

Supplementary table 3. Non-synonymous variations information.

Gene	Aminoacid Sustitution		ZIKV collection	Frequency within the ZIKV collection (%)	$\Delta\Delta G_{\text{Mean}}$ (kcal/mol)	$\Delta\Delta G_{\text{SD}}$ (kcal/mol)
	Protein numeration	Poliprotein numeration				
C	K6R	K6R	African	14,3	-1,16	0,12
C	S25N	S25N	African	100,0	0,22	0,05
C	F27L	F27L	African	100,0	-0,16	0,29
C	S71T	S71T	African	14,3	0,36	0,01
C	K101R	K101R	African	100,0	-0,43	0,40
C	T108A	T108A	African	14,3	-0,70	0,03
C	V110I	V110I	African	100,0	1,10	0,02
C	V113I	V113I	African	42,9	3,04	0,47
C	G114S	G114S	African	14,3	5,27	0,02
C	A120V	A120V	African	14,3	-0,25	0,09
C	S8F	S8F	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,13	0,05
C	L37F	L37F	Asian Pre-Epidemic	33,3	4,96	1,55
C	A106T	A106T	Asian Pre-Epidemic	66,7	0,22	0,00
C	D107E	D107E	Brain	14,3	-0,67	0,05
C	A120V	A120V	Brain	14,3	-0,25	0,09
prM	V3I	V125I	African	100,0	0,66	0,16
prM	N17S	N139S	African	100,0	0,32	0,00
prM	E21K	E143K	African	100,0	-1,02	0,16
prM	P26V	P148V	African	85,7	1,39	0,07
prM	P26A	P148A	African	14,3	1,75	0,02
prM	T28N	T150N	African	28,6	-0,16	0,02
prM	M31V	M153V	African	100,0	0,63	0,06
prM	Y35H	Y157H	African	100,0	0,72	0,11
prM	I36V	I158V	African	100,0	1,29	0,02
prM	R124K	R246K	African	100,0	-0,07	0,18
prM	A136T	A258T	African	14,3	0,18	0,02
prM	A138V	A260V	African	71,4	0,57	0,03
prM	A140V	A262V	African	100,0	0,23	0,01
prM	A1V	A123V	Asian Pre-Epidemic	100,0	1,49	0,27
prM	S8N	S130N	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,18	0,01
prM	N17S	N139S	Asian Pre-Epidemic	100,0	0,32	0,00
prM	E21K	E143K	Asian Pre-Epidemic	33,3	-1,02	0,16
prM	L29M	L151M	Asian Pre-Epidemic	66,7	-0,11	0,05
prM	M31V	M153V	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,63	0,06
prM	H82R	H204R	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,81	0,08
prM	N17S	N139S	Brain	14,3	0,32	0,00
prM	E21K	E143K	Brain	14,3	-1,02	0,16
prM	R89W	R211W	Brain	14,3	0,14	0,12
prM	F130L	F252L	Brain	14,3	-0,22	0,08
prM	P165L	P287L	Brain	14,3	1,34	0,07
E	A120T	A410T	African	100,0	0,30	0,08
E	T156I	T446I	African	25,0	-0,60	0,38
E	H158Y	H448Y	African	20,0	1,46	0,50

