

# 虾源肌球蛋白抗原表位的计算机辅助计算

时月明<sup>1</sup>, 张哲<sup>1,2</sup>, 刘剑兰<sup>3</sup>, 刘明皓<sup>3</sup>

(1. 中国医科大学 附属第四医院, 沈阳 110032; 2. 中国医科大学 医学人文学院, 沈阳 110122;  
3. 吉林大学 生命科学学院, 长春 130012)

**摘要:** 利用在线软件和线下软件对来源于刀额新对虾(*Metapenaeus ensis*)的过敏原 Met e1 的 B 细胞抗原表位和 T 细胞抗原表位进行预测、筛选以及辅助计算。首先, 通过 uniprot 蛋白质数据库获取 Met e1 蛋白质氨基酸序列; 其次, 用 ExPASy ProtParam, SignalP-5.0 Server 和 TMHMM Server v. 2.0 在线工具对 Met e1 的理化性质、信号肽与跨膜区域进行分析, 用 PSIPRED 在线工具、SOPMA 在线工具和 DNASTar 软件联合预测计算 Met e1 二级结构, 用 Swiss model 在线软件预测计算 Met e1 三级结构; 再次, 用 DNASTar 线下软件和 IEDB 在线软件综合预测计算线性 B 细胞表位, 用 IEDB 在线软件预测计算 CD4+T 细胞表位和 CD8+T 细胞表位; 最后将所得结果进行 B 细胞表位和 T 细胞表的筛选。结果表明: Met e1 蛋白的 B 细胞表位为 15~28, 45~49, 92~95, 125~130, 150~153, 255~258 位氨基酸; T 细胞表位为 78~84, 223~232 位氨基酸。

**关键词:** Met e1 蛋白质; B 细胞表位; T 细胞表位; 抗原表位筛选

**中图分类号:** R392 **文献标志码:** A **文章编号:** 1671-5489(2024)05-1267-07

## Computer-Aided Calculation of Antigen Epitope of Tropomyosin in Shrimp

SHI Yueming<sup>1</sup>, ZHANG Zhe<sup>1,2</sup>, LIU Jianlan<sup>3</sup>, LIU Minghao<sup>3</sup>

(1. The Fourth Affiliated Hospital of China Medical University, Shenyang 110032, China;  
2. Medical Humanities Sciences, China Medical University, Shenyang 110122, China;  
3. School of Life Sciences, Jilin University, Changchun 130012, China)

**Abstract:** Online and offline software were used to predict, screen and assist in the calculation of the B-cell and T-cell epitopes of the allergen Met e1 from *Metapenaeus ensis*. Firstly, the amino acid sequence of Met e1 protein was retrieved from the uniprot protein database. Secondly, the physicochemical properties, signal peptides, and transmembrane regions of Met e1 were analyzed by using online tools ExPASy ProtParam, SignalP-5.0 Server, and TMHMM Server v. 2.0. The secondary structure of Met e1 was jointly predicted and calculated by using the PSIPRED online tool, SOPMA online tool, and DNASTar software, while the tertiary structure of Met e1 was predicted and calculated by using Swiss model online software. Thirdly, the linear B-cell epitopes were comprehensively predicted and calculated by using DNASTar offline software and IEDB online

收稿日期: 2024-03-24. 网络首发日期: 2024-06-25.

第一作者简介: 时月明(1994—), 女, 汉族, 博士研究生, 从事生物化学和临床医学的研究, E-mail: 981799570@qq.com.

通信作者简介: 张哲(1972—), 女, 汉族, 博士, 教授, 从事生物化学和医学人文的研究, E-mail: 1399281578@qq.com.

基金项目: 吉林省科技发展计划项目(批准号: 20230204044YY).

网络首发地址: <https://link.cnki.net/urlid/22.1340.o.20240623.1116.001>.

software, CD4+T and CD8+T-cell epitopes were predicted and calculated by using the IEDB online software. Finally, the obtained results were screened for B-cell and T-cell epitopes. The results show that the B-cell epitopes of Met e1 protein are located at amino acids 15—28, 45—49, 92—95, 125—130, 150—153 and 255—258, and T-cell epitopes are located at amino acids 78—84 and 223—232.

