altos que lo estimado inicialmente y comunicado por la OMS.

Simulaciones masivas de coronavirus completadas en una supercomputadora

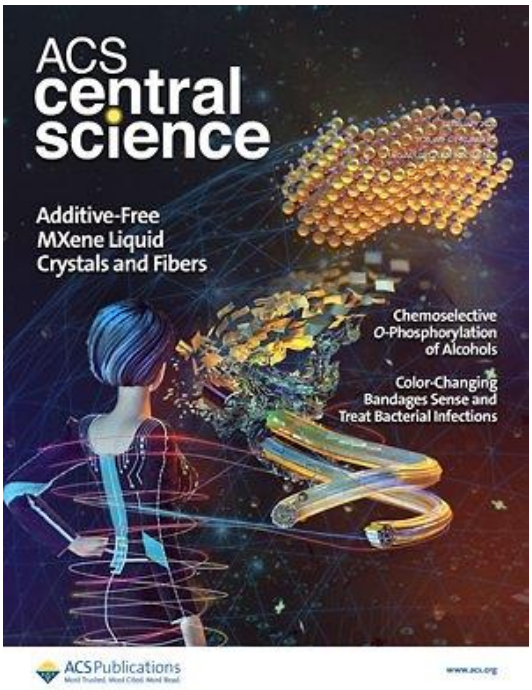
Un grupo de científicos de la Universidad de Texas en el Centro de Computación Avanzada de Texas (TACC), Austin, Estados Unidos, preparan un modelo

informático de SARS-CoV-2 que esperan darán una idea más precisa de cómo se infecta el cuerpo humano. Los investigadores han dado los primeros pasos y han probado las primeras partes del modelo y optimizado el código en la supercomputadora Frontera.

Esta información —el conocimiento completo del modelo viral puede ayudar a los investigadores a diseñar nuevos medicamentos y vacunas para combatir la infección por el SARS-Cov-2.

El modelo completo viral contempla la composición de todos los átomos de la envoltura del SARS-COV-2 y con ello la posibilidad de identificar aquellos componentes que están involucrados en el reconocimiento molecular. El reconocimiento molecular implica cómo el virus interactúa con los receptores de la enzima convertidora de angiotensina 2 (ACE2) y posiblemente otros objetivos dentro de la membrana de la célula huésped.

Se estima que este modelo de coronavirus contendrá aproximadamente 200 millones de átomos y las simulaciones brindarán nuevas ideas sobre las diferentes partes del coronavirus que se requieren para la infectividad.



De esta manera se abren nuevas oportunidades para diseñar nuevos medicamentos, para entender cómo funcionan los medicamentos actuales y las posibles combinaciones farmacológicas que pueden ser útiles en el tratamiento.

Nuevo modelo matemático puede hacer un seguimiento más eficaz de las epidemias

Un nuevo modelo (matemático) publicado el 17 de marzo del 2020 en las Actas de la Academia Nacional de Ciencias, permitirá presumir los cambios en la propagación epidémica causados por la mutación de un organismo. Este modelo permite, además, pronosticar la evolución de la epidemia ante medidas de salud pública.

Los modelos actualmente empleados para rastrear epidemias utilizan generalmente datos médicos y epidemiológicos para hacer predicciones sobre la progresión de una enfermedad. Ahora se podrán evaluar, además, acciones como cuarentenas, aislamientos de las personas, y luego ver cómo afectan la propagación de una epidemia cuando el patógeno está mutando a medida que se propaga.

Durante una pandemia en curso, cuando las circunstancias cambian a diario —como se ha visto con el SARS-CoV-2—, obtener información precisa es extremadamente difícil. Con el nuevo modelo desarrollado se podrían tomar decisiones efectivas y oportunas sin tener que recurrir a experiencia iniciales durante el desarrollo de la epidemia, y comprender mejor las razones por las cuales, por ejemplo, el virus se propaga mucho más rápido de lo previsto en la actualidad.

Bibliografía

Ying Liu, Albert A Gayle, Annelies Wilder-Smith, Joacim Rocklöv. The reproductive number of COVID-19 is higher compared to SARS coronavirus. Journal of Travel Medicine, 2020; DOI: 10.1093/jtm/taaa021

Jacob D. Durrant, Sarah E. Kochanek, Lorenzo Casalino, Pek U. Ieong, Abigail C. Dommer, Rommie E. Amaro. Mesoscale All-Atom Influenza Virus Simulations Suggest New Substrate Binding Mechanism. ACS Central Science, 2020; 6 (2): 189 DOI: 10.1021/acscentsci.9b01071

Eletreby R, Zhuang Y, Carley KM, Yağan O, Poor HV. The effects of evolutionary adaptations on spreading processes in complex networks. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2020; 117 (11): 5664 DOI: 10.1073/pnas.1918529117

Un medicamento destinado para el tratamiento del ébola también puede funcionar contra los coronavirus

Por Dr.C. Julio César Hernández Perera

Comprender cómo funcionan los medicamentos es un paso importante en el desarrollo de nuevos tratamientos para COVID-19.

Un grupo de investigadores de la Universidad de Alberta expusieron como el remdesivir es efectivo en el tratamiento de los coronavirus que causan el síndrome respiratorio del Medio Oriente (MERS) y el síndrome respiratorio agudo severo (SARS). Ellos esperan, además, que también sea efectivo para tratar a los pacientes infectados con el SARS-CoV-2.

El estudio, publicado en el Journal of Biological Chemistry en el mes de marzo del 2020, explica cómo el remdesivir funciona contra los coronavirus.

Desarrollado por Gilead Sciences como respuesta a la epidemia del virus del Ébola de África Occidental de 2014, remdesivir se usó por primera vez en un paciente con el nuevo coronavirus a principios de este año en los Estados Unidos.

Como se informó en el New England Journal of Medicine, el paciente recibió el medicamento en el séptimo día de la enfermedad y mostró una marcada mejoría al día siguiente, con síntomas que finalmente desaparecieron por completo.

Ante la esperanza de ser un fármaco que pudiera mostrar una eficacia real contra el COVID-19 —evita la replicación del ARN viral dentro de la células huesped—, se espera, mientras tanto, por los resultados de los ensayos clínicos, pronosticados para finales del mes de abril del 2020.

Bibliografía

Ying Liu, Albert A Gayle, Annelies Wilder-Smith, Joacim Rocklöv. The reproductive number of COVID-19 is higher compared to SARS coronavirus. Journal of Travel Medicine, 2020; DOI: 10.1093/jtm/taaa021