

A molécula de MHC é responsável pela apresentação de antígenos na superfície das células apresentando um papel chave na resposta contra infecções, na compatibilidade em transplantes e no desenvolvimento de distúrbios autoimunes. Embora exista um número considerável de estruturas de MHC cristalizadas, o número de alelos existentes é muito superior ao de estruturas resolvidas. Este fato, associado à necessidade de um conhecimento mais profundo das variantes e suas implicações na funcionalidade dessas proteínas, despertou nosso interesse na modelagem de alelos de MHC com estrutura tridimensional desconhecida. Ainda que os alelos de MHC difiram em apenas alguns aminoácidos, essas mudanças provocam diferenças cruciais na apresentação de um mesmo peptídeo. Anteriormente realizamos a modelagem cruzada de MHCs murinos, averiguando a confiabilidade do processo. A modelagem por homologia foi realizada utilizando o software Modeller, que consiste em códigos Python executados em um terminal. Com intuito de facilitar o processo de modelagem e a análise do largo volume de dados gerados, o principal objetivo deste trabalho foi empregar algoritmos de ordenação nos dados de saída e desenvolver uma interface para tornar o software de modelagem mais acessível aos usuários. A interface desenvolvida solicita dados das estruturas molde e da estrutura alvo, gerando automaticamente os códigos e executando o software. Após, foram desenvolvidos códigos para análise automática de todos os modelos construídos em diferentes softwares. De posse desses resultados, os algoritmos de ordenação classificam os modelos de acordo com parâmetros energéticos e estereoquímicos, auxiliando na escolha dos melhores modelos. Adicionalmente, estamos utilizando estas ferramentas para modelar alelos humanos já cristalografados, o que nos fornecerá a base para modelar estruturas desconhecidas de alelos de MHC humanos.