

Relazione scientifica sul programma di ricerca Short Term Mobility presso il CIGB, L'Avana, Cuba, svoltosi dal 18 febbraio al 12 marzo 2018.

Visualizzazione e simulazione al computer di processi biotecnologici

Il periodo trascorso all'Avana, Cuba, è stato fruttuoso sotto tutti gli aspetti.

Contatti con il Centro di Ingegneria Genetica e Biotecnologie (CIGB) [1]. Il Centro è stato l'interlocutore principale del progetto, in particolare nelle persone di Javier Gonzales, Vivian Huerta e Glay China. Con loro abbiamo approfondito aspetti sia di visualizzazione che di virologia. In particolare, i colleghi cubani sono impegnati in una ricerca, ormai da molti anni, relativa al virus Dengue (DV) [2]. Dengue, un virus diffuso in tutte le aree tropicali e subtropicali, trasmesso dalla zanzara, può provocare effetti anche gravi, compresi encefalite, emorragia diffusa e morte in una percentuale significativa di casi (2% delle seconde infezioni). La dinamica di infezione, la complessa immunologia, i passaggi di produzione e diffusione nel flusso sanguigno sono oggetto di studi intensi in tutto il mondo. I colleghi cubani hanno svolto ricerche che hanno portato ad identificare il recettore cellulare per il virus Dengue [3], e quindi sono in grado di proporre un modello della dinamica di infezione che può essere studiato sia in vitro che in sistemi di simulazione, basati su modelli quali- e quantitativi [4]. Su questa modellistica si fonda la collaborazione proposta, che coinvolge anche il secondo interlocutore contattato durante il periodo di soggiorno all'Avana.

La Universidad de Ciencias Informáticas (UCI) [5], pur essendo relativamente giovane (fu istituita nel 2002), è tra i fiori all'occhiello del sistema di istruzione superiore cubano, notoriamente di alto livello in tutti i campi. Oltre a servire più di 15mila studenti, è impegnato in servizi di sviluppo e servizi sia software che hardware (soprattutto Open Source e Software Libero), per esempio in ambito medico ed epidemiologico, con l'elaborazione di una scheda sanitaria nazionale, che permette di seguire i pazienti in qualsiasi struttura del paese, e con sistemi di gestione ed analisi di immagini di origine biomedico-sperimentale. Il centro VERTEX [6], dedicato allo sviluppo di ambienti interattivi 3D, diretto da Lombera Rodriguez, si è dimostrato interessato alla collaborazione con noi ed anche con il CIGB, con cui già è in atto uno studio congiunto. Per quanto riguarda il progetto di visualizzazione, i colleghi cubani hanno manifestato un forte interesse a conoscere, per poterlo utilizzare, ampliare ed aggiornare, il programma sviluppato da noi al CNR, BioBlender [7-9].

In attesa di un **accordo formale di collaborazione**, e della possibilità di proporre progetti di ricerca specifici in risposta a specifiche 'call for applications', emessa da qualsiasi ente erogatore di fondi per ricerca medica, scientifica e tecnologica, abbiamo concordato di portare avanti, con le poche risorse disponibili, una prima fase di verifica della fattibilità, e di progettazione più approfondita. I tre enti (CNR, UCI e CIGB) hanno proposto diversi 'agreement papers' che, benché formalmente diversi, nella sostanza sono per il momento delle semplici dichiarazioni di intenti, visto che i progetti dettagliati, nonché i fondi per attuarli, andranno preparati in un secondo momento, in risposta alle disponibilità e richieste dei vari enti finanziatori. I suddetti documenti sono al momento tutti nelle mani degli organi dirigenti delle tre istituzioni di ricerca coinvolte, nella speranza che almeno questo passo formale possa essere portato a termine in tempi rapidi. In seguito sarà possibile sviluppare il lavoro vero e proprio nell'interesse di tutti e tre gli organismi, nonché della salute delle popolazioni esposte ad infezione da virus Dengue.

Riferimenti

1. <http://www.cigb.edu.cu/en/>

2. Rodenhuis-Zybert IA, Wilschut J, Smit JM: **Dengue virus life cycle: viral and host factors modulating infectivity.** *Cellular and Molecular Life Sciences* 2010, **67**(16):2773-2786.
3. Huerta V, China G, Fleitas N, Sarria M, Sanchez J, Toledo P, Padron G: **Characterization of the interaction of domain III of the envelope protein of dengue virus with putative receptors from CHO cells.** *Virus research* 2008, **137**(2):225-234.
4. Huerta V, Ramos Y, Yero A, Pupo D, Martin D, Toledo P, Fleitas N, Gallien S, Martin AM, Marquez GJ *et al*: **Novel interactions of domain III from the envelope glycoprotein of dengue 2 virus with human plasma proteins.** *Journal of proteomics* 2016, **131**:205-213.
5. www.uci.cu/en
6. <http://www.uci.cu/investigacion-y-desarrollo/centros-de-desarrollo/centro-de-entornos-interactivos-3d-vertex>
7. Zoppè M, Loni T: **The Representation of Electrostatics for Biological Molecules.** In: *Computational Electrostatics for Biological Applications*,. Edited by Rocchia W, Spagnuolo M. Switzerland: Springer International Publishing; 2015: 215 -225.
8. Zini MF, Porozov Y, Andrei RM, Loni T, Caudai C, Zoppè M: **BioBlender: Fast and Efficient All Atom Morphing of Proteins Using Blender Game Engine.** 2010.
9. Andrei RM, Callieri M, Zini MF, Loni T, Maraziti G, Pan MC, Zoppe M: **Intuitive representation of surface properties of biomolecules using BioBlender.** *Bmc Bioinformatics* 2012, **13**.