

# **Análise de métodos de agrupamento aplicados à estratégia de detecção de padrões em interfaces proteína-proteína**

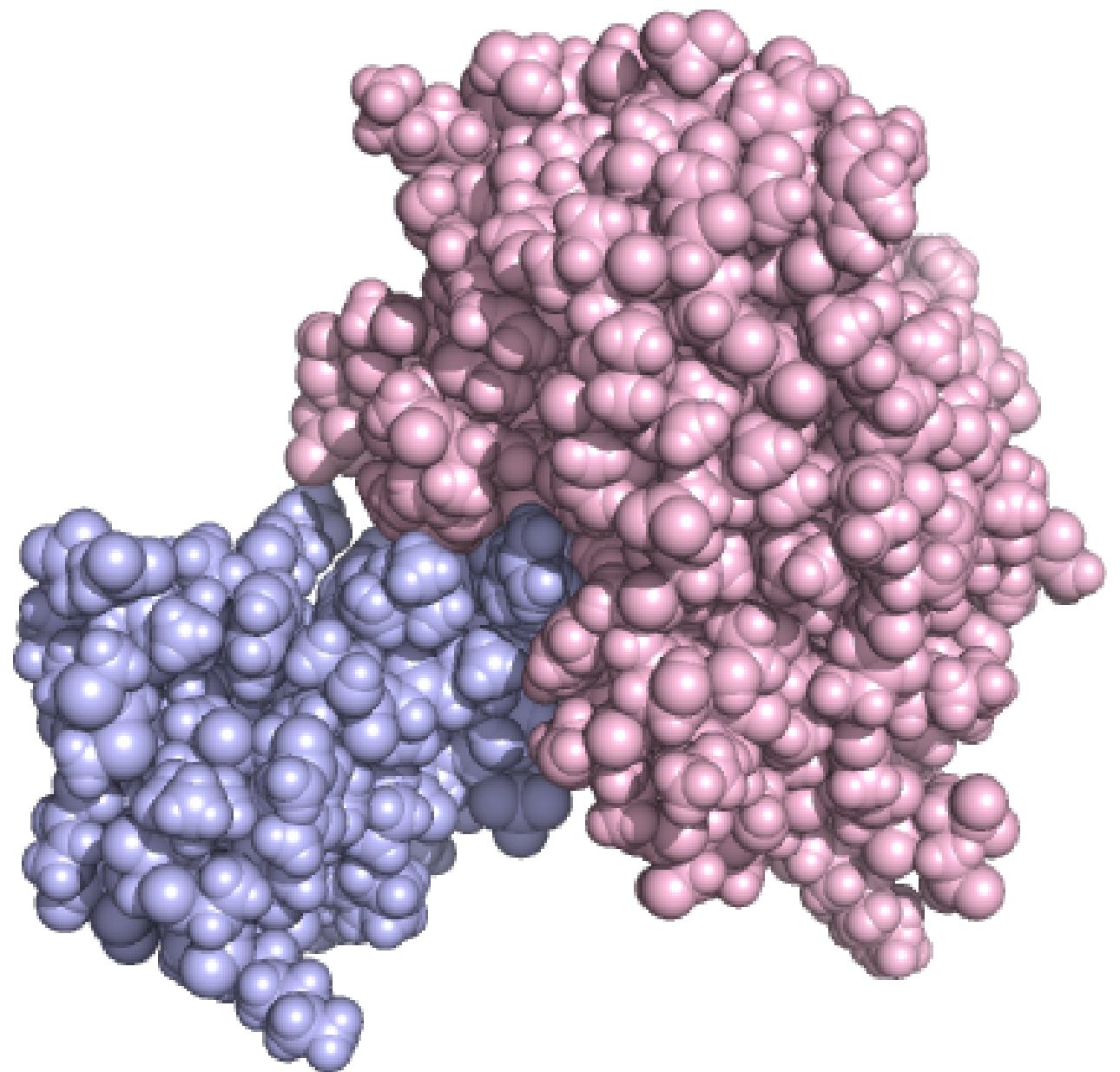
AMANDA MARÇAL ROSSINOL

ORIENTADORA: SABRINA DE AZEVEDO SILVEIRA

# Introdução

Extensão do projeto de Iniciação Científica:

- ➡ Representações 3D de estruturas moleculares;
- ➡ Modelagem de estruturas em grafos;
- ➡ Estudo de estratégias para detecção e visualização de padrões em interfaces proteína-ligante e proteína-proteína.

