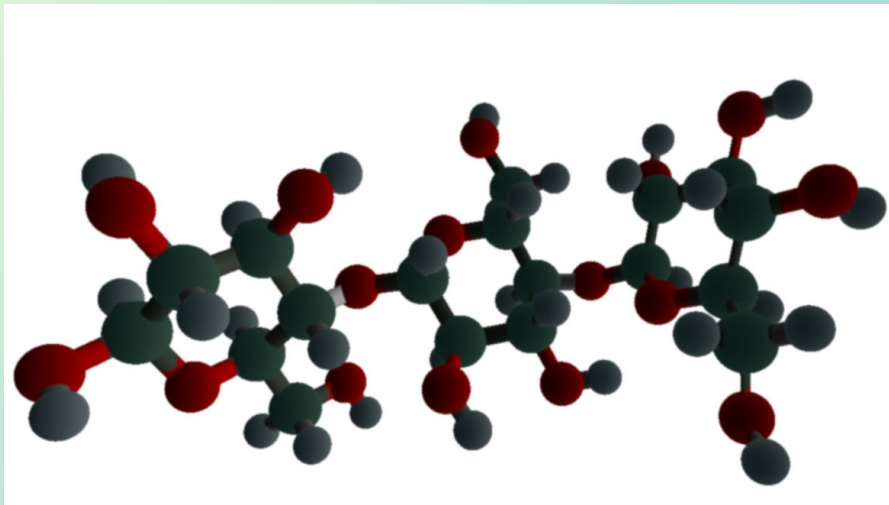




# Tough Protein Enhancer

*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*

\*

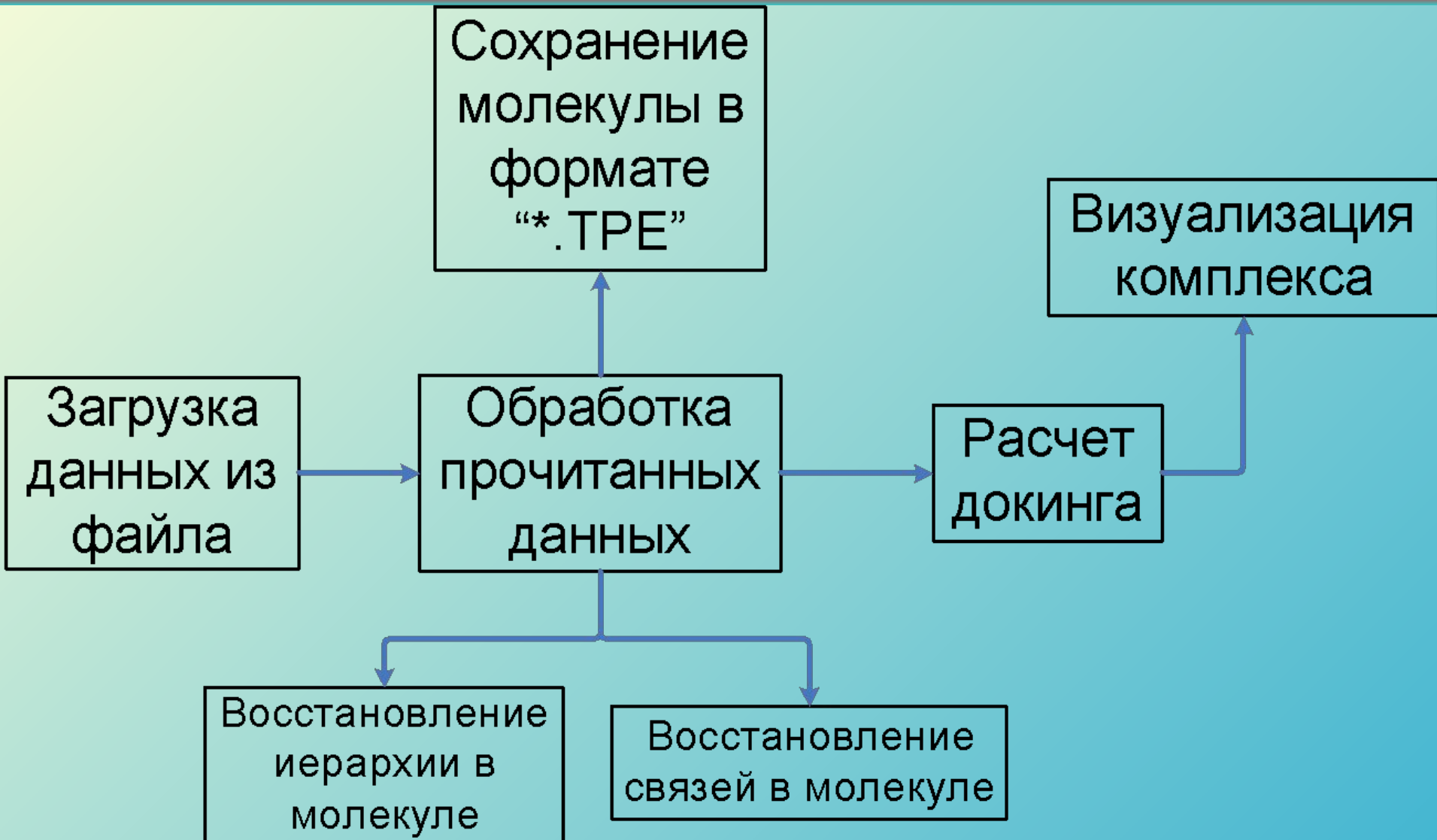


