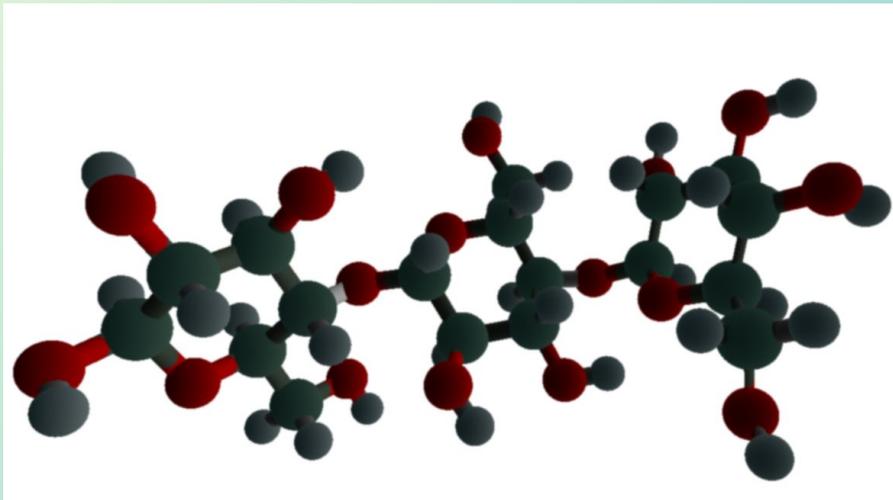




Tough Protein Enhancer

Косуха Анатолий 10-1 класс
Логачев Федор 10-3 класс



Tough Protein Enhancer

Open
Tough Protein Enhancer

Save
Tough Protein Enhancer

Docking
Tough Protein Enhancer

EXIT
Tough Protein Enhancer

Protein view window

Cur.energy: 496.953766
Min.energy: 223.072723

*Научный руководитель: Галинский Виталий Александрович,
Преподаватель информатики и программирования ФМЛ № 30*

