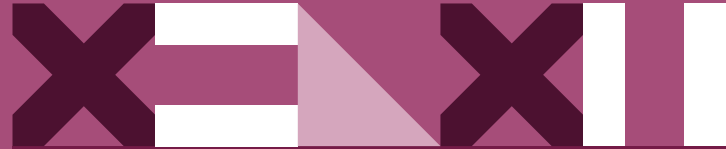




GENOMICS / PROTEOMICS

Quais as principais técnicas para predição da estrutura molecular de proteínas?

Ciência e Visualização de Dados em Saúde (IA386X)
prof. André Santanchè (IC)
prof. Paula Dornhofer Paro Costa (FEEC)



ESTUDO

Quais as principais técnicas para predição da estrutura molecular de proteínas?

CRITÉRIOS

- Google Acadêmico
- PubMed

FONTES

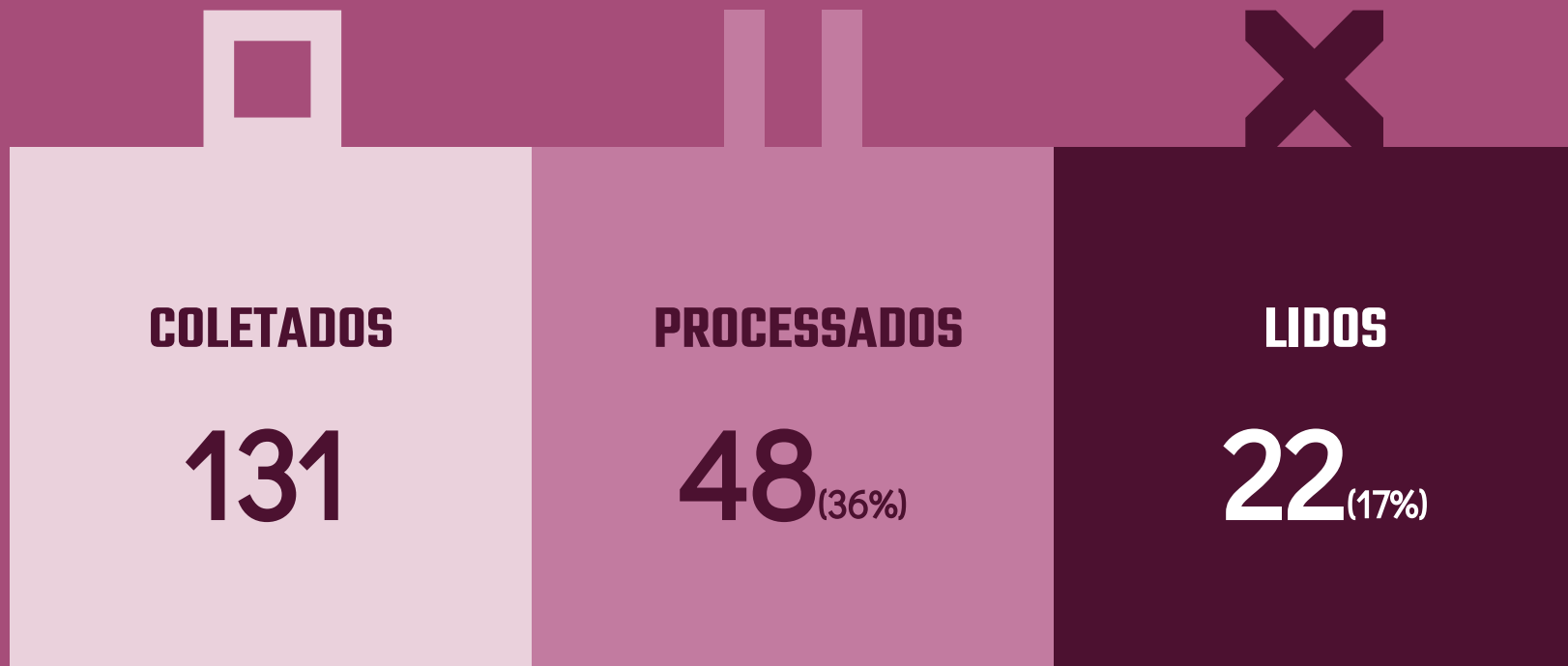
- “protein structure prediction”
- “protein structure modeling”
- automated "protein structure determination"