E	N163D	N453D	African	14,3	3,10	0,33
E	I169V	I459V	African	100,0	1,75	0,09
E	A227S	A517S	African	14,3	0,38	0,02
E	G232E	G522E	African	14,3	-0,55	0,04
E	S285F	S575F	African	85,7	-0,96	0,20
E	I317V	I607V	African	100,0	0,95	0,04
E	T335R	T625R	African	14,3	-1,08	0,36
E	V341I	V631I	African	14,3	1,64	0,37
E	A343V	A633V	African	14,3	-1,96	0,03
E	E393D	E683D	African	100,0	0,10	0,00
E	T406I	T696I	African	14,3	-0,27	0,15
E	A437V	A727V	African	100,0	0,05	0,08
E	L438F	L728F	African	100,0	0,10	0,04
E	I445V	I735V	African	28,6	0,61	0,03
E	M473V	M763V	African	100,0	2,88	0,05
E	M487T	M777T	African	100,0	0,46	0,07
E	L495M	L785M	African	100,0	-0,23	0,05
E	T156I	T446I	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,60	0,38
E	E168D	E458D	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,54	0,16
E	K215R	K505R	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,04	0,08
E	A311S	A601S	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,15	0,09
E	E393D	E683D	Asian Pre-Epidemic	66,7	0,10	0,01
E	M473V	M763V	Asian Pre-Epidemic	100,0	2,88	0,05
E	M487T	M777T	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,46	0,07
E	S260T	S550T	Brain	14,3	0,05	0,12
E	V391I	V681I	Brain	14,3	0,15	0,05
E	A437V	A727V	Brain	14,3	0,05	0,08
E	I468L	I758L	Brain	14,3	-0,46	0,10
E	A501T	A791T	Brain	14,3	0,07	0,00
NS1	K11R	K805R	African	28,6	-0,25	0,05
NS1	V21I	V815I	African	28,6	0,12	0,15
NS1	K33R	K827R	African	14,3	0,40	0,31
NS1	D52E	D846E	African	100,0	0,84	0,28
NS1	R69K	R863K	African	100,0	0,93	0,52
NS1	Q102R	Q896R	African	14,3	-0,25	0,09
NS1	K146E	K940E	African	14,3	0,23	0,22
NS1	V162I	V956I	African	28,6	-0,17	0,05
NS1	K191R	K985R	African	14,3	-1,54	0,49
NS1	V194A	V988A	African	100,0	1,77	0,10
NS1	K213R	K1007R	African	28,6	0,21	0,04
NS1	I236V	I1030V	African	100,0	0,32	0,20
NS1	M264V	M1058V	African	57,1	-0,02	0,12
NS1	M264A	M1058A	African	28,6	0,22	0,15
NS1	M264L	M1058L	African	14,3	0,18	0,08
NS1	H286Y	H1080Y	African	14,3	-0,16	0,29
NS1	V188A	V982A	Asian Pre-Epidemic	100,0	0,57	0,01
NS1	M264V	M1058V	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,02	0,12

NS1	K265E	K1059E	Asian Pre-Epidemic	33,3	1,68	0,09
NS1	V46I	V840I	Brain	14,3	-0,09	0,01
NS1	G100A	G894A	Brain	28,6	1,19	0,01
NS1	K146D	K940D	Brain	14,3	0,81	0,10
NS1	K227Q	K1021Q	Brain	14,3	0,99	0,02
NS1	T233A	T1027A	Brain	14,3	0,31	0,10
NS1	H253Y	H1047Y	Brain	14,3	-0,92	0,22
NS1	R324W	R1118W	Brain	14,3	-0,12	0,34
NS1	M349V	M1143V	Brain	28,6	0,40	0,08
NS2A	I34M	I1180M	African	100,0	-0,52	0,10
NS2A	V40M	V1186M	African	14,3	-2,21	0,08
NS2A	A43V	A1189V	African	14,3	1,12	0,26
NS2A	I45V	I1191V	African	42,9	0,64	0,03
NS2A	S50L	S1196L	African	14,3	0,26	0,04
NS2A	A58V	A1204V	African	100,0	0,14	0,01
NS2A	I80V	I1226V	African	100,0	0,96	0,03
NS2A	D124E	D1270E	African	42,9	-0,16	0,04
NS2A	I129V	I1275V	African	85,7	0,73	0,07
NS2A	V143A	V1289A	African	100,0	0,34	0,03
NS2A	T151A	T1297A	African	100,0	-0,16	0,01
NS2A	A153P	A1299P	African	14,3	4,02	0,05
NS2A	I154V	I1300V	African	14,3	0,75	0,06
NS2A	F180I	F1326I	African	14,3	-0,44	0,27
NS2A	L183I	L1329I	African	14,3	1,39	0,29
NS2A	M199A	M1345A	African	14,3	3,35	0,11
NS2A	L208I	L1354I	African	85,7	2,35	0,04
NS2A	L208V	L1354V	African	14,3	3,15	0,04
NS2A	A117V	A1263V	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,15	0,00
NS2A	L128P	L1274P	Asian Pre-Epidemic	33,3	4,19	0,10
NS2A	V143A	V1289A	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,34	0,03
NS2A	K188R	K1334R	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,26	0,04
NS2A	V42I	V1188I	Brain	14,3	-0,67	0,02
NS2A	A58T	A1204T	Brain	14,3	0,11	0,01
NS2A	I80T	I1226T	Brain	14,3	1,58	0,03
NS2A	L113F	L1259F	Brain	14,3	-0,42	0,01
NS2A	V143A	V1289A	Brain	14,3	0,34	0,03
NS2B	A24T	A1396T	African	14,3	0,31	0,02
NS2B	S45T	S1417T	African	14,3	0,97	0,06
NS2B	D89E	D1461E	African	100,0	0,12	0,26
NS2B	T105A	T1477A	African	100,0	0,72	0,01
NS2B	T105A	T1477A	Asian Pre-Epidemic	66,7	0,72	0,01
NS2B	M32V	M1404V	Brain	14,3	1,33	0,10
NS2B	T105A	T1477A	Brain	14,3	0,72	0,01
NS3	S56A	S1558A	African	100,0	0,07	0,02
NS3	H92L	H1594L	African	85,7	-0,39	0,03
NS3	H92V	H1594V	African	14,3	0,15	0,07
NS3	R107K	R1609K	African	14,3	0,42	0,37

