

VISUALIZAÇÃO DE PADRÕES ESTRUTURAIS EM INTERAÇÕES PROTEÍNA-PROTEÍNA

Universidade Federal de Viçosa

Amanda Marçal Rossinol¹, Sabrina de Azevedo Silveira²

¹Graduanda em Ciência da Computação - UFV, ²Professora Adjunta do DPI-UFV

¹amanda.rossinol@ufv.br, ²sabrina@ufv.br

Área temática: Ciência da Computação
Grande Área: Ciências Exatas e Tecnológicas
Categoria: Pesquisa

Palavras chave: interações proteína-proteína, visualização, padrões

Introdução

Interações proteína-proteína têm importante atuação na execução de processos biológicos nos organismos. A detecção de padrões nessas interações pode auxiliar na obtenção de maiores informações e detalhes sobre como elas ocorrem. O ppiGReMLIN[1], usado como referência, tem como objetivo a detecção de padrões por meio de uma estratégia baseada em mineração de grafos. Portanto, uma vez descobertos tais padrões, se faz necessária uma maneira de dispor e estudá-los de forma mais eficiente e clara.

Objetivos

Estudo da estratégia utilizada no ppiGReMLIN[1], com ênfase nos resultados entregues pela mesma para proposição e disponibilização de formas de visualização dos padrões tanto de forma isolada como inseridos em complexos proteicos.

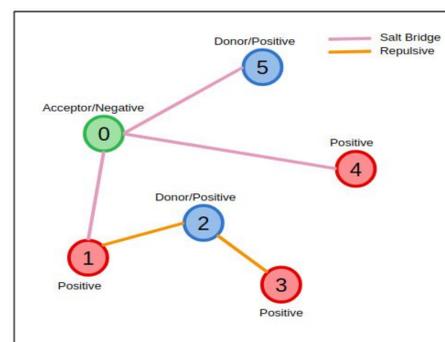
Material e Métodos

As formas de visualização propostas serão disponibilizadas por meio de *web server*, que está sendo desenvolvido com linguagens como Python, HTML/CSS e JavaScript. Além disso, foram escolhidas inicialmente as bibliotecas d3.js e NGL para desenho de grafos e estruturas moleculares.

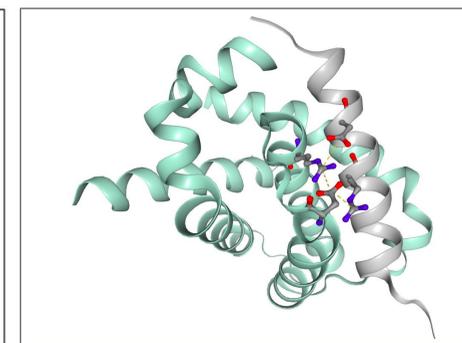
Resultados e Discussão

Dado que os padrões são representados por grafos bipartidos, onde os nós representam tipos de átomos e as arestas são as interações entre eles, uma das representações escolhidas é o

desenho 2D dos mesmos, utilizando esquemas de cores para diferenciar interações e átomos uns dos outros. Uma segunda representação envolve a exibição dos padrões inseridos em complexos que os contém, proporcionando uma melhor noção da localização espacial na estrutura.



Padrão representado em forma de grafo.



Padrão ao lado destacado no complexo 2VM6 do PDB. Modelagem 3D feita utilizando a biblioteca NGL.

Por se tratar de um trabalho ainda em andamento, outras formas como tabelas contendo outras informações relevantes deverão também ser consideradas em fases posteriores do desenvolvimento.

Conclusões

Ao fim, espera-se que as visualizações escolhidas e implementadas contribuam para detecção visual contextualizada dessas estruturas conservadas, auxiliando por exemplo, no processo de design de peptídeos.

Bibliografia

[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>

Apoio Financeiro