TERMOS

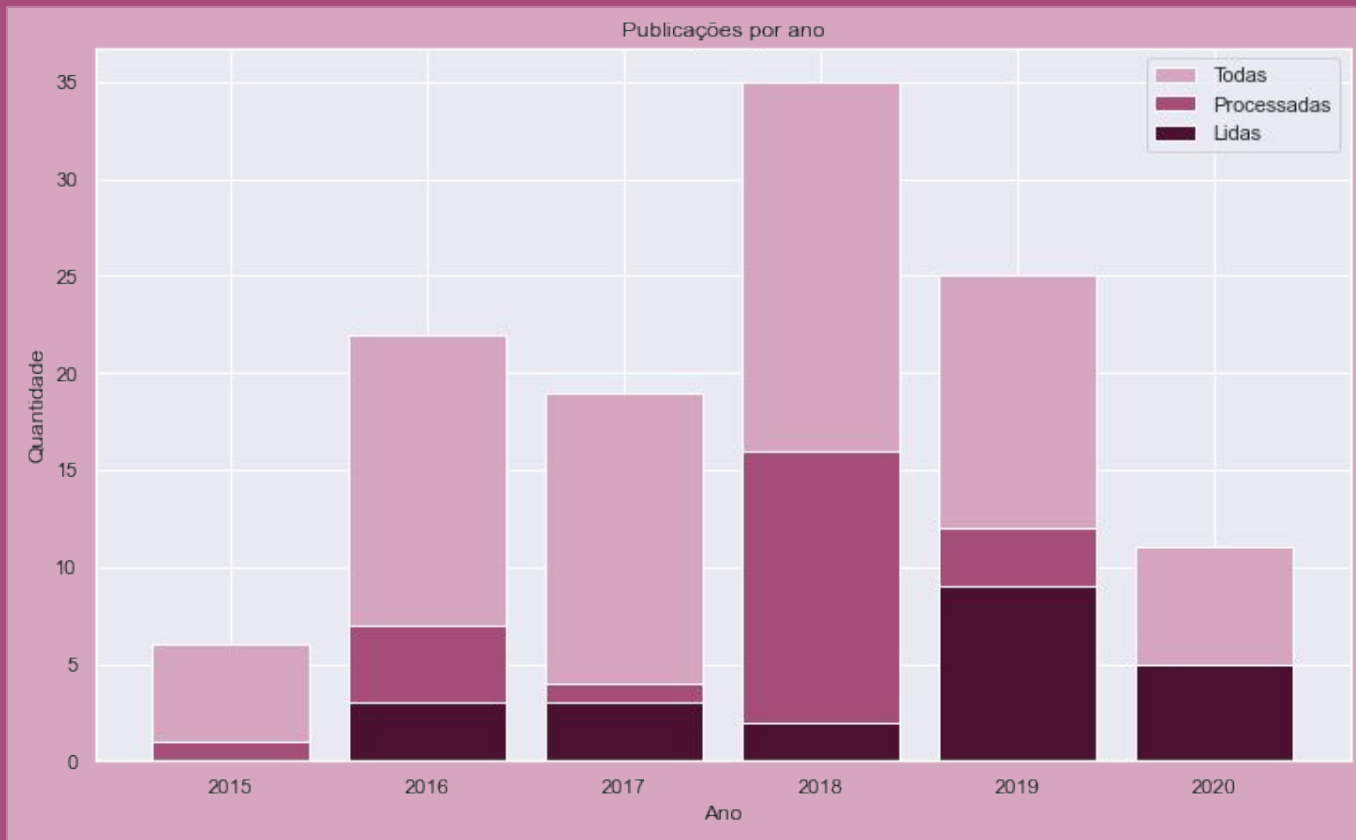
- Google Scholar: Desde 2016, classificar por relevância, sem patentes e citações, primeiros 20 resultados
- PubMed: 2015-2020, classificar por relevância (best match), Texto completo (Full Text), primeiros 20 resultados

BUSCA E ORDENAÇÃO

PESQUISA



PESQUISA



MOTIVAÇÃO



Motivos para se estudar a predição da estrutura de proteínas:

- Criação de novos fármacos;
- Terapias genéticas mais eficientes;
 - Melhorias e alterações metabólicas no organismo;
- Outros tipos de interações do organismo.

MÉTODOS DE PREDIÇÃO

ab initio

Métodos que buscam criar estruturas 3D de proteínas do zero (from scratch) baseados em princípios físicos.



Template-based

Métodos que buscam por estruturas proteicas similares em bases de dados (PDB)

CASP

Critical assessment of methods of protein structure prediction

01.

