

Desenvolvimento de uma ferramenta automatizada para a construção de complexos pMHC para aplicação em estudos imunológicos

Caio Diniz de Farias ^{[1,2]*}, Maurício M. Rigo ^[2], Dinler A. Antunes ^[2], Marialva Sinigaglia ^[2], Marcus F. A. Mendes ^[2], Marina Scheid ^[2], Gustavo F. Vieira ^[2], José A. B. Chies ^[2]

^[1] Instituto de Física, ^[2] NBLI - Núcleo de Bioinformática do Laboratório de Imunogenética, Departamento de Genética, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS

*caio.diniz@ufrgs.br

INTRODUÇÃO: O MHC é um tipo de proteína que apresenta sistematicamente peptídeos ao sistema imune, sendo determinante na resposta imunológica. Existem diversas sequências proteicas de alelos de MHC's registradas em bancos de dados, mas poucas estruturas tridimensionais disponíveis. O conhecimento destas estruturas pode fornecer informações importantes para o desenvolvimento de vacinas racionalizadas.

O objetivo deste trabalho foi desenvolver uma ferramenta automatizada para a construção de complexos pMHCs 3D apresentando qualquer peptídeo de interesse e que possa ser utilizada por toda a comunidade científica (*sem necessidade de conhecimentos computacionais avançados*).

METODOLOGIA: Foram utilizadas ferramentas de bioinformática para a modelagem tridimensional e o uso de linguagens de programação de alto nível para a criação da ferramenta web. Para atingir o objetivo, foi desenvolvida uma ferramenta web para o usuário com um banco de dados próprio para os serviços requeridos. A ferramenta desenvolvida permite que os usuários construam de forma automatizada o complexo pMHC de seu interesse, fornecendo apenas a sequência linear de aminoácidos (formato FASTA) do epitopo que deseja modelar no contexto do MHC escolhido (*figura 1 e figura 2*).

