



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Determinação de aglomeramentos em redes metabólicas e PPI
Autor	JOSÉ ANTÔNIO PELLIZZARO
Orientador	DANIEL GAMERMANN

Determinação de agrupamentos em redes metabólicas e PPI.

Aluno: José Antônio Pellizzaro

Orientador: Daniel Gamermann

A teoria de grafos é usada para descrever vários sistemas complexos como as redes sociais, redes de transmissão de energia, internet, etc. Nesse contexto, estudamos dois tipos de redes biológicas: redes metabólicas e redes de interações de proteínas (PPI - *Protein Protein Interaction*). Um nó (ou vértice do grafo) nas redes PPI, simboliza uma proteína, já uma ligação entre os nós, nos diz que as duas proteínas interagem entre si em algum processo. Já nas redes metabólicas cada vértice representa um metabólito e uma conexão entre eles significa que ambos fazem parte de uma reação química como um par produto-reagente.

O que buscamos indentificar são proteínas e moléculas que participem da mesma função biológica nos organismos. Para fazer isso, tiramos vantagem de uma das propriedades dessas redes: a presença de *clusters*. *Clusters* ou aglomeramentos, são conjuntos de nós muito conectados entre si, mas, ao mesmo tempo, fracamente ligados com o resto da rede. Em resumo, metabólitos e proteínas que fazem parte de uma mesma função devem ser membros de um mesmo *cluster*.

Com isso em mente, fizemos um algoritmo para reordenar a rede de modo que os clusters fiquem em evidência. Imaginamos que os nós estão dispostos num espaço unidimensional discreto e que existe uma força atuante entre cada nó i e j da rede. Essa força pode ser de dois tipos: repulsiva, se os nós não compartilharem nenhum vizinho, ou atrativa do tipo massa-mola se os nós tiverem vizinhos em comum. Nesse caso, o *topological overlap* entre os nós atua como a constante elástica da mola.

Analisando a força resultante sobre cada nó, vemos se o nó tem tendência a se deslocar para a esquerda ou para a direita na rede. O algoritmo, então, faz permutações entre os nós - trocando nós à esquerda com tendência de ir para a direita por nós à direita que tenham tendência de ir para a esquerda. Essas permutações visam minimizar a energia potencial associada a essas forças e, além disso, aproximar os nós com maior topological overlap entre si - aproximando os *clusters*.

Existem outros algoritmos que também reordenam as redes. Nesse trabalho iremos comparar os resultados obtidos pelo nosso algoritmo com os do PageRank e do Kruskal.

O PageRank é o algoritmo usado pelo Google para ordenar os resultados das buscas em seu site. Visa obter a relevância de cada nó (no caso, os sites) da rede e os ordena de acordo com esses com esse resultado. Já o Kruskal encontra a árvore geradora mínima do grafo para ordená-lo.