

RESUMEN

En este trabajo se presenta el proyecto molUDLAP, un simulador de Acoplamiento Molecular (AC) de tipo académico. Primero se presentan algunos de los aspectos más importantes del AC considerados para el diseño de este sistema; después se trata el procedimiento para la realización de dicho proyecto, para el cual se usaron distintos tipos de APIS en Java de tipo open source. Se presenta una breve descripción de cada herramienta (API) utilizada, también se describen los objetivos por los que ha sido utilizada cada una, se hacen algunas observaciones del trabajo que se ha realizado.

Para el diseño de la aplicación se utilizó como lenguaje de programación Java debido principalmente a su versatilidad de ser multiplataforma; también se hizo uso de “Jmol”, el cual es un visor Java de código abierto que se utiliza para visualizar las moléculas en 3D, los archivos de estas se descargan de la base de datos mundial “Protein Data Bank” (PDB). Para los procesos necesarios en la preparación de las moléculas (proteínas y ligandos), en parte de la simulación se utilizó “Chemistry Development Kit” (CDK); que consiste en una API en Java con herramientas para el desarrollo de aplicaciones de tipo bioinformático, que brinda utilidades en la carga de archivos .pdb, .sdf, y para la implementación de cargas de Gasteiger, etc. Para el cálculo de la energía entre las moléculas se propuso e implementó una fórmula que hace uso de las interacciones que se dan entre las moléculas; finalmente para la simulación se implementó un algoritmo genético para recorrer las configuraciones posibles entre la proteína y el ligando en el espacio de búsqueda con lo que se obtiene la mejor configuración posible.

En la elaboración de la aplicación se estudiaron algunos de los distintos métodos (algoritmos) computacionales que existen para llevar a cabo la simulación del Acoplamiento Molecular, es conveniente mencionar que en este caso en particular se hizo énfasis en las técnicas usadas para el acoplamiento de tipo “proteína-ligando”.

Finalmente se analizaron algunas de las herramientas disponibles que se usan en modelado del Acoplamiento Molecular con la finalidad de tener parámetros de la entrada y la salida, en este caso se usó a Docking Server (<http://www.dockingserver.com>).