

Universidade de Pernambuco

Programa de Pós-Graduação em Engenharia da Computação (PPGEC)

Proposta de Tese de Doutorado

Área: Computação Inteligente

Título: Sistemas inteligentes para projeto *in silico* de vacinas baseados em aprendizado de máquina e computação evolucionária

Orientador: Wellington Pinheiro dos Santos (wps@ecomp.poli.br)

Coorientador: Bruno José Torres Fernandes (bjtf@ecomp.poli.br)

Descrição: O crescimento desordenado das cidades, as grandes movimentações demográficas, as mudanças climáticas e os impactos da destruição de diversos biomas têm feito emergir novas ameaças à existência humana. Dentre essas ameaças, as de efeito mais imediato têm sido novos vírus. Nos anos de 2002 a 2004 e de 2012, o mundo viveu uma epidemia de SARS-CoV (*Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus*) na Ásia, e de MERS-CoV (*Middle-Eastern Respiratory Syndrome Coronavirus*) no Oriente Médio, originadas das interações entre seres humanos e morcegos e camelos, respectivamente. Em 2015, o nordeste do Brasil vive uma epidemia de Zika vírus, com efeitos graves sobre mulheres grávidas e neonatais. Em dezembro de 2019 se inicia a pandemia de Covid-19, uma doença transmitida pelo novo coronavírus, o SARS-CoV-2. O mundo então começa um esforço para projetar e produzir, em tempo recorde, medicamentos e vacinas contra a nova doença. Um importante fator para a aceleração da produção de vacinas foi o avanço da Inteligência Artificial, mais especificamente do Aprendizado Profundo (*Deep Learning*). O projeto *in silico* de vacinas baseadas em peptídeos consiste no uso de ferramentas computacionais para projetar moléculas (os peptídeos) que, ao interagir com o sistema imunológico, possam ensiná-lo a reconhecer o agente estranho, no caso, a proteína do vírus expressa como sequência de RNA, e produzir uma resposta otimizada a esse agente em termos da produção de células Beta, de células T e de anticorpos. Esta proposta consiste na construção de um *framework* para o projeto *in silico* de vacinas baseadas em peptídeos a partir do projeto de: (1) máquinas de aprendizado profundo capazes reconhecer sequências de RNA que maximizem a produção de células Beta, T e de anticorpos; (2) máquinas de aprendizado profundo capazes de avaliar o grau de toxicidade e a efetividade de peptídeos candidatos a vacinas; (3) modelos de otimização multiobjetivo que permitam o projeto de sequências de RNA de peptídeos candidatos a vacinas que maximizem a resposta imunológica e a efetividade com toxicidade mínima. Este projeto fará uso de bases de dados livres de peptídeos expressos na forma de sequências de caracteres, organizadas por resposta imunológica, efetividade e toxicidade.

Referências Bibliográficas

1. GOODSWEN, Stephen J.; KENNEDY, Paul J.; ELLIS, John T. A novel strategy for classifying the output from an *in silico* vaccine discovery pipeline for eukaryotic pathogens using machine learning algorithms. **BMC Bioinformatics**, v. 14, n. 1, p. 1-13, 2013.
2. ONG, Edison et al. COVID-19 coronavirus vaccine design using reverse vaccinology and machine learning. **Frontiers in Immunology**, v. 11, p. 1581, 2020.
3. ONG, Edison et al. Vaxign2: the second generation of the first Web-based vaccine design program using reverse vaccinology and machine learning. **Nucleic Acids Research**, 2021.

--