



Institut Hospital del Mar
d'Investigacions Mèdiques



Simulan por primera vez un paso clave en la maduración del virus del SIDA

Los investigadores han mostrado con técnicas computacionales como se libera la proteína responsable de la maduración del virus e inicia la infección

El trabajo se ha realizado con la tecnología GPUGRID.net, una plataforma de cálculo voluntario distribuido que equivaldría a un superordenador virtual.

Barcelona, 04 de diciembre de 2012.- Bioinformáticos del IMIM (Instituto Hospital del Mar de Investigaciones Médicas) y de la UPF (Universidad Pompeu Fabra) consiguen explicar mediante técnicas de simulación molecular, un paso muy concreto en el proceso de maduración de los viriones del VIH, es decir, cómo las nuevas partículas de virus inerte que se forman, se convierten en infecciosas. Esto es esencial para entender su replicación. Los resultados se publican en la última edición de la revista *PNAS* y pueden ser claves en el diseño de futuros nuevos fármacos antirretrovirales.

Los viriones del VIH se convierten en maduros e infecciosos a través de la acción de una proteína llamada VIH proteasa. Ésta actúa como unas "tijeras", cortando la larga cadena de proteínas que forman el VIH, en proteínas individuales que formaran la estructura infecciosa de nuevos viriones. Según los investigadores del grupo de biofísica computacional del IMIM-UPF coordinado por Gianni De Fabritiis, **"uno de los aspectos más intrigantes de todo el proceso de maduración del VIH, es cómo la VIH proteasa se libera, es decir como la "proteína tijeras" aparece por primera vez, ya que ésta también forma parte inicialmente de la larga cadena de proteínas que forman los nuevos viriones del VIH"**.

El grupo de Gianni De Fabritiis ha sido capaz mediante un software para simulaciones moleculares (ACEMD) y utilizando una tecnología llamada GPUGRID.net, de demostrar que las primeras "proteínas tijeras" se pueden cortar ellas mismas de dentro la cadena de proteínas. Esto lo hacen uniendo a su propia parte activa, uno de sus finales conectados (el N-terminus) y cortando luego el enlace químico que los conecta con el resto de la cadena. Este es el inicio de todo el proceso de maduración del VIH y si somos capaces de detener el VIH proteasa mientras todavía están en proceso de maduración, impediremos que las partículas víricas o viriones lleguen a madurar y por lo tanto puedan infectar.

El trabajo se ha realizado utilizando la plataforma de cálculo voluntario distribuido GPUGRID.net, que consiste en aprovechar para la investigación, la potencia de miles de unidades de procesamiento gráfico *Nvidia GPU accelerators*, cedida voluntariamente por los propietarios de múltiples ordenadores domésticos mientras no la necesitan. Sería como disponer de un superordenador virtual. Esto permite que la potencia de cálculo sea unas 10 veces superior a la generada con los ordenadores normales y como consecuencia que se reduzcan los costes de la investigación proporcionando un nivel de potencia computacional que antes solo se podía obtener utilizando superordenadores multimillonarios.

Los investigadores utilizan esta potencia de cálculo para procesar grandes cantidades de datos y generar simulaciones moleculares de alta complejidad. Concretamente en este caso, han realizado miles de

simulaciones computacionales, cada una para cientos de nanosegundos (la mil millonésima parte de un segundo) para poder estudiar un proceso que en total dura casi un milisegundo.

Según los investigadores, este descubrimiento en el proceso de maduración del VIH, proporciona un camino alternativo en el diseño de futuros fármacos, que se basarían en la utilización de estos nuevos mecanismos moleculares. Por ahora, este trabajo nos proporciona una mayor comprensión de un paso clave en el ciclo de la vida del VIH, un virus que ataca directamente y debilita el sistema inmunológico de nuestro organismo convirtiéndolo en vulnerable a gran número de infecciones y que afecta a millones de personas en todo el mundo.

Sigue GPUGRID.net en: <http://facebook.com/gpugrid>

Artículo de referencia:

“Kinetic characterization of the critical step in HIV-1 protease maturation”.SKashif Sadiq, Frank Noe and Gianni De Fabritiis.PNAS.DOI:10.1073/pnas.1210983109.

<http://www.pnas.org/content/early/2012/11/21/1210983109.abstract?sid=9e8d7340-4d4c-4fa5-85a2-c68194eff067>

Para más información contactar con:

Rosa Manaut, responsable de Comunicación del IMIM, Telf: 699094833 o Marta Calsina, Servicio de Comunicación del IMIM, Telf: 933160680.