

Estudo de quinonas com atividade tripanossomicida através de redes neurais artificiais

Fábio A. de Molfetta¹ (PG)*, Wagner F. D. Angelotti² (PG), Roseli A. F. Romero³ (PQ), Albérico B. F. da Silva¹ (PQ)

*famolfetta@iqsc.usp.br

1 - Departamento de Química e Física Molecular, Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo.

2 - Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas.

3 - Departamento de Ciências da Computação, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo.

Palavras Chave: Doença de Chagas, DFT, Redes Neurais MLP.

Introdução

A doença de Chagas é uma endemia prevalente na América Latina causada pelo protozoário flagelado *Trypanossoma cruzi* (parasito da ordem *Kinetoplastida*), o qual é transmitido para o hospedeiro humano, principalmente pelas fezes do inseto do vetor hematófago conhecido como “barbeiro” ou “chupão”. As espécies mais comuns de triatomíneos são o *Triatoma infestans*, *Panstrongylus megistus* e *Triatoma sordida*, entre outras. Estes insetos encontram um habitat favorável nas frestas das paredes de barro ou de madeiras das chamadas casas de pau a pique, encontradas principalmente na zona rural e na periferia da zona urbana (favelas).

Estima-se que cerca de 20 milhões de pessoas estão infectadas e 100 milhões (25% da população da América Latina) correm o risco de adquiri-la.

As quinonas apresentam propriedades microbicidas, virucidas, antitumorais, anticânceres e, como será mostrado no presente trabalho, também são estudadas no combate à doença de Chagas

Redes Neurais Artificiais (ANN – *Artificial Neural Networks*) ou simplesmente redes neurais, vêm sendo muito utilizadas na Química, demonstrando um grande potencial de aplicação em modelagem, simulação, controle e predição, sendo apropriada para o uso de planejamento de fármacos que é o objetivo deste trabalho.

Resultados e Discussão

Foram estudadas 28 quinonas e separadas em conjunto de treinamento e teste. Para isso, foram escolhidas aleatoriamente 20 quinonas como conjunto de treinamento, para treinar uma rede neural Multi Layer Perceptrons (MLP) (70% dos compostos), e o restante das quinonas foi utilizado como conjunto teste (30% dos compostos) para verificar a performance do modelo. As variáveis selecionadas foram T₅, QTS1, VOLS2 e HOMO-1.

O programa utilizado para treinamento das redes neurais foi Toolbox de redes neurais do Matlab 6.0, e

o algoritmo de aprendizagem utilizado foi o *backpropagation* (retropropagação de erros).

Todos os resultados obtidos com as redes neurais MLP foram feitos em triplicatas, pois a escolha dos pesos iniciais para os neurônios em cada camada é feita através de uma função aleatória. Devido a isto, todo o procedimento de treinamento foi repetido duas vezes, para se obter um modelo mais adequado.

A arquitetura da rede com 4 neurônios na camada de entrada, 10 neurônios na camada intermediária e 2 neurônios na camada de saída foi adotada observando-se o erro quadrático médio. Após a escolha da melhor arquitetura das redes, foi realizado o processo de validação cruzada com o intuito de avaliar a capacidade de previsão das redes neurais. Para isto, utilizou-se o conjunto teste e a classe destes compostos foi prevista pelas redes. As duas classes de compostos foram definidas por dois códigos, ou seja, os compostos ativos foram nomeados pelo código (1 0) e os compostos inativos com o código (0 1). Foram construídos 8 modelos com o método de validação cruzada do tipo “leave-one-out”.

Apenas um composto não foi classificado corretamente no conjunto teste, o que mostra que os resultados obtidos com as redes neurais apresentam alta porcentagem de informação correta (87,5%).

Conclusões

Os resultados obtidos com as redes neurais do tipo MLP apresentaram alta porcentagem de informação na classificação de novos compostos, em ativos ou inativos. Deste modo, pode-se dizer que o modelo de redes neurais para as quinonas estudadas é um modelo robusto e capaz de gerar previsões confiáveis.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Capes, CNPq e Fapesp.