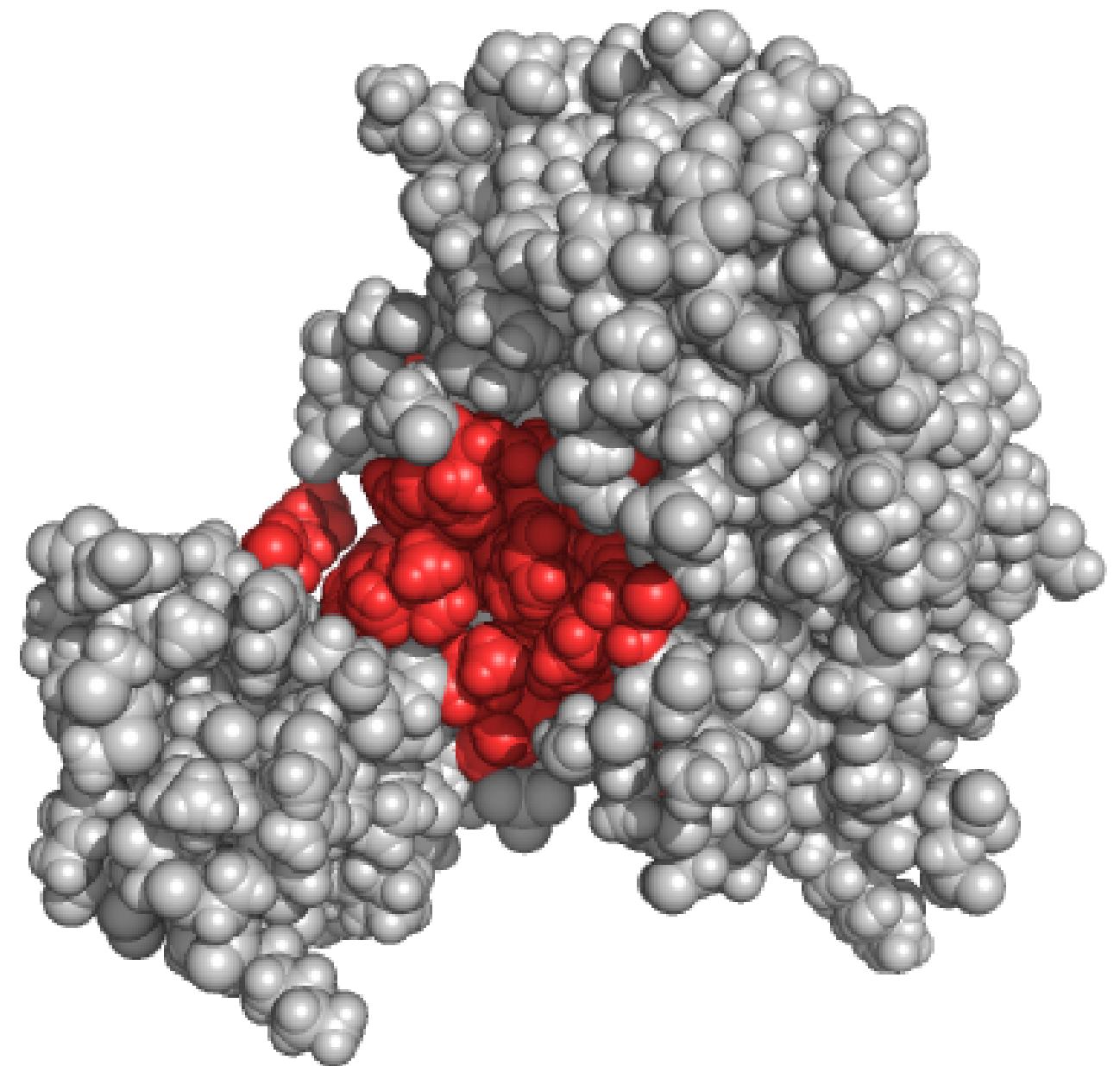


PDB ID: 4Y11, CHAIN E, CHAIN I

# Introdução

Extensão do projeto de Iniciação Científica:

- ➡ Representações 3D de estruturas moleculares;
- ➡ Modelagem de estruturas em grafos;
- ➡ Estudo de estratégias para detecção e visualização de padrões em interfaces proteína-ligante e proteína-proteína.