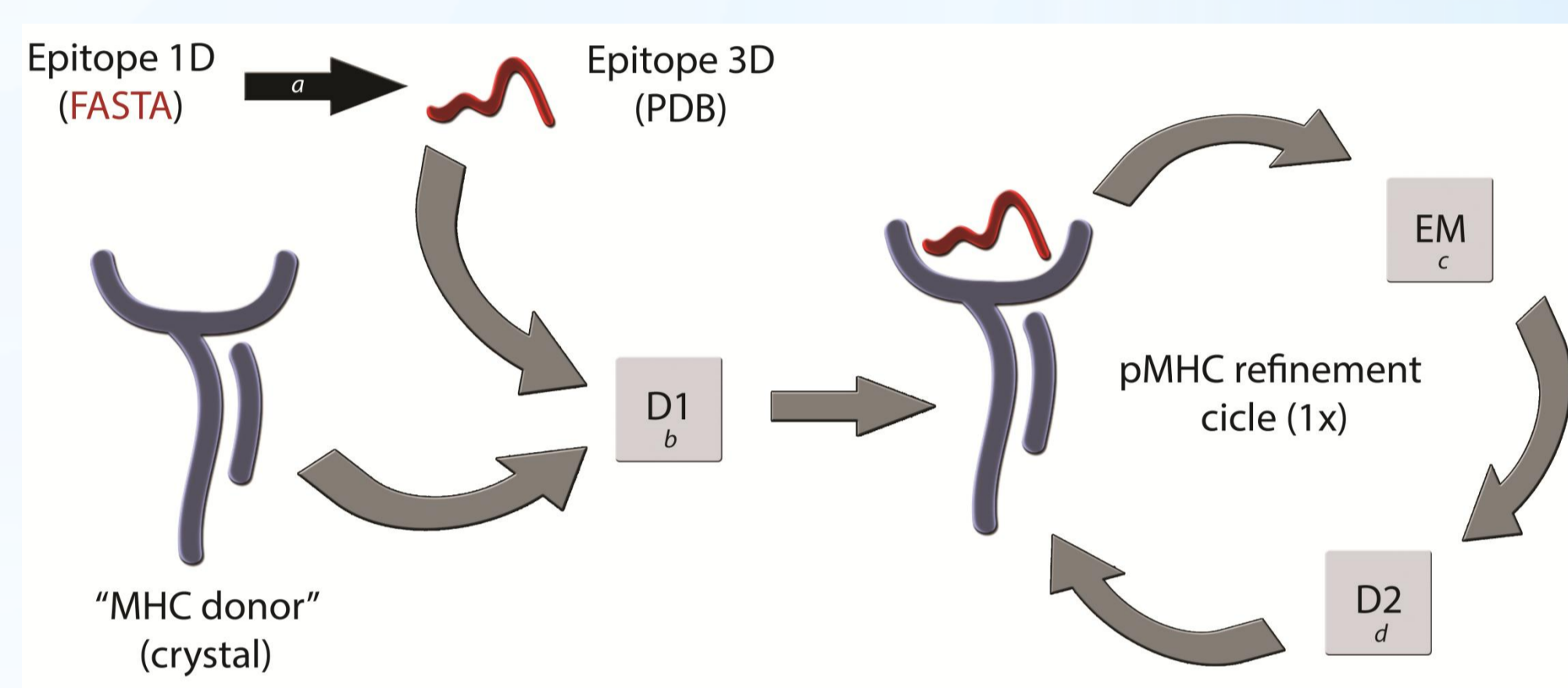


Figura 2: Fluxograma da técnica de modelagem de complexos (D1-EM-D2).

CROSS TOPE
Structural Data Bank for
Cross-Reactivity Assessment

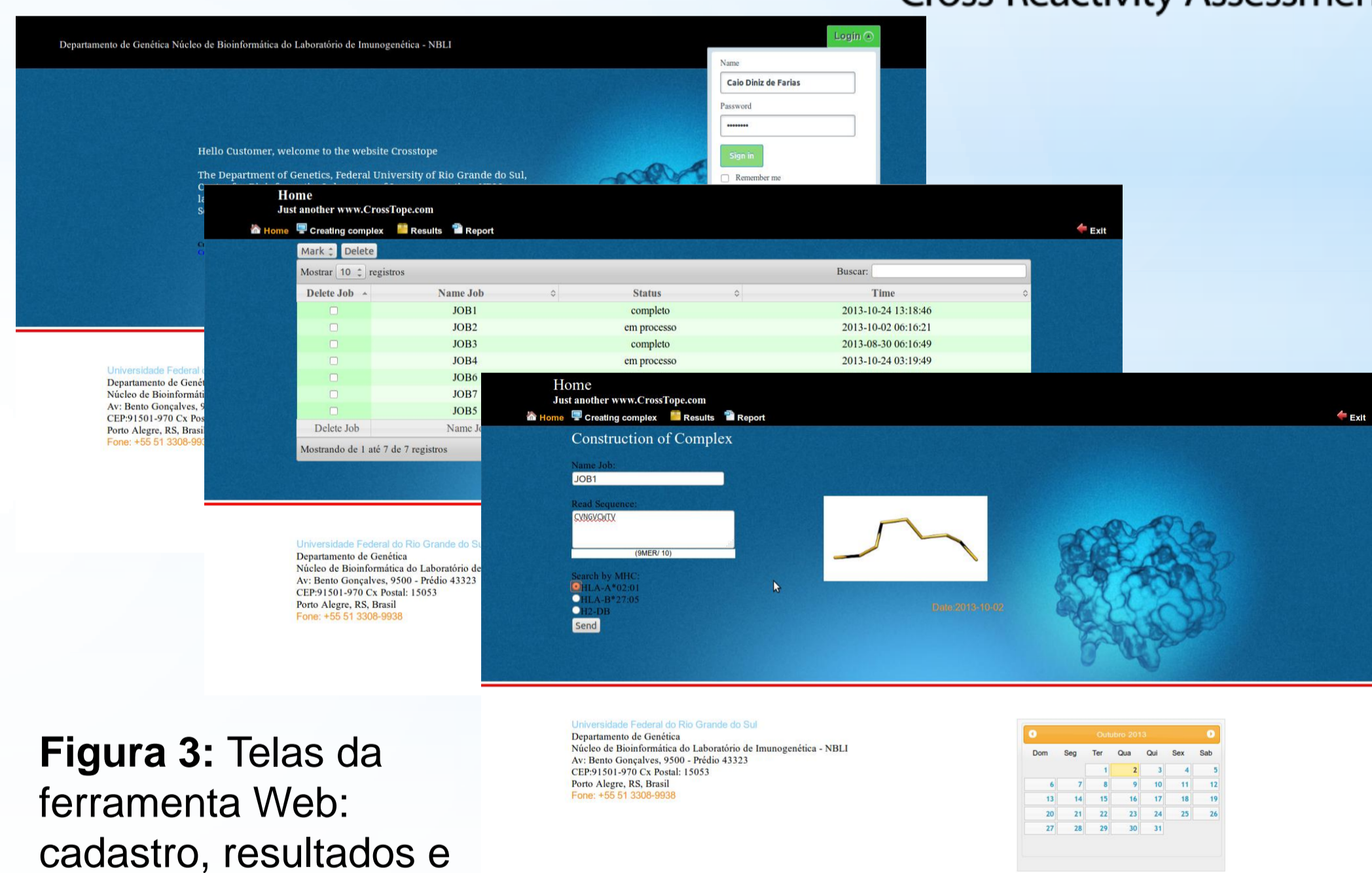


Figura 3: Telas da ferramenta Web: cadastro, resultados e construção .

