

Trabalho III

Bruno lochins Grisci

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

bigrisci@inf.ufrgs.br

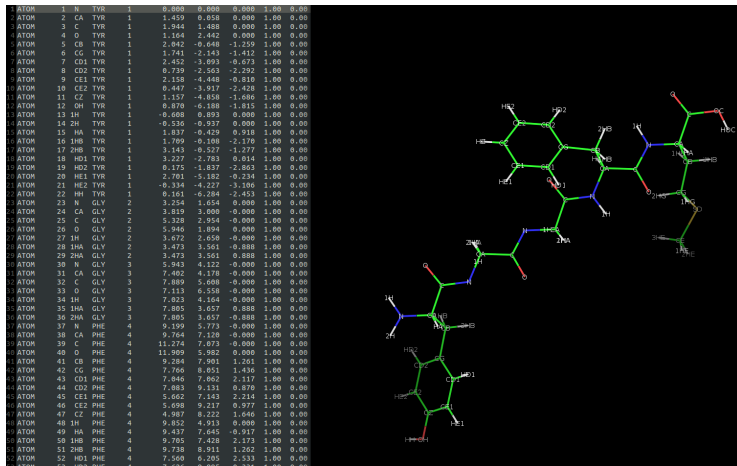
29 de junho de 2017

Sumário

- 1 Prelúdio
- 2 Criação da proteína
- 3 Implementação

Antes de começar...

Correção da formatação do arquivo PDB do trabalho II.

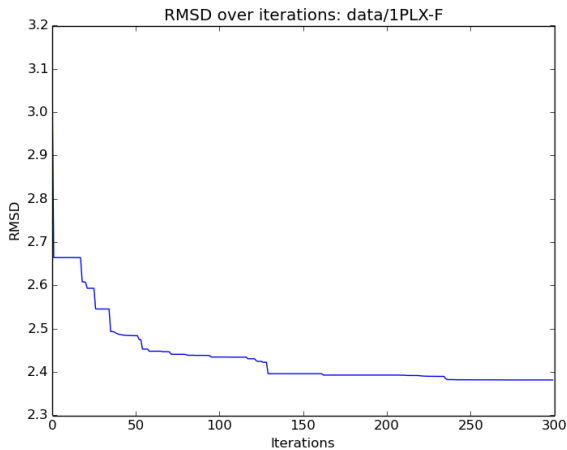


Otimização

Particle Swarm Optimization

- Minimização
- Função de avaliação: $RMSD_{all}$
- Dimensões: $2 \times \|AA\| - 2$
- Limites: $[-\pi, \pi]$
- População: 200
- Iterações: 300

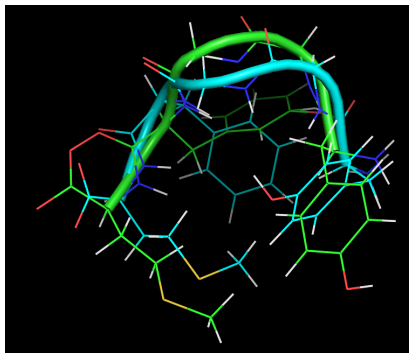
Minimização do RMSD



Tempo de execução: 19 minutos

Resultados

- $RMSD_{C_{\alpha}}$: 0.40
- $RMSD_{backbone}$: 0.83
- $RMSD_{all}$: 2.38



Ângulos (1PLX x 1PLX-F)

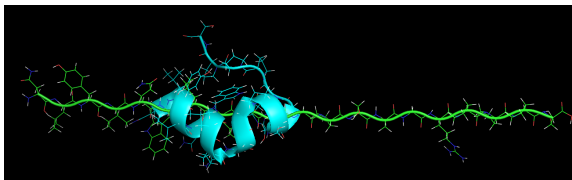
AA	PHI	PSI	OMEGA
TYR	360.00 x 360.00	176.63 x -115.80	360.00 x 360.00
GLY	148.48 x 121.15	-21.96 x 10.17	179.86 x 179.98
GLY	114.02 x 78.37	29.89 x 35.39	179.81 x -179.99
PHE	-88.00 x -81.96	-38.16 x -93.28	179.75 x 179.97
MET	-74.24 x -9.66	360.00 x 360.00	-179.95 x 180.00

Ferramentas

- Python;
- Numpy;
- Orientado a Objetos;
- Trabalhos I e II.

1L2Y

- Sequência: NLYIQWLKDGGPSSGRPPPS;
- 1L2Y x 1L2Y-P:
 - $RMSD_{C_{\alpha}}$: 17.89
 - $RMSD_{backbone}$: 18.08
 - $RMSD_{all}$: 19.13



Otimização

Particle Swarm Optimization

- Minimização;
- Função de avaliação: Energia Potencial (AMBER99);
- Dimensões: $2 \times \|AA\| - 2$;
- Limites: 0;
- População: 0;
- Iterações: 0

Fim