

AIR-Vaccination

Diseño computacional de vacunas basado en tecnologías de IA y metodologías de Vacunación Inversa

Objetivo del proyecto

Desarrollar una plataforma inteligente de apoyo al diseño computacional de vacunas mediante Reverse Vaccinology, integrando IA Generativa, IA eXplicable (XAI), Deep Learning, RCNN, modelos de difusión y HPC, capaz de identificar genes, proteínas y péptidos candidatos de forma más rápida, sostenible, escalable y fiable.

Participantes del proyecto

AIRInstitute, <https://air-institute.com>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León,
www.scayle.es

Ejecución: 2025 al 2026.

Financiación del proyecto

2023 Proyectos de I+D Excelencia en CCTT.

Funciones de SCAYLE

Predicción de la estructura tridimensional de las proteínas, utilizando AlphaFold2 GPU.

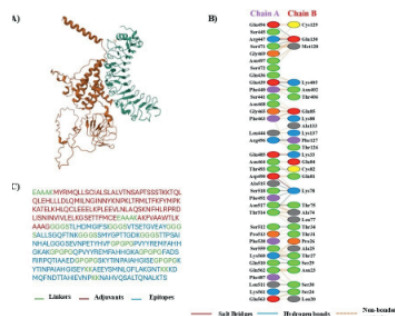
Justificación del proyecto

El proyecto AIR-Vaccination responde a la necesidad crítica de acelerar y optimizar el diseño de vacunas frente a patógenos emergentes mediante una plataforma integral de IA y computación avanzada. Los métodos tradicionales requieren entre 5 y 15 años de pruebas preclínicas y clínicas y consumen grandes recursos materiales y animales. AIR-Vaccination propone integrar Reverse Vaccinology, analítica masiva de datos ómicos, IA generativa, modelos neuro-similares, RCNN, modelos de difusión, docking molecular y HPC, reduciendo

tiempos, potenciando la reproducibilidad y permitiendo el diseño automático de candidatos vacunales altamente específicos. La iniciativa se alinea con RIS3 (prioridades 1 y 3), EECTI 2021-2027 y Horizonte Europa, y posiciona a Castilla y León en la vanguardia biotecnológica mediante herramientas capaces de transformar la industria farmacéutica regional y la medicina de precisión.

Líder del proyecto

AIRInstitute, es una organización privada de investigación, destinada a la promoción y el desarrollo de la investigación científica en el campo de la informática y la IA.



A) Estructura 3D del complejo de acoplamiento entre TLR4 (verde) y la vacuna construida (naranja), B) Resultados de PDBSum del complejo de acoplamiento entre TLR4 (cadena A) y la vacuna construida (cadena B), C) Secuencia de la vacuna construida.