

## **BSC i IrsiCaixa creen un mètode bioinformàtic per predir l'eficàcia dels fàrmacs antiretrovirals contra les diferents mutacions del VIH**

*És un pas cap a la medicina personalitzada, amb la que el tractament es decidirà després d'analitzar genèticament el causant de la malaltia en cada pacient*

(09/05/ 2016. - Barcelona) L'eficàcia dels medicaments antiretrovirals que s'utilitzen com a tractament per al VIH (Virus de la Immunodeficiència Humana) sovint es veu afectada per la capacitat que té aquest virus de desenvolupar mutacions genètiques. El Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) i l'Institut de Recerca de la Sida IrsiCaixa han desenvolupat un mètode bioinformàtic per predir l'efecte de cada mutació en la resistència del virus a aquests fàrmacs. Un article publicat al *Journal of Chemical Information and Modeling* explica com aquest mètode ha estat eficaç per predir les resistències als fàrmacs amprenavir i darunavir de virus amb mutacions genètiques a la proteasa del VIH-1, que és una proteïna essencial per a la replicació del virus. Aquest mètode podria ser fàcilment aplicat a altres fàrmacs i proteïnes.

En l'actualitat, la predicció dels efectes de les mutacions del VIH sobre l'eficàcia dels fàrmacs es fa en base a la informació obtinguda d'altres pacients. És un coneixement acumulatiu, basat en l'experiència clínica, que resulta útil però que té limitacions, com per exemple que no pot donar cap resposta quan el virus desenvolupa una mutació que abans no ha estat registrada. El mètode desenvolupat pel BSC i IrsiCaixa supera aquestes limitacions, ja que fa les prediccions en base a les característiques de cada mutació genètica i als canvis que aquesta mutació provoca en les proteïnes del virus que actuen com a dianes dels fàrmacs.

El mètode BSC-IrsiCaixa combina la seqüenciació de l'ADN del VIH, la detecció de les mutacions genètiques, el modelatge computacional de les proteïnes i la simulació de l'acoblament dels fàrmacs amb les proteïnes del virus. Tota aquesta anàlisi bioinformàtica pot ser executada en menys de 24 hores en un equip informàtic relativament petit i a l'abast de qualsevol laboratori. Una de les claus del sistema és la utilització de PELÉ, un *software* de simulació desenvolupat al BSC per predir la

interacció dels fàrmacs amb les seves dianes, que ha demostrat tenir avantatges competitives sobre altres *softwares* comercials.

### **Disponible via web**

El BSC ha creat una plataforma automàtica disponible via web en la qual, de manera gratuïta, els investigadors que ho desitgin poden introduir la seqüència genòmica de la proteasa HIV-1 PR d'un pacient i predir l'eficàcia de subministrar-los els fàrmacs amprenavir i darunavir. De moment, aquestes són les úniques prediccions disponibles, a l'espera d'avançar en la recerca al voltant dels efectes de les mutacions del VIH sobre altres proteïnes del virus i les interaccions amb altres fàrmacs antiretrovirals.

### **Exemple de la futura medicina personalitzada**

L'investigador del BSC que figura com a responsable principal de l'article publicat avui al *Journal of Chemical Information and Modeling* i principal desenvolupador de PELÉ, Víctor Guallar, explica que "aquest sistema és un dels primers passos palpables del que serà la medicina personalitzada, amb la qual els tractaments es decidiran després d'analitzar genèticament els causants de les malalties de cada pacient i quin fàrmac pot tenir més eficàcia en cada cas concret."

"En aquest estudi mostrem com és possible enllaçar el diagnòstic clínic de rutina de VIH-1 amb la modelització estructural i per ordinador. És una prova de concepte pluridisciplinar que supera les limitacions de la pràctica actual a l'hora de definir els tractaments antiretrovirals i que, a més a més, permetrà dissenyar nous fàrmacs més ràpidament", afegix Marc Noguera-Julian, investigador d'IrsiCaixa que ha participat en l'estudi.

---

### **Més informació:**

Link a l'article "Computational Prediction of HIV-1 Resistance to Protease Inhibitors": <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jcim.5b00667>

Link a vídeo d'una de les simulacions realitzades: <https://youtu.be/nRDOTloIWp0>

---

### **Sobre el BSC-CNS:**

El Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) és el centre líder de la supercomputació a Espanya. La seva especialitat és la computació d'altres prestacions, coneguda també amb el nom d'HPC (High Performance Computing). La seva funció és doble: oferir infraestructures i servei en

supercomputació als científics espanyols i europeus, i generar coneixement i tecnologia per transferir-los a la societat.

És un Centre d'Excel·lència Severo Ochoa, membre de primer nivell de la infraestructura de recerca europea PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) i gestiona la Red Española de Supercomputación (RES).

El BSC-CNS es un consorci format pel Ministerio de Economía y Competitividad, el Departament d'Empresa i Coneixement de la Generalitat de Catalunya i la Universitat Politècnica de Catalunya BarcelonaTech.

### **Sobre IrsiCaixa:**

L'Institut de Recerca de la Sida IrsiCaixa és una organització de reconegut prestigi internacional. El seu objectiu és investigar sobre el VIH/sida i les malalties relacionades, la seva prevenció i els seus tractaments, amb l'objectiu últim d'**eradicar la pandèmia**. Va ser creat l'any 1995, com a fundació privada sense ànim de lucre, per l'Obra Social "la Caixa" i el Departament de Salut de la Generalitat de Catalunya. El centre està ubicat a l'Hospital Universitari Germans Trias, a Badalona (Barcelona).

La recerca d'IrsiCaixa es porta a terme en coordinació amb els centres de recerca més prestigiosos del món, i les seves publicacions tenen un dels índexs de factor d'impacte més elevats en la seva àrea. Més de 60 investigadors dedicats a la recerca, a la formació acadèmica i a la divulgació treballen a IrsiCaixa, en col·laboració amb professionals sanitaris i més de 3.000 pacients. Aquest model facilita la transferència del coneixement entre els diferents agents implicats i l'avenç cap a l'eradicació del VIH. IrsiCaixa també participa en assajos clínics per avaluar noves estratègies terapèutiques i col·labora amb països en vies de desenvolupament per a col·laborar en la lluita global contra la pandèmia.

---

### **Contactes:**

- **Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación**  
Gemma Ribas MasPOCH. Tel: 620 429 956 [communication@bsc.es](mailto:communication@bsc.es) | [www.bsc.es](http://www.bsc.es)
- **IrsiCaixa - Unitat de Difusió de la Recerca Biomèdica**  
Júlia Bestard – Comunicació i Premsa. Tel. 93 465 63 74 ext. 121  
[comunicacio@irsicaixa.es](mailto:comunicacio@irsicaixa.es) | [www.irsicaixa.es](http://www.irsicaixa.es) | [www.irsicaixa.es/UDRBio](http://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](mailto:iroch@fundaciolacaixa.es) | [www.lacaixa.es/obrasocial](http://www.lacaixa.es/obrasocial)  
**Sala de premsa multimèdia** <http://premsa.lacaixa.es/obrasocial>