

# Algoritmos Genéticos de Múltiplas Soluções para Análise Conformacional de Monossacarídeos

Aline R.Portella<sup>1</sup> (IC)\*, Clarissa O. da Silva<sup>1</sup>(PQ), Camila S. de Magalhães<sup>2</sup> (PQ)

\*line\_rprj@oi.com.br

<sup>1</sup> Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, BR 465, Km 7, Seropédica – RJ.

<sup>2</sup> Universidade Federal do Rio de Janeiro, Polo Xerém, Estrada de Xerém 27, Duque de Caxias – RJ.

Palavras Chave: Algoritmos Genéticos, Análise Conformacional, Carboidratos.

## Introdução

Um dos problemas importantes em química computacional consiste na determinação e no estudo de conformações energeticamente favoráveis de carboidratos, que possam ajudar no estudo de interações intermoleculares relevantes para o tratamento de doenças.

Devido à alta flexibilidade conformacional destas moléculas, se faz necessário o uso de algoritmos com potencial para investigar efetivamente um grande número de soluções possíveis, a fim de que soluções com relevância biológica sejam encontradas. Neste trabalho, o algoritmo AGSS-MRTS<sup>1</sup> foi adaptado e aplicado ao problema de análise conformacional de monossacarídeos. O AGSS-MRTS é um programa que implementa um algoritmo genético (AGSS) e utiliza o campo de forças molecular clássico MMFF94. O desempenho do algoritmo foi avaliado na identificação de conformações energeticamente favoráveis das moléculas D-Xilopiranoose e Lixose.

## Resultados e Discussão

O algoritmo AGSS-MRTS modificado foi testado para a análise conformacional da D-Xilopiranoose e Lixose. O desempenho do algoritmo foi avaliado comparando-se as conformações encontradas pelo AGSS-MRTS com as obtidas utilizando-se cálculos de *single point* e otimização de geometria<sup>2</sup>.

**Tabela 1.** Resultados para D-Xilopiranoose.

Experimentos		Taxa de Sucesso (TS) - %			
EXP <sup>3</sup>	NA <sup>3</sup>	Alfa		Beta	
		≤ 50 <sup>1</sup>	≥ 50 <sup>2</sup>	≤ 50 <sup>1</sup>	≥ 50 <sup>2</sup>
1	1000	57,1	100	88,9	100
2	2000	78,6	100	83,3	100
3	3000	71,4	100	66,7	100

<sup>1</sup>TS com as 50 melhores soluções em relação à energia intramolecular; <sup>2</sup>TS com todas as soluções encontradas. <sup>3</sup>EXP- número do experimento, NA- número máximo de avaliações; 30 rodadas.

No trabalho de Andrade et al., foram encontradas 14 conformações distintas para o anômero alfa da

D-xilopiranoose, e 18 conformações distintas para o anômero beta. Para a Lixose (dados não publicados), foram encontradas 19 conformações para o anômero alfa e 14 para o anômero beta. Três experimentos com variação do número de avaliações de função energia (NA) foram realizados para cada anômero de cada molécula. O algoritmo obteve taxa de sucesso significativa em encontrar conformações energeticamente favoráveis das duas moléculas. Os melhores resultados foram obtidos para a D-Xilopiranoose, com taxa de sucesso maior do que 70% na maioria dos casos. Para a Lixose, os melhores resultados foram obtidos com o experimento 1, com taxa de sucesso maior do que 57%.

**Tabela 2.** Resultados para Lixose

Experimentos		Taxa de Sucesso (TS) - %			
EXP <sup>3</sup>	NA <sup>3</sup>	Alfa		Beta	
		≤ 50 <sup>1</sup>	≥ 50 <sup>2</sup>	≤ 50 <sup>1</sup>	≥ 50 <sup>2</sup>
1	1000	57,9	57,9	57,1	57,1
2	2000	15,8	15,8	71,4	71,4
3	3000	31,6	31,6	42,9	42,9

<sup>1</sup>TS com 50 melhores soluções em relação à energia intramolecular; <sup>2</sup>TS com todas as soluções encontradas. <sup>3</sup>EXP- número do experimento, NA- número máximo de avaliações; 30 rodadas.

## Conclusões

O algoritmo AGSS-MRTS apresentou resultados promissores em comparação aos obtidos com métodos mais sofisticados e caros computacionalmente<sup>2</sup>. Taxas de sucesso elevadas foram obtidas para a D-Xilopiranoose. Análises com diferentes estratégias em algoritmos genéticos estão em andamento visando melhorar os resultados.

## Agradecimentos

À Faperj pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup>De Magalhães, C.S., Barbosa, H.J.C., Dardenne, L.E. Selection-Insertion Schemes in Genetic Algorithms for the Flexible Ligand Docking Problem. Lecture Notes in Computer Science. **2004**, 3102:368-379.

<sup>2</sup>Andrade R.R. and Silva C.O., On the Route of the Determination of Monosaccharides Conformations, Mini-Reviews in Organic Chemistry. **2011**, 8:239-248.