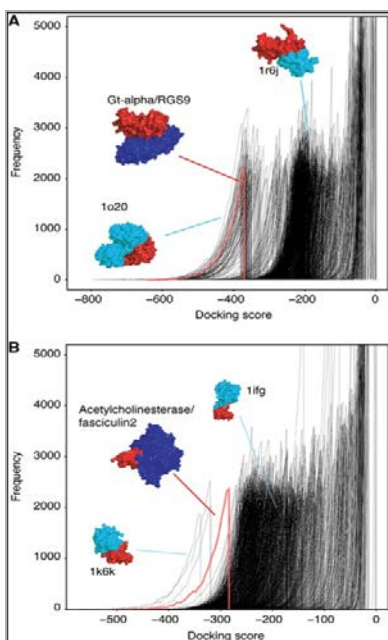


## Programes computacionals per a predir la composició de complexos macromoleculars

**Els resultats obren noves possibilitats per al modelatge dels complexos de proteïnes com a passos previs per a la interpretació de les mutacions relacionades amb el càncer**

**Barcelona, 23 de febrer de 2011** - La prestigiosa revista *Molecular Systems Biology* ha publicat el primer estudi que demostra la capacitat dels programes computacionals habitualment utilitzats per estudiar l'acoblament entre proteïnes per predir l'estructura de complexos macromoleculars. Aquesta investigació ha estat realitzada per Mark Wass i Gloria Fuentes, del Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas (CNIO), Carles Pons, del Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) i Florencio Pazos, del Centro Nacional de Biotecnología (CNB-CSIC), sota la direcció del Prof. Alfonso Valencia, director del Programa de Biología Estructural y Biocomputación del CNIO.

“En aquest estudi hem demostrat per primera vegada que els mètodes de predicció de l'acoblament (*docking*) de proteïnes poden ser usats per diferenciar entre les proteïnes que interaccionen i les que no. Hem observat que la distribució de valors obtinguts mitjançant aquests mètodes és diferent en parells de proteïnes que interaccionen respecte els obtinguts mitjançant un conjunt de parells no interactius. Aquesta troballa ha estat possible després d'executar més de 100.000 simulacions al supercomputador MareNostrum” ha destacat Carles Pons del BSC.



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

Aquest tipus de càlculs són extremadament complexos i es van poder dur a terme gràcies a les instal·lacions del Barcelona Supercomputing Center. Els complexos de proteïnes són essencials per a tots els processos que tenen lloc a les nostres cèl·lules, però fins avui només s'ha pogut determinar la composició i els detalls de la seva arquitectura molecular per a una petita fracció d'ells. Aquest coneixement és essencial per a la comprensió de les conseqüències de les mutacions i per al desenvolupament de potencials inhibidors. Els resultats presentats en aquesta publicació obren noves possibilitats per al modelatge dels complexos de proteïnes com a passos previs per a la interpretació de les mutacions relacionades amb el càncer.

### Article de referència:

#### 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>