

## Ferramenta computacional de Machine Learning para predição de peptídeos com função dupla de penetração celular e antimicrobiana

Igor Teixeira Brasiliano<sup>1</sup>(igor.brasiliano@ufv.br), Rayane Monique Bernardes Loch<sup>2</sup>(rayane.bernardes@ufv.br), Maria Cristina Baracat Pereira<sup>2</sup>(baracat@ufv.br), Sabrina de Azevedo Silveira<sup>1</sup>([sabrina@ufv.br](mailto:sabrina@ufv.br))

<sup>1</sup> Departamento de Informática, Universidade Federal de Viçosa

<sup>2</sup> Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, Universidade Federal de Viçosa

Machine Learning, Predição de Peptídeos, Antibióticos  
Ciências Exatas e Tecnológicas, Ciência da computação - Pesquisa

### Introdução

Há duas principais classes de peptídeos que interagem com membranas, os peptídeos de penetração celular (CPP), que se destacam pela capacidade de entrar em células alvo, e peptídeos antimicrobianos (AMP), se caracterizam por sua função antimicrobiana, podendo agir contra fungos, bactérias, vírus e outros patógenos.

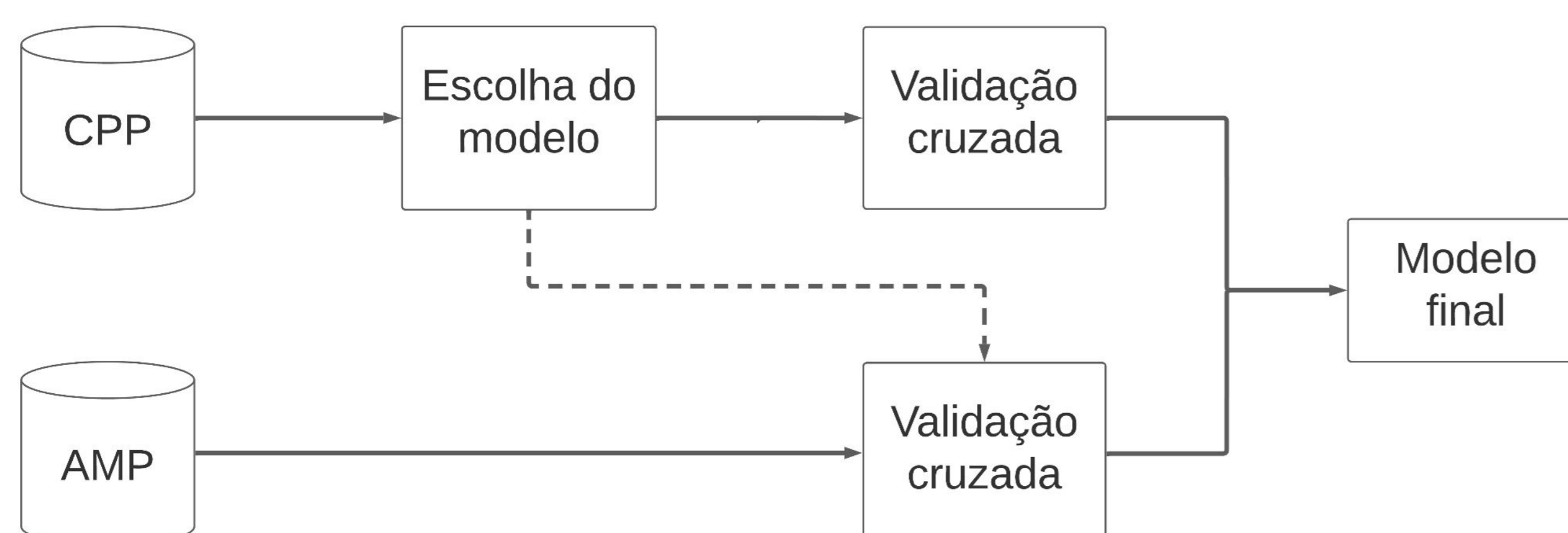
Alguns peptídeos podem apresentar uma dupla função de CPP e AMP e achar esses peptídeos hoje, em um cenário que surge uma crescente preocupação com moléculas resistentes a antibióticos convencionais, é de grande importância.

### Objetivos

Tem-se então o objetivo de desenvolver uma ferramenta computacional por meio de estratégias de machine learning capaz de prever peptídeos com dupla função, penetração celular e atividade antimicrobiana, auxiliando na identificação de moléculas com poder antimicrobiano.