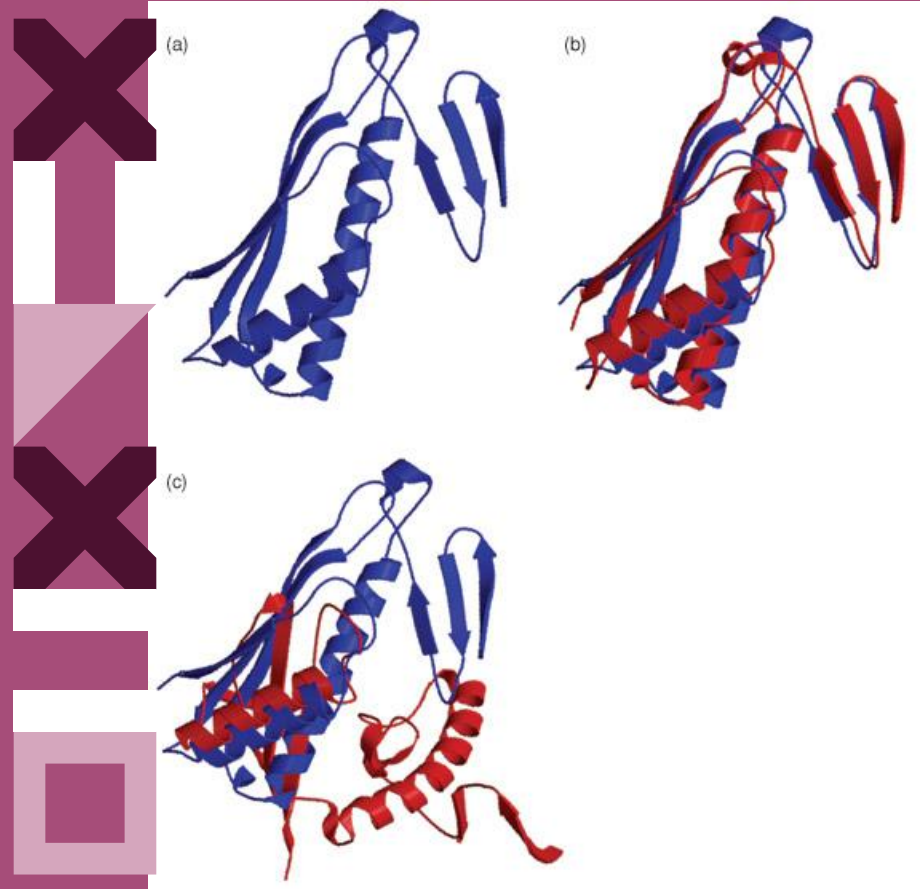
“Competição” **bienal** cujo objetivo é identificar o progresso que acontece na área de predição de proteínas.

02.

Iniciou em **1994** (CASP1) e em 2020 esta acontecendo o CASP14.

03.

Subsidiado pelo US National Institute of General Medical Sciences (NIH/NIGMS)