NS3	R169K	R1671K	African	100,0	-0,13	0,17
NS3	T174A	T1676A	African	28,6	-0,06	0,01
NS3	K185R	K1687R	African	42,9	-0,30	0,23
NS3	T215K	T1717K	African	100,0	-1,30	0,17
NS3	N249K	N1751K	African	14,3	-0,55	0,03
NS3	Y282N	Y1784N	African	14,3	4,65	0,04
NS3	V360I	V1862I	African	42,9	-0,85	0,01
NS3	H400N	H1902N	African	100,0	-0,51	0,03
NS3	V407I	V1909I	African	100,0	-0,87	0,03
NS3	I460V	I1962V	African	14,3	1,97	0,36
NS3	L472M	L1974M	African	100,0	0,56	0,08
NS3	D483G	D1985G	African	14,3	0,41	0,02
NS3	R583K	R2085K	African	100,0	0,23	0,17
NS3	H584Y	H2086Y	African	100,0	0,06	0,27
NS3	H400N	H1902N	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,51	0,03
NS3	D404E	D1906E	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,23	0,34
NS3	L472M	L1974M	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,56	0,08
NS3	H584C	H2086C	Asian Pre-Epidemic	100,0	-0,30	0,16
NS3	A106E	A1608E	Brain	14,3	0,33	0,03
NS3	T215A	T1717A	Brain	14,3	-0,44	0,01
NS3	T566A	T2068A	Brain	14,3	-0,53	0,03
NS3	T567I	T2069I	Brain	14,3	0,10	0,01
NS3	M572L	M2074L	Brain	28,6	0,34	0,02
NS3	H584Y	H2086Y	Brain	14,3	0,06	0,27
NS4A	A2V	A2121V	African	14,3	-0,99	0,06
NS4A	F4L	F2123L	African	100,0	-0,14	0,06
NS4A	E8D	E2127D	African	42,9	0,4	0,01
NS4B	S11N	S2280N	African	57,1	1,04	0,51
NS4B	L13I	L2282I	African	100,0	0,44	0,28
NS4B	S14A	S2283A	African	57,1	-0,08	0,01
NS4B	H15Q	H2284Q	African	14,3	-0,92	0,21
NS4B	R19K	R2288K	African	14,3	-0,01	0,14
NS4B	R20K	R2289K	African	42,9	-0,71	0,18
NS4B	A24I	A2293I	African	57,1	1,92	0,57
NS4B	I26V	I2295V	African	28,6	1,31	0,54
NS4B	F49L	F2318L	African	100,0	-0,41	0,12
NS4B	F91L	F2360L	African	14,3	0,07	0,19
NS4B	I98V	I2367V	African	14,3	1,91	0,40
NS4B	I113T	I2382T	African	14,3	4,33	0,43
NS4B	V180T	V2449T	African	42,9	1,60	0,01
NS4B	I184V	I2453V	African	100,0	1,41	0,44
NS4B	S186L	S2455L	African	100,0	-1,03	0,58
NS4B	S14G	S2283G	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,18	0,11
NS4B	I26M	I2295M	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,23	0,08
NS4B	F49L	F2318L	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,41	0,12
NS4B	I98M	I2367M	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,42	0,16
NS4B	V180I	V2449I	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,71	0,38

