

---

## Plan Overview

*A Data Management Plan created using DMPTool*

**Title:** Plano Gestão Dados - PD

**Creator:** Ivan Pires de Oliveira

**Affiliation:** Universidade de São Paulo (www5.usp.br)

**Funder:** São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

**Template:** Template USP - Mínimo

### Project abstract:

O projeto está baseado na busca por elucidação de mecanismos moleculares associados aos compostos derivados de piridopirimidinas. Estes compostos agem para inibir o acúmulo de cGMP em células intestinais, e portanto, este é o principal objetivo deste projeto. Para desvendar este mecanismo, utilizaremos como ferramenta as simulações de Dinâmica Molecular associadas aos resultados experimentais disponíveis na literatura e correlação com resultados teóricos. Investigaremos as interações moleculares dos derivados de piridopirimidinas principalmente com proteínas-alvos, como guanilato ciclases, fosfodiesterase tipo 5 e peptídeo enterotoxina termo-estável STA, tendo em vista a relação destas proteínas com a síntese ou consumo de cGMP. Com isso, espera-se alcançar alguma contribuição para a área de saúde pública via simulação computacional.

**Start date:** 01-01-2018

**End date:** 12-31-2020

**Last modified:** 01-07-2021

### Copyright information:

The above plan creator(s) have agreed that others may use as much of the text of this plan as they would like in their own plans, and customize it as necessary. You do not need to credit the creator(s) as the source of the language used, but using any of the plan's text does not imply that the creator(s) endorse, or have any relationship to, your project or proposal

## Plano Gestão Dados - PD - Descrição dos Dados e Metadados produzidos pelo projeto

---

### Descrição dos dados e metadados produzidos

#### *Que dados serão coletados ou criados?*

Serão criados dados de modelagem molecular, como estruturas tridimensionais proteína-ligante e trajetórias temporais via simulações computacionais.

Dados em formato .coord, .log, .vel, .xsc, .dcd entre outros.

Volume da ordem de ~50GB

Softwares de uso livre serão utilizados: NAMD, VMD e MDAnalysis.

#### *Como os dados serão coletados ou criados*

Os dados serão coletados através da realização de cálculos de modelagem molecular, especificamente docagem molecular e simulações de dinâmica molecular.

Serão utilizadas metodologias convencionais e bem estabelecidas dentro do projeto.

A qualidade será averiguada por validação de metodologia via análise de médias (e erros) em relação aos dados comparados.