# Составные части проекта

- 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”:

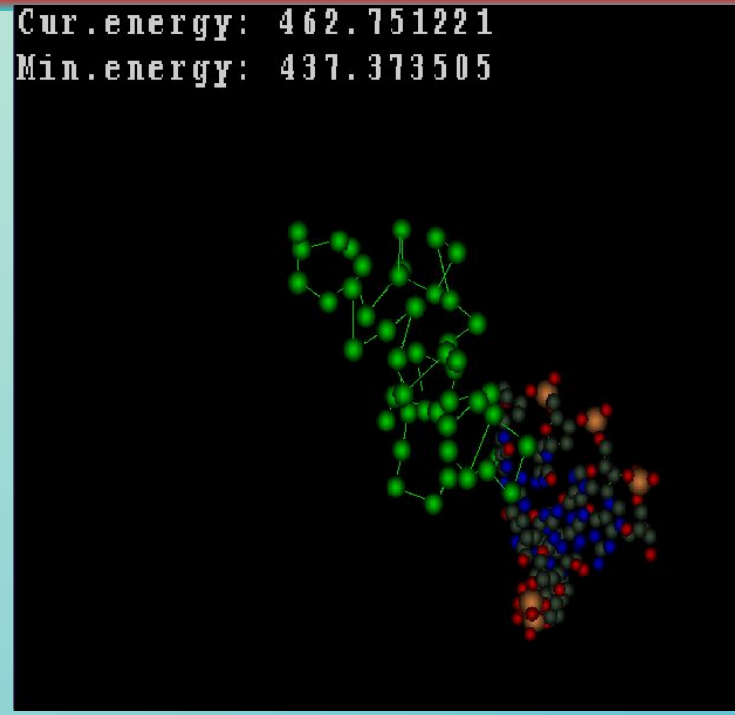
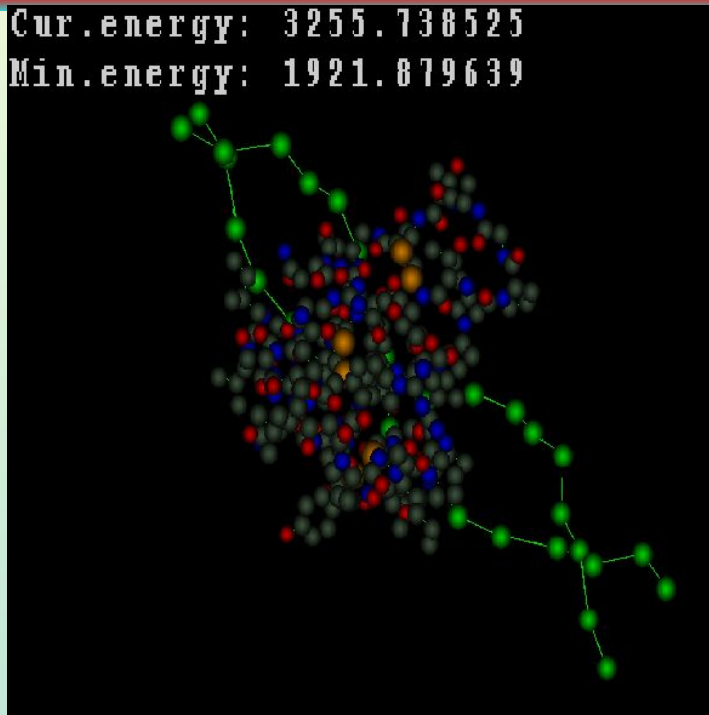
- Отсутствие недостатков формата “PDB”



