

VIII SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA

XXVI Semana de Iniciação Científica da URCA

04 a 09 de dezembro de 2023

Tema: "INTERIORIZAÇÃO DA CIÊNCIA E REDUÇÃO DE ASSIMETRIAS: O PAPEL DOS PIBIC'S COMO EXPERIÊNCIA DE ARTICULAÇÃO DA PESQUISA NA GRADUAÇÃO E NA PÓS GRADUAÇÃO"



APRENDIZAGEM DE MÁQUINA NA CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS DE GPCRs

Francisco Isac Soares Leite¹, Rubem Francisco Silva Bezerra², Diniz Maciel de Sena Júnior³

Resumo: Receptores acoplados à proteína G (GPCRs) compõem uma grande família de receptores de membrana, sendo responsáveis por funções como a transmissão de sinais extracelulares para o interior da célula. Os GPCRs são divididos em algumas classes, sendo a classe A a que possui maior quantidade de representantes. Esses receptores possuem semelhanças estruturais, como sete hélices transmembranares ligadas através de alças intra e extracelulares. Como membro desta classe está o receptor μ -opióide (MOR), principal alvo da morfina, sendo este relacionado à regulação de processos fisiológicos, como a sinalização da dor. Os GPCRs, ao serem ativados, passam por mudanças conformacionais marcantes, que podem ser observadas em simulações computacionais. Várias técnicas podem ser utilizadas para avaliar o grau de ativação de um GPCR, entre elas a aprendizagem de máquina (ML). Assim, o objetivo deste trabalho é implementar técnicas de ML em análises de dados provenientes de simulações de dinâmica molecular (MD). Utilizando um protocolo publicado na literatura, trajetórias de MD envolvendo o MOR, tanto na forma apo quanto ligado a agonistas, serão analisadas para identificar a probabilidade de ativação do receptor em cada quadro. Estes resultados serão comparados com outras metodologias empregadas anteriormente. Espera-se compreender a grande variedade de conformações relacionadas ao estado de ativação dos GPCRs, bem como comparar os dados deste modelo com os dados de metodologias já utilizadas. Além disso, com este trabalho, espera-se poder entender as técnicas de aprendizado de máquina e estender a metodologia utilizada para diferentes áreas, como outros tipos de simulação computacional e outros estudos relacionados à ciência a nível molecular. É de grande valor entender a família de proteínas representadas pelos GPCRs, bem como as suas respectivas classes, em diferentes estudos, desde as simulações computacionais até a descoberta de novas drogas. Ademais, o uso de técnicas de aprendizado de máquina possibilita um maior entendimento no que diz respeito a essa área que está em constante crescimento e evolução.

¹ Universidade Regional do Cariri, email: isac.leite@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: rubem.bezerra@ufca.br

³ Universidade Regional do Cariri, email: dnz@urca.br

VIII SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVI Semana de Iniciação Científica da URCA

04 a 09 de dezembro de 2023

Tema: "INTERIORIZAÇÃO DA CIÊNCIA E REDUÇÃO DE ASSIMETRIAS: O PAPEL DOS PIBIC'S COMO EXPERIÊNCIA DE ARTICULAÇÃO DA PESQUISA NA GRADUAÇÃO E NA PÓS GRADUAÇÃO"



Palavras-chave: Inteligência artificial. Opióides. Dinâmica molecular.

Agradecimentos: CNPq.