones de secuencias, aprenden el "lenguaje" de los aminoácidos. Este paralelismo lingüístico coadyuva a la creación de nuevas macromoléculas con funciones innovadoras en los campos de biotecnología y biomedicina.

El potencial de modelado se manifiesta en una aplicación clínica que es trascendental en la lucha contra el cáncer. Luis Córdova, Marco Velasco y Adrián Sánchez, en el artículo "Uso de supercómputo para el descubrimiento de fármacos: un caso de estudio sobre CK1ε", describen el uso de recursos computacionales de alto rendimiento en el cribado virtual y la simulación de dinámica molecular. La caseína cinasa 1 ε (CK1ε) es una enzima asociada con la progresión tumoral, por lo que constituye una

diana terapéutica de interés. No obstante, identificar compuestos químicos capaces de inhibirla mediante métodos convencionales toma más de una década. A partir de simulaciones de dinámica molecular ejecutadas en la supercomputadora Miztli de la UNAM, los autores caracterizaron las interacciones moleculares y propusieron candidatos viables.

El supercómputo también encuentra aplicaciones directas en el estudio del medio ambiente y en la capacidad de respuesta ante contingencias ecológicas. Gabriela Reséndiz Colorado, Rosario de Lourdes Romero, Jorge Zavala, Miguel Ángel Robles y Pavel Ernesto Oropeza presentan en "Supercómputo para el medio ambiente: paralelizando simulaciones de derrames en el mar" una estrategia para generar pronósticos rápidos ante incidentes por hidrocarburos en el Golfo de México. A través del uso de la biblioteca PyGnome y la paralelización de las simulaciones mediante *scripts* en Python y Bash en el clúster Ometéotl de la UNAM, las personas autoras redujeron en un 77.8 % el tiempo de cómputo frente a los métodos secuenciales. Esto hizo posible ejecutar más de 66 000 simulaciones en apenas 36 horas, una capacidad particularmente relevante cuando la oportunidad de los resultados puede incidir en las decisiones de los equipos responsables de atender una contingencia.

José Agustín García aborda el tema de la modelación atmosférica y la protección civil ante riesgos naturales, donde el cómputo de alto rendimiento puede salvar vidas. En "Potenciando pronósticos ambientales en México: supercómputo como pilar en modelación de calidad del aire y de dispersión de cenizas", los investigadores del ICAYCC de la UNAM exponen la implementación diaria de los modelos WRF-Chem y Fall3D para resolver numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes y de transporte químico, lo que permite predecir cómo se dispersan contaminantes como el ozono o las cenizas del volcán Popocatepetl. Para ello, se necesita una infraestructura de almacenamiento paralelo como LUSTRE y gestores de trabajos como SLURM.

El número concluye con la participación de las personas autoras Germán Emiliano López, Vicenta Sánchez y Chumin Wang, quienes abordan la escala cuántica en el artículo "Superconductividad en nanoestructuras vía matriz por bloques". Se trata de un fenómeno en el que los electrones cooperan sin resistencia eléctrica para transportar energía sin pérdidas. Tradicionalmente, resolver las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes (BdG) mediante métodos autoconsistentes es muy complejo desde el punto de vista computacional; sin embargo, con la supercomputadora Miztli de la UNAM, lograron dividir las matrices complejas en bloques independientes. El resultado es un problema de 19 átomos que antes requería tres semanas de procesamiento continuo y que se resolvió en apenas nueve minutos, lo que representa una aceleración de más de tres mil veces. El trabajo muestra un futuro en el que la combinación de álgebra lineal, supercómputo e inteligencia artificial impulsa el diseño cuántico de nuevos superconductores que operan a temperatura ambiente.

Con este segundo volumen, la *Revista TIES* cierra la publicación de los trabajos derivados del Congreso Internacional de Supercómputo 2025, organizado por la Universidad Nacional Autónoma de México. Los artículos reunidos en ambos números muestran un campo que difícilmente puede entenderse

sólo desde la capacidad de procesamiento: el supercómputo participa en la manera de formular preguntas, construir modelos y explorar fenómenos cuya escala o complejidad rebasa los límites de otros métodos de análisis. Desde las ciencias ambientales y biomédicas hasta el estudio de materiales y sistemas cuánticos, estos trabajos dejan constancia de algunas de las líneas presentadas durante el congreso y, al mismo tiempo, del conocimiento que se desarrolla en la Universidad en torno a la computación de alto rendimiento.

Dr. Héctor Benítez Pérez