**Keywords:** Met e1 protein; B-cell epitope; T-cell epitope; antigen epitope screening

虾类过敏原是导致食物过敏的一个重要类别, 摄入虾可能导致严重的超敏反应. 原肌球蛋白(Tropomyosin)是主要的热稳定虾过敏原. Daul 等<sup>[1]</sup>研究表明, 各品种虾的主要过敏原都是一种原肌球蛋白. 虾原肌球蛋白是一种肌纤维蛋白, 天然含有 2 个亚基(相对分子质量分别为 38 500, 36 600), 其比例为 1:1, 可通过三磷酸腺苷(ATP)诱导的高离子强度组装成纳米纤维<sup>[2]</sup>. 虾原肌球蛋白作为主要的食物过敏原已被证明具有极高的热稳定性, 并能承受食品加工活动, 可见虾原肌球蛋白的致敏性较强. 在棕色虾(*Penaeus aztecus*)中鉴定出 13 种不同的过敏原, 主要有 Met e1, Pen a1, Pan s1 和 Hom a1 等种类<sup>[3]</sup>. 鉴定虾源肌球蛋白抗原中的表位, 对去除虾类食品中的过敏原, 开发虾源肌球蛋白疫苗, 进行免疫诊断和临床治疗等方面具有重要意义. 目前有许多方法可用于研究和确认抗原表位, 如抗原-单克隆抗体复合物、蛋白水解或化学切割片段方法等<sup>[4]</sup>. 但这些方法大多较复杂, 难以执行或效率低下, 需对大批潜在的表位候选物进行实验筛选. 而现在的计算机模拟预测计算可减少潜在表位候选者列表, 使实验精简. 生物信息学和计算机方法在抗原表位预测分析方面发挥了关键作用.

B 细胞表位可分为连续型和不连续型两类. 对不连续的 B 细胞表位已开发出的预测计算方法较少. 线性 B 细胞表位由肽组成, 用于替换抗原以进行免疫和抗体生产. 因此, 尽管线性 B 细胞数量较少, 但其表位预测已受到广泛关注. 线性 B 细胞表位预测主要是基于氨基酸性质如亲水性、电荷、暴露表面积和二级结构等. 目前主要有 6 种预测方案: 亲水性方案、可及性方案、抗原性方案、可塑性方案、电源分布方案和二级结构预测方案. T 细胞在其表面上存在一种称为 T 细胞受体(TCR)的特异性受体, 特定情况下能识别抗原. 由于 T 细胞表位以线性形式与 MHC 分子结合, 因此配体和 T 细胞之间的界面可精确建模. 而表位通过 R 基团侧链与位于 MHC 底部的囊袋相互作用, 连接到 MHC I 类和 II 类分子的结合槽中. 基于此, 人们建立了大量的 T 细胞表位映射算法, 并利用这些算法开发工具快速识别 T 细胞表位. 常用分析网站有 NetMHCII, NetMHCpan, NetMHCIIpan, nHLApred, SVMHC, IEDB, SVRMHC 和 NetCTL 等.

本文用在线软件和线下软件对来源于刀额新对虾(*Metapenaeus ensis*)的过敏原 Met e1<sup>[5]</sup> 抗原表位进行预测、筛选与辅助计算. 首先, 通过 uniprot 蛋白数据库获取 Met e1 蛋白质氨基酸序列, 然后用 ExPASy ProtParam, SignalP-5.0 Server 和 TMHMM Server v. 2.0 在线工具对 Met e1 的理化性质、信号肽与跨膜区域进行分析, 用 PSIPRED 在线工具、SOPMA 在线工具和 DNASTAR 软件<sup>[6]</sup>联合预测计算 Met e1 二级结构, 用 Swiss model 在线软件<sup>[7]</sup>预测计算 Met e1 三级结构. 在此基础上, 用 DNASTAR 线下软件和 IEDB 在线软件综合预测计算线性 B 细胞表位, 用 IEDB 在线软件预测计算 CD8+T 细胞表位和 CD4+T 细胞表位. 最后将所得结果进行 B 细胞表位和 T 细胞表位筛选.

