

**TACAPE: UMA FERRAMENTA PARA CRIAÇÃO DE NOVOS PEPTÍDEOS
ANTICÂNCER**

Isadora Leitzke Guidotti (leitzke.gi@gmail.com)

Frederico Schmitt Kremer (fred.s.kremer@gmail.com)

INTRODUÇÃO: O câncer é a segunda doença que mais causa óbitos no mundo e atualmente os tratamentos para câncer como a quimioterapia e radioterapia deixam a desejar, já que causam muitos efeitos colaterais prejudicando a qualidade de vida do paciente, além da resistência apresentada em muitos casos, por isso se faz necessário o investimento em terapias biotecnológicas como a imunoterapia e a terapia alvo. Dentro dessas, os peptídeos anticâncer (ACPs) têm sido amplamente utilizados para o desenvolvimento de novas terapias para câncer (1). Os ACPs são pequenos peptídeos formados entre 10 e 60 aminoácidos, que facilmente se modifica, são específicos e com uma boa capacidade de penetração na célula. Deep Learning (DL) é uma classe dentro do Machine Learning (ML) que visa simular o funcionamento de redes de neurônios profundas, uma arquitetura de DL chamada transformers baseada em um codificador e um decodificador, isto é, um modelo baseado em contexto, que leva em consideração outras informações, no caso dos ACPs, ele pode basear a montagem de uma nova sequência de ACPs com base nos aminoácidos que compõem ACPs já descobertos e usados para a terapia do câncer (2). **OBJETIVO:** Dessa forma o objetivo do presente trabalho é desenvolver uma ferramenta usando transformers que possa criar novos peptídeos anticâncer. Além de conseguir

predizer se um peptídeo é ou não anticâncer. METODOLOGIA: Para desenvolver a ferramenta foi feito o uso do framework tensorflow, e para o treino foi utilizado os dados do banco de dados ANTICP2.0. Para avaliar qual arquitetura tinha o melhor resultado foram usadas as métricas de acurácia, recall, precisão e f1 score, os dados foram treinados com algoritmos como o transformers, LSTM e redes convolucionais. Após a construção da ferramenta foram usadas ferramentas de predição ANTICP2.0, ACPred e MLACP2.0, para avaliar se os peptídeos gerados. Além disso, um classificador baseado em Transformer também foi treinado para filtrar os peptídeos gerados, adotando-se um critério de pelo menos 95% de probabilidade. Por fim, para predizer a estrutura dos peptídeos gerados foi utilizado o PEPFOLD4.0. Atualmente estão sendo rodadas as dinâmicas moleculares com os 5 (cinco) peptídeos que tiveram o melhor resultado, sendo o peptídeo 22 o nosso controle, a dinâmica será feita em uma membrana saudável e outra cancerosa seguindo a metodologia criada por MA et al., 2019. RESULTADOS: OTACaPe - Transformed - based Anti - Cancer Peptide Classification and Generation foi capaz de gerar 1000 peptídeos os quais depois de avaliados tiveram taxa de sucesso para a geração de novas sequências de 95%. Os 100 melhores peptídeos de acordo com a validação nos bancos de dados foram preditos na ferramenta PEPFOLD 4.0. O resultado das dinâmicas estão em andamento, mas o peptídeo 193 que já foi rodado se mostrou promissor e será um dos submetidos as análises in vitro. CONCLUSÕES: O TACaPe é uma ferramenta eficaz para o desenho de novos ACPs. Para avaliar os peptídeos gerados para saber como eles se comportam na célula, para isso há perspectivas de testes usando docking molecular e dinâmica molecular, bem como testes in vitro.

Palavras-chave: aprendizado profundo; antineoplásicos; peptídeos cíclicos.