

Bioinformática na pandemia de COVID-19: revisão de literatura acerca de suas aplicações

Vinícius Oliveira Lord¹

Thayne Woycinck Kowalski²

Resumo: A bioinformática teve sua ascensão durante a pandemia, teve um papel importante no enfrentamento da COVID-19. Diferentes áreas da ciência básica e aplicada foram necessárias para que pudesse ter um melhor entendimento do vírus e sua patologia, bem como estudar estratégias de tratamento e criação de vacinas. O objetivo deste trabalho foi elencar as subáreas da bioinformática e mostrar sua importância no enfrentamento à COVID-19. Foi realizada uma busca no PubMed utilizando-se das palavras-chave “bioinformatics” e “COVID-19”. As análises filogenéticas foram utilizadas para entender o surgimento do SARS-CoV-2, que seria resultado de uma recombinação entre os vírus SARS-CoV típicos do pangolim e do morcego. O sequenciamento inicial do vírus foi outra área em que a bioinformática foi importante, o genoma do SARS-CoV-2 foi rapidamente obtido, sendo publicado em janeiro de 2020. Com a disseminação do vírus associada à característica de altas taxas de replicação, ocorreu o surgimento de variantes, que também puderam ser identificadas com análises de bioinformática. No âmbito estrutural, dois tipos de análise foram especialmente aplicados para prever a estrutura e organização do vírus, sequenciamento gênico e reconstrução tridimensional de estrutura; dentro dessas análises foi visto as diferenças na estrutura das proteínas virais, principalmente a Spike (S) e sua ligação ao receptor da enzima conversora de angiotensina, o ACE2, além de comparar com a capacidade de ligação e infecção de outros vírus da família dos coronavírus. A bioinformática estrutural também foi importante para avaliação de fármacos já disponíveis, que poderiam contribuir no tratamento. Estudos de dinâmica e docking molecular foram aplicados a antivirais e também em medicamentos anti-hipertensivos que também atuam no receptor ACE2. A partir disso, foi possível listar os principais medicamentos que poderiam ter um impacto positivo no tratamento da COVID-19. Ensaio clínico para diferentes fármacos estão em andamento para que seus mecanismos de atuação sejam avaliados. Além disso, os estudos de genômica do hospedeiro têm contribuído não somente para o entendimento da susceptibilidade à infecção, mas também aos fatores genéticos do organismo humano que contribuem para desfechos não-favoráveis, como por exemplo, sequelas pós-COVID-19 e até mesmo o óbito. Avaliação do microbioma do hospedeiro também tem sido aplicada para o entendimento da COVID-19 longa e o estudo de marcas epigenéticas tem auxiliado a compreender como o vírus sequestra a maquinaria

¹ Estudante do Curso de Biomedicina do Centro Universitário Cesuca. E-mail: viniciusoliveiralord@gmail.com

² "Docente dos cursos de Biomedicina e Nutrição. Centro Universitário Cesuca. Doutorado em Genética e Biologia Molecular. E-mail: thayne.kowalski@cesuca.edu.br"

genética do hospedeiro para sua replicação. Por fim, os ensaios de transcriptômica têm sido muito relevantes no entendimento da resposta imunológica do hospedeiro, buscando analisar os padrões de expressão diferencial de sangue periférico e períodos da infecção, além de buscar entender o papel da vacina na ativação da resposta imunológica. A bioinformática contribuiu com ferramentas para auxiliar no entendimento e combate do vírus. Em um cenário social, a bioinformática contribuiu também com a possibilidade da manutenção da pesquisa científica, mesmo durante o período de isolamento, uma vez que a mesma permite o trabalho remoto. Também possibilitou agilidade no desenvolvimento de fármacos e vacinas, com estratégias de predição de alvos e avaliações in silico permitem uma avaliação dos medicamentos, reduzindo os custos e o tempo de pesquisa.

Palavras-chave: Ciências ômicas; SARS-CoV-2; Bancos de dados