## 1 Met e1 蛋白基本性质和结构

### 1.1 Met e1 蛋白理化性质

利用 ExPASy ProtParam 在线工具(<http://web.expasy.org/protparam/>)分析 Met e1 蛋白的相对分子质量( $M_w$ )、理论等电点(pI)、半衰期、不稳定系数、亲水性平均系数和其他理化参数, 结果列于表 1. 由表 1 可见, 蛋白质原子组成为  $C_{1\ 336}H_{2\ 210}N_{398}O_{479}S_6$ , 相对分子质量 31 704.98, 理论等电点 4.66, 不稳定系数 37.58(<40), 为稳定蛋白质, 脂肪系数 78.43, 亲水性平均系数 -1.138, 为亲水性蛋白. 带负电荷残基数(Asp+Glu)总数为 71, 带正电荷的残基(Arg+Lys)总数为 46. Met e1 蛋白质最多的氨基酸为 Glu, 占比 19.7%; 其次是 Leu, 占比 12.0%.

表 1 ExPASy ProtParam 预测 Met e1 蛋白的基本理化性质

Table 1 Basic physicochemical properties of Met e1 proteins predicted by ExPASy ProtParam

名称	结果
氨基酸数量/个	274
相对分子质量	31 704.98
理论 pI 值	4.66
预计半衰期	该序列的 N 端为 M(Met). 估计半衰期为 30 h(哺乳动物网织红细胞, 体外); 半衰期 > 20 h(酵母, 体内); 半衰期 > 10 h(大肠杆菌, 体内)
不稳定系数	37.58
脂肪系数	78.43
亲水性平均系数(GRAVY)	-1.138
分子式	C <sub>1 336</sub> H <sub>2 210</sub> N <sub>398</sub> O <sub>479</sub> S <sub>6</sub>
原子总数	4 429
氨基酸组成	Glu (E) 54 19.7%; Leu (L) 33 12.0%; Ala (A) 30 10.9%
消光系数	5 960 mol/(L · cm)(不含任何色氨酸残基, 在 280 nm 波长的水中)

1.2 Met e1 蛋白的二级结构预测

用 PSIPRED 在线工具 (<http://bioinf.cs.ucl.ac.uk/psipred/>)<sup>[8]</sup> 和 SOPMA 在线工具 ([http://npsa-pbil.ibcp.fr/cgi-bin/npsa\\_automat.pl?page=npsa\\_sopma.html](http://npsa-pbil.ibcp.fr/cgi-bin/npsa_automat.pl?page=npsa_sopma.html)) 预测计算蛋白质二级结构. 结果表明, Met e1 蛋白最主要的二级结构为  $\alpha$  螺旋, 同时还有少量无规则卷曲. 通过 DNASTAR 软件中的 Protean 模块, 导入氨基酸序列, 分别采用 Chou-Fasman 方法及 Garnier-Robson 方法分析 Met e1 蛋白二级结构. 结果表明, 除 Met e1 蛋白最主要的二级结构为  $\alpha$  螺旋, 同时还有少量无规则卷曲外, Garnier-Robson 方法显示存在一小部分  $\beta$  转角. 综合以上 3 种预测计算工具显示的结果, 选择 Met e1 蛋白以  $\alpha$  螺旋结构为主体. 以 PSIPRED, SOPMA 和 DNASTAR 中的全部预测计算方法中的重叠区域作为预测计算结果, 显示  $\alpha$  螺旋结构最有可能在氨基酸序列 7~17, 23~56, 62~70, 75~124, 127~150, 154~193, 198~218, 224~260. 以 PSIPRED, SOPMA 和 DNASTAR 中的全部预测计算方法中的重叠区域作为预测结果, 蛋白质无转角. 以 PSIPRED 和 DNASTAR 中的全部预测计算方法中的重叠区域作为预测结果, 显示无规则卷曲存在于氨基酸序列 271~274.  $\alpha$  螺旋难以成为 B 细胞表位,  $\beta$  转角的无规则卷曲更容易成为 B 细胞表位. 由于存在  $\beta$  转角, 无规则卷曲在 Met e1 蛋白中极少, 所以二级结构预测计算方案不能很好发挥作用, 仅能根据无规则卷曲预测结果推测蛋白质末端可能存在抗原表位.

1.3 Met e1 蛋白同源建模

用 Swiss model 在线软件 (<https://swissmodel.expasy.org/>) 进行同源建模结果如图 1 所示. 由图 1 可见, Met e1 蛋白三级结构是两条缠绕的  $\alpha$  螺旋体形成的超螺旋结构, 与二级结构预测计算结果相符.

