

Trabalho II

Bruno lochins Grisci

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

bigrisci@inf.ufrgs.br

22 de junho de 2017

Sumário

1 Questão 1

2 Questão 2

Implementação

- Python;
- Numpy;
- Orientado a Objetos;
- Leitura do PDB: reaproveitada do Trabalho I

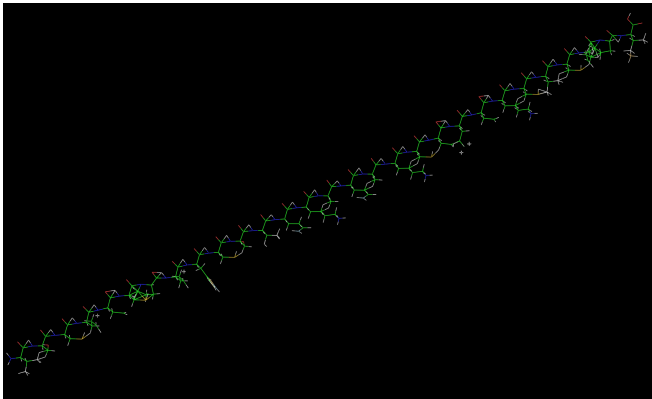
Formação de ligação peptídica

- Leitura dos arquivos .pdb dos aminoácidos;
- Tratar nomenclatura dos átomos;
- Átomos N dos aminoácidos são transladados para a origem;
- Para cada aminoácido:
 - Remove átomo H;
 - Move N para posição do átomo OC do aminoácido anterior*;
 - Salva posição do átomo OC atual;
 - Remove átomos OC e HOC atuais.
- Primeiro e último aminoácidos são casos especiais;
- Correção de índices.

*Posição ajustada para que o comprimento da ligação peptídica seja de 1.32Å e correção do ângulo da ligação.

Estrutura resultante

Sequência: VSCEDCPEHCSTQKAQAKCDNDKCVCEPI



Cálculo dos ângulos

Átomos:

- ϕ (phi): $C_{n-1} - N_n - C_{\alpha n} - C_n$
- ψ (psi): $N_n - C_{\alpha n} - C_n - N_{n+1}$
- ω (omega): $C_{\alpha n} - C_n - N_{n+1} - C_{\alpha n+1}$

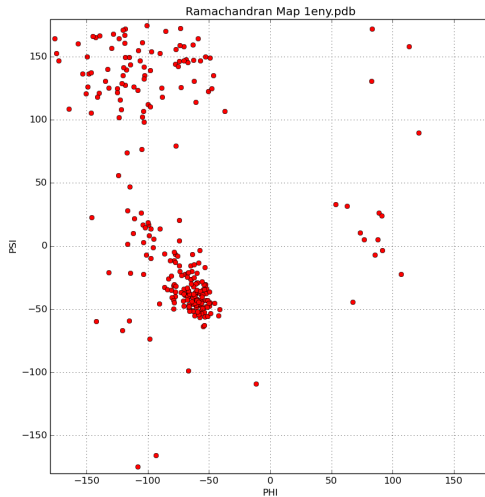
Cálculo de ângulo diedro

- P_1, P_2, P_3, P_4
- $\vec{b}_1 = P_2 - P_1, \vec{b}_2 = P_3 - P_2, \vec{b}_3 = P_4 - P_3$
- $\vec{n}_1 = \frac{\vec{b}_1 \times \vec{b}_2}{\|\vec{b}_1 \times \vec{b}_2\|}$
- $\vec{n}_2 = \frac{\vec{b}_2 \times \vec{b}_3}{\|\vec{b}_2 \times \vec{b}_3\|}$
- $\vec{m}_1 = \vec{n}_1 \times \frac{\vec{b}_2}{\|\vec{b}_2\|}$
- $x = \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2$
- $y = \vec{m}_1 \cdot \vec{n}_2$
- $\alpha = -\text{atan2}(y, x)$

Ângulos PHI - PSI (1ENY)

AMINO ÁCIDO	PHI	PSI
ALA	360.00	-112.08
GLY	121.15	89.96
LEU	-52.87	-30.57
LEU	-116.76	28.04
ASP	-50.50	122.54
GLY	62.56	31.90
...

Ramachandran Map

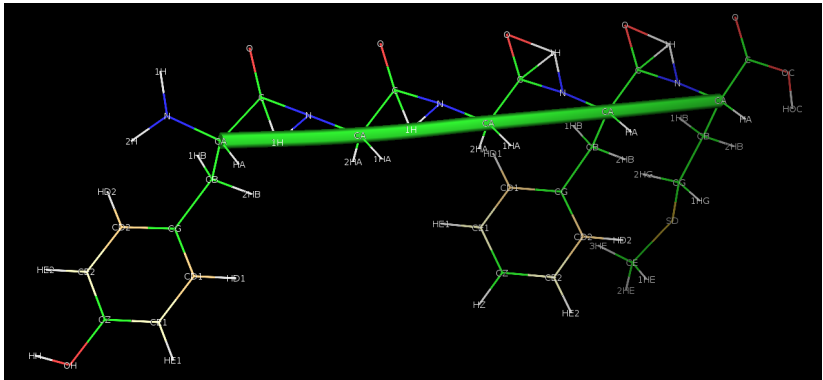


1PLX-P

Sequência: YGGFM

$$RMSD_{C_{\alpha}} : 2.931457373$$

$RMSD_{backbone}$: 2.91612536719

$$RMSD_{all} : 4.75262535547$$


Cálculo do ângulo entre 3 átomos

- P_1, P_C, P_2
- $\vec{bond}_{1C} = \frac{P_1 - P_C}{\|P_1 - P_C\|}$
- $\vec{bond}_{2C} = \frac{P_2 - P_C}{\|P_2 - P_C\|}$
- $\theta = \arccos(\vec{bond}_{1C} \cdot \vec{bond}_{2C})$

