



XXV ENCONTRO DE JOVENS PESQUISADORES
VII MOSTRA ACADÊMICA DE INOVAÇÃO E TECNOLOGIA

De 17 a 19 de outubro de 2017
Campus-Sede da UCS • Caxias do Sul



PREDIÇÃO DE ELEMENTOS REGULATÓRIOS DA EXPRESSÃO DE GENES DE BACTÉRIAS GRAM-NEGATIVAS: APRIMORAMENTO DA FERRAMENTA COMPUTACIONAL BACPP

Jean Lucas Benvenuti (VOLUNTÁRIO), Scheila de Avila e Silva , Daniel Luis Notari
(Orientadora(a))

A expressão gênica de procariotos é regulada de diversas formas. Uma delas é a regulação pré-transcricional, na qual regiões promotoras encontradas “upstream” do sítio de início de transcrição dos genes interagem com a enzima RNA Polimerase (RNAP). A RNAP é formada por cinco subunidades e mais um fator sigma, o qual confere especificidade na expressão gênica de resposta às mudanças ambientais. Os promotores possuem características próprias como a composição de nucleotídeos e características estruturais. Dentre elas, a curvatura do DNA é uma estrutura que atua em processos biológicos. Dessa forma, o objetivo deste trabalho é realizar simulações de Redes Neurais Artificiais (RN) para identificar promotores reconhecidos pelo fator sigma 70 da bactéria gram-negativa *Escherichia coli*. Utilizou-se sequências de promotores da plataforma RegulonDB, os quais foram convertidos em valores de curvatura segundo o modelo AAEWedge, que fornece valores de curvatura, de ângulo da curvatura e de ângulo da maleabilidade. Após isso, os dados foram suavizados com um filtro passa-baixa. Esses dados foram utilizados como entrada para uma RN de arquitetura Multilayer Perceptron. Para a classificação, utilizou-se a metodologia de validação cruzada e como medidas de performance: exatidão, especificidade e sensibilidade. Como resultado obtido, tem-se a aprendizagem da RN na identificação de promotores, sendo que os parâmetros: ângulo de curvatura e ângulo de maleabilidade não se mostraram eficientes no processo de simulações de RN. Por outro lado, os valores de curvatura discriminaram os promotores, sendo que a arquitetura ótima de RN apresentou 80 neurônios na camada de entrada, 4 neurônios na camada oculta e 1 neurônio na camada de saída. Os valores obtidos para as medidas de performance foram com classificações de (i) exatidão 70,59%, (ii) especificidade 74,01% e (iii) sensibilidade 73,16%. A próxima etapa será a extração de regras da camada oculta das RN a fim de verificar o aprendizado por ela obtido e assim, promover a ampliação de inferências biológicas relacionadas à estrutura e à funcionalidade de promotores. Adicionalmente, pretende-se obter um classificador de promotores que poderá ser usado no melhoramento de ferramentas de predição de promotores bacterianos (BacPP).

Palavras-chave: Promotores, Curvatura , Redes Neurais Artificiais

Apoio: UCS