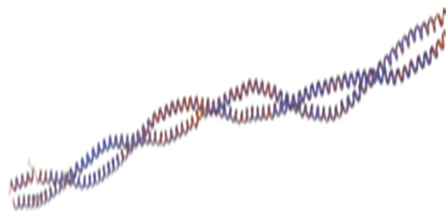


图 1 Swiss model 预测计算的 Met e1 蛋白三级结构

Fig. 1 Tertiary structure of Met e1 protein predicted and calculated by Swiss model

2 Met e1 蛋白的 B 细胞表位预测计算

2.1 亲水性分析

用 DNASTAR 软件中的 Protean, Protscale 和 IEDB 模块分别预测计算蛋白亲水性及疏水性. Protean 模块显示 Met e1 蛋白亲水性较强. Protscale 模块也显示 Met e1 蛋白亲水性较强, 亲水性区

域主要集中在氨基酸序列 1~50, 66~71, 73~76, 92~108, 118~153, 158~168, 176~189, 216~237, 249~253, 255~266, 268~272. 其中通过 IEDB 预测计算的 Met e1 蛋白亲水性与疏水性结果如图 2(A)所示, 其中黄色区域为亲水性较强区域, 主要集中在氨基酸序列 1~33, 45~50, 62~75, 88~96, 110~116, 125~130, 145~155, 198~210, 250~260. 综合以上 3 种方法, 选择重叠部分作为预测计算结果. 结果表明, Met e1 蛋白亲水性较强的区域为 1~33, 45~50, 62~71, 92~96, 125~130, 145~153, 250~253, 255~260.

## 2.2 表面可及性分析

用 DNASTAR 软件中的 Protean 和 IEDB 模块预测计算蛋白可及性. Protean 模块显示 Met e1 蛋白可及性较强. 蛋白质表面可及性较大的区域主要集中在 1~50, 54~58, 82~96, 107~137, 140~160, 191~196, 220~244, 251~270. IEDB 预测计算的 Met e1 蛋白可及性结果如图 2(B)所示, 其中黄色区域为可及性较强区域, 主要集中在氨基酸序列为 15~30, 36~41, 88~95, 147~182, 167~174, 202~211, 253~258. 综合以上两种预测计算工具的结果, 得到可及性较大的区域为 15~30, 36~41, 88~95, 147~161, 167~174, 253~258.

## 2.3 可塑性分析

用 DNASTAR 软件中的 Protean, ProtScale 和 IEDB 模块预测计算蛋白可塑性. Protean 模块显示 Met e1 蛋白可塑性较强. ProtScale 模块预测计算的可塑性较大区域为氨基酸序列 4~6, 8~28, 34~74, 87~104, 109~132, 136~142, 147~156, 168~181, 185~188, 192~195, 199~227, 235~249, 255~277. IEDB 预测计算的 Met e1 蛋白可塑性结果如图 2(C)所示, 其中黄色区域为可塑性较强区域, 主要集中在氨基酸序列 10~35, 45~53, 85~102, 112~115, 120~130, 170~179, 200~208, 212~222, 235~245, 255~273. 综合以上 3 种预测计算工具的结果, 得到可塑性较大的区域为 10~28, 45~53, 87~102, 112~115, 120~130, 170~179, 200~208, 212~222, 235~245, 255~273.

## 2.4 抗原性分析

用 DNASTAR 软件中的 Protean 和 IEDB 模块预测计算蛋白抗原性. Protean 模块显示 Met e1 蛋白抗原性较强. IEDB 预测计算的 Met e1 蛋白抗原性结果如图 2(D)所示, 其中黄色区域为抗原性较强区域, 主要集中在氨基酸序列为 47~65, 74~87, 101~109, 140~146, 152~165, 178~184, 186~193, 196~201, 212~217, 233~246. 综合以上两种预测计算工具的结果, 得到抗原性较大的区域为 47~65, 74~87, 101~109, 140~146, 152~165, 178~184, 186~193, 196~201, 212~217, 233~246.

