

# Predição de Estrutura Terciária de Proteína

Nilcimar Neitzel Will



Programa de Pós-Graduação  
em Computação Aplicada -  
UDESC



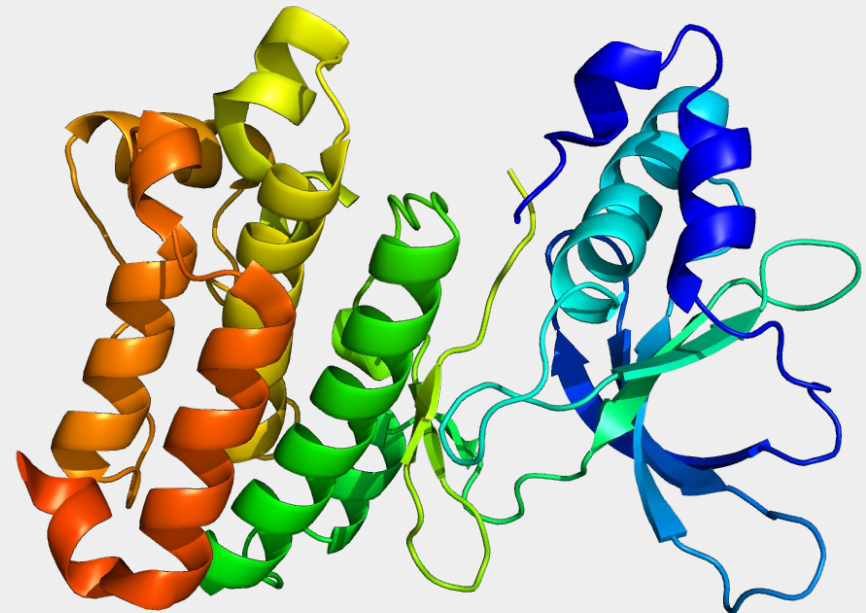
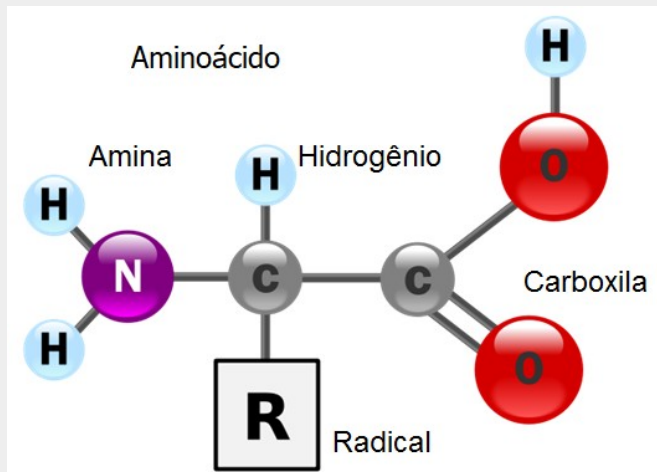
# O que são Proteínas

Proteínas são macromoléculas que realizam funções essenciais a vida como: transporte de oxigênio, catálise, funções de defesa, hormonal, estrutural, entre outras.

São formadas por aminoácidos.

Existem 20 tipos de aminoácidos conhecidos.

Cada proteína possui uma sequência única.