*

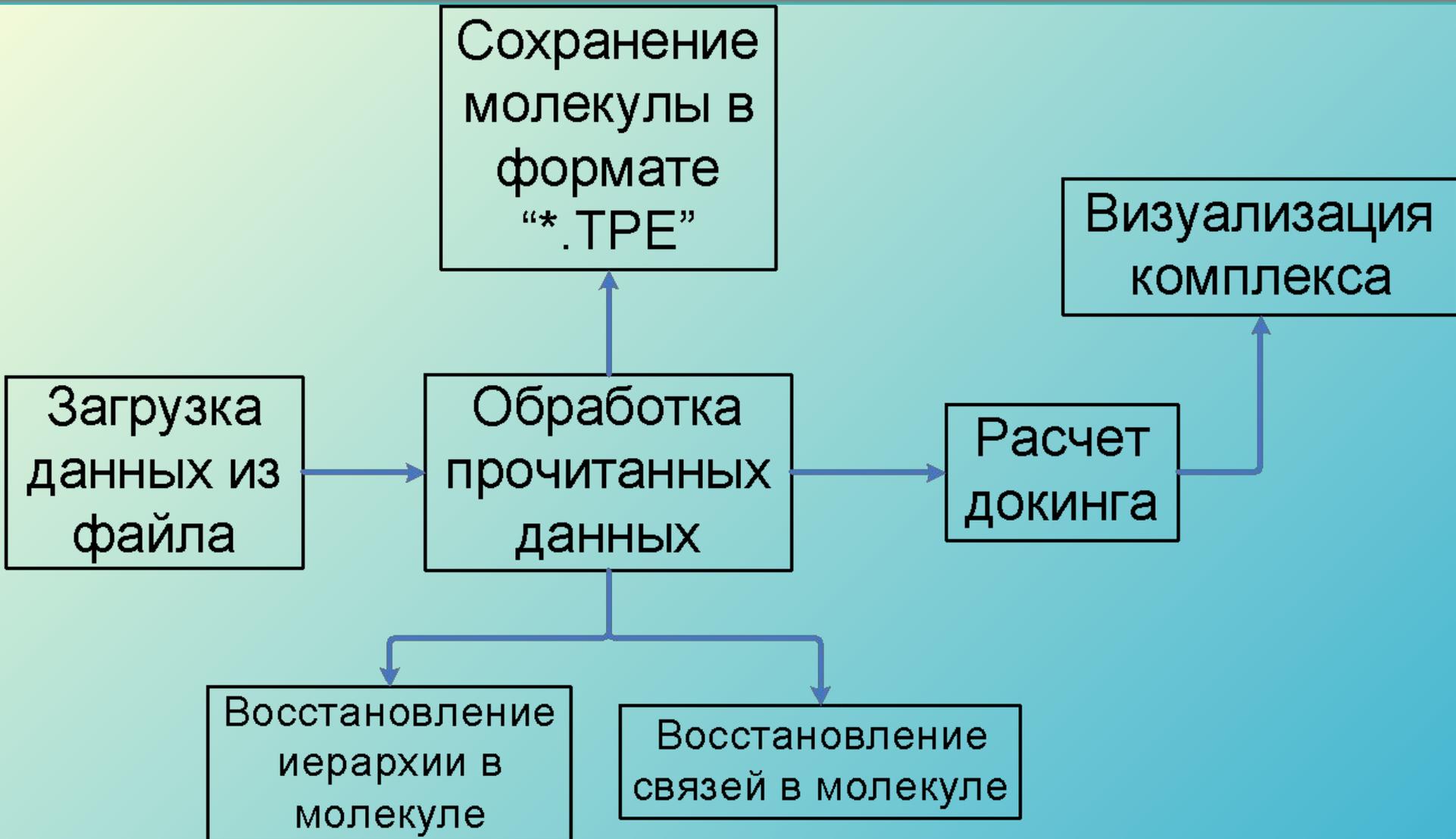


Составные части проекта

- Загрузка данных из файла формата “Protein Data Bank”
- Обработка информации
- Реализация докинга
- Визуализация, оконная система



Общий ход работы