## 2.5 $\beta$ 转角分析

用 DNASTAR 软件中的 Protean 和 IEDB 模块预测计算 Met e1 蛋白  $\beta$  转角. Protean 模块预测计算出现蛋白  $\beta$  转角可能性较大的氨基酸序列为 257~259. IEDB 预测计算的 Met e1 蛋白  $\beta$  转角区域如图 2(E)所示, 其中黄色区域为可能出现转角的区域, 主要集中在氨基酸序列为 1~28, 42~50, 55~62, 67~72, 110~115, 120~130, 150~155, 175~178, 255~274. 综合以上两种预测计算工具的结果, 得到出现  $\beta$  转角可能性较大的区域为 257~259.

## 2.6 Bepipred-1.0 线性表位预测计算分析

通过 Bepipred-1.0 线性表位预测计算 B 细胞表位, 结果如图 2(F)所示, 其中得分高于阈值(默认值为 0.35)的残基被预测为表位的一部分, 在图上用黄色表示. 由图 2(F)可见, IEDB Bepipred-1.0 线性表位预测计算表明, B 细胞表位存在于 6~33, 45~49, 61~63, 66~75, 89~98, 101~115, 124~133, 148~154, 166~178, 199~213, 223~224, 226~231, 244~245, 251~266, 269~269.

## 2.7 BepiPred-2.0 线性表位预测计算分析

BepiPred-2.0 服务器根据蛋白质序列预测 B 细胞表位, 之后执行顺序预测计算, 结果如图 2(G)所示, 其中得分高于阈值(默认值为 0.5)的残基被预测计算为表位的一部分, 在图上用黄色表示. 由图 2(G)可见, BepiPred-2.0 预测计算结果表明, B 细胞表位存在于 5~270.

综合分析以上 7 种预测方案, 筛选出 15~28, 45~49, 92~95, 125~130, 150~153, 255~258

为最终优势肽段.

