

**WORKFLOW CIENTÍFICO PARA EXECUÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR:
MÓDULO DE ANÁLISE DE RESULTADOS**

GOMES, Douglas (autor/es)
CORNETET, Luisa (autor/es)
MACHADO, Karina S. (orientador)
douglaschelsea@msn.com

Evento: Congresso de Iniciação Científica
Área do conhecimento: Ciências Exatas e da Terra/Ciência da Computação

Palavras-chave: Dinâmica Molecular, Workflows Científico, Gráficos

1 INTRODUÇÃO

O acesso a informações sobre propriedades de macromoléculas biológicas permitiu o desenvolvimento de estudos de simulação por dinâmica molecular (DM) que tem por objetivo simular o comportamento microscópico de átomos em proteínas, fundamentada nos princípios básicos da mecânica clássica.

Existem atualmente diferentes programas utilizados para a simulação por DM, entre os quais o GROMACS (CHRISTEN, 2005) uma ferramenta de acesso e código livre. A geração de uma simulação por DM utilizando o GROMACS envolve uma série de etapas: obtenção do arquivo da proteína, preparação dos arquivos de entrada, solvatação do sistema e limites-barreira, minimização de energia e a fase de produção da DM. Em cada uma das etapas descritas, há uma série de parâmetros e arquivos que precisam ser definidos pelo usuário que está definindo o experimento de simulação por DM. Para automatizar a execução de uma simulação com o GROMACS foi desenvolvido um workflow científico (CORNETET et al. 2011).

O presente trabalho tem como objetivo criar um módulo de análise de resultados da simulação da dinâmica molecular (DM) no workflow já desenvolvido. Esta análise é feita na forma de gráficos e auxiliam o usuário a observar e analisar o comportamento de várias características da simulação por DM executada, como por exemplo: pressão, densidade, temperatura, desvio médio quadrático e raio de giro.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Em condições fisiológicas, as biomoléculas experimentam vários tipos de movimentos e de mudanças conformacionais muitas vezes cruciais para suas funções. Com o avanço de técnicas experimentais tornou-se possível uma visão mais detalhada de diversos processos biológicos pelo acesso a propriedades atômicas de macromoléculas biológicas (van GUNSTEREN, 2006). O acesso a essas informações permitiu o desenvolvimento de simulações por dinâmica molecular na qual o foco principal é o estudo do comportamento de um sistema de partículas em função do tempo (van GUNSTEREN, 2006, CHRISTEN, 2005).

3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

Um dos principais programas que propicia a simulação da DM é o Gromacs, que possui um pacote de ferramentas gratuito e de código aberto, sendo extremamente rápido e ele se tornou um referencial em simulação há quase uma

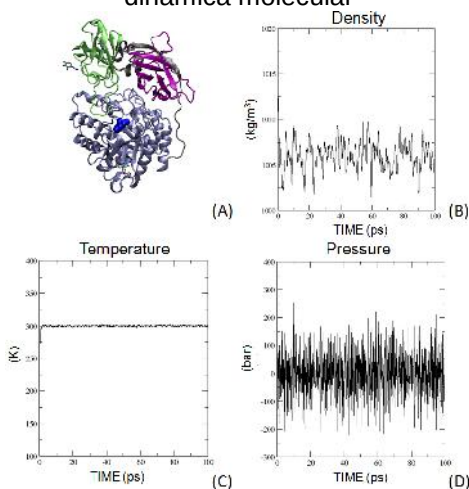
década. Sobressai-se principalmente em simular proteínas e lipídios, e compatível com a maioria dos sistemas operacionais disponíveis (CHRISTEN, 2005)

O Qt Creator é a ferramenta que possibilita o desenvolvimento da interface gráfica do trabalho proposto. A principal linguagem de programação (LP) utilizada no Qt Creator é o C++. A linguagem C++ suporta múltiplos paradigmas e é considerada de nível médio, sendo criada para ser tão eficiente quanto o C, porém com novas funções, apresentando grande flexibilidade. Para a criação da análise gráfica no Qt Creator foi utilizada a biblioteca que possibilite essa função, o Qcustomplot. Com a utilização desta biblioteca é possível plotar gráficos e visualizar dados.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

O resultado parcial do projeto foi à criação de gráficos na interface do Qt Creator a partir da biblioteca encontrada. A Figura 1 (B), (C) e (D) mostram gráficos gerados no módulo de análise incorporado ao workflow desenvolvido e correspondem a resultados de simulação por DM da proteína com estrutura descrita na Figura 1(A).

Figura 1 – Gráficos de análise de resultados gerados no workflow científico para execução de dinâmica molecular



5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados demonstram que a ferramenta desenvolvida auxilia muito os pesquisadores de diferentes áreas na execução de simulações por DM. Com a incorporação do módulo de análise, os pesquisadores não precisarão recorrer a outras ferramentas para avaliar a simulação executada.

REFERÊNCIAS

CHRISTEN, M. et al. The gromos software for biomolecular simulation: Gromos05. J. Comput. Chem., 26(16):1719-1751, 2005.

CORNETET, L. R.; WERHLI, A. V.; MACHADO, K. S. A Scientific Workflow for Performing Molecular Dynamics Simulation. In: Xmeeting 2011. Abstract book, 2011. p. 152-152. 2011

van GUNSTEREN, W. F. Biomolecular Modeling: Goals, Problems, Perspectives. Molecular Dynamics, 45, 4064-4092; 2006.