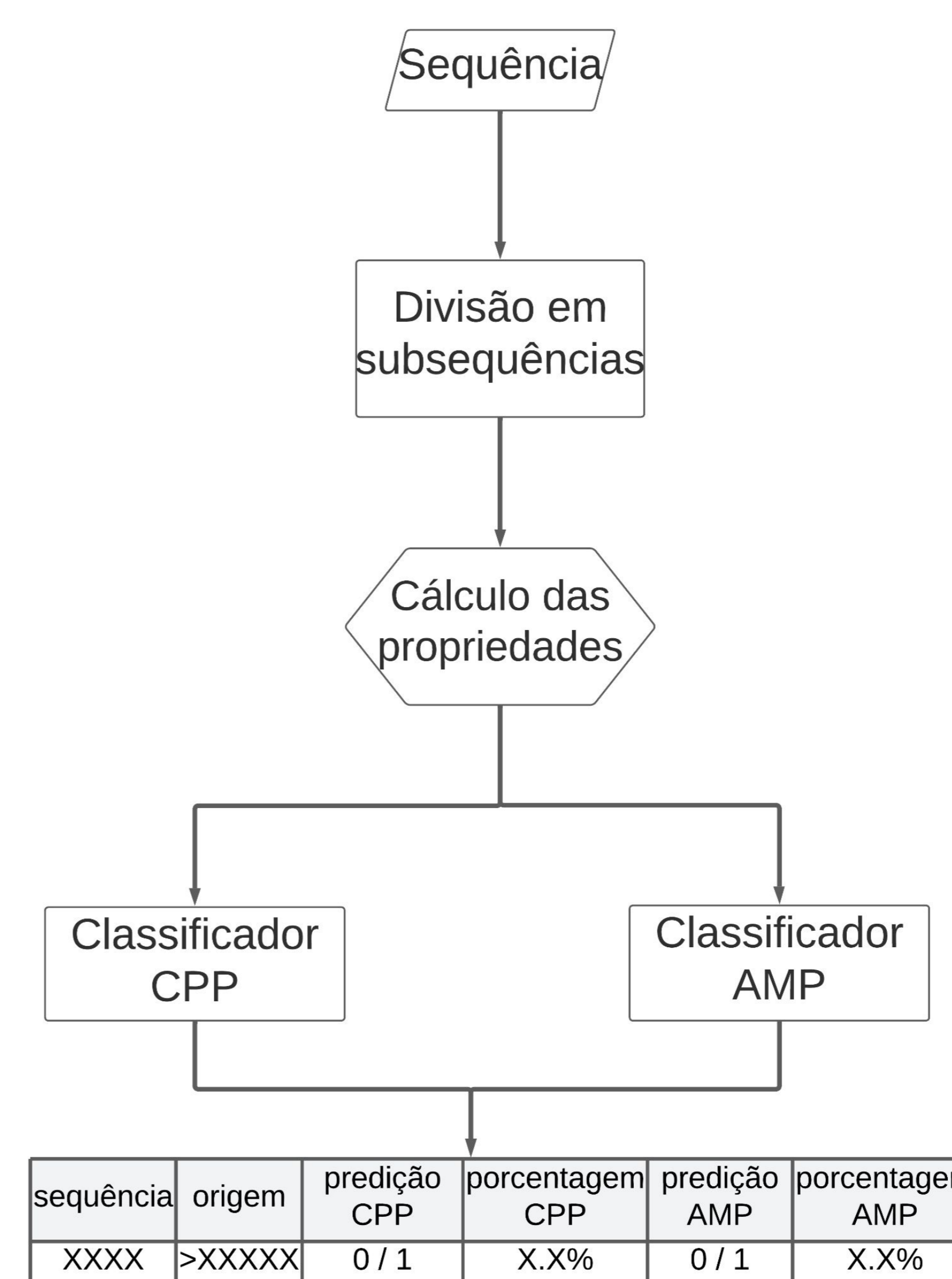
### Material e Métodos

Os dados foram tratados de forma independente, ou seja, a classificação dos CPPs não interfere na classificação dos AMPs. Foram testados e validados, com partição cruzada, alguns algoritmos famosos para a tarefa de classificação: KNN, SVM, Extra Trees e Naive Bayes.



### Resultados e Discussão

A ferramenta final obtida funciona como dois classificadores independentes, uma para classificação dos CPPs e outro para classificação dos AMPs, gerando uma tabela com as predições e porcentagem para cada classe. Como resultados preliminares, obtivemos 98% de acurácia, 96% de precisão e 98% de revocação para predição de AMPs e 83% de acurácia, 80% de precisão e 75% de revocação para predição de CPPs.



### Conclusões

Como os peptídeos de penetração celular são ‘novos’ e ainda não temos uma definição clara e objetiva em relação a sua identificação, os resultados apresentados, até então, para sua classificação se mostram satisfatórios. Além disso, a ferramenta desenvolvida pode auxiliar outros pesquisadores no desenvolvimento de novas moléculas com poder antimicrobiano.

### Apoio Financeiro