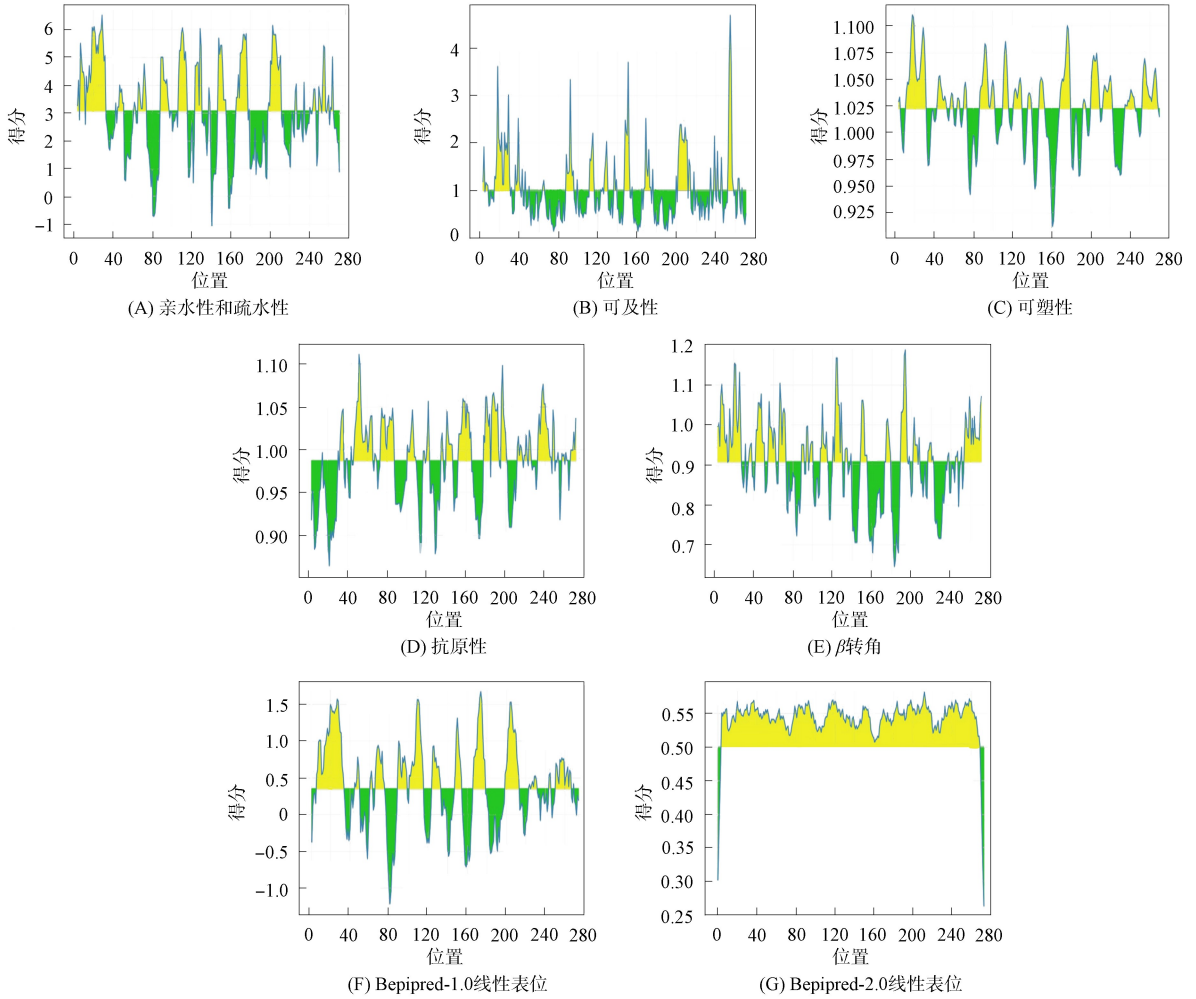


图 2 IEDB 预测计算 Met e1 蛋白 B 细胞表位结果

Fig. 2 B-cell epitopes results of Met e1 protein predicted and calculated by IEDB

### 3 Met e1 蛋白的 T 细胞表位预测计算

#### 3.1 CD8+T 细胞表位预测计算结果

用 IEDB 在线软件进行 CD8+T 细胞表位预测计算, 结果列于表 2. 对于 HLA-I 类等位基因, 选择百分等级小于 1 作为表位预测计算结果, 百分等级越小则亲和力越强, 且只选取前 5 名. 由表 2 可见, 预测计算得到了人类常见 HLA-A \* 11 : 01, HLA-A \* 02 : 01, HLA-A \* 24 : 02, HLA-B \* 40 : 01, HLA-B \* 46 : 01, HLA-C \* 01 : 02 和 HLA-C \* 03 : 04 等位基因结果.

选择至少 2 个等位基因预测计算的重叠部分作为对 CD8+T 细胞表位预测计算的最终结果, CD8+T 细胞表位可能存在于序列 7~15, 56~61, 76~84, 151~159, 179~183, 213~218, 223~239, 241~246, 256~264, 266~268.

#### 3.2 CD4+T 细胞表位预测计算结果

用 IEDB 在线软件进行 CD4+T 细胞表位预测计算, 结果列于表 3. 对于 HLA-II 类等位基因, 选择百分等级小于 5 作为表位预测计算结果, 百分等级越小则亲和力越强, 且只选取前 5 名. 由表 3 可见, 预测计算得到了 HLA-DRB1 \* 03 : 01, HLA-DRB1 \* 07 : 01, HLA-DRB1 \* 15 : 01, HLA-DRB3 \* 01 : 01, HLA-DRB3 \* 02 : 02, HLA-DRB4 \* 01 : 01, HLA-DRB5 \* 01 : 01 人类等位基因结果. CD4+T 细胞表位可能存在于序列 210~224, 213~227, 212~226, 211~225, 209~223, 141~155,

140~154, 50~64, 139~153, 138~152, 184~198, 185~199, 183~197, 186~200, 51~65, 182~196, 181~195, 184~198, 52~66, 1~15, 49~63, 183~197, 215~229, 214~228.

表 3 列出了对人类等位基因 HLA-DQA1 \* 01 : 01/DQB1 \* 02 : 01, HLA-DQA1 \* 01 : 01/DQB1 \* 03 : 01 和 HLA-DPA1 \* 01 : 03/DPB1 \* 03 : 01 的预测计算结果.

