



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2013
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Desenvolvimento de uma ferramenta automatizada para a construção de complexos pMHC para aplicação em estudos imunológicos
<b>Autor</b>	CAIO DINIZ DE FARIAS
<b>Orientador</b>	JOSE ARTUR BOGO CHIES

Esse trabalho se insere numa pesquisa que consiste na busca de padrões compartilhados entre epitopos virais imunogênicos objetivando a aplicação deste conhecimento no desenvolvimento de vacinas racionalizadas que considerem tanto a variabilidade genética dos vírus como dos indivíduos a serem imunizados. Levando isso em consideração nosso grupo de pesquisa desenvolveu o Banco de Dados CrossTope. O CrossTope se constitui no primeiro repositório de estruturas tridimensionais de complexos peptídeo:MHC (pMHC), incluindo dados curados sobre imunogenicidade, relações de similaridade e reatividade cruzada. Os complexos hospedados por este banco de dados são obtidos principalmente por construção *in silico* de complexos pMHC usando uma nova abordagem (D1-EM-D2 - Docking1-EnergyMinimization-Docking2) desenvolvida pelo nosso grupo. Nesse momento, o banco de dados contém 182 estruturas não redundantes de complexos pMHC (169 modelos e 13 cristais) de dois alelos humanos (HLA-B\*27:05 e HLA-A\*02:01) e dois alelos murinos (H2-Kb e H2-Db). É importante salientar que a técnica para modelagem de complexos pMHC é complexa e envolve uma combinação de várias ferramentas de bioinformática as quais incluem a modelagem de epitopos, minimizações de energia, dinâmica e ancoramentos moleculares. Dentro deste contexto o objetivo deste trabalho foi desenvolver uma ferramenta automatizada para a construção de complexos pMHC para ser disponibilizada no sítio do Banco de Dados CrossTope ([www.crosstope.com.br](http://www.crosstope.com.br)).

Para atingir esse objetivo foi desenvolvido um portal web para cada usuário, com um banco de dados próprio para os serviços requeridos. Satisfeitas as exigências ferramentais, introduziu-se a linguagem "shell script" para automatizar e otimizar os scripts, aprimorando-se os referidos procedimentos. 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. Quando estiver pronto, o usuário recebe em seu email a estrutura do complexo pMHC modelado. Esta ferramenta possibilita que pesquisadores do mundo todo possam ter acesso a informações estruturais dos seus possíveis alvos imunogênicos em um curto período de tempo, sem a necessidade de dominar ferramentas de bioinformática complexas e que necessitam de alto poder computacional. De posse destes complexos o usuário pode desenvolver várias análises que contribuam para o entendimento dos mecanismos imunogênicos, dos processos envolvidos no fenômeno de reatividade cruzada e dos elementos que podem ser empregados no desenvolvimento de vacinas generalistas.