



## XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2023
<b>Local</b>	Campus Centro - UFRGS
<b>Título</b>	Implementação de aprendizado de máquinas no mapeamento de grupamentos hidrofóbicos em mini-Cas
<b>Autor</b>	LUCAS MARTINS DE ANDRADE
<b>Orientador</b>	DIEGO BONATTO

A análise de grupamentos hidrofóbicos (HCA) é um método que combina a comparação de sequências primárias com as formas secundárias de proteínas a partir de aglomerados hidrofóbicos. Devido à aversão de aminoácidos hidrofóbicos à água, junto da pressão exercida na água por forças entálpicas e entrópicas, estes aminoácidos tendem a se agrupar e formar estruturas compactas e estáveis nas partes internas das proteínas, formando domínios globulares com traços hidrofóbicos característicos. A disposição espacial destes domínios é, em sua maioria, conservada dentro de famílias protéicas, possibilitando dados de funções moleculares de proteínas pouco anotadas. Assim, alinhando sequências de aminoácidos com base nestes grupamentos hidrofóbicos e calculando a frequência de cada um são construídas matrizes em que cada linha representa um aminoácido e cada coluna representa a posição no alinhamento. Analisando a matriz, é possível identificar padrões indicativos de similaridades estruturais e funcionais que acarretam em predições de estruturas proteicas. No entanto, a eficiência geral do método ainda depende de fatores humanos, como a capacidade de reconhecer e interpretar padrões hidrofóbicos. Desta maneira, este trabalho tem como objetivo desenvolver processos de automação para a técnica de HCA, mais especificamente a implementação de redes neurais, treinadas a partir de conjuntos de proteínas de diferentes grupos taxonômicos com valores de similaridade entre 100% até 30%, que identifiquem grupamentos hidrofóbicos e predigam estruturas proteicas com altos níveis de confiabilidade. Estas análises serão aplicadas para enzimas da família Cas12j de origem eucariota, com potencial para a descoberta de novas mini-Cas para uso em edição gênica em eucariotos.