



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Predição de estrutura de dissacarídeos utilizando evolução diferencial auto-adaptativa
Autor	ALFEU UZAI TAVARES
Orientador	MARCIO DORN

Predição de estrutura de dissacarídeos utilizando evolução diferencial auto-adaptativa

Autor: Alfeu Uzai Tavares

Orientador: Márcio Dorn

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Utilizando a meta-heurística de evolução diferencial com auto-adaptação de parâmetros 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 (ϕ , ψ e ω em alguns casos) que surgem devido à ligação, assim como demais mudanças estruturais causadas. A meta-heurística evolução diferencial 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. É um método da área de computação evolutiva, onde soluções candidatas passam iterativamente pelo processo de avaliação por uma função objetivo, mutação, recombinação e seleção. Tal processo busca encontrar soluções que minimizem a função objetivo. A auto-adaptação de parâmetros remove do usuário a responsabilidade de configurar os mesmos para obter um bom desempenho. Foi implementada o campo de força GROMOS para ser usado como função objetivo. As soluções candidatas são representadas por distâncias de ligações, ângulos e ângulos diedrais dos dissacarídeos. Os resultados obtidos se mostraram consistentes entre várias execuções, encontrando estruturas válidas e com baixo valor de energia. Entretanto, ao comparados com resultados obtidos por dinâmica molecular utilizando o GROMACS muitos são diferentes, possivelmente pela ausência de solvente (explícito e implícito) na função de energia utilizada pela evolução diferencial.