



Hibridación Virtual. Diseño de herramientas bioinformáticas para microarreglos de DNA en la identificación y predicción de Huellas Genómicas de bacterias

Jaimes-Díaz, Hueman; Méndez Tenorio-Alfonso, Maldonado-Rodríguez, Rogelio.

Laboratorio de Biotecnología y Bioinformática Genómica. Escuela Nacional de Ciencias Biológicas (IPN). Prol de Carpio y Plan de Ayala s/n. 11340. México, D.F.
huemanjaimes@yahoo.com.mx

El Laboratorio de Biotecnología y Bioinformática Genómica en colaboración con la empresa Amerigenics, Inc; ha desarrollado herramientas computacionales capaces de realizar con una alta precisión la simulación *in silico* de un microarreglo conformado por 15,264 sondas con una longitud de 13 nucleótidos encaminado a la identificación de genomas bacterianos llamado “Sensor Universal de la Huella Genómica” o “Universal Fingerprinting Chip” (UFC-13).

El programa de Hibridación Virtual 3.0 (VH) realiza la predicción de los posibles sitios de unión entre un conjunto de sondas y una secuencia de DNA blanco durante la hibridación. En estos experimentos *in silico*, los genomas bacterianos (blanco) a probar se colectan en una base de datos, después el programa VH busca y rastrea los sitios del genoma bacteriano, tomando en cuenta el grado de complementariedad entre las secuencias (mínimo con un mismatch de diferencia) y las sondas de los sitios reconocidos, calculando la estabilidad termodinámica entre ellas. La predicción es confiable porque el programa detecta los sitios adecuados para la unión, también establece la estabilidad termodinámica en el sitio de hibridación entre la sonda y el DNA blanco.

La información generada incluye los siguientes datos: indica los sitios específicos del DNA blanco donde ocurrió la hibridación, el número y secuencia de la sonda que hibridó, calcula el valor de energía libre de cada uno de los sitios donde existe un potencial de hibridación. Después el programa UFA genera una imagen de los sitios del microarreglo, donde se predice que ocurrirá la hibridación de las sondas con el genoma o fragmento de DNA blanco (Huellas Genómicas) esta imagen generada se transforma para predecir el cambio en el patrón de hibridación bajo diferentes condiciones de incubación.

Los patrones de hibridación virtual de los genomas de diferentes bacterias se pueden comparar para calcular los valores de distancia, las diferencias y semejanzas entre ellos. La tabla final de valores de distancia se usa para producir el árbol taxonómico que relaciona los patrones de hibridación virtual con cada una de los Huellas Genómicas bacterianas.

Se ha obtenido 191 huellas genómicas bacterianas con sus respectivas señales de hibridación. Se comprobó las diferencias y similitudes de la simulación *in silico* de la hibridación virtual con la taxonomía clásica, encontrándose así diferencias en algunas cepas bacterianas altamente relacionadas.