



APRENDIZAGEM DE MÁQUINA NA CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS DO RECEPTOR μ -OPIÓIDE

Hiúre Hipólito Matos¹, Diniz Maciel de Sena Junior²

Resumo: Os receptores acoplados à proteína G (GPCRs) são proteínas de membrana responsáveis por transmitir sinais do meio exterior para o interior da célula. Dentre todas as classes existentes, a mais abundante é a classe A. A semelhança estrutural entre os membros de uma classe é notável, todos apresentam um emaranhamento composto de diversas hélices transmembranares, que são interligadas por alças intra e extracelulares. Vários resíduos são conservados entre eles, de modo que uma notação, desenvolvida por Ballesteros e Weinstein permite a comparação de resíduos equivalentes de diferentes receptores da mesma classe. No momento de sua ativação, estes receptores passam por alterações bem documentadas na estrutura, que podem ser observadas em simulações de dinâmica molecular. Os dados obtidos nestas simulações podem ser tratados com técnicas de Inteligência Artificial, permitindo obter informações que transcendem a compreensão humana. Neste trabalho pretende-se utilizar a aprendizagem de máquina, uma sub-área da inteligência artificial, para análise e tratamento de dados provenientes de simulações de dinâmica molecular realizadas com o receptor μ -opióide. Serão utilizados protocolos existentes na literatura com o objetivo de classificação das estruturas observadas nas simulações de acordo com seu grau de ativação, em um processo que requer menor intervenção humana. Os dados obtidos poderão ser comparados com resultados de análises prévias, que empregaram outros métodos. Espera-se com isso estabelecer uma metodologia de tratamento de dados que facilite a análise, contribuindo para a formação de recursos humanos em uma área que está em crescente evolução. As técnicas aqui empregadas poderão, futuramente, ser empregadas em outras áreas fomentando a interdisciplinaridade da pesquisa.

Palavras-chave: Análise estrutural. Dinâmica molecular. Análise de dados. Inteligência artificial.

Agradecimentos:

Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio concedido por meio do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC).

¹ Universidade Regional do Cariri, e-mail: hiured3x.matos@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, e-mail: dnz@urca.br

X SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVIII SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA
10 a 14 de NOVEMBRO de 2025

Tema: "UNIVERSIDADE E SOCIEDADE NA AGENDA 2030"

