

PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE DNA UTILIZANDO O MÉTODO DE DECOMPOSIÇÃO EM VALORES SINGULARES (SVD)

João Vitor Xavier DOS SANTOS (Unileste); Erik De Oliveira MARTINS (Unileste)

Introdução: A pesquisa em cálculos analíticos da estabilidade do duplexo de DNA tem sido impulsionada por diversas aplicações de hibridização de DNA, que despertaram o interesse em métodos aprimorados. A bibliografia relevante nesse contexto fornece a base teórica para a pesquisa, destacando a importância da predição precisa das propriedades termodinâmicas do DNA. Ela também realça a necessidade de simplificar os cálculos e tornar mais acessível a compreensão das interações de pares de bases.

Objetivo: O objetivo principal é aplicar o método da Decomposição em Valores Singulares (SVD) para prever as propriedades termodinâmicas do DNA, com ênfase na estabilidade do duplexo e simplificação das interações das bases. Além disso, a pesquisa aprimora a compreensão do método "vizinho mais próximo" na predição da estabilidade do DNA.

Metodologia: Para alcançar nossos objetivos, utilizaremos o SVD para analisar as propriedades termodinâmicas do DNA. Integrando este método em um programa Python personalizado, automatizaremos a análise de dados de DNA, simplificando a complexidade das interações de pares de bases e facilitando nossa pesquisa na área.

Resultados: Os dados experimentais de Richard Owczarzy e sua equipe, que descrevem as variações de entalpia (ΔH) e entropia (ΔS) para combinações únicas de bases empilhadas em DNA, fornecem a base matemática essencial para o desenvolvimento do software. Esses dados refletem as interações termodinâmicas entre as bases de DNA, fundamentais para entender a estabilidade das duplas hélices. Com essa tabela, podemos criar um sistema de referência que permitirá o cálculo preciso da temperatura de derretimento (T_m) e da estabilidade do DNA. O software em desenvolvimento utilizará algoritmos que consideram as variações de ΔH e ΔS para prever com precisão a estabilidade de diferentes sequências de DNA, simplificando a análise de sequências de DNA e contribuindo significativamente para a pesquisa na área.

Conclusão: Este estudo realça a importância dos dados experimentais de entalpia e entropia como base para nosso software de previsão de estabilidade do DNA. Ao aplicar métodos matemáticos a esses dados, nosso software promete simplificar e aprimorar a análise de sequências de DNA, contribuindo para avanços na biotecnologia e biologia molecular.

Palavras-chave: Dna. Termodinâmica. Svd.

Agências de fomento: Unileste