



E0522

### **ALGORITMOS PARA CÁLCULO DE ESTRUTURA MOLECULAR**

Fernando Nakatani de Oliveira Lopes (Bolsista PIBIC/CNPq), Carlile Campos Lavor (Co-orientadora) e Prof. Dr. Antonio Carlos Moretti (Orientador), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica - IMECC, UNICAMP

Um dos mais importantes problemas da biofísica molecular é a determinação da conformação estrutural de menor energia potencial de uma molécula cuja sequência atômica é conhecida, mas cuja estrutura tridimensional não é conhecida. Neste trabalho foi produzido um método que permite a visualização do valor de "energia" de diversas estruturas moleculares calculadas segundo parâmetros fornecidos. Esse método é capaz de levar um espaço n-dimensional para um espaço unidimensional (conjunto dos números naturais) através da discretização dos ângulos de torção que descrevem completamente um homopolímero e do cálculo das estruturas através de uma árvore de busca. Junto com esse método, foi produzido um algoritmo capaz de produzir estruturas semelhantes a uma estrutura conhecida, em termos do RMSD. Os testes realizados mostraram que com esse algoritmo é possível obter diversas estruturas diferentes da fornecida, porém com valores de RMSD próximos de zero quando calculados em relação à estrutura dada.

Energia potencial molecular - Problema de geometria molecular - Minimização global