Формат хранения протеинов

Формат “Protein Data Bank” :

Достоинства:

- Существование больших баз протеинов
- Большое распространение

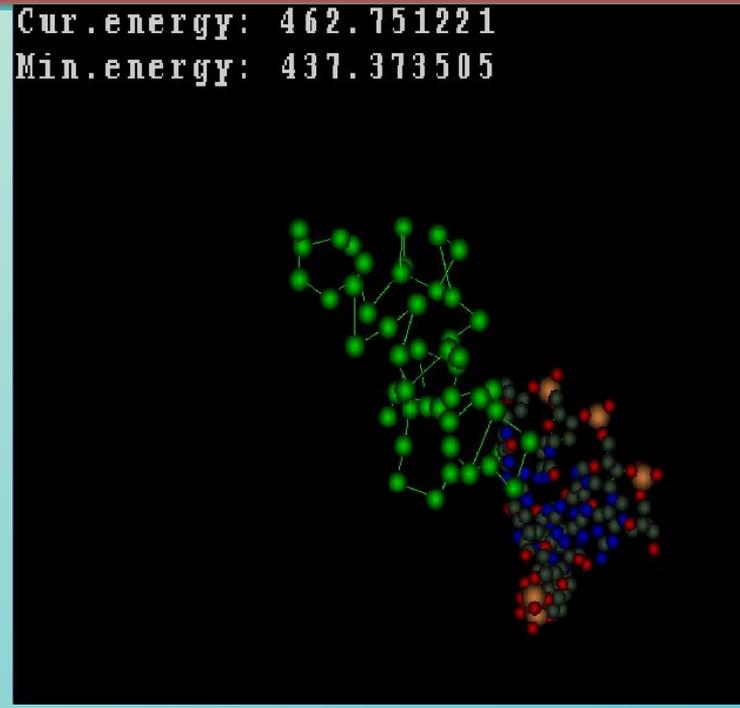
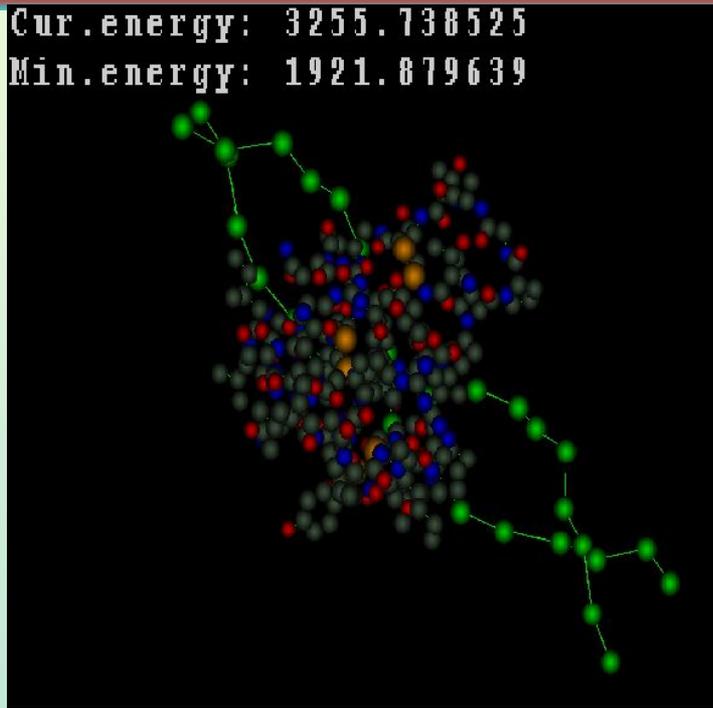
Недостатки:

