



E0418

ALGORITMOS GENÉTICOS APLICADOS NO ESTUDO DO FOLDING DE PROTEÍNAS EM MODELOS DE REDE

Francisco Alírio Almeida Gomes de Moura (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Douglas Soares Galvão (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

Para que possamos desenvolver novos compostos orgânicos, é importante conhecermos a conformação espacial de compostos já existentes, ou, no melhor caso, sermos capazes de prever a conformação espacial de um novo composto antes de sintetizá-lo. Sabe-se que todas as proteínas atingem uma conformação nativa única, porém o mecanismo envolvido nesse processo é desconhecido e esse problema é conhecido como folding, ou enovelamento, de proteínas. Esse trabalho dá continuidade ao trabalho apresentado no congresso de iniciação científica do ano anterior, e visa atacar o problema do folding de proteínas utilizando algoritmos genéticos. Supõe-se que a conformação nativa da proteína seja a que atinge o mínimo de energia livre, e utilizamos um algoritmo genético, que é um algoritmo estocástico baseado em seleção natural, como estratégia de otimização para encontrar esse mínimo. Em trabalhos anteriores o algoritmo genético foi utilizado associado a modelos de rede, que representam mal a verdadeira posição dos átomos dentro da proteína, nesse trabalho utilizamos um modelo recente de potencial empírico com solvente implícito para o cálculo da energia livre levando em conta a posição de cada átomo da proteína. Tal estratégia foi aplicada a proteínas de estrutura conhecida, e nos resultados observamos que o modelo de potencial utilizado teve bom desempenho, e algumas características do enovelamento foram reproduzidas pela simulação, mas o enovelamento total se provou muito difícil para o algoritmo genético proposto.

Simulação computacional - Algoritmos genéticos - Proteínas