

198

DADOS DE SIMULAÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR COM VISUALIZAÇÃO ATRAVÉS DOS ESTADOS DE UMA REDE NEURAL. *Eduardo Schnurr Siqueira, Adelmo Luis Cechin (orient.)* (UNISINOS).

A simulação por Dinâmica Molecular (DM) é uma técnica computacional utilizada na investigação do comportamento de moléculas biológicas, como proteínas e DNAs. Trata-se de um processo onde se estuda os movimentos de um sistema de partículas simulando e analisando sua evolução temporal, diante de uma enorme rotina de cálculos, que incluem um potencial de interação e as leis de Newton. Estes cálculos são refeitos a cada passo da simulação, gerando assim horas de processamento. Em uma simulação realizada com a proteína 1acw imersa em moléculas de água formando um sistema molécula-solvente contendo 1000 partículas, consumiram em uma máquina Xeon 3.0 Ghz, aproximadamente 30 horas de processamento, para simular um nanosegundo de dinâmica da molécula, o que dificulta um estudo mais detalhado, uma vez que eventos importantes como dobramento de proteínas, ocorrem na escala dos micro segundos. Neste trabalho investigamos a capacidade de implementação de Redes Neurais Artificiais (RNAs), no processo de simulação, mais especificamente Redes Neurais Recorrentes (RNR), por tratar-se de uma evolução temporal. Desta forma, buscamos estudar a capacidade das RNAs para “aprender” o comportamento temporal de uma molécula submetida à simulação por DM e analisar a viabilidade de extração de conhecimento sobre este aprendizado obtendo assim modelos mais simples de representação molecular.