

Búsqueda de potenciales inhibidores de quinasas en *Leishmania* spp. a través de máquinas de soporte vectorial

Rodrigo Ochoa¹, Andrés Flórez¹, Carlos Muskus¹

¹ Programa de estudio y control de enfermedades tropicales (PECET), Universidad de Antioquia. Medellín (Antioquia), Colombia.

Financiación: Convocatoria 519-2010 Banco Proyectos en Salud - Nacional, Colciencias.

Introducción. Las quinasas son un grupo de enzimas esenciales para el desarrollo de diversos procesos bioquímicos, y se han identificado en varias especies como potenciales blancos terapéuticos. En este proyecto se hizo uso de información registrada sobre interacciones entre compuestos y quinasas, para el diseño de una máquina de soporte vectorial (**SVM**), basada en teorías de Inteligencia Artificial, capaz de clasificar automáticamente compuestos existentes como potenciales inhibidores de quinasas en *Leishmania* spp. **Metodología.** Se recopilaron datos acerca de la bioactividad de compuestos sobre quinasas de diversas especies, a partir de tres bases de datos: *DrugBank*, *ChEMBL* y *KinaseSARfari*. La estrategia consistió en codificar las quinasas como vectores binarios que representen la ausencia o presencia de dominios específicos dentro de la cadena de aminoácidos de la enzima, con los cuales se construyó un sistema de predicción de actividad inhibitoria por cada compuesto registrado. Para el proceso de codificación se diseñaron protocolos personalizados usando lenguajes de programación. Las máquinas después de ser entrenadas, fueron implementadas con las quinasas pertenecientes a *Leishmania* spp. **Resultado preliminar.** Las máquinas de aprendizaje entrenadas tuvieron una precisión aproximada del 84% en la clasificación, para un total de 642 máquinas diseñadas (cada máquina representa un compuesto con más de 5 blancos registrados en la literatura). Las máquinas fueron implementadas sobre 257 secuencias de quinasas de *Leishmania* spp. anotadas en la base de datos *UniProt*. Todo el protocolo de codificación, entrenamiento y prueba de las máquinas fue automatizado y documentado. **Conclusión.** Mediante esta estrategia *in silico* basada en herramientas de inteligencia artificial (**IA**), se identificaron inicialmente compuestos que potencialmente podrían inhibir blancos moleculares en *Leishmania* spp. Sin embargo, serán incorporados datos adicionales a la presencia o ausencia de dominios con el fin de mejorar la predicción de potenciales inhibidores.

Evaluación de la respuesta terapéutica y toxicidad de anfotericina B tópica para el tratamiento de la leishmaniasis cutánea

Claudia X Asela-Pinzón¹, Sara M Robledo-Restrepo¹, Liliana López-Carvajal¹, Adriana M Restrepo-Agudelo¹, Iván D Vélez-Bernal¹.

¹ Programa de estudio y control de enfermedades tropicales (PECET), Universidad de Antioquia. Medellín (Antioquia), Colombia.