

Modelo in-silico para la predicción de péptidos HLA-I restringidos candidatos a vacuna en SARS-CoV-2

jueves, 28 de julio de 2022 14:45 (15 actas)

La aparición de patógenos emergentes hace necesaria la búsqueda de nuevas estrategias para el diseño de vacunas, hecho que fue demostrado por el SARS-CoV-2, apoyadas en el desarrollo de herramientas bioinformáticas.

En este trabajo se hizo la integración de un conjunto de herramientas bioinformáticas: NetMHCIIpan 4.0, NetMHCstabpan, mhcfurry, NetMHC, NetMHCpan y MHCnuggets. Se desarrolló una interfaz Web y un pipeline para la integración de las herramientas de selección de epítopes inmunogénicos. Primero, se seleccionó un conjunto de péptidos utilizando el proteoma de SARS-CoV-2 realizando cortes de 8, 9, 10 y 11 aminoácidos, obteniendo miles de péptidos. Luego, estos fueron filtrados por las herramientas basadas en redes neuronales artificiales, para seleccionar los candidatos; así se seleccionaron los péptidos que cumplieron con la validación de al menos dos de los tres algoritmos utilizados, i.e., candidatos que se unen con alta afinidad a moléculas HLA-I y que hacen parte del haplotipo de HLA-I altamente expresados en la población colombiana.

Haciendo una selección por dos de los tres algoritmos, se generó un total de 2921 péptidos; mientras que con tres algoritmos se obtuvieron 347 péptidos. Esto último se validaron con una búsqueda en la literatura y se encontró que estos péptidos fueron encontrados por 1, 2 y hasta 7 autores diferentes, lo cual demuestra que existe evidencia biológica publicada que comprueba que las predicciones hechas utilizando el pipeline propuesto conduce a epítopes altamente inmunogénicas. Vale destacar además que la herramienta propuesta fue validada utilizando *Mycobacterium tuberculosis* como un organismo control.

En conclusión, mediante la integración de herramientas a través de un pipeline bioinformático, hemos podido realizar la selección de antígenos candidatos a vacunas profilácticas para SARS-CoV-2. Este pipeline puede ser muy útil para la selección de epítopes candidatos a vacunas contra otros patógenos.

Palabras clave

Vacunas, SARS-CoV-2, Bioinformática, Antígenos, Péptidos

Características de la colaboración

Este trabajo se generó a partir de autores y coautores que ya colaboraban antes de la pandemia

Interinstitucionalidad

No

Interdisciplina

Si

Autores primarios: Sr. HERNANDEZ, Holman; Sr. ALZATE, Daniel; Dr. NIÑO, Luis Fernando; Dr. PARRA, Carlos Alberto

Presentadores: Sr. HERNANDEZ, Holman; Sr. ALZATE, Daniel

Clasificación de la sesión: Posters y Ponencias Virtuales Breves: Sesión II