
Algoritmo evolutivo de muitos objetivos para
predição ab initio de estrutura de proteínas

Christiane Regina Soares Brasil

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Algoritmo evolutivo de muitos objetivos para predição ab initio de estrutura de proteínas

Christiane Regina Soares Brasil

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Cláudio Botazzo Delbem

Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de
Computação - ICMC-USP, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Doutor em Ciências - Ciências de
Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO
REVISADA.*

USP – São Carlos
Julho de 2012

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

B823a Brasil, Christiane Regina Soares
Algoritmo Evolutivo de Muitos Objetivos para
Predição Ab Initio de Estrutura de Proteínas /
Christiane Regina Soares Brasil; orientador
Alexandre Cláudio Botazzo Delbem. -- São Carlos,
2012.
125 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Ciências de Computação e Matemática Computacional) --
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, 2012.

1. Predição de estruturas de proteínas. 2.
Otimização Multiobjetivo. 3. Modelo puramente ab
initio. I. Delbem, Alexandre Cláudio Botazzo,
orient. II. Título.

Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, a Deus por tudo, a começar pelo dom da vida. A Ele, toda minha gratidão. *"O Senhor vai acendendo as lâmpadas diante de nós, à medida que delas necessitamos"* - T. Alberione.

A minha família, pelo profundo amor e intenso incentivo aos estudos desde a infância, meus pais Reginaldo e Fátima, e irmãs Cintia, Tatyane e Keyna. Desde meus primeiros erros, é o amor deles que me encoraja na busca pelo melhor de mim mesma. *"Sim, todo amor é sagrado, e o fruto do trabalho é mais que sagrado"* - B. Guedes.

Ao meu namorado Rafael, por todo amor, estímulo e compreensão, amizade e cumplicidade. Pelo amor que é para mim. *"Com minhas letras e canções, com o perfume das manhãs, com a chuva dos verões, com o desenho das maçãs, com você me sinto bem. Eu, pensando em você..."* - P. Moska.

Aos meus amigos, grandes tesouros na minha vida, Karen, Valéria(s), Rodrigo, Bruno, Mayron, Ludmila, Erinaldo, Daniel, Marcilyanne, colegas de laboratório, companheiros de música, irmãos de fé. *"Amigo é coisa pra se guardar debaixo de sete chaves dentro do coração"* - M. Nascimento.

Ao meu professor e orientador Alexandre Cláudio Botazzo Delbem, que tanto me ensina. *"Você pode encarar um erro como uma besteira a ser esquecida, ou como um resultado que aponta uma nova direção"* - S. Jobs.

À banca examinadora, Hélio J. C. Barbosa, Ricardo H. C. Takahashi, Fernando L. B. da Silva e Ivan N. da Silva, pelas sugestões enriquecedoras.

Aos funcionários do ICMC, em especial ao serviço de pós-graduação e aos vigilantes do instituto.

Por fim, agradeço à FAPESP, pelo suporte financeiro essencial a este trabalho.

*“Há duas formas para se viver a vida:
uma é acreditar que não existe milagre.
A outra é acreditar que todas as coisas
são um milagre” - Albert Einstein*

Resumo

Este trabalho foca o desenvolvimento de algoritmos de otimização para o problema de PSP puramente *ab initio*. Algoritmos que melhor exploram o espaço de potencial de soluções podem, em geral, encontrar melhores soluções. Esses algoritmos podem beneficiar ambas abordagens de PSP, tanto o modelo *ab initio* quanto os baseados em conhecimento a priori. Pesquisadores tem mostrado que Algoritmos Evolutivos Multiobjetivo podem contribuir significativamente no contexto do problema de PSP puramente *ab initio*. Neste contexto, esta pesquisa investiga o Algoritmo Evolutivo Multiobjetivo baseado em Tabelas aplicado ao PSP puramente *ab initio*, que apresenta interessantes resultados para proteínas relativamente simples. Por exemplo, um desafio para o PSP puramente *ab initio* é a predição de estruturas com folhas- β . Para trabalhar com tais proteínas, foi desenvolvido procedimentos computacionalmente eficientes para estimar energias de ligação de hidrogênio e solvatação. Em geral, estas não são consideradas no PSP por abordagens que combinam métodos de otimização e conhecimento a priori. Considerando somente van der Waals e eletrostática, as duas energias de interação que mais contribuem para a definição da estrutura de uma proteína, com as energias de ligação de hidrogênio e solvatação, o problema de PSP tem quatro objetivos. Problemas combinatórios (tais como o PSP), com mais de três objetivos, geralmente requerem métodos específicos capazes de lidar com muitos critérios. Para resolver essa limitação, este trabalho propõe um novo método para a otimização dos muitos objetivos, chamado Algoritmo Evolutivo Multiobjetivo com Muitas Tabelas (AEMMT). Esse método executa uma amostragem mais adequada do espaço de funções objetivo e, portanto, pode mapear melhor as regiões promissoras deste espaço. A capacidade de lidar com muitos objetivos capacita o AEMMT a utilizar melhor a informação oriunda das energias de solvatação e de ligação de hidrogênio, e então predizer estruturas com folhas- β e algumas proteínas relativamente mais complexas. Do ponto de vista computacional, o AEMMT é um novo método que lida com muitos objetivos (mais de dez) encontrando soluções relevantes.

Gracias por visitar este Libro Electrónico

Puedes leer la versión completa de este libro electrónico en diferentes formatos:

- HTML(Gratis / Disponible a todos los usuarios)
- PDF / TXT(Disponible a miembros V.I.P. Los miembros con una membresía básica pueden acceder hasta 5 libros electrónicos en formato PDF/TXT durante el mes.)
- Epub y Mobipocket (Exclusivos para miembros V.I.P.)

Para descargar este libro completo, tan solo seleccione el formato deseado, abajo:

