

[Inici](#) > Investigadors del BSC dissenyen una estratègia per entendre millor l'evolució de les proteïnes

---

## Investigadors del BSC dissenyen una estratègia per entendre millor l'evolució de les proteïnes

El nou mètode computacional, publicat a Nature Communications, podria ajudar a dissenyar noves proteïnes amb diferents aplicacions biotecnològiques i biomèdiques



AlphaFold2, l'eina d'intel·ligència artificial (IA) desenvolupada per la companyia DeepMind de Google que permet realitzar models realistes de les proteïnes, els components fonamentals dels sistemes cel·lulars, ha generat tota una revolució de què es beneficien diferents camps de la ciència, des del disseny de fàrmacs fins a l'estudi de l'evolució.

Ara, un equip d'investigadors del Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) s'ha beneficiat de la capacitat d'AlphaFold per predir totes les estructures dels milers de proteïnes que componen diferents famílies de proteïnes per desenvolupar un mètode computacional que analitza el grau de conservació al llarg de l'evolució – i per tant la seva importància – de regions crítiques per a l'estructura i la funció de cada família de proteïnes (denominades regions energèticament frustrades).

El nou mètode computacional i els resultats obtinguts permeten contribuir al coneixement bàsic sobre l'evolució d'aquestes proteïnes i podrien ajudar en el disseny de noves proteïnes amb diferents aplicacions biotecnològiques i biomèdiques.

Els científics, que formen part del departament de Ciències de la Vida del BSC que dirigeix el professor ICREA Alfonso Valencia, s'han beneficiat igualment de la gran capacitat de computació del superordinador MareNostrum per fer aquest estudi, que ha estat liderat per l'investigador Gonzalo Parra, del grup de Biologia Computacional. Els resultats de la investigació, en què també han col·laborat grups d'Argentina, Xile i els Estats Units. han estat publicats a la revista Nature Communications.

“Aquestes noves condicions ens permeten, per primera vegada, afrontar grans preguntes sobre la relació entre l'estructura tridimensional de les proteïnes i les seves capacitats funcionals, amb la conservació evolutiva i les estructures de proteïnes com a guia. Un tema que aplega l'interès científic amb implicacions directes en biotecnologia per al disseny racional de proteïnes amb noves propietats”, assegura Alfonso Valencia.

## Vigilància epidemiològica de patògens emergents

La recent pandèmia del coronavirus va posar en evidència la importància de comprendre els mecanismes d'evolució darrere patògens amb potencial infectivitat en humans. Per això, un dels casos que s'ha estudiat detalladament en la recerca és el de les proteïnes del SARSCov2, encara molt poc caracteritzades a nivell de les seves propietats funcionals. Es van analitzar totes les proteïnes codificades pel genoma del SARSCov2 en el context de les proteïnes codificades pels centenars de genomes de coronavirus coneguts, tant aquells que infecten humans com altres espècies.

Les anàlisis en la proteïna PLPro, d'interès directe per al desenvolupament d'antivirals, van mostrar que la història evolutiva dels 124 coronavirus relacionats pot donar molts indicis quant a com s'adapten als hostes i milloren les seves estratègies d'infectivitat. "En concret, es van detectar canvis al lloc catalític que són potencialment responsables de l'adaptació del virus a diferents hostes, obrint noves portes per al desenvolupament de compostos dirigits a aquests llocs", indica València.

