

# **Maia, Moisés: AVALIAÇÃO DA PERFORMANCE DE MÉTODOS DE DINÂMICA MOLECULAR E ATRACAMENTO MOLECULAR EMPREGADOS NO DESENVOLVIMENTO DE FÁRMACOS ASSISTIDO POR COMPUTADOR.**

**Italo Levy Lopes Lima**

Prof. Moisés Maia-Centro Universitário Fametro- Unifametro

**Desenvolvimento de produtos e projetos  
Ciências da Saúde  
XI encontro de inicialização científica.**

Modelagem molecular pode ser caracterizada como o desenvolvimento ou aperfeiçoamento de moléculas orgânicas, ou não, com a ajuda de softwares computacionais. Estes são de suma importância pois barateia o desenvolvimento do fármaco e possibilita a venda dos medicamentos a valores mais acessíveis. O estudo tem como meta observar fatores que aumentam ou diminuem a eficiência dos softwares responsáveis por tal trabalho e analisar o uso da nova ferramenta Vina-GPU do software AutoDock Vina. O método se baseará em análises de semelhantes. Usando como comparação os resultados encontrados por Donald Kinghorn da pugetsystems para uma RTX3070Ti e representados graficamente, a proteína a ser usada será a “spike” do Sars-Cov-2. Segundo o autor é mister destacar que apesar da mesma workstation -tipo de computador projetado para trabalhos de alta performance- ou da mesma placa gráfica, existem distintas produtividades a depender do programa utilizado e quão otimizados estão. Observamos duas versões do programa AutoDock Vina -1.1.2 e 1.2.5- e como estes se comportam na hora de processar as relações do composto e uma ferramenta chamada Vina-GPU a fim de determinar notáveis alterações de desempenho, sendo este o principal foco do trabalho apresentado.

A princípio foi observado que a workstation usada pela pugetsystems se sobressaiu sobre a utilizada por nós em benchRIB e em benchPEAP, por 31,4% e 44,3% respectivamente enquanto o sistema operacional do pesquisador conseguiu se sobressair em benchMEM por 26,2% - benchRIB, benchPEAP e benchRIB são comandos computacionais que possuem como objetivo simular proteínas, ribossomos e peptídeos em meios específicos- apesar de usar as mesmas placas gráficas, isso se deve ao processador utilizado pela empresa norte-americana possuir um processador com 4 vezes mais threads e cores que o utilizamos, o que impactou nos resultados obtidos.

Da mesma forma que houveram alterações entre workstations distintas, foi possível observar alterações entre diferentes versões do mesmo software -AutoDock Vina nas versões 1.1.2 e 1.2.5-. Em primeira análise foi possível destacar que a versão 1.2.5 obteve ganhos surpreendentes, destacamos que a versão conseguiu reduzir pela metade o tempo de processamento da sua versão anterior. Também destacamos o uso de uma nova ferramenta chamada de Vina-GPU que busca reduzir o tempo de comunicação da CPU e a GPU.

Ao analisar os resultados o estudioso conseguiu chegar a algumas conclusões. A taxa de processamento da CPU deve acompanhar a taxa de processamento da GPU com objetivo de ter ganhos na velocidade e confiabilidade dos trabalhos, isso se torna destacável pela diferença que a nossa workstation teve perante a da pugetsystems no que se refere tempo de processamento. Outro ponto a ser analisado se refere aos ganhos que a versão 1.2.5 obteve perante a versão 1.1.2 no quesito tempo de processamento e como a Vina-GPU gerou ganhos. A principal mudança entre as versões foi como o programa interage com a CPU, a versão mais recente consegue otimizar o seu uso e por consequência melhorar o tempo de elaboração.

Por fim, foi observado pelo investigador que a ferramenta Vina-GPU gerou ganhos impressionantes no que se refere a tempo de processamento, todavia, o ganho de tempo veio acompanhado de uma perda de informações, o que acaba por gerar menor confiabilidade. A ferramenta, por mais impressionante que seja, não é viável que seja usada por enquanto, a perda de informação, por menor que seja, é extremamente grave. É de se esperar que futuras atualizações viabilizem o seu uso de forma segura.

**Palavras-chave:** Desenvolvimento de medicamentos; Química medicinal; Uso de softwares; Métodos de pesquisa.

## REFERÊNCIAS

EBERHARDT, J.; SANTOS-MARTINS, D.; TILLACK, A. F. and FORLI, S. **Supporting Information AutoDock Vina 1.2.0: new docking methods, expanded force field, and Python bindings**. Acessado em: [https://pubs.acs.org/doi/suppl/10.1021/acs.jcim.1c00203/suppl\\_file/ci1c00203\\_si\\_001.pdf](https://pubs.acs.org/doi/suppl/10.1021/acs.jcim.1c00203/suppl_file/ci1c00203_si_001.pdf)

KINGHORN, DONALD. **Molecular Dynamics Benchmarks GPU Roundup GROMACS NAMD2 NAMD 3alpha on 12 GPUs**, 2022. Puget Systems. Disponível em: <<https://www.pugetsystems.com/labs/hpc/molecular-dynamics-benchmarks-gpu-roundup-gromacs-namd2-namd-3alpha-on-12-gpus-2330/#Results>>. Acesso em: 21 de Abril de 2023

MAIA, MOISÉS, **Avaliação da Performance de Métodos de Dinâmica Molecular e Atracamento Molecular Empregados no Desenvolvimento de Fármacos Assistido por Computador**, 2023.

SANTOS-MARTINS, D.; TILLACK, A. F.; SOLIS-VASQUEZ, L.; SANNER, M. F. , KOCH, A. and FORLI, S. **Accelerating AutoDock4 with GPUs and Gradient-Based Local Search**. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 17, 2, 1060-1073, 2021