



## Desenvolvimento de servidor semi-automático de modelagem molecular

João Luiz de Almeida Filho, Jorge Hernandez Fernandez

### RESUMO

Introdução: Devido ao grande volume de dados que é gerado atualmente pela biologia, o computador se tornou uma ferramenta fundamental para os pesquisadores desta área. A cada dia novas ferramentas para organização e análise desses dados são criadas, embora a maioria voltada para o pesquisador com maior domínio da linguagem computacional. Com o objetivo de facilitar o uso da modelagem molecular para leigos, estamos criando o serviço-web AutoModel. Objetivos: A finalidade do AutoModel é ser um serviço multiusuário disponível pela internet a pesquisadores de todo o mundo para desenvolver a modelagem molecular por homologia através de uma interface gráfica simples e fácil de usar, utilizando como base o programa Modeller. Metodologia: Para o desenvolvimento do AutoModel o dividimos em duas camadas: uma camada "Servidor" que é instalada em um dos servidores do LQFPP e outra camada "Cliente" que é executada nos computadores dos usuários. A camada "Servidor" é responsável por receber chamadas dos clientes, fazer o processamento no Modeller versão 9v8 e devolver os resultados para os usuários. Na camada "Cliente" o usuário manipula interativamente toda a modelagem através de uma interface gráfica desenvolvida em WxPython. Ambas camadas foram criadas usando a linguagem de programação Python e para comunicação entre elas foi utilizada a biblioteca RPyC. A utilização da linguagem Python permite que o cliente seja executado em qualquer Sistema Operativo. O servidor ainda possui o programa PROCHECK que permite que o usuário faça uma análise qualitativa da modelagem. Resultados: O AutoModel foi testado por alunos da PG-CBB e a modelagem utilizando o serviço tornou-se muito mais simples e rápida do que a feita com o Modeller no modo tradicional (linha de comando). Atualmente estamos implementando com a GRC-UENF a disponibilidade do AutoModel como serviço web. Conclusão: O desenvolvimento do AutoModel está na sua fase final, em período de testes internos. As próximas etapas serão adicionar o recurso de refinamento de loops e implementar o acesso livre à pesquisadores de todo mundo através da internet.

**PALAVRAS CHAVE:** Bioinformática, Modelagem molecular, Serviço web

**IV Congresso  
Fluminense  
de Iniciação  
Científica  
e Tecnológica**

17º Encontro de IC da UENF  
9º Circuito de IC da IFF  
5ª Jornada de IC da UFF



**Bioquímica**