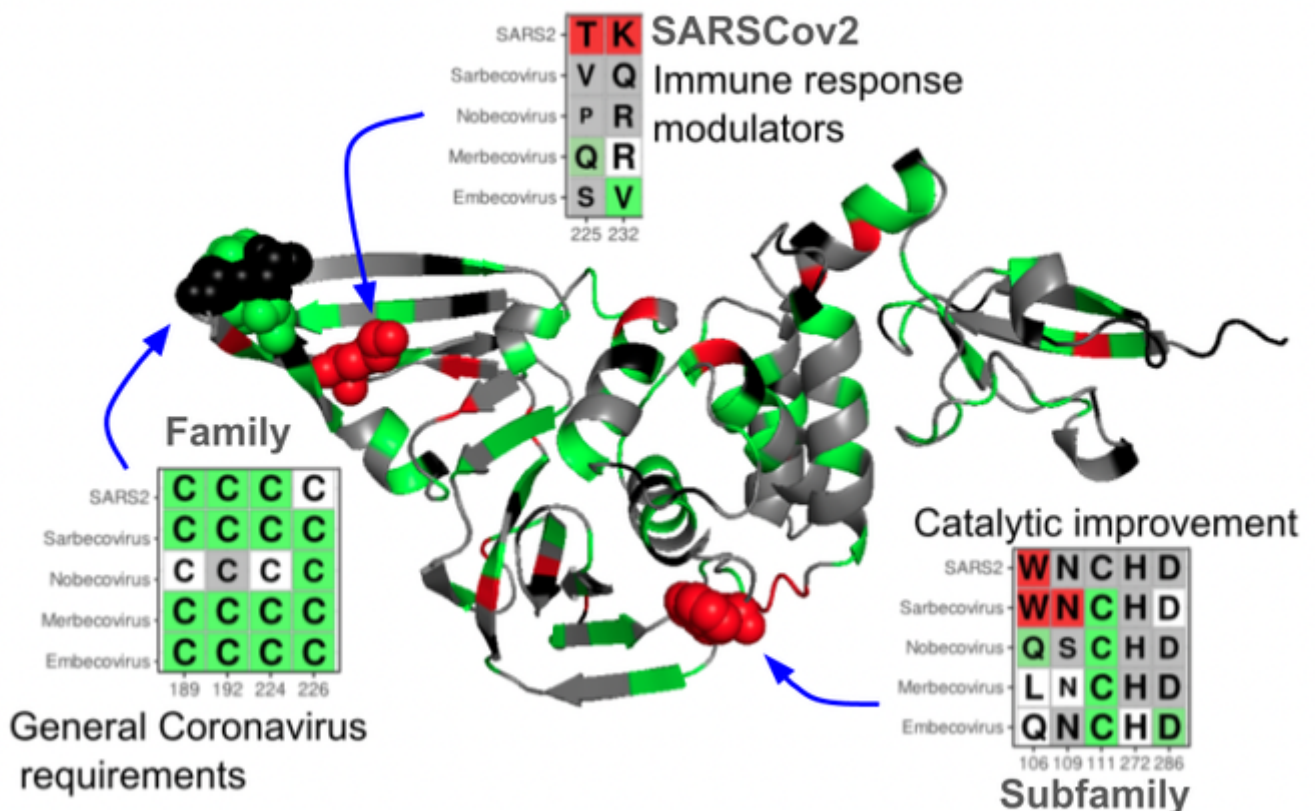


Figura: Mapa de frustració energètica de PLPro on es mostren les restriccions evolutives a diferents nivells (tots els coronavirus, sarbecoronavirus, SARSCov2). En verd les regions importants per a l'estabilitat, en

*vermell les regions importants per a la funció. Es destaquen les regions més importants.*

Aquesta anàlisi va requerir menys d'una setmana de còmput al supercomputador MareNostrum del BSC. Estratègies similars es poden aplicar en el futur per analitzar l'evolució de nous patògens d'interès epidemiològic tan bon punt el genoma estigui disponible. Aquestes anàlisis podrien ajudar a generar el desenvolupament de vacunes o altres estratègies per lluitar contra aquest tipus de virus.

**Referència:** “Local energetic frustration conservation in protein families and superfamilies”

<https://www.nature.com/articles/s41467-023-43801-2>

Foto: Grup de Biologia Computacional del BSC

Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación

---

**Source URL (retrieved on 13 jul 2024 - 19:42):** <https://www.bsc.es/ca/noticies/noticies-del-bsc/investigadors-del-bsc-dissenyen-una-estrat%C3%A8gia-entendre-millor-levoluci%C3%B3-de-les-prote%C3%AFnes>