NS4B	I184V	I2453V	Asian Pre-Epidemic	33,3	1,41	0,44
NS4B	S186L	S2455L	Asian Pre-Epidemic	33,3	-1,03	0,58
NS4B	H15Q	H2284Q	Brain	14,3	-0,92	0,21
NS4B	A88T	A2357T	Brain	14,3	0,50	0,80
NS4B	A201T	A2470T	Brain	14,3	0,70	0,00
NS4B	T240I	T2509I	Brain	14,3	-0,93	0,23
NS5	D46N	D2566N	African	14,3	-0,37	0,04
NS5	L62I	L2582I	African	14,3	1,69	0,15
NS5	V66E	V2586E	African	14,3	2,46	0,31
NS5	Y74H	Y2594H	African	71,4	0,19	0,03
NS5	I78V	I2598V	African	100,0	-0,58	0,24
NS5	K101R	K2621R	African	71,4	-0,43	0,12
NS5	V114M	V2634M	African	100,0	-0,56	0,22
NS5	V124I	V2644I	African	14,3	0,40	0,01
NS5	P139S	P2659S	African	14,3	1,73	0,07
NS5	A159T	A2679T	African	100,0	-0,14	0,00
NS5	L195M	L2715M	African	100,0	-0,36	0,13
NS5	Y202H	Y2722H	African	42,9	3,68	0,42
NS5	S212C	S2732C	African	14,3	-0,50	0,26
NS5	T229V	T2749V	African	14,3	-1,24	0,43
NS5	D245E	D2765E	African	14,3	0,00	0,06
NS5	V267A	V2787A	African	100,0	-0,08	0,14
NS5	I277V	I2797V	African	28,6	0,29	0,05
NS5	N280R	N2800R	African	71,4	-0,25	0,10
NS5	S287N	S2807N	African	57,1	-0,46	0,08
NS5	F295L	F2815L	African	14,3	0,32	0,10
NS5	I322V	I2842V	African	100,0	0,58	0,00
NS5	Q373R	Q2893R	African	14,3	0,28	0,09
NS5	V374A	V2894A	African	14,3	2,33	0,02
NS5	V374T	V2894T	African	14,3	2,15	0,04
NS5	S376N	S2896N	African	100,0	0,02	0,12
NS5	M377I	M2897I	African	14,3	-0,67	0,37
NS5	S379A	S2899A	African	14,3	-1,04	0,05
NS5	H389R	H2909R	African	100,0	-0,53	0,03
NS5	K438R	K2958R	African	14,3	-0,22	0,19
NS5	Q449H	Q2969H	African	100,0	1,30	0,14
NS5	V519I	V3039I	African	85,7	-0,44	0,03
NS5	S524N	S3044N	African	71,4	0,88	0,01
NS5	I526A	I3046A	African	100,0	0,86	0,24
NS5	R530K	R3050K	African	100,0	0,06	0,11
NS5	R545K	R3065K	African	85,7	-0,18	0,21
NS5	K560E	K3080E	African	100,0	-0,96	0,10
NS5	A564T	A3084T	African	14,3	0,30	0,01
NS5	I569V	I3089V	African	100,0	1,13	0,07
NS5	Q575K	Q3095K	African	14,3	-0,57	0,07
NS5	K587G	K3107G	African	100,0	0,31	0,09
NS5	Q634H	Q3154H	African	42,9	0,40	0,22