CASP 6 exemplo: (a) TM0919 proteína; (b) boa predição; (c) predição ruim

MODELOS

COMPUTACIONAIS



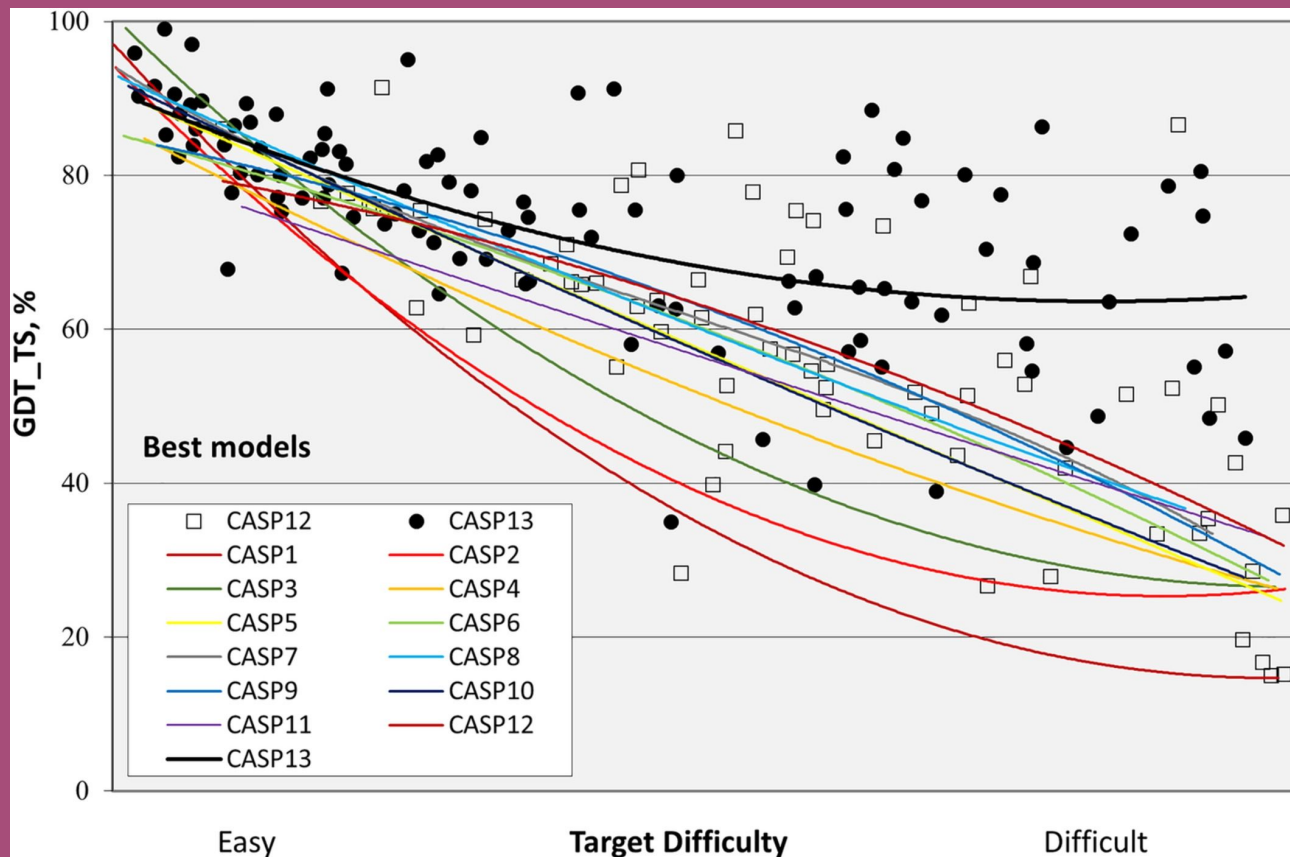
ab initio

- AlphaFold
- RaptorX
- QUARK
- Rosetta

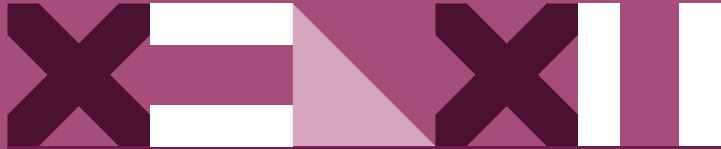
Template-based

- I-TASSER
- Phyre2
- AWSEM-Suite
- MODELLER

EVOLUÇÃO DAS PREDIÇÕES (CASP)

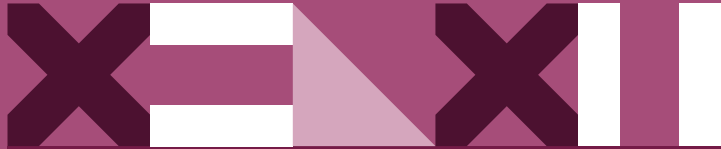


TÉCNICAS FÍSICAS



- X-ray crystallography
- NMR spectroscopy
- cryo-electron microscopy (cryo-EM)

BANCO DE DADOS



- PDB (Protein Data Bank)
- MALIDUP
- MALISAM
- HOMSTRAD
- ...

CONSIDERAÇÕES FINAIS



MODELOS

Modelos de Deep Learning e modelos híbridos (template-base + ab initio)



INSTITUIÇÕES E EMPRESAS

Zhang Lab
Universidade de Chicago
Google (Deep Mind)
...



DADOS

A técnica cryo-EM promete aumentar em grande quantidade o mapeamento de novas estruturas de proteínas, aumentando assim os datasets.



BIOINFORMÁTICA

Área que tem tendência a entrar em vigor novamente devido a avanços nas áreas biológicas (dados) quanto computacionais (hardware + software)



ÁREA

Empresas como o Google podem fomentar mais inovação e competitividade



FUTURO

ab initio, principalmente, tem muito a ser explorado.

OBRIGADO

Perguntas, só entrar em contato:

Rodolfo De Nadai - RA: 208911

rdenadai@gmail.com

[@rdenadai](#)

www.rdenadai.com.br

Zotero:

<https://www.zotero.org/rdenadai/collections/6WDHP79S>

Blog:

<http://www.rdenadai.com.br/blog/view/review-protein-structure-prediction.html>

CREDITS: This presentation template was created by **Slidesgo**, including icons by **Flaticon**, and infographics & images by **Freepik**

Please keep this slide for attribution

