

SALÃO DE  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA  
**XXIX SIC**  
UFRGS  
PROPESQ



múltipla   
**UNIVERSIDADE**  
inovadora  inspiradora

|                   |   |
|-------------------|---|
| <b>Evento</b>     | Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS           |
| <b>Ano</b>        | 2017  |
| <b>Local</b>      | Campus do Vale  |
| <b>Título</b>     | Predição de estrutura de dissacarídeos utilizando Particle Swarm Optimization |
| <b>Autor</b>      | ALFEU UZAI TAVARES  |
| <b>Orientador</b> | MARCIO DORN   |

# Predição de estrutura de dissacarídeos utilizando Particle Swarm Optimization

Autor: Alfeu Uzai Tavares

Orientador: Márcio Dorn

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Utilizando a meta-heurística Particle Swarm Optimization busca-se determinar a estrutura tridimensional de dissacarídeos. Com os resultados obtidos espera-se mostrar um método alternativo para a solução deste problema, geralmente tratado por simulações de dinâmica molecular. Cada dissacarídeo é formado pela ligação de dois monossacarídeos, sendo que esta ocorre entre átomos de carbono, um de cada monossacarídeo, existindo 5 opções de escolha para os mesmos: C1, C2, C3, C4 e C6. Na nova estrutura formada deseja-se saber os valores dos novos ângulos diedrais que surgem devido à ligação, assim como demais mudanças estruturais causadas. A meta-heurística Particle Swarm Optimization (PSO) é um método computacional que visa otimizar uma função de forma iterativa, por meio da melhora contínua de candidatos à solução, avaliados segundo uma função objetivo. O método consiste em criar um conjunto de partículas, que representam candidatos à solução, avaliá-las segundo a função objetivo e então executar o movimento das partículas usando como informação as melhores posições (soluções) pessoais e globais, ou seja, a melhor solução individual de cada partícula e a melhor dentre todas. O espaço de busca do PSO consiste nos parâmetros de distância de ligações, ângulos de ligações e ângulos diedrais do dissacarídeo em questão, onde suas partículas possuem valor da função objetivo determinadas por uma função de energia para a molécula. No presente momento da escrita deste resumo foram obtidos resultados para todos os casos. Porém, devido à detalhes na implementação, o número de parâmetros otimizados foi pequeno, não sendo possível validar os resultados. Estão sendo feitas modificações no PSO para lidar com maior número de parâmetros e na função de energia para melhor precisão.