

## Simulen per primera vegada un pas clau en la maduració del virus de la SIDA

*Els investigadors han mostrat amb tècniques computacionals com s'allibera la proteïna responsable de la maduració del virus per iniciar la infecció*

*El treball s'ha realitzat amb la tecnologia GPUGRID.net, una plataforma de càlcul voluntari distribuït que equivaldria a un superordinador virtual.*

Barcelona, 04 de desembre de 2012 - Bioinformàtics de l'IMIM (Institut Hospital del Mar d'Investigacions Mèdiques) i de la UPF (Universitat Pompeu Fabra) aconsegueixen explicar mitjançant tècniques de simulació molecular, un pas molt concret en el procés de maduració dels virions del VIH, és a dir com les noves partícules del virus inert que es formen, es converteixen en infeccioses. Això és essencial per entendre la seva replicació. Aquests resultats es publiquen en l'última edició de la revista PNAS i poden ser claus en el disseny de futurs nous fàrmacs antiretrovirals.

Els virions del VIH esdevenen madurs i infecciosos a través de l'acció d'una proteïna anomenada VIH proteasa. Aquesta actua com unes "tissores", tallant la llarga cadena de proteïnes que formen el VIH, en proteïnes individuals que formaran l'estructura infecciosa de nous virions. Segons els investigadors del grup de biofísica computacional de l'IMIM-UPF coordinat per Gianni De Fabritiis, **"un dels aspectes més intrigants de tot el procés de maduració del VIH, és com la VIH proteasa s'allibera, és a dir com la" proteïna tissores "apareix per primera vegada, ja que aquesta també forma part inicialment de la llarga cadena de proteïnes que formen els nous virions del VIH"**.

El grup de Gianni De Fabritiis ha estat capaç mitjançant un software per simulacions moleculars (ACEMD) i utilitzant una tecnologia anomenada GPUGRID.net, de demostrar que les primeres "proteïnes tissores" es poden tallar elles mateixes de dins la cadena de proteïnes. Això ho fan unint a la seva pròpia part activa, un dels seus finals connectats (el N-terminus), y tallant després l'enllaç químic, que els connecta amb la resta de la cadena. Aquest és l'inici de tot el procés de maduració del VIH i si som capaços d'aturar el VIH proteasa mentre encara està en procés de maduració, impedirem que les partícules víriques o virions arribin a madurar i per tant puguin infectar.

El treball s'ha realitzat utilitzant la plataforma de càlcul voluntari distribuït GPUGRID.net, que consisteix en aprofitar per a la investigació, la potència de milers d'unitats de processament gràfic *Nvidia GPU accelerators*, cedida voluntàriament pels propietaris de múltiples ordinadors domèstics mentre no la necessiten. Seria com disposar d'un superordinador virtual. Això permet que la potència de càlcul sigui unes 10 vegades superior a la generada amb els ordinadors normals i com a conseqüència que és redueixin les despeses de la investigació proporcionant un nivell de potència computacional que abans només es podia obtenir utilitzant superordinadors multimilionaris.

Els investigadors utilitzen aquesta potència de càlcul per processar grans quantitats de dades i generar simulacions moleculars d'alta complexitat. Concretament en aquest cas, han realitzat milers de

simulacions computacionals, cadascuna per centenars de nanosegons (la mil milionèsima part d'un segon) per poder estudiar un procés que en total dura gairebé un milisegon.

Segons els investigadors, aquest descobriment en el procés de maduració del VIH, proporciona un camí alternatiu en el disseny de futurs fàrmacs, que es basarien en la utilització d'aquests nous mecanismes moleculars. Per ara, aquest treball ens proporciona una major comprensió d'un pas clau en el cicle de la vida del VIH, un virus que ataca directament i debilita el sistema immunològic del nostre organisme convertint-lo en vulnerable a gran nombre d'infeccions i que afecta a milions de persones a tot el món.

Segueix GPUGRID.net a: <http://facebook.com/gpugrid>

**Article de referència:**

*"Kinetic characterization of the critical step in HIV-1 protease maturation"*. S Kashif 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>

Per més informació contactar amb:

---

Rosa Manaut, responsable de Comunicació de l'IMIM, Telf: 618509885 o Marta Calsina, Servei de Comunicació de l'IMIM, Telf: 933160680.