

## TRABALHO I

### Instruções:

- A resolução do trabalho deve ser feita **individualmente** conforme especificação.
- A entrega deve ser feita por e-mail (exclusivamente) e somente até a data especificada compactando todos os arquivos em um único arquivo zip ou similar com o nome “t1-primeiro nome-último nome.zip”. Arquivos corrompidos serão desconsiderados.
- O envio do código fonte é obrigatório. A linguagem para implementação é livre. Não serão aceitos trabalhos atrasados.

NOME: ..... CARTÃO: .....

1. Realizar a leitura do material disponível no *Livro Essentials of Metaheuristics*, Sean Luke, 2nd Edition. Cada aluno deve realizar a leitura da seção conforme organização abaixo e realizar as tarefas que seguem. Download do livro em: <https://cs.gmu.edu/~sean/book/metaheuristics/Essentials.pdf>

- 1. Tabu Search - Pág. 26 - Virgínia de Castilhos
- 2. Simulated Annealing - Pág. 25 - Leonardo Alves Santos
- 3. Iterated Local Search - Pág. 28 - Manuel Alexander Garcia Napa
- 4. Algoritmo Genético - Pág. 36 - Débora Bubnitz Anton
- 5. Differential Evolution - Pág. 54 - Felipe Castro Nepomuceno
- 6. Particle Swarm Optimization - Pág. 55 - Bruno Iochins Grisci
- 7. Greedy Rand. Adaptive Search Procedures - Pág. 151 - Andrew Santana Pompeo
- 8. Ant Colony Optimization - Pág. 152 - Pablo Felipe Leonhart

- (a) Preparar material para apresentação em sala de aula da técnica estudada. A apresentação deve contemplar o embasamento teórico da técnica, algoritmo básico, tipos de problemas em que a técnica é utilizada, etc.

- **Data da Entrega da Tarefa:** 19.05.2017 (sexta-feira) até as 15h:00m.
- **Formato de Entrega:** arquivo PDF da apresentação.
- **Forma de Entrega:** por e-mail (mdorn@inf.ufrgs.br). Incluir no Assunto do email “T1-1 - Bioinf Estrutural”.
- **Data de Apresentação em sala de aula:** 26.05.2016 (sexta-feira).

2. O alinhamento de estruturas de proteínas permite que seja muito fácil comparar e procurar por similaridades e diferenças entre duas proteínas ou duas conformações diferentes de uma mesma proteína. O RMSD, do inglês “Root Mean Square Deviation”, é o valor médio para o desvio médio quadrático dos átomos de uma estrutura X, relativamente a uma segunda estrutura Y. Quanto maior este valor, maior é a diferença estrutural entre as proteínas ou estruturas que estão a ser alvo de comparação. Para o cálculo da diferença entre duas estruturas é necessário que ambas estejam na mesma orientação (translação e rotação do corpo rígido). Implemente um sistema que receba duas estruturas em formato PDB e calcule o valor de RMSD como segue:

- (a) O valor de RMSD deve ser calculado buscando encontrar o alinhamento estrutural perfeito entre os corpos (estruturas). Implemente e utilize a metaheurística estudada na **Questão 1** para encontrar o alinhamento perfeito entre as estruturas.
- (b) Considere o conjunto de arquivos PDBs disponibilizados no endereço web: <http://www.inf.ufrgs.br/~mdorn/bio/t1/q2/>. Este conjunto de arquivos é composto por uma estrutura referência (reference.pdb) e 6 estruturas modelo. As estruturas não possuem o mesmo ponto de origem. Para validar o valor de RMSD utilize o software PROFIT<sup>1</sup>. Calcule o valor de RMSD da seguinte forma:
- Entre a estrutura 3-D referência e cada uma das estruturas modelo, considerando somente os átomos da cadeia-principal (*backbone*).
  - Entre a estrutura 3-D referência e cada uma das estruturas modelo, considerando apenas o Carbono alfa ( $C_\alpha$ ) de cada resíduo de aminoácido. Apresente todos os valores encontrados.
  - Entre a estrutura 3-D referência e cada uma das estruturas modelo, considerando todos os átomos do polipeptídeo.
- (c) Preparar material para apresentação em sala de aula dos métodos desenvolvidos. A apresentação deve contemplar o algoritmo básico desenvolvido e demonstrar todos os resultados obtidos.
- **Data da Entrega da Tarefa:** 24.05.2017 (quarta-feira) até as 15h:00m.
  - **Formato de Entrega:** arquivo PDF da apresentação dos resultados e códigos implementados. Enviar **um único** arquivo compactado.
  - **Forma de Entrega:** por e-mail (mdorn@inf.ufrgs.br). Incluir no Assunto do email "T1-2 - Bioinf Estrutural".
  - **Data de Apresentação em sala de aula:** 26.05.2016 (sexta-feira).
3. Realize a Leitura do artigo "*Benchmark Functions for CEC'2013 Special Session and Competition on Niching Methods for Multimodal Function Optimization*"<sup>2</sup>. Endereço para download do arquivo disponível no rodapé. Considere a função F12: Composition Function 4 com dimensão 3D descrita no artigo. Implemente a metaheurística estudada na **Questão 1** para encontrar o mínimo desta função. Arquivos necessários para a questão estão disponíveis em: <http://www.inf.ufrgs.br/~mdorn/bio/t1/q3/>
- (a) Apresentar análise de convergência do método (gráficos de convergência).
- (b) Se tratando de um método estocástico execute a técnica implementada por 30 vezes e faça análise estatística dos resultados encontrados.
- **Data da Entrega da Tarefa:** 26.05.2017 (sexta-feira) até as 13h:00m.
  - **Formato de Entrega:** arquivo PDF da apresentação dos resultados e códigos implementados. Enviar **um único** arquivo compactado.
  - **Forma de Entrega:** por e-mail (mdorn@inf.ufrgs.br). Incluir no Assunto do email "T1-3 - Bioinf Estrutural".
  - **Data de Apresentação em sala de aula:** 26.05.2016 (sexta-feira).

Os slides da última aula estão disponíveis em: <http://www.inf.ufrgs.br/~mdorn/bio/t1/slides/>

<sup>1</sup><http://www.bioinf.org.uk/profit/>

<sup>2</sup><http://goanna.cs.rmit.edu.au/~xiaodong/cec13-niching/competition/cec2013-niching-benchmark-tech-report.pdf>