

Aspectos Práticos em Triagem Virtual em Larga Escala: Pré-requisitos

Alessandro S. Nascimento¹ e Isabella A. Guedes²

¹ Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo. Av. Trabalhador SãoCarlense, 400. Parque Arnold Schimidit. São Carlos, SP, Brazil. 13566-590.

² Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC/MCT. Av. Getúlio Vargas 333 - 1A11 - Quitandinha, Petrópolis, RJ, Brazil. 25651-075. (Dated: 20/08/2018)

Resumo

Neste documento, apresentamos os principais pacotes necessários para a realização das práticas do minicurso *Aspectos Práticos em Triagem Virtual em Larga Escala e Desenho Racional de Fármacos* da IX EMMSB 2018.

1 UCSF Chimera[1]

Faça o download do programa [aqui](#). Siga as instruções de instalação disponíveis na página do Chimera.

2 OpenBabel[2]

Utilizando o sistema operacional Linux, instale através do seguinte comando:

```
$ sudo apt-get install openbabel
```

Os guias de instalação para os sistemas operacionais Windows e Mac podem ser encontrados na página do [OpenBabel](#).

3 LiBELa[3]

Descompacte o arquivo LiBELa.zip (enviado em anexo no e-mail juntamente com este tutorial):

```
$ unzip LibBELa.zip
```

Entre no diretório criado:

```
$ cd LiBELa/
```

Instale o programa LiBELa:

```
$ source libelarc
```

4 Comandos Úteis:

```
# entrar em um diretorio:
```

```
$ cd pasta/
```

```
# voltar para um diretorio um nivel acima:
```

```
$ cd ..
```

```
# listar arquivos e diretorios:
```

```
$ ls
```

```
# criar diretorio:
```

```
mkdir pasta/
```

```
# remover arquivo:
```

```
rm arquivo
```

```
# copiar arquivo do diretorio de origem para o diretorio de desti no:
```

```
cp origem/arquivo destino/.
```

Referências

- [1] E F Pettersen, T D Goddard, C C Huang, G S Couch, D M Greenblatt, E C Meng, and T E Ferrin. UCSF chimera - A visualization system for exploratory research and analysis. *Journal of Computational Chemistry*, 25:1605–1612, 2004.
- [2] N M O’Boyle, M Banck, C A James, C Morley, T Vandermeersch, and G R Hutchison. Open Babel: An open chemical toolbox. *J Cheminform*, 3:33, 2011.
- [3] Heloisa dos Santos Muniz and Alessandro S. Nascimento. Ligand- and receptor-based docking with LiBELa. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 29(8):713–723, 2015.