表 2 CD8+T 细胞表位预测计算结果

Table 2 CD8+T cell epitope prediction and calculation results

等位基因	肽段序列	百分等级(PR)	等位基因	肽段序列	百分等级(PR)
HLA-A * 11 : 01	56~64	0.04	HLA-B * 40 : 01	241~250	0.09
HLA-A * 11 : 01	195~203	0.08	HLA-B * 40 : 01	26~36	0.14
HLA-A * 11 : 01	266~274	0.44	HLA-B * 46 : 01	223~231	0.03
HLA-A * 11 : 01	228~238	0.53	HLA-B * 46 : 01	203~211	0.17
HLA-A * 11 : 01	213~221	0.53	HLA-B * 46 : 01	266~274	0.37
HLA-A * 02 : 01	53~61	0.12	HLA-B * 46 : 01	222~231	0.48
HLA-A * 02 : 01	130~138	0.18	HLA-B * 46 : 01	143~152	0.50
HLA-A * 02 : 01	102~110	0.19	HLA-C * 01 : 02	231~239	0.18
HLA-A * 02 : 01	238~246	0.23	HLA-C * 01 : 02	151~159	0.23
HLA-A * 02 : 01	179~187	0.24	HLA-C * 01 : 02	263~271	0.33
HLA-A * 24 : 02	256~264	0.04	HLA-C * 01 : 02	7~15	0.35
HLA-A * 24 : 02	210~218	0.05	HLA-C * 01 : 02	76~84	0.38
HLA-A * 24 : 02	151~159	0.06	HLA-C * 03 : 04	231~239	0.01
HLA-A * 24 : 02	256~268	0.13	HLA-C * 03 : 04	223~231	0.05
HLA-A * 24 : 02	150~159	0.36	HLA-C * 03 : 04	7~15	0.07
HLA-B * 40 : 01	229~239	0.05	HLA-C * 03 : 04	76~84	0.15
HLA-B * 40 : 01	176~183	0.07	HLA-C * 03 : 04	260~268	0.26
HLA-B * 40 : 01	173~183	0.07			

表 3 CD4+T 细胞表位预测计算结果

Table 3 CD4+T cell epitope prediction and calculation results

等位基因	肽段序列	百分等级(PR)	等位基因	肽段序列	百分等级(PR)
HLA-DRB5 * 01 : 01	210~224	1.20	HLA-DRB3 * 02 : 02	52~66	3.90
HLA-DRB5 * 01 : 01	213~227	1.20	HLA-DRB1 * 03 : 01	1~15	4.00
HLA-DRB5 * 01 : 01	212~226	1.20	HLA-DRB3 * 02 : 02	49~63	4.40
HLA-DRB5 * 01 : 01	211~225	1.20	HLA-DRB3 * 02 : 02	183~197	4.50
HLA-DRB5 * 01 : 01	209~223	2.70	HLA-DRB5 * 01 : 01	215~229	4.70
HLA-DRB5 * 01 : 01	141~155	2.80	HLA-DRB5 * 01 : 01	214~228	4.70
HLA-DRB5 * 01 : 01	140~154	2.80	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	155~169	0.59
HLA-DRB3 * 02 : 02	50~64	2.80	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	156~170	0.60
HLA-DRB5 * 01 : 01	139~153	2.90	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	154~168	0.77
HLA-DRB5 * 01 : 01	138~152	3.00	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	157~171	0.89
HLA-DRB5 * 01 : 01	184~198	3.20	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	153~167	1.50
HLA-DRB3 * 02 : 02	185~199	3.20	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	158~172	2.10
HLA-DRB5 * 01 : 01	185~199	3.20	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	78~92	4.90
HLA-DRB5 * 01 : 01	183~197	3.20	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 02 : 01	77~91	5.00
HLA-DRB3 * 02 : 02	186~200	3.30	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 03 : 01	219~233	3.20
HLA-DRB3 * 02 : 02	51~65	3.30	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 03 : 01	218~232	3.70
HLA-DRB5 * 01 : 01	182~196	3.50	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 03 : 01	220~234	4.00
HLA-DRB5 * 01 : 01	181~195	3.50	HLA-DQA1 * 01 : 01/DQB1 * 03 : 01	221~235	4.50
HLA-DRB3 * 02 : 02	184~196	3.90	HLA-DPA1 * 01 : 03/DPB1 * 03 : 01	218~232	3.80

由表 3 可见, HLA-DQA1 \* 01 : 01/DQB1 \* 02 : 01 等位基因预测 CD4+T 细胞表位可能存在于序列 155~169, 156~170, 154~168, 157~171, 153~167; HLA-DQA1 \* 01 : 01/DQB1 \* 03 : 01 等