- Большой объем памяти компьютера
- Отсутствие некоторых данных
- Наличие множества версий формата

Формат “TRF”:

- Отсутствие недостатков формата “PDB”

Реализация докинга



- **Первый этап** – случайное расположение молекулы лиганда (таблетки) на поверхности биомишени(протеина).
- **Второй этап** – расчет потенциальной энергии взаимодействия комплекса.
- **Цель** – минимизировать энергию взаимодействия.

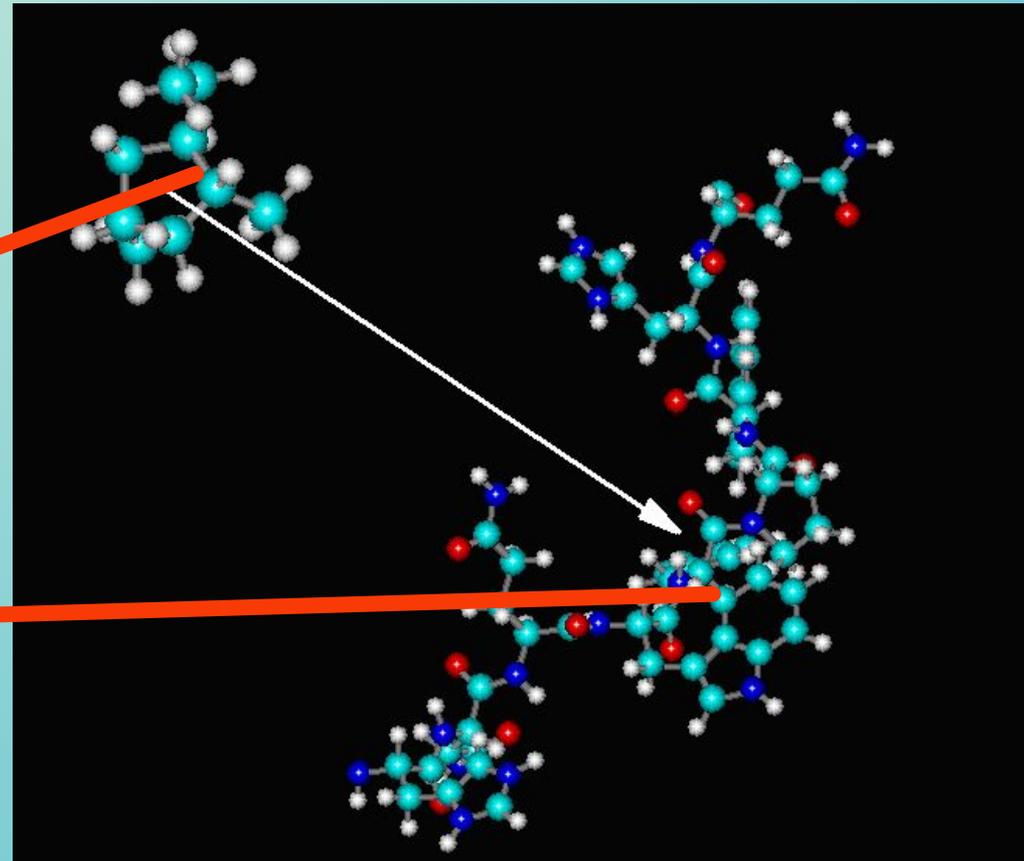


Расчет энергии взаимодействия