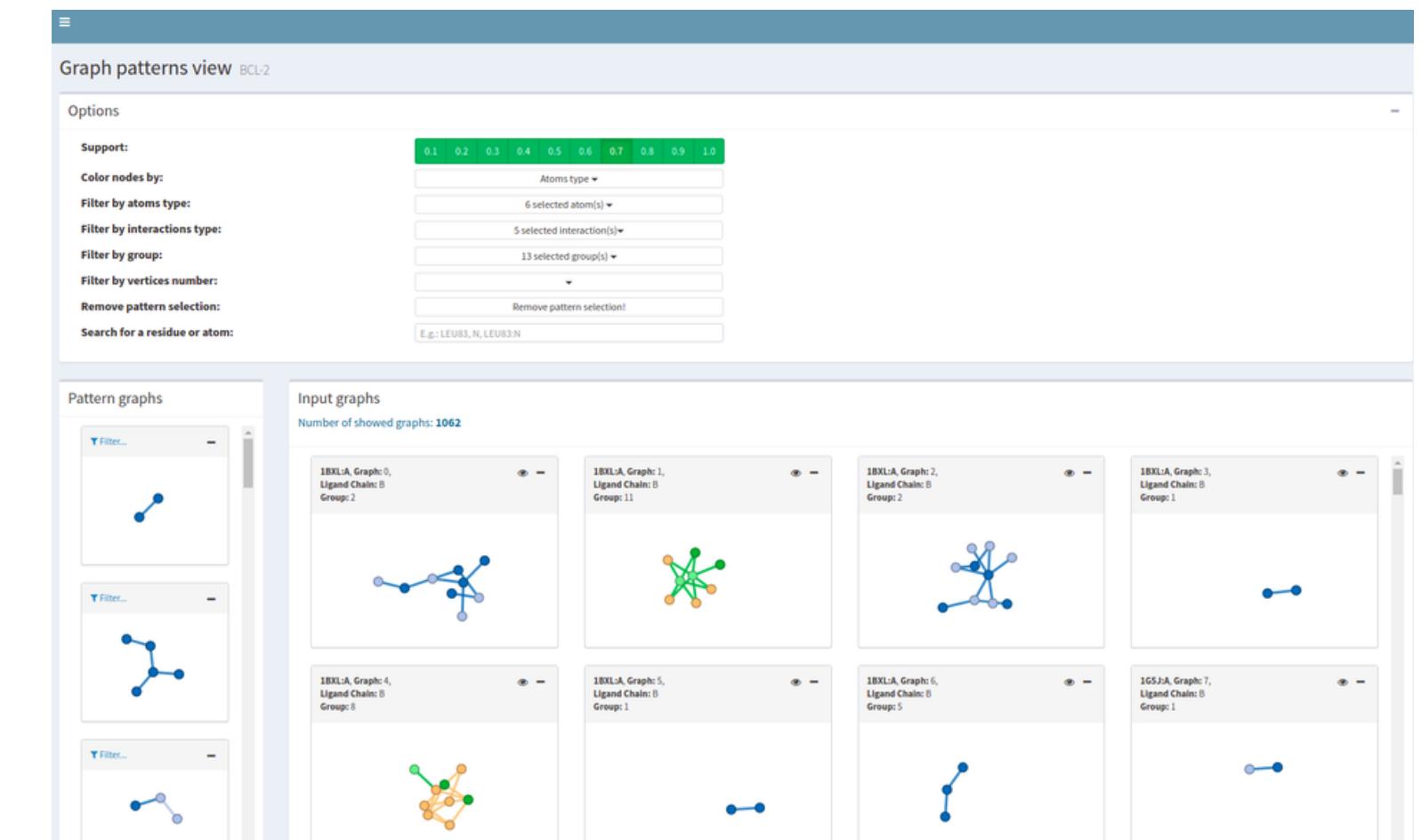


PDB ID: 4Y11, CHAIN E, CHAIN I

# Introdução

*ppiGReMLIN:*

- ➡ Estratégia baseada em grafos para detectar padrões estruturais em interfaces proteína-proteína;
- ➡ Publicado na revista *BMC Bioinformatics* em 2020;
- ➡ Surgiu de uma demanda biológica relacionada à defesa das plantas contra insetos e patógenos.



