

# Visualização de simulações de dinâmica molecular

Bruno Lochins Grisci

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*bigrisci@inf.ufrgs.br*

4 de agosto de 2017

# Sumário

1 Introdução

2 Implementação

3 Ferramenta

4 Resultados

# Proteínas

- Proteínas são macromoléculas essenciais para o funcionamento do organismo dos seres-vivos.
- São formadas por uma sequência unidimensional de amino ácidos própria e única.
- Na natureza, existem 20 cadeias laterais, diferenciando os 20 amino ácidos básicos.

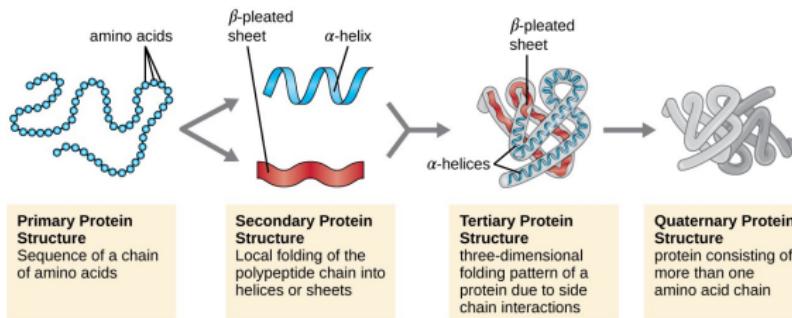


Figura : Estrutura das proteínas.

# Dinâmica Molecular



# Dimensões

- DSSP: estrutura secundária
- SASA: solvent-accessible surface area
- GYRATE: raio de giro
- ENERGY: energia total do sistema
- RMSF: root mean square fluctuation of atomic positions

Todas as dimensões são valores numéricos contínuos.

# Kappa-conotoxin PVIIA



Figura : Lesma marinha.

# Kappa-conotoxin PVIIA

- Toxina encontrada em lesmas marinhas.
- *CRIPNQKCFQHLDDCCSRKCNRFNKCV*
- Mutação da asparagina (N) na quinta posição por uma alanina (A) causa perda de 100% da toxicidade.

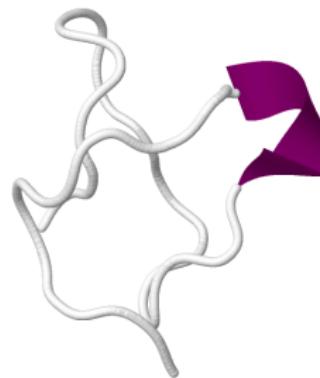


Figura : Estrutura 3D da Kappa-conotoxin PVIIA.

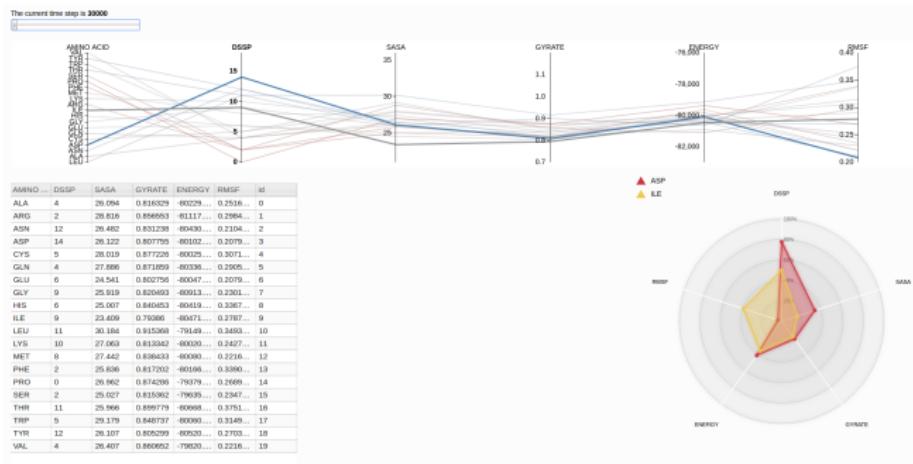
# Ferramentas

- JavaScript;
- HTML;
- CSS;
- D3.js.

# Funcionalidades

- Grid
  - Destaque de item
  - Seleção de item
- Parallel Coordinates
  - Filtragem de eixo
  - Ordenação de eixo
  - Repositionamento de eixo
  - Coloração por seleção de eixo
- Radar Chart
  - Destaque de item
- Slider

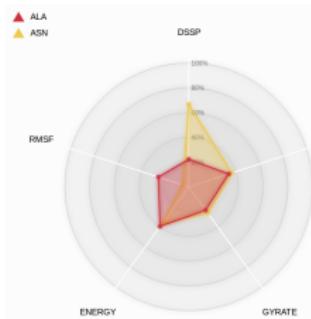
# Visão geral



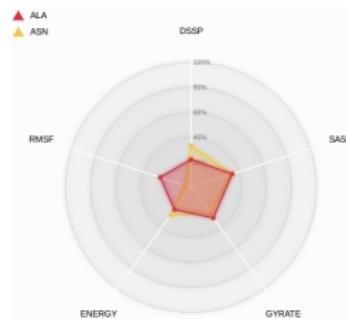
Disponível em:

<http://inf.ufrgs.br/~bigrisci/parallel-coordinates>

# Comparação N x A



(a) Time step 30000



(b) Time step 40000



(c) Time step 50000

Figura : Comparação entre simulações com asparagina (amarelo) e alanina (vermelho) em 3 momentos distintos.

# Trabalhos futuros

- Teste com outras proteínas;
- Ferramenta web;
- Adicionar novas visualizações;
- Experimentar com outros tipos de dados.

Obrigado :)