



Portal DockThor

O programa e o respectivo portal DockThor de atracamento molecular receptor-ligante foram desenvolvidos pelo grupo de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos do LNCC, integrante do INCT-INOVAR.

Em 2013, durante a 65 SBPC (Recife-PE), foi lançado o Portal web DockThor (www.dockthor.lncc.br) o qual é disponibilizando gratuitamente para a comunidade científica internacional e se constitui no primeiro programa brasileiro (e possivelmente de todo o hemisfério sul) de atracamento molecular receptor-ligante. Este portal está acoplado às facilidades de computação de alto-desempenho do SINAPAD (Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho - <https://www.lncc.br/sinapad/>) e conta com o apoio do INCT-INOVAR para o seu desenvolvimento. O desempenho do programa DockThor foi analisado e validado através de um estudo comparativo com alguns dos programas de atracamento molecular mais utilizados atualmente (i.e., GOLD, GLIDE e AutoDock Vina). Estes estudos comparativos indicaram que o programa Dockthor é bastante competitivo na sua capacidade de predição dos modos de ligação de complexos receptor-ligante e tem um grande potencial para ser amplamente utilizado pela comunidade científica em estudos reais de desenho racional de fármacos.

Desde o seu lançamento o portal DockThor foi acessado por mais de 1330 visitantes únicos. No Brasil apenas os estados do Acre e Tocantins não tiveram pesquisadores acessando o portal. Cerca de 30% dos acessos são de pesquisadores estrangeiros (23% dos EUA e 7% de mais de 20 países). No primeiro semestre de 2014 o portal teve cerca de 1000 *jobs* submetidos.

Atualmente estão em desenvolvimento funções empíricas de energia livre para a predição de afinidades de ligação proteína-ligante e uma metodologia baseada na estratégia de *ensemble docking* para incorporação da flexibilidade do receptor. Estes desenvolvimentos serão integrados à futura versão do portal DockThor-VS para triagem virtual de ligantes em larga escala. Esta versão será integrada aos projetos do INCT-INOVAR (tanto no uso da sua biblioteca de ligantes quanto no estudo de alvos moleculares específicos) e utilizará a plataforma de computação de alto desempenho do SINAPAD. No início de 2015 está prevista a chegada de um super-computador com capacidade de computação da ordem de 1,2 petaflops (com previsão de duplicação da capacidade em 2016). Com a implementação desta plataforma de super-computação será possível disponibilizar o portal DockThor-VS como uma ferramenta gratuita para uma grande diversidade de grupos de pesquisa brasileiros realizando estudos na área de desenho racional de fármacos.