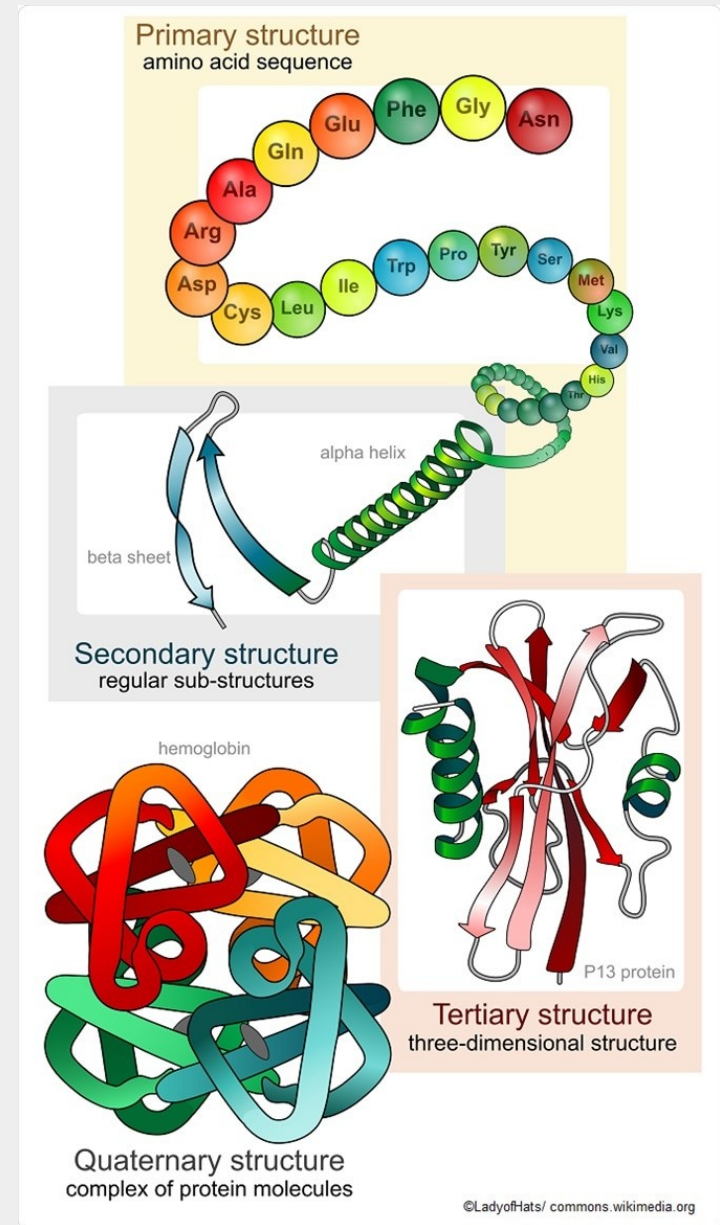
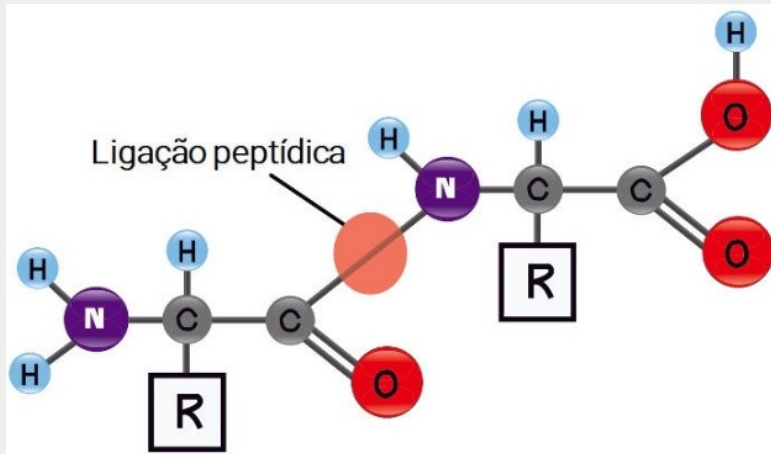
# Estrutura de Proteína

Por que estrutura terciária?

Sua função é desenvolvida ao assumir sua estrutura terciária.

Motivação:

Importante para o desenvolvimento de medicamentos e cura de certas doenças.



# Como fazer a predição?

Técnicas experimentais:

- Cristalografia por difração de raios X e
- Ressonância magnética nuclear.

São muito caras, demoradas e sem garantia de sucesso.

Métodos computacionais:

- Redes neurais, Deep learning
- Metaheurísticas

É um problema em aberto na Bioinformática há mais de 20 anos.

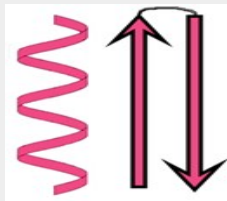
# Proposta de Solução

Metaheurística

Algoritmo: jDE

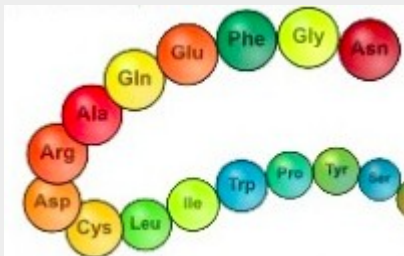
Função objetivo: minimizar a energia da proteína

Informação do problema



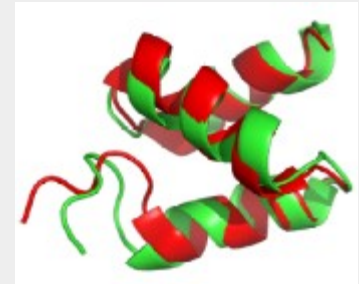
Fragmentos de  
estrutura secundária

Entrada



jDE

Saída



# Recapitulando...

- As proteínas realizam funções essenciais a vida.
- Prever a estrutura 3D de uma proteína nos fornece informações para o desenvolvimento de medicamentos e cura de doenças.
- Proposta: prever a estrutura terciária através da estrutura primária utilizando informações da estrutura secundária para reduzir o espaço de busca.