位基因预测 CD4 + T 细胞表位可能存在于序列 219 ~ 233, 218 ~ 232, 220 ~ 234, 221 ~ 235; HLA-DPA1 \* 01 : 03/DPB1 \* 03 : 01 等位基因预测 CD4 + T 细胞表位可能存在于序列 218 ~ 232; HLA-DPA1 \* 01/DPB1 \* 04 : 01, HLA-DPA1 \* 01 : 03/DPB1 \* 40 : 01 的预测计算结果百分等级均大于 5, 故不予考虑。

选择重叠部分作为对 CD4 + T 细胞表位预测计算的最终结果, CD4 + T 细胞表位可能存在于序列 78 ~ 91, 158 ~ 167, 221 ~ 232 位。

综合分析 7 条 CD8 + T 细胞优势表位和 12 条 CD4 + T 细胞优势表位, 78 ~ 84 和 223 ~ 232 为筛选出的最终优势肽段。

综上所述, 本文对虾源肌球蛋白 Met e1 的抗原表位进行预测计算分析。综合分析多种预测方案, 筛选出 15 ~ 28, 45 ~ 49, 92 ~ 95, 125 ~ 130, 150 ~ 153, 255 ~ 258 为最终优势线性 B 细胞抗原表位肽段。综合分析 7 条 CD8 + T 细胞优势表位和 12 条 CD4 + T 细胞优势表位, 筛选出 78 ~ 84 和 223 ~ 232 为最终优势 T 细胞抗原表位肽段。

通过对虾源肌球蛋白 Met e1 的抗原表位的精确预测计算, 增强了对虾引起过敏反应的分子机制的理解。特定抗原表位的鉴定, 为过敏诊断提供了一种更准确和敏感的方法, 在食物过敏日益普遍的背景下, 对于区分引起相似症状的不同过敏原尤为关键。对 Met e1 蛋白抗原表位的深入认识, 不仅促进了更早期和更精确的过敏预警系统的开发, 而且为设计针对性免疫治疗策略如过敏疫苗等提供了理论依据, 为过敏疾病的诊断和治疗提供了新的思路和方向。

### 参 考 文 献

- [1] DAUL C B, MORGAN J E, LEHRER S B. Hypersensitivity Reactions to Crustacea and Mollusks [J]. *Clinical Reviews in Allergy*, 1993, 11(2): 201-222.
- [2] BACKERT L, KOHLBACHE R. Immunoinformatics and Epitope Prediction in the Age of Genomic Medicine [J]. *Genome Medicine*, 2015, 7(1): 119-1-119-12.
- [3] HONG J Y, GAO Q C, XIAO X J, et al. T Cell Epitope of Arginine Kinase with CpG Co-encapsulated Nanoparticles Attenuates a Shrimp Allergen-Induced Th<sub>2</sub>-Bias Food Allergy [J]. *Bioscience Biotechnology and Biochemistry*, 2019, 84(4): 804-814.
- [4] SORIA-GUERRA R E, NIETO-GOMEZ R, GOVEA-ALONSO D O, et al. An Overview of Bioinformatics Tools for Epitope Prediction: Implications on Vaccine Development [J]. *Journal of Biomedical Informatics*, 2015, 53: 405-414.
- [5] LEUNG P S C, CHU K H, CHOW W K, et al. Cloning, Expression, and Primary Structure of *Meta penaeus ensis* Tropomyosin, the Major Heat-Stable Shrimp Allergen [J]. *Journal of Allergy and Clinical Immunology*, 1994, 94(5): 882-890.
- [6] BURLAND T G. DNASTAR's Lasergene Sequence Analysis Software [J]. *Bioinformatics Methods and Protocols*, 2000, 132: 71-91.
- [7] ANDREW W, MARTINO B, STEFAN B, et al. SWISS-MODEL: Homology Modelling of Protein Structures and Complexes [J]. *Nucleic Acids Research*, 2018, 46: W296-W303.
- [8] BUCHAN D W A, JONES D T. The PSIPRED Protein Analysis Workbench: 20 Years on [J]. *Nucleic Acids Research*, 2019, 47: W402-W407.

(责任编辑: 单 凝)