



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

| | |
|-------------------|--|
| Evento | Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2021 |
| Local | Virtual |
| Título | Análise utilização do pyrosetta na otimização da função de energia de um atracamento molecular do ligante AH1 na proteína 1AJX com a meta-heurística de Simmulated Annealing |
| Autor | GUILHERME FETZER DORNELES |
| Orientador | MARCIO DORN |

Análise da utilização do pyrosetta na otimização da função de energia de um atracamento molecular do ligante AH1 na proteína 1AJX com a meta-heurística de Simmulated Annealing

Autor: Guilherme Fetzter Dorneles

Orientador: Prof. Márcio Dorn

PyRosetta é uma interface interativa baseada em python para o pacote de modelagem molecular Rosetta. Ele permite que os usuários projetem seus próprios algoritmos de modelagem molecular personalizados usando métodos de amostragem Rosetta e funções de energia. O atracamento molecular ligante-proteína é uma técnica computacional utilizada para prever o modo de ligação e os detalhes do reconhecimento molecular entre um ligante e uma proteína. Para isso utiliza-se diversas metodologias, que fornecem um tratamento adequado das características físico-químicas e estruturais das moléculas. Dentro desse cenário as meta-heurísticas merecem destaque devido a sua ótima versatilidade, sendo possível utilizá-la em qualquer atracamento molecular. Essa pesquisa tem por objetivo avaliar a utilização do pyrosetta e suas funções de atracamento molecular e de energia, junto com a meta-heurística de simmulated annealing, tendo como base um atracamento molecular que já foi previamente feito em outras interfaces interativas já conhecidas como DockThor. Foi utilizada a função de energia para ligantes do pyrosetta e suas funções de rotação e translação de corpo rígido, com uma área de atracamento de 11 Angstroms cúbicos a partir do centro de atracamento para movimentação do ligante. Os resultados de energia encontrados demonstram um padrão compatível com os resultados de outras interfaces interativas. Para as funções de movimento do ligante, associado a meta-heurística de Simmulated Annealing, apresentam uma maior flexibilidade e facilidade na hora da utilização do que outras interfaces interativas.