NS5	R641K	R3161K	African	100,0	-0,14	0,28
NS5	S642P	S3162P	African	100,0	-2,56	0,14
NS5	N647R	N3167R	African	100,0	-0,90	0,09
NS5	S651C	S3171C	African	28,6	0,55	0,01
NS5	N652S	N3172S	African	14,3	0,07	0,21
NS5	D703S	D3223S	African	100,0	0,05	0,08
NS5	H719Y	H3239Y	African	14,3	-0,52	0,07
NS5	S784A	S3304A	African	100,0	-0,36	0,06
NS5	V787T	V3307T	African	14,3	-0,19	0,01
NS5	T808I	T3328I	African	14,3	0,44	0,16
NS5	V813M	V3333M	African	100,0	-0,23	0,02
NS5	E827G	E3347G	African	14,3	-0,59	0,08
NS5	N867D	N3387D	African	100,0	0,16	0,01
NS5	N870S	N3390S	African	14,3	2,07	0,27
NS5	K881R	K3401R	African	14,3	-0,40	0,08
NS5	Y882F	Y3402F	African	14,3	0,53	0,05
NS5	V114T	V2634T	Asian Pre-Epidemic	100,0	0,30	0,21
NS5	P139S	P2659S	Asian Pre-Epidemic	33,3	1,73	0,07
NS5	T229I	T2749I	Asian Pre-Epidemic	33,3	-2,26	0,06
NS5	V267A	V2787A	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,08	0,14
NS5	M275L	M2795L	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,53	0,13
NS5	I282V	I2802V	Asian Pre-Epidemic	33,3	1,42	0,04
NS5	S376N	S2896N	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,02	0,12
NS5	I526T	I3046T	Asian Pre-Epidemic	33,3	1,34	0,15
NS5	R530K	R3050K	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,06	0,11
NS5	K587R	K3107R	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,56	0,21
NS5	S642P	S3162P	Asian Pre-Epidemic	33,3	-2,56	0,14
NS5	N647S	N3167S	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,35	0,02
NS5	V669G	V3189G	Asian Pre-Epidemic	33,3	4,02	0,02
NS5	D703S	D3223S	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,05	0,08
NS5	H719Y	H3239Y	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,52	0,07
NS5	N867D	N3387D	Asian Pre-Epidemic	33,3	-0,36	0,06
NS5	V872M	V3392M	Asian Pre-Epidemic	66,7	0,06	0,22
NS5	M883V	M3403V	Asian Pre-Epidemic	33,3	0,60	0,02
NS5	H289Q	I2598V	Brain	14,3	0,88	0,13
NS5	V114M	V2634M	Brain	14,3	-0,56	0,22
NS5	A159T	A2679T	Brain	14,3	-0,14	0,00
NS5	E311V	E2831V	Brain	14,3	0,27	0,02
NS5	I322V	I2842V	Brain	14,3	0,58	0,00
NS5	G510V	G3030V	Brain	14,3	4,24	0,10
NS5	R525C	R3045C	Brain	28,6	0,62	0,15
NS5	V813A	V3333A	Brain	14,3	0,27	0,01
NS5	T833A	T3353A	Brain	14,3	0,18	0,08
NS5	D878E	D3398E	Brain	14,3	-0,08	0,17

The table present the detailed information corresponding to each variation analyzed. Data regarding the location of the variation in the polyprotein and in each viral protein, the frequency of the change within each ZIKV collection and the mean and the standard desviation of the predicted $\Delta\Delta G$ of protein folding for each indivual variation are shown. The colors of the fonts indicate when a variation was representative and restrictive of a ZIKV group (Gray: None, Blue: African, Green: Asian Pre Epidemic, Yellow: both African and Asian Pre Epidemic).

Unravelling the epidemiological diversity of Zika virus by analyzing key protein variations

Archives Virology

Leiva Santiago, Bugnon Valdano Marina, and Gardiol Daniela.

IBR-CONICET, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario

Corresponding to: gardiol@ibr-conicet.gov.ar