

PREDIÇÃO DE EPÍTOPOS DA PROTEÍNA A33R PARA CONSTRUÇÃO VACINAL MULTI-EPÍTOPO CONTRA MONKEYPOX A PARTIR DE ANÁLISES DE IMUNOINFORMÁTICA

Jocelin Santa Rita Bisneto¹; Maria da Conceição Viana Invenção¹; Benigno Cristofer Flores Espinoza¹; Laíza Maria Ferreira Souza¹; Beatriz Mendonça Alves Bandeira¹; Micaela Evellin dos Santos Silva¹; Rayanne Regina Vasconcelos Fernandes²; Antonio Carlos de Freitas¹

¹Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, PE

¹Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, PE

¹Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, PE

³Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, PE

¹Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, PE

¹Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, PE

Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, PE

¹Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife, PE

RESUMO

DOI: 10.47094/XXXSBM.2025/18

Introdução: Em julho de 2022, a OMS decretou a varíola dos macacos, doença causada pelo vírus monkeypox (MPVX), uma Emergência de Saúde Pública de Importância Internacional, após surtos em países não endêmicos, como o Brasil. O MPVX, vírus de DNA de fita dupla do gênero *Orthopoxvirus*, é transmitido por via respiratória ou dérmica e causa comprometimento sistêmico ^[1]. Como contrapartida, as atuais vacinas possuem efeitos colaterais e a impossibilidade de uma dose única ^[1]. Abordagens *in silico* permitem, através de ferramentas computacionais e servidores online gratuitos, identificar possíveis regiões imunogênicas de maneira célere, com ótimo custo-efetividade, além de garantir maior segurança e melhorar o potencial imunogênico dos epítopos candidatos à construção vacinal ^[2]. A A33R é uma proteína de membrana do MPVX que atua no processo de adesão viral à célula hospedeira e na evasão da resposta imune ^[3], mostrando-se um antígeno interessante a ser explorado na construção vacinal. **Objetivo:** Predizer e analisar *in silico*, epítopos da proteína A33R, a fim de compor um antígeno vacinal multi-epítopo sintético contra monkeypox. **Metodologia:** A sequência da proteína A33R (AGR34694.1) foi obtida a partir do genoma de referência do vírus Monkeypox (PP601228.1). Utilizou-se o *Immune Epitope Database and Analysis Resource* (IEDB) para prever os epítopos que interagem com o HLA de classe I e de classe II, mas também com as células B. Os epítopos que apresentaram forte afinidade de ligação com os HLAs, ou seja, percentil rank (PR) abaixo 1,5 (classe I) e 2,0 (classe II), seguiram para a análise de imunogenicidade dos epítopos de classe I e agrupamento de sequências semelhantes (>70% de semelhança). Ainda, avaliou-se a conservação das variantes virais emergentes e a cobertura populacional do

conjunto de múltiplos epítomos. O software ToxinPred classificou as sequências de cada epítomo quanto à toxicidade. Resultados: De início, foram incluídos 79 epítomos que interagem com o HLA de classe I (PR < 0,5), 56 com o HLA de classe II (PR < 2,0) e 4 epítomos representativos das células B. No teste de imunogenicidade, 13 epítomos de classe I apresentaram valores positivos, confirmando seu potencial imunogênico. Todas as sequências de epítomos mostraram-se não tóxicas. Na clusterização, identificou-se 7 epítomos de classe I, 10 de classe II e 4 para células B, todos 100% conservados diante das variantes virais emergentes. O conjunto de múltiplos epítomos apresentou uma cobertura populacional mundial de 88,25% para HLAs de classe I e II. Considerações finais: Os epítomos preditos *in silico* interagem com os HLAs e as células B, demonstrando potencial para o design de vacinas contra o MPVX, sobretudo ao atender aos critérios de toxicidade e imunogenicidade, além de melhorar o custo-efetividade da produção vacinal. A seleção criteriosa de epítomos da proteína utilizada (A33R) é imprescindível para resultar em uma cobertura populacional expressiva dos HLAs e em uma ampla resposta imune. Assim, a simulação *in silico* do desempenho vacinal de seus epítomos contra a monkeypox fornece melhores perspectivas na prevenção de surtos da doença. Entretanto, testes laboratoriais adicionais são essenciais para validação.

PALAVRAS-CHAVE: Bioinformática. Virologia. Saúde Pública.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

1. MITJÀ, O. et al. Monkeypox. The Lancet, 2023.
2. WAQAS, M. et al. Immunoinformatics design of multivalent epitope vaccine against monkeypox virus and its variants using membrane-bound, enveloped, and extracellular proteins as targets. Frontiers in Immunology, v. 14, 2023.
3. WANG, Y.; YANG, K.; ZHOU, H. Immunogenic proteins and potential delivery platforms for mpox virus vaccine development: A rapid review. International Journal of Biological Macromolecules, 2023.