

BSC e IrsiCaixa crean un método bioinformático para predecir la eficacia de los fármacos antirretrovirales contra las diferentes mutaciones del VIH

- El método ha sido eficaz para predecir las resistencias a los medicamentos amprenavir y darunavir de virus con mutaciones genéticas en una proteína del VIH-1, y podría ser fácilmente aplicado a otros fármacos y proteínas. Todo el análisis bioinformático puede ser ejecutado en menos de 24 horas con un equipo informático relativamente pequeño y al alcance de cualquier laboratorio.
- El sistema es un paso más hacia la medicina personalizada, ya que permite decidir qué fármaco puede tener más eficacia en cada caso concreto, en función del virus causante de la infección.
- El método, que ya está disponible vía web, ha sido desarrollado por el Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación y el Instituto de Investigación del Sida IrsiCaixa, impulsado conjuntamente por la Obra Social "la Caixa" y el Departamento de Salud de la Generalitat de Catalunya. El estudio se ha publicado en *Journal of Chemical Information and Modeling*.

Barcelona, 9 de mayo de 2016. La eficacia de los medicamentos antirretrovirales que se utilizan como tratamiento para el VIH (Virus de la Inmunodeficiencia Humana) a menudo se ven afectados por la capacidad que tiene este virus de desarrollar mutaciones genéticas. El Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) y el Instituto de Investigación del Sida IrsiCaixa, impulsado conjuntamente por la Obra Social "la Caixa" y el Departamento de Salud de la Generalitat de Catalunya, han desarrollado un método bioinformático para predecir el efecto de cada mutación en la resistencia del virus a estos fármacos. Un artículo publicado en el *Journal of Chemical Information and Modeling* explica cómo este método ha sido eficaz para predecir las resistencias a los fármacos amprenavir y darunavir de virus con mutaciones genéticas en la proteasa del VIH-1, que es una proteína esencial para la replicación del virus. Este método podría ser fácilmente aplicable a otros fármacos y proteínas.

En la actualidad, la predicción de los efectos de las mutaciones del VIH sobre la eficacia de los fármacos se realiza en base a la información obtenida de otros pacientes. Es un conocimiento acumulativo, basado en la experiencia clínica, que resulta útil pero que tiene limitaciones, como por ejemplo, que no puede dar respuesta cuando el virus desarrolla una mutación que antes no ha sido registrada. El método desarrollado por el BSC-CNS e IrsiCaixa supera estas limitaciones, ya que realiza las predicciones en base a las características de cada mutación genética y a los cambios que esta mutación provoca en las proteínas del virus que actúan como dianas para los fármacos.

El método BSC-IrsiCaixa combina la secuenciación del ADN del VIH, la detección de las mutaciones genéticas, el modelado computacional de las proteínas y la simulación del

acoplamiento de los fármacos con las proteínas del virus. Todo este análisis bioinformático puede ser ejecutado en menos de 24 horas en un equipo informático relativamente pequeño y al alcance de cualquier laboratorio. Una de las claves del sistema es la utilización de PELÉ, un *software* de simulación desarrollado en el BSC-CNS para predecir la interacción de los fármacos con sus dianas, que ha demostrado tener ventajas competitivas sobre otros *softwares* comerciales.

Disponible vía web

El BSC-CNS ha creado una plataforma automática disponible vía web en la cual, de manera gratuita, los investigadores que lo deseen pueden introducir la secuencia genómica de la proteasa HIV-1 PR de un paciente y predecir la eficacia de suministrarles los fármacos amprenavir y darunavir. De momento, estas son las únicas predicciones disponibles, a la espera de avances en la investigación sobre los efectos de mutaciones del VIH en otras proteínas del virus y las interacciones con otros fármacos antirretrovirales.

Ejemplo de la futura medicina personalizada

El investigador del BSC-CNS que responsable principal del artículo publicado en el *Journal of Chemical Information and Modeling* y principal desarrollador de PELÉ, Víctor Guallar, explica que “este sistema es uno de los primeros pasos palpables de lo que será la medicina personalizada, con la cual los tratamientos se decidirán después de analizar genéticamente los causantes de las enfermedades de cada paciente y qué fármaco puede tener más eficacia en cada caso concreto.”

“En este estudio mostramos cómo es posible enlazar el diagnóstico clínico de rutina de VIH-1 con la modelización estructural por ordenador. Es una prueba de concepto pluridisciplinar que supera las limitaciones de la práctica actual a la hora de definir los tratamientos antirretrovirales y que, además, permitirá diseñar nuevos fármacos más rápidamente”, añade Marc Noguera-Julian, investigador de IrsiCaixa que ha participado en el estudio.

Link al artículo *Computational Prediction of HIV-1 Resistance to Protease Inhibitors*: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jcim.5b00667>

Link a vídeo de una de las simulaciones realizadas: <https://youtu.be/nRDOTloIWp0>

Sobre el BSC-CNS

El Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) es el centro líder de la supercomputación en España. Su especialidad es la computación de altas prestaciones, también conocida como HPC (High Performance Computing). Su función es doble:

ofrecer infraestructuras y servicio en supercomputación a los científicos españoles y europeos, y generar conocimiento y tecnología para transferirlos a la sociedad.

El BSC-CNS es un Centro de Excelencia Severo Ochoa, miembro de primer nivel de la infraestructura de investigación europea PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) y gestiona la Red Española de Supercomputación (RES).

El BSC-CNS es un consorcio formado por el Ministerio de Economía y Competitividad, el Departament d'Empresa i Coneixement de la Generalitat de Catalunya y la Universidad Politécnica de Catalunya BarcelonaTech

Sobre IrsiCaixa

El Instituto de Investigación del Sida IrsiCaixa es una organización de reconocido prestigio internacional. Su objetivo es investigar en torno al VIH/sida y las enfermedades relacionadas, su prevención y sus tratamientos, con el objetivo último de **erradicar la pandemia**. Fue fundado en 1995, como una fundación privada sin ánimo de lucro, por la Obra Social “la Caixa” y el Departamento de Salud de la Generalitat de Catalunya. Está ubicado en el Hospital Germans Trias i Pujol, en Badalona (Barcelona).

La investigación de IrsiCaixa se lleva a cabo en coordinación con los centros de investigación más prestigiosos del mundo, y sus publicaciones tienen uno de los índices de factor de impacto más elevados en su área. Más de 60 investigadores dedicados a la investigación, a la formación académica y a la divulgación trabajan en IrsiCaixa, en colaboración con profesionales sanitarios y más de 3.000 pacientes. Este modelo facilita la transferencia de conocimiento entre los diferentes actores implicados y el avance hacia la erradicación del VIH. IrsiCaixa también participa en ensayos clínicos para evaluar nuevas estrategias terapéuticas y colabora con países en vías de desarrollo en la lucha global contra la pandemia.

Para más información:

Barcelona Supercomputing Center

Gemma Ribas MasPOCH. Tel: 620 429 956 communication@bsc.es
www.bsc.es

IrsiCaixa - Unidad de Difusión de la Investigación Biomédica

Júlia Bestard – Comunicación y Prensa. Tel. 93 465 63 74 ext. 121 comunicacio@irsicaixa.es
www.irsicaixa.es | www.irsicaixa.es/UDRBio | [@IrsiCaixa](https://twitter.com/IrsiCaixa)

Departamento de Comunicación de la Obra Social “la Caixa”

Irene Roch. Tel. 93 404 60 27 iroch@fundaciolacaixa.es
www.lacaixa.es/obrasocial

Sala de prensa multimedia

<http://premsa.lacaixa.es/obrasocial>