- Энергия электростатического взаимодействия
- Энергия Ван-дер-Ваальса

Лиганд

Биомишень



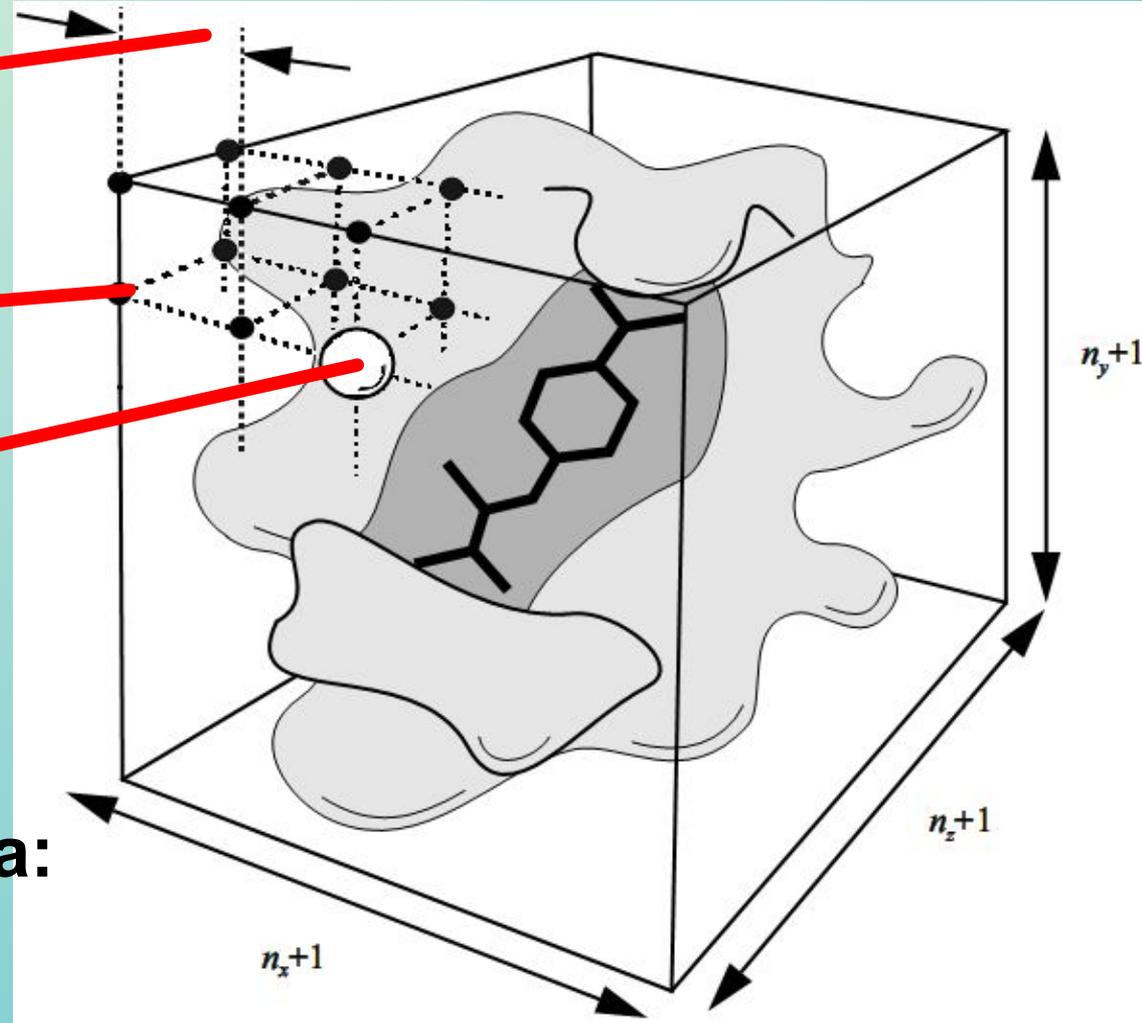


Генетический алгоритм

Размер ячейки

Вершина решетки

Пробный атом



Сложность алгоритма:

$$\sum_{Protein} \sum_{Ligand} \rightarrow \sum_{Ligand}$$



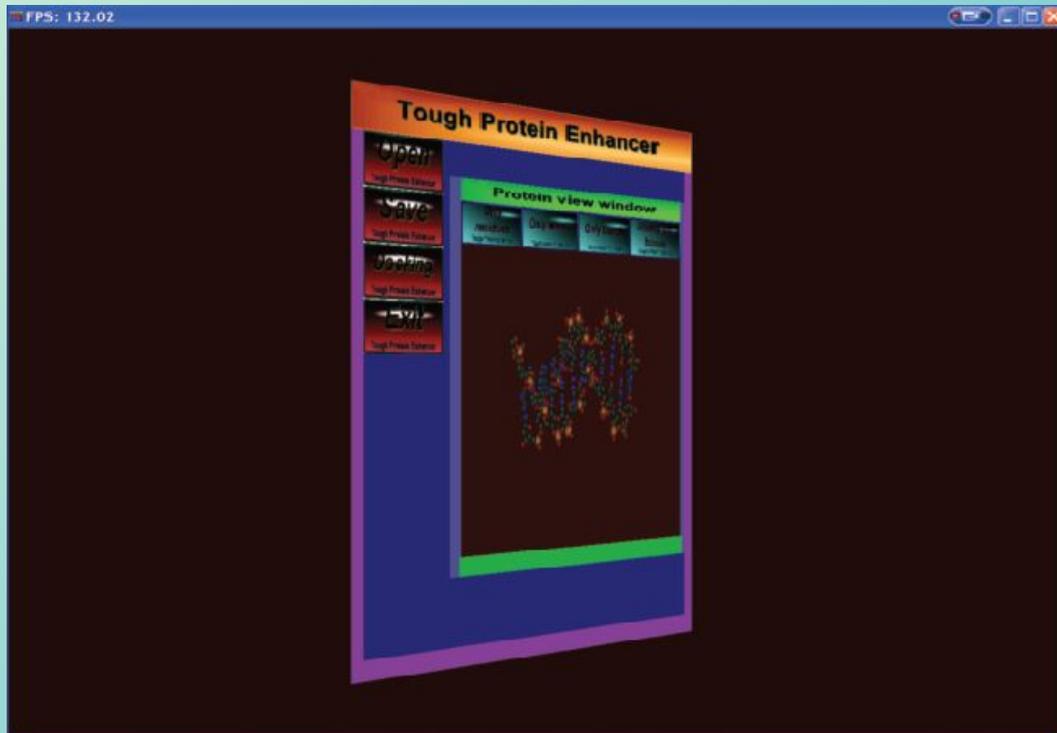
Визуализация

Низкий уровень

- Система вывода
- Система примитивов
- Система освещения
- Текстурный менеджер
- Система вывода прозрачных объектов

