



E0415

### **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 - IFGW, UNICAMP

Uma área importante na pesquisa de sistemas orgânicos é o design de compostos para aplicações específicas. Exemplos típicos dessas aplicações são o desenvolvimento de enzimas por engenharia genética, novos catalisadores e agentes anticancerígenos. O design desses compostos implica um conhecimento detalhado da estrutura tridimensional, ou seja, da determinação da estrutura conformacional de menor energia livre. Supondo-se que a estrutura nativa de uma molécula corresponda a uma conformação para a qual a energia está próxima do mínimo global, o problema da determinação da conformação molecular pode ser formulado como um problema clássico de otimização. Nesse trabalho abordamos o problema do enovelamento de proteínas, que consiste na minimização da energia conformacional, utilizando simulações feitas com um algoritmo genético associado a um modelo HP de rede cúbica 3d. O algoritmo genético é um algoritmo de otimização com operadores inspirados na biologia, especialmente na teoria da evolução de Darwin, e a rede cúbica é uma simplificação bastante utilizada na literatura. No modelo HP, reduzimos os aminoácidos a dois grupos, hidrofóbico ou polar, e tratamos da interação entre eles. Os resultados obtidos foram comparados favoravelmente com outros resultados da literatura dentro do mesmo problema.

Simulação computacional - Algoritmos genéticos - Folding de proteínas