

## Trabalho IV

Bruno lochins Grisci

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*bigrisci@inf.ufrgs.br*

27 de julho de 2017

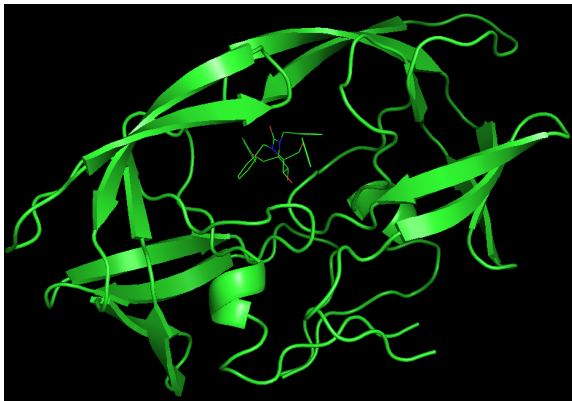
# Sumário

- 1 Introdução
- 2 Implementação
- 3 Resultados

# Ferramentas

- Python;
- Numpy;
- Orientado a Objetos;
- Trabalhos I, II e III;
- DockThor;
- Vina.

## 1AJX



# Docking

- Proteína rígida;
- Ligante: translação, rotação, rotações internas;
- Função de energia: Vina.

# Ligações com rotação

## DockThor

Rotatable bonds: 12

	Atom 1	Atom 2
<input checked="" type="checkbox"/>	1	8
<input checked="" type="checkbox"/>	3	16
<input checked="" type="checkbox"/>	4	23
<input type="checkbox"/>	5	31
<input type="checkbox"/>	6	32
<input checked="" type="checkbox"/>	7	33
<input checked="" type="checkbox"/>	8	9
<input checked="" type="checkbox"/>	16	17
<input checked="" type="checkbox"/>	23	24
<input checked="" type="checkbox"/>	24	25
<input checked="" type="checkbox"/>	33	34
<input checked="" type="checkbox"/>	34	35

# Configuração do Vina

```
1ajx_config.txt x
1 receptor = data/1ajx_protein.pdbqt
2 ligand = data/1ajx_ligand.pdbqt
3 center_x = 11.741
4 center_y = 23.343
5 center_z = 5.989
6 size_x = 11.0
7 size_y = 11.0
8 size_z = 11.0
9 out = 1ajx_ligand.pdbqt|
```

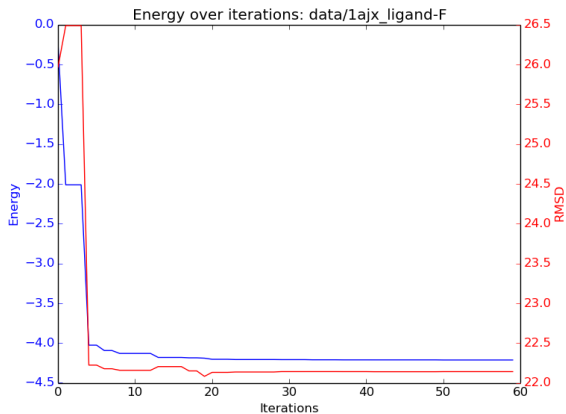
# Otimização

## Rotation Particle Swarm Optimization

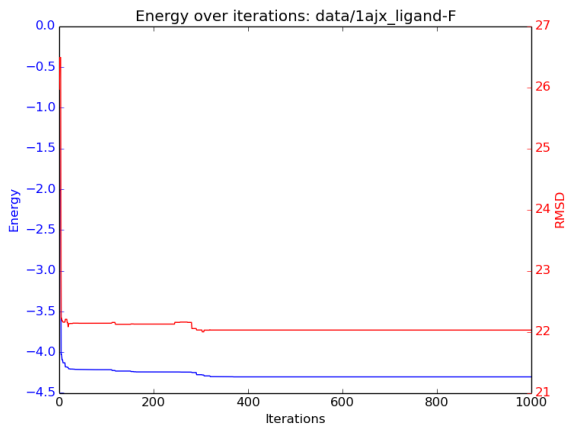
- Minimização;
- Função de avaliação: Vina;
- Dimensões:  $3 + 3 + 10$ ;
- Limites:  $[-11, 11], [-\pi, \pi]$ ;
- População: 60;
- Iterações: 1000



# Energia X RMSD



# Energia X RMSD

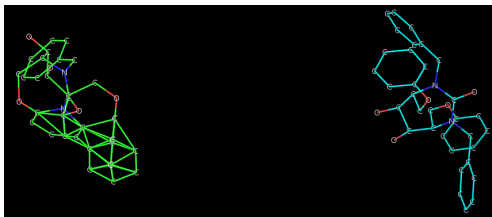


Tempo: 1h 48 min

# Energias

- $E_{Vina}^{1AJX} : -10.22689 \text{ kJ/mol}$
- $E_{Vina}^{1AJX-F} : -4.30361 \text{ kJ/mol}$

## 1AJX x 1AJX-F



- $RMSD_{all-ligand}^{not-aligned}$  : 22.02Å

Fim