

153

MODELAGEM E SIMULAÇÃO EM BIOLOGIA COMPUTACIONAL E BIOINFORMÁTICA.

Klaus Stertz, Adelmo Luis Cechin (orient.) (UNISINOS).

Um dos maiores objetivos da Bioinformática é entender a relação entre a seqüência de aminoácidos de uma proteína e a sua estrutura. Se esta relação for conhecida, então a estrutura de uma proteína pode ser prevista de modo seguro. Lamentavelmente, a relação entre a seqüência e estrutura não é tão simples. No contexto da determinação da estrutura de proteínas, onde o número de seqüências é muito superior ao número de estruturas já determinadas, a utilização de Redes Neurais Artificiais mostra-se uma técnica adequada. A explicação para tal reside no fato das Redes Neurais Artificiais aprenderem a partir dos exemplos recebidos e exibirem uma capacidade de generalizar este aprendizado para dados ainda não vistos. Essa característica faz dessa técnica uma ótima candidata a processar dados de domínios os quais se tenha pouco ou incompleto conhecimento do problema a ser resolvido, mas onde existam dados de treinamento suficientes para a projeção de um modelo. No caso, são utilizados Bancos de Dados de estruturas tridimensionais já determinadas, como o PDB (*Protein Data Bank*). Esse trabalho apresenta uma nova metodologia para obtenção de Redes Neurais Artificiais como metamodelos de simulação de forma automatizada. A obtenção de um modelo clássico ou neural exige que o usuário componha um projeto experimental, execute as simulações e calcule os parâmetros do modelo. Este processo é realizado em *batch* e baseado na experiência anterior com o processo e no espaço onde se deseja que o modelo apresente um bom desempenho. A automatização deste processo representa assim um ganho de tempo para o usuário no planejamento do experimento e de performance do modelo, cujo desempenho em regiões complexas é melhorado.