



E241

OTIMIZAÇÃO DE EMPACOTAMENTO COMO ESTRATÉGIA PARA DOCKING E PARA GERAR CONFIGURAÇÕES INICIAIS COMPLEXAS PARA DINÂMICA MOLECULAR

Leandro Martinez (Bolsista FAPESP) e Prof. Dr. José Mario Martinez (Orientador), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica – IMECC, UNICAMP

Dinâmica molecular é uma metodologia poderosa para a compreensão a nível molecular de quase todos os sistemas químicos ou bioquímicos. A teoria e as técnicas desenvolvidas para as análises estruturais e termodinâmicas estão bem estabelecidas e existem vários pacotes computacionais disponíveis para sua realização. No entanto, a construção de configurações iniciais para as dinâmicas pode ser muito trabalhosa. Estruturas regulares, cristalinas, podem ser usadas quando líquidos ou misturas simples são estudados. Porém, para sistemas mais complexos, como soluções de polímeros, líquidos adsorvidos em sólidos ou outras estruturas complexas, as estruturas regulares não podem ser utilizadas e muito tempo pode ser gasto na manipulação das estruturas ou otimização dos potenciais a partir dos retículos cristalinos até que uma configuração inicial adequada seja obtida. Neste trabalho, o problema de se obter uma configuração inicial para dinâmica molecular é tratado como um problema de empacotamento e resolvido por um método de otimização. As configurações iniciais válidas são aquelas em que a distância entre átomos de diferentes moléculas é maior que um valor determinado e as moléculas estão restritas a regiões do espaço de acordo com as restrições estruturais desejadas. O método de otimização utilizado é o bem estabelecido BOX-QUACAN. Exemplos de configurações são mostradas para a solvatação de proteínas, misturas de muitos componentes e interfaces líquidas. A mesma metodologia também é usada para gerar configurações de docking de um ligante pequeno em uma proteína, mostrando ser uma técnica poderosa também na busca espacial de interações efetivas entre pequenas moléculas e proteínas de interesse farmacológico.

Otimização de Larga Escala - Restrições de Caixa - Convergência Global