

# Função de Energia Potencial

Pablo Felipe Leonhart

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

07 de Julho, 2017

# Implementação

- ▶ Python
- ▶ Orientação a objetos
- ▶ Trabalho II

# Ligação Peptídica

Resultado da ligação peptídica NLYIQWLKDGGPSSGRPPPS:

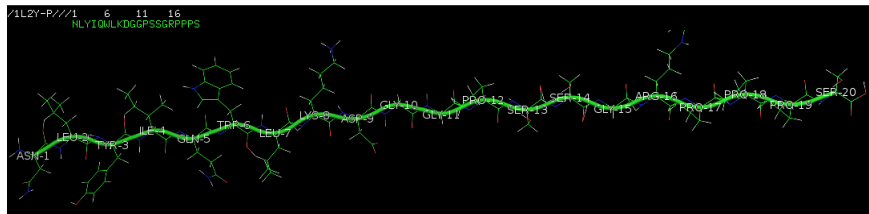


Figure 1: Sequência de aminoácidos vista no PyMOL

# Ligação Peptídica

Comparação entre 1L2Y e 1L2Y-P:

- ▶  $RMSD_{C_{\alpha}}$  : 18.30Å
- ▶  $RMSD_{backbone}$  : 18.49Å
- ▶  $RMSD_{all}$  : 19.55Å

# Função de Energia

Foi considerado apenas o termo dos não ligados:

$$E_{total} = \sum_{nonbond} \varepsilon_{ij} \left[ \left( \frac{R_{minij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{R_{minij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \varepsilon_1 \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

# Potencial de Lennard-Jones

$$E_{total} = \sum_{nonbond} \varepsilon_{ij} [(\frac{R_{minij}}{r_{ij}})^{12} - 2(\frac{R_{minij}}{r_{ij}})^6]$$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}$$

$$R_{mini} = \sigma_i \cdot 2^{1/6}, R_{minj} = \sigma_j \cdot 2^{1/6}$$

$$R_{minij} = \frac{R_{mini} + R_{minj}}{2}$$

$r_{ij}$  = distância euclidiana entre os átomos  $i$  e  $j$

$\varepsilon_i$ ,  $\varepsilon_j$ ,  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$  são os valores de *epsilon* e *sigma* lidos no arquivos dos não ligados

# Potencial de Coulomb

$$\varepsilon_1 \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

$$\varepsilon_1 = 139.1319 \text{ kJ/mol}$$

$q_i, q_j$  = cargas lidas no arquivo de aminoácidos

$r_{ij}$  = distância euclidiana entre os átomos  $i$  e  $j$

Consideradas distâncias menores do que  $8.0 \text{ \AA}$  (*cutoff*)

Parâmetros utilizados:

- ▶ Dimensões do problema = ( 'psi1', 'phi2', 'psi2', ..., 'phi19', 'psi20', 'phi20' )
- ▶ Intervalo para valores de rotação = [ -Pi:Pi ]
- ▶  $k = 200$
- ▶ Número de formigas = 150
- ▶  $q = 0.0001$
- ▶  $e = 0.85$
- ▶ Máximo de iterações = 1000



## Resultados

Comparativo entre as sequências: 1L2Y(azul), 1L2Y-F(vermelho)

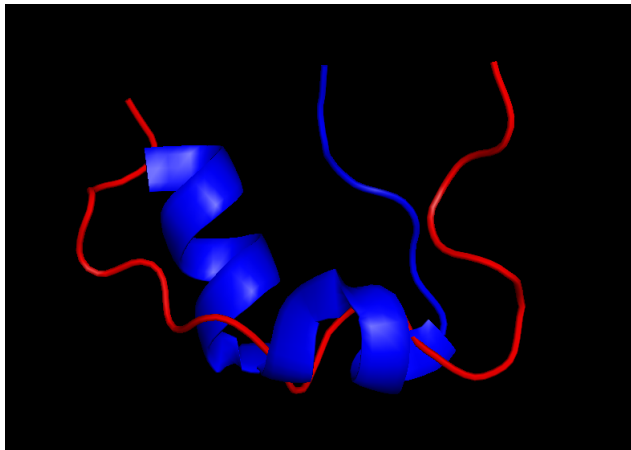


Figure 2: Alinhamento das estruturas no PyMOL

# Resultados

Comparação entre 1L2Y e 1L2Y-F:

- ▶  $RMSD_{C_{\alpha}}$  : 6.05Å
- ▶  $RMSD_{backbone}$  : 6.00Å
- ▶  $RMSD_{all}$  : 8.58Å

Valores de energia:

- ▶ 1L2Y = 3,285,747.77 kJ/mol
- ▶ 1L2Y-P = 5,489,726,755.36 kJ/mol
- ▶ 1L2Y-F = 5,489,685,817.81 kJ/mol

# Resultados

Análise da energia e do RMSD obtido a cada iteração do algoritmo:

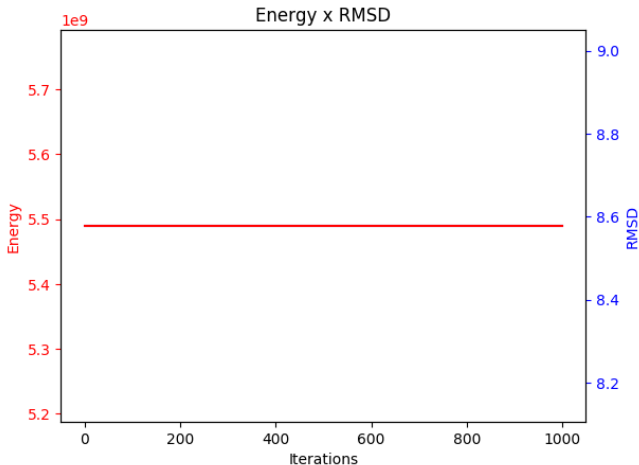


Figure 3: ACO<sub>r</sub>: Energia x RMSD x Gerações

Obrigado!

pablo.leonhart@inf.ufrgs.br