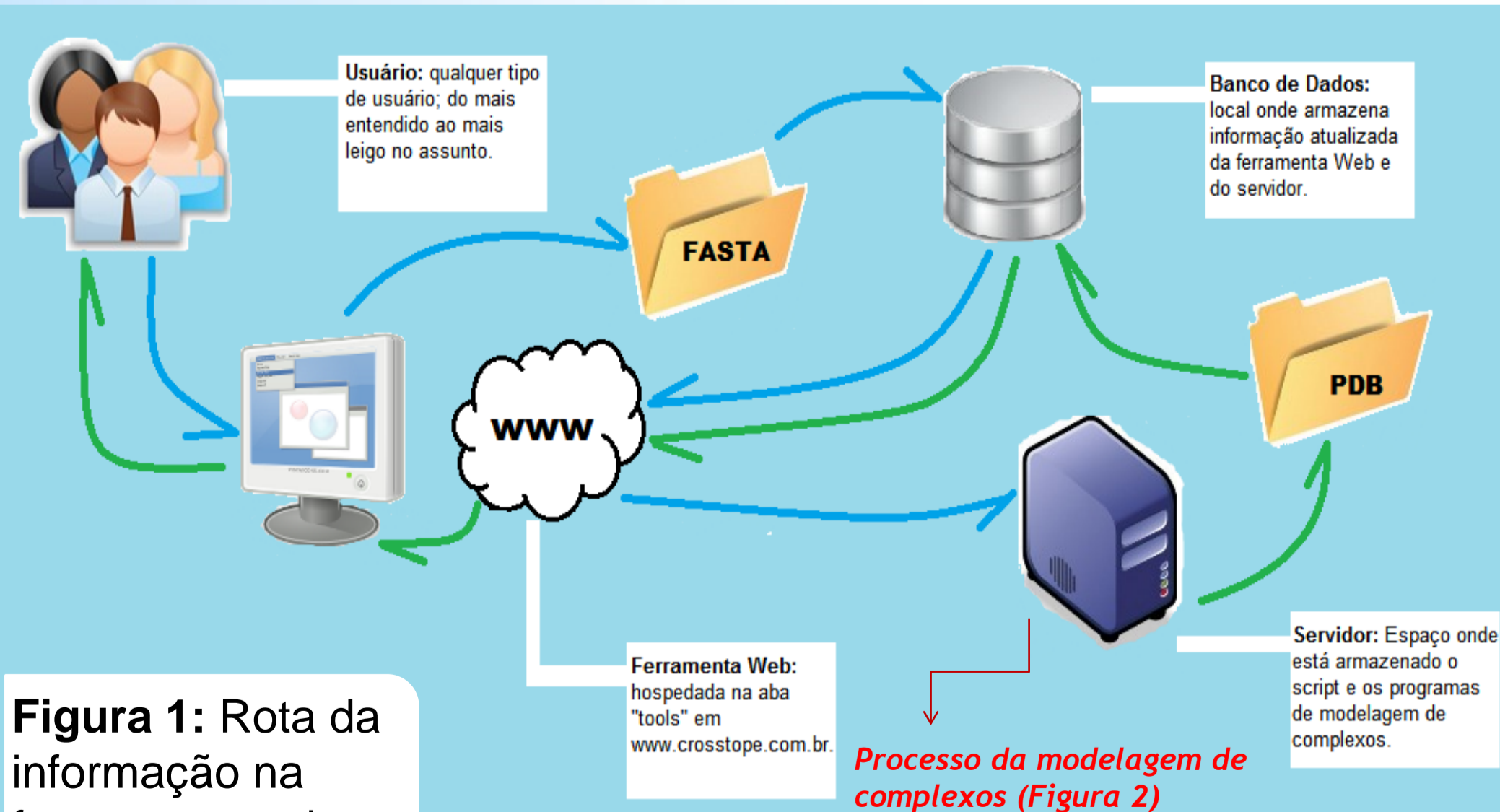


Figura 1: Rota da informação na ferramenta web

RESULTADOS: Os resultados obtidos até o momento podem ser visualizados nas imagens acima (figura 3). As telas da ferramenta web apresentam: cadastro de usuário, construção de complexos, resultados de complexos e documento PDF do histórico de processos.

PERSPECTIVAS FUTURAS: Nosso próximo passo será desenvolver um App ("Aplicativo móvel"), onde o usuário terá fácil acesso à ferramenta.

Apoio Financeiro