GROMACS WORKFLOW: UMA FERRAMENTA PARA EXECUÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR

Luisa Cornetet, Karina Machado

Ciências Exatas e da Terra – Ciência da Computação
Metodologia e Técnicas da Computação

Palavras Chave: Bioinformática, Dinâmica Molecular.

Resumo

Atualmente a computação tem sido aplicada a diferentes áreas, em especial na Biologia Molecular, o que pode ser definido como Bioinformática. Entre as muitas áreas de pesquisa da Bioinformática, uma delas é o entendimento sobre o comportamento de macromoléculas, como proteínas e enzimas. Esse comportamento pode ser modelado por programas de simulação de dinâmica molecular (DM) como o GROMACS, que geram um conjunto de diferentes estruturas de uma determinada proteína ao longo do tempo. Essa simulação do comportamento de moléculas receptoras é importante, por exemplo, para a busca de novos fármacos. Para a utilização do software GROMACS é necessária a preparação dos arquivos envolvidos e a execução de uma série de programas, um após o outro. Ou seja, é um trabalho repetitivo, mas que traz muitas dificuldades para profissionais que não são da área da computação. Este projeto tem por objetivo o desenvolvimento de uma ferramenta para modelar e automatizar o processo de execução de uma DM de forma a torná-lo mais simples de ser executado por profissionais de diferentes áreas. Até o momento todas as etapas envolvidas, assim como os respectivos parâmetros necessários já foram definidos, estando a ferramenta em fase final de implementação com o *framework* QT. Esse *framework* permite um fácil desenvolvimento da interface gráfica, onde atualmente a maioria das etapas já estão validadas. Além do mais, a ferramenta contará com um banco de dados, que permitirá o registro de como cada experimento científico foi realizado e todos os parâmetros considerados. Como estudo de caso, o projeto tem como alvo a DM da proteína InhA do *Mycobacteruim Tuberculosis,* uma importante enzima do mecanismo de ação da tuberculose.