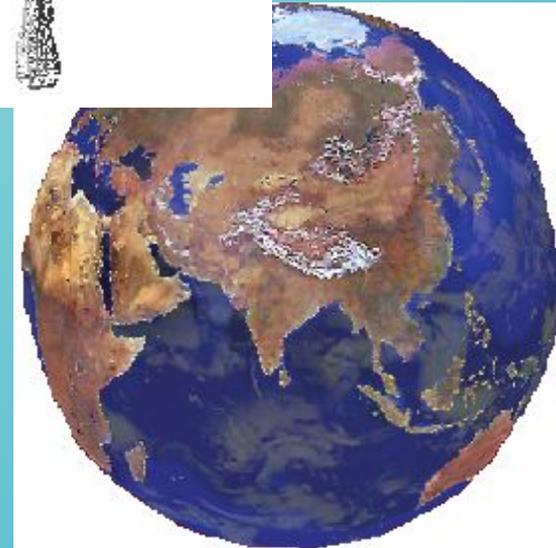
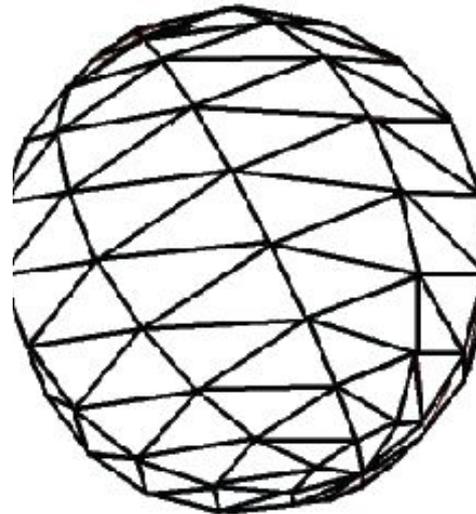
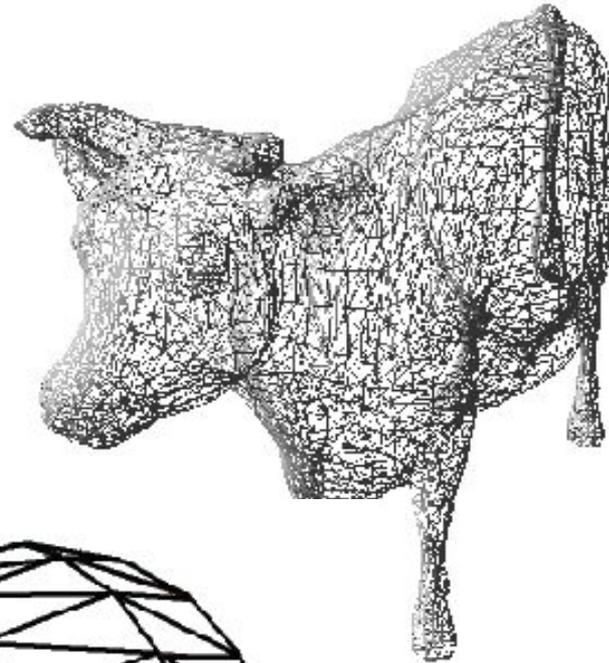
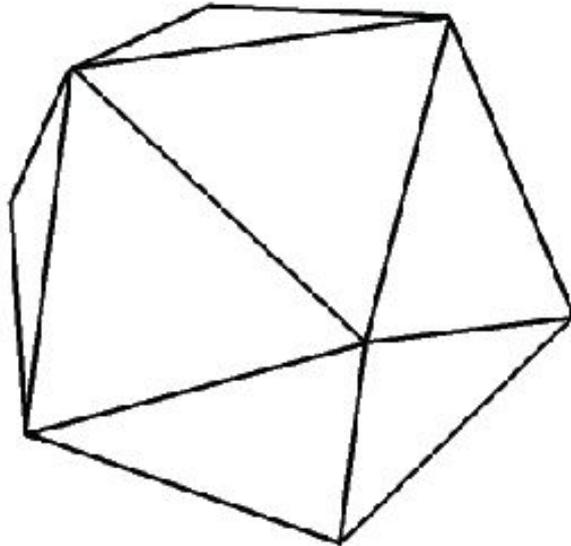
Оконная система

Высокий уровень –
взаимодействие с пользователем



Визуализация

Примеры примитивов





Визуализация

Оконная система





Выводы и перспективы

Выводы:

- Реализован оригинальный формат, который обладает значительными преимуществами по сравнению с PDB
- Реализована система визуализации протеинов
- Реализована быстродействующая система докинга

Перспективы:

- Оптимальный алгоритм докинга на базе генетических алгоритмов
- Учет других видов энергии взаимодействия молекул
- Улучшение системы визуализации