

## Atualização do AutoModel para Modelagem Molecular e descoberta de Fármacos

A bioinformática estrutural possui um papel crucial na identificação de candidatos a fármacos com potencial terapêutico e na redução dos custos associados ao processo. A obtenção de estruturas tridimensionais de proteínas representa um grande desafio devido à complexidade e aos custos dos métodos experimentais, o que leva à utilização de ferramentas computacionais para a predição de estruturas a partir de sequências de aminoácidos. Tradicionalmente, a modelagem por homologia tem sido amplamente utilizada. No entanto, ferramentas de predição que empregam inteligência artificial, como o AlphaFold, estão ganhando destaque. Neste cenário, no LQFPP/CBB/UENF, foi desenvolvido o AutoModel, que utiliza a técnica modelagem por homologia e oferece uma interface simples e amigável para usuários com pouca experiência na área. No entanto, a versão atual do AutoModel apresenta limitações de funcionalidade e instalação, sendo compatível apenas com Linux e utilizando bibliotecas desatualizadas desde 2013. Este projeto tem como objetivo desenvolver uma versão web atualizada do AutoModel com uma interface gráfica aprimorada, utilizando os frameworks Django, Shiny e virtualenv. O AutoModel também será integrado como uma etapa de pré-processamento do HTP SurflexDock, um software para busca e identificação de candidatos a fármacos, também desenvolvido no LQFPP/CBB/UENF. Espera-se que com a realização das melhorias propostas no AutoModel pesquisadores e usuários deste tipo de ferramenta sejam beneficiados, facilitando os avanços científicos na compreensão e no desenvolvimento de novas moléculas terapêuticas.

=====

=====