Rotação da ligação de 3 átomos

- $\theta, Q_0, P_1, P_C, P_2$
- $c = \cos(\theta), s = \sin(\theta), t = 1 - \cos(\theta)$
- $Q = Q_0 - P_C$
- $\vec{bond}_{1C} = \frac{P_1 - P_C}{\|P_1 - P_C\|}$
- $\vec{bond}_{2C} = \frac{P_2 - P_C}{\|P_2 - P_C\|}$
- $\vec{k} = \frac{\vec{bond}_{1C} \times \vec{bond}_{2C}}{\|\vec{bond}_{1C} \times \vec{bond}_{2C}\|}$
- $R_{3,3} =$

$$\begin{pmatrix} c + \vec{k}_x \cdot \vec{k}_x \cdot t & \vec{k}_x \cdot \vec{k}_y \cdot t - \vec{k}_z \cdot s & \vec{k}_x \cdot \vec{k}_z \cdot t + \vec{k}_y \cdot s \\ \vec{k}_x \cdot \vec{k}_y \cdot t + \vec{k}_z \cdot s & c + \vec{k}_y \cdot \vec{k}_y \cdot t & \vec{k}_y \cdot \vec{k}_z \cdot t - \vec{k}_x \cdot s \\ \vec{k}_z \cdot \vec{k}_x \cdot t - \vec{k}_y \cdot s & \vec{k}_z \cdot \vec{k}_y \cdot t + \vec{k}_x \cdot s & c + \vec{k}_z \cdot \vec{k}_z \cdot t \end{pmatrix}$$
- $Q_1 = Q \times R^T + P_C$

Rotação de ângulo diedro

Rodrigues' rotation formula:

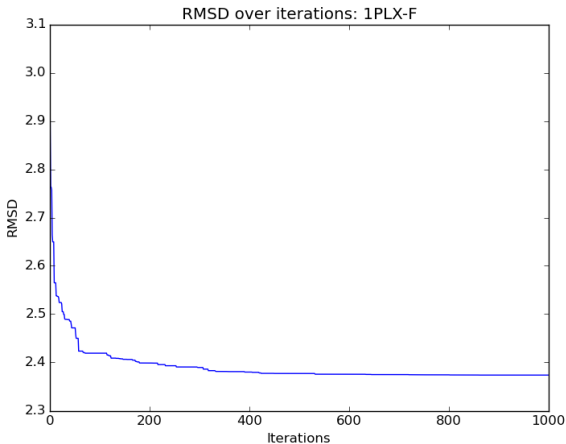
- $\theta, P_0, bond_0, bond_1$
- $\vec{v} = P_0 - bond_0$
- $\vec{k} = \frac{bond_1 - bond_0}{\|bond_1 - bond_0\|}$
- $r = \vec{v} \cdot \cos(\theta) + \vec{k} \times \vec{v} \cdot \sin(\theta) + \vec{k} \cdot \vec{v} \cdot (1 - \cos(\theta))$
- $P_1 = r + bond_0$

Otimização

Particle Swarm Optimization

- Minimização
- Função de avaliação: $RMSD_{all}$
- Dimensões: $2 \times \|AA\| - 2$
- Limites: $[-\pi, \pi]$
- População: 200
- Iterações: 1000

Minimização do RMSD



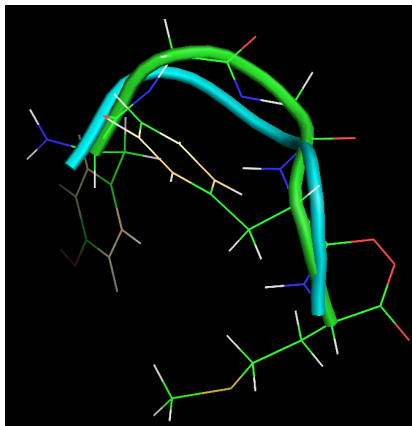
Tempo de execução: 65 minutos

Resultados

$RMSD_{C_{\alpha}}$: 0.38657032646

$RMSD_{backbone}$: 0.827079038808

$RMSD_{all}$: 2.37386628213



Ângulos (1PLX x 1PLX-F)

AA	PHI	PSI	OMEGA
TYR	360.00 x 360.00	176.63 x -110.52	179.86 x -179.98
GLY	148.48 x 124.15	-21.96 x 2.58	179.81 x -179.97
GLY	114.02 x 84.56	29.89 x 27.43	179.75 x 179.97
PHE	-88.00 x -71.94	-38.16 x -94.85	-179.95 x 179.99
MET	-74.24 x -14.96	360.00 x 360.00	360.00 x 360.00

Fim