Disponível em: [ppigremlin.github.io/pages/graphs/graphs-bcl.html](http://ppigremlin.github.io/pages/graphs/graphs-bcl.html)

# Introdução

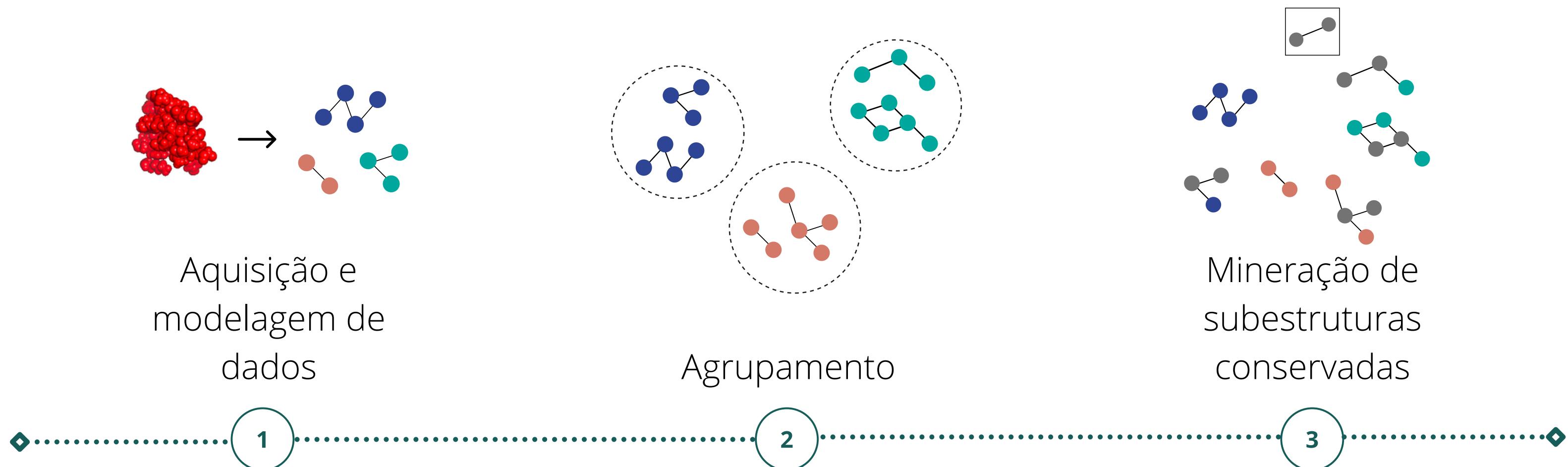
- ➡ Problema modelo lagarta-da-soja;
  - Lagarta ataca a soja;
  - Soja produz inibidor KTI;
  - O inibidor causa um processo de degradação das proteases no intestino da lagarta.
- ➡ Alternativa aos agroquímicos que possuem toxicidade alta.
- ➡ Caracterização do processo de inibição da protease da lagarta;
- ➡ Providenciar subestruturas conservadas usadas no processo de design de peptídeos;



Retirado de: [agrolink.com.br/problemas/lagarta-da-soja\\_37.html](http://agrolink.com.br/problemas/lagarta-da-soja_37.html)

# Introdução

Composto de três etapas principais:



# Objetivos

- ➡ Trabalhar na etapa de agrupamentos do ppiGReMLIN;
- ➡ Analisar se os algoritmos causam algum impacto nos padrões encontrados;
- ➡ Indicar qual melhor algoritmo de agrupamento para o problema especificado;
- ➡ Apontar algoritmo de menor complexidade computacional a ser usado no lugar do atual.

# Metodologia

- 1 Buscar na literatura algoritmos de agrupamento;
- 2 Adaptá-los e aplicar no ppiGReMLIN;
- 3 Utilizar métricas de avaliação de qualidade dos agrupamentos formados e dos padrões encontrados;
- 4 Avaliar e discutir os resultados obtidos para tirar conclusões.

# Cronograma

	FEV	MAR	ABR	MAIO
<i>Definição do tema</i>	✓			
<i>Revisão da literatura</i>		✓	✓	✓
<i>Seleção de critérios de avaliação e métodos de agrupamento</i>			✓	✓
<i>Implementações</i>				✓
<i>Monografia</i>		✓	✓	✓

# Referências

- [1] Queiroz, F.C., Vargas, A.M.P., Oliveira, M.G.A. et al. ppiGReMLIN: a graph mining based detection of conserved structural arrangements in protein-protein interfaces. BMC Bioinformatics 21, 143 (2020). <https://doi.org/10.1186/s12859-020-3474-1>

Obrigada!

# Perguntas?

Contato: [amanda.rossinol@ufv.br](mailto:amanda.rossinol@ufv.br)

Repositório: [github.com/amandarmarcal/analiseAgrupamentosTCC](https://github.com/amandarmarcal/analiseAgrupamentosTCC)