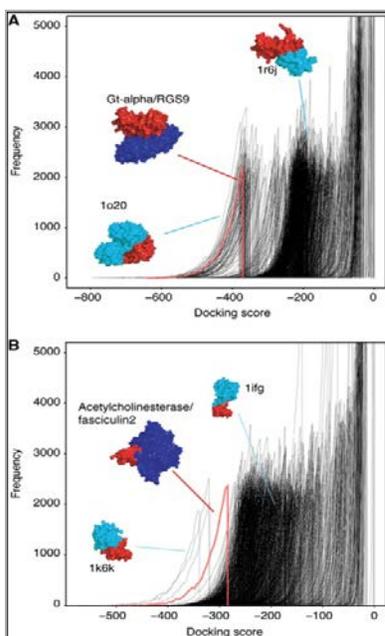


## Programas computacionales para predecir la composición de complejos macromoleculares

Los resultados abren nuevas posibilidades para el modelado de los complejos de proteínas como pasos previos para la interpretación de las mutaciones relacionadas con el cáncer

**Barcelona, 23 de febrero de 2011** - La prestigiosa revista *Molecular Systems Biology* ha publicado el primer estudio que demuestra la capacidad de los programas computacionales comúnmente utilizados para estudiar el acoplamiento entre proteínas para predecir la estructura de complejos macromoleculares. Esta investigación ha sido llevada a cabo por Mark Wass y Gloria Fuentes, del Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas (CNIO), Carles Pons, del Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) y Florencio Pazos, del Centro Nacional de Biotecnología (CNB-CSIC), bajo la dirección del Prof. Alfonso Valencia, director del Programa de Biología Estructural y Biocomputación del CNIO.

“En este estudio hemos demostrado por primera vez que los métodos de predicción del acoplamiento (*docking*) de proteínas pueden ser usados para diferenciar entre las proteínas que interaccionan y las que no. Hemos observado que la distribución de valores obtenidos mediante estos métodos es diferente en pares de proteínas que interaccionan con respecto a los obtenidos mediante un conjunto de pares no interactivos. Este hallazgo ha sido posible después de ejecutar más de 100,000 simulaciones en el supercomputador MareNostrum”, ha destacado Carles Pons del BSC.



**Fig.1** Docking score distributions for benchmark

Este tipo de cálculos son extremadamente complejos y se pudieron llevar a cabo gracias a las instalaciones del Barcelona Supercomputing Center. Los complejos de proteínas son esenciales para todos los procesos que tienen lugar en nuestras células, pero hasta la fecha sólo se ha podido determinar la composición y los detalles de su arquitectura molecular para una pequeña fracción de ellos. Este conocimiento es esencial para la comprensión de las consecuencias de las mutaciones y para el desarrollo de potenciales inhibidores. Los resultados presentados en esta publicación abren nuevas posibilidades para el modelado de los complejos de proteínas como pasos previos para la interpretación de las mutaciones relacionadas con el cáncer.

### Artículo de referencia:

#### Towards the prediction of protein interaction partners using physical docking

Mark N Wass, Gloria Fuentes, Carles Pons, Florencio Pazos and Alfonso Valencia. *Mol Syst Biol* 7:469, doi:10.1038/msb.2011.3 disponible para su descarga en <http://www.nature.com/doifinder/10.1038/msb.2011.3>