# Формат хранения протеинов

LV4F3W	590	0	NON	106	29.686	14.356	20.990	1.00	45.40	0
WML0SX	591	0	NON	107	36.413	3.329	16.229	1.00	30.39	0
L0L0XW	592	0	NON	108	52.888	-8.790	16.078	1.00	24.06	0
L0L0XW	593	0	NON	109	52.711	-0.515	9.176	1.00	29.99	0
+e111J	594	0	NON	110	58.212	-8.411	12.729	1.00	26.12	0
F-RW	595	0	NON	111	56.186	-11.613	5.491	1.00	18.34	0
C0	596	0	NON	112	54.594	-1.823	22.148	1.00	27.83	0
C0	597	0	NON	113	60.959	-11.339	-0.923	1.00	23.09	0
C0	598	0	NON	114	60.187	-7.637	-2.569	1.00	36.83	0
C0	599	0	NON	115	75.363	-25.664	-3.534	1.00	34.47	0
C0	600	0	NON	116	55.853	-10.172	3.315	1.00	23.07	0
C0	601	0	NON	117	54.681	0.693	7.709	1.00	23.06	0
C0	602	0	NON	118	57.346	-13.770	8.495	1.00	27.15	0
C0	603	0	NON	119	63.802	-12.570	-0.995	1.00	28.10	0
C0	604	0	NON	120	65.246	-8.826	11.102	1.00	30.79	0
C0	605	0	NON	121	57.158	1.070	11.017	1.00	19.70	0
C0	606	0	NON	122	51.962	-8.124	9.027	1.00	21.91	0
C0	607	0	NON	123	55.178	-12.425	14.624	1.00	29.58	0
C0	608	0	NON	124	59.296	0.919	15.521	1.00	36.70	0
C0	609	0	NON	125	50.647	-2.056	19.584	1.00	21.63	0
C0	610	0	NON	126	46.251	-5.068	15.125	1.00	29.53	0
C0	611	0	NON	127	51.587	0.563	20.387	1.00	25.61	0
C0	612	0	NON	128	33.788	2.545	16.074	1.00	27.68	0
C0	613	0	NON	129	52.637	-13.191	14.636	1.00	23.37	0
C0	614	0	NON	130	61.501	-14.132	10.703	1.00	25.63	0
C0	615	0	NON	131	56.912	-5.091	18.367	1.00	25.73	0
C0	616	0	NON	132	63.412	-11.927	10.766	1.00	32.50	0
C0	617	0	NON	133	58.190	0.681	5.034	1.00	26.69	0
C0	618	0	NON	134	58.540	-8.298	0.014	0.50	32.43	0
C0	619	0	NON	135	40.833	-0.450	20.693	1.00	39.31	0
C0	620	0	NON	136	81.089	-12.275	-3.148	1.00	41.58	0
C0	621	0	NON	137	43.183	9.398	17.375	1.00	26.44	0
C0	622	0	NON	138	43.069	11.342	21.850	1.00	31.49	0
C0	623	0	NON	139	60.233	-14.402	8.316	1.00	30.34	0
C0	624	0	NON	140	74.352	-13.231	5.407	1.00	35.47	0
C0	625	0	NON	141	43.975	6.891	16.632	1.00	30.43	0
C0	626	0	NON	142	44.802	-5.908	10.724	1.00	27.62	0
C0	627	0	NON	143	46.156	-5.554	7.949	1.00	38.27	0
C0	628	0	NON	144	38.223	-2.997	18.840	1.00	42.71	0
C0	629	0	NON	145	45.008	7.060	11.690	1.00	33.14	0
C0	630	0	NON	146	74.752	-20.893	-11.136	1.00	31.35	0
C0	631	0	NON	147	40.996	-0.909	12.919	1.00	34.35	0
C0	632	0	NON	148	45.912	4.858	18.163	1.00	39.08	0
C0	633	0	NON	149	72.052	-22.701	-5.368	1.00	51.67	0
C0	634	0	NON	150	44.056	0.891	11.656	1.00	37.09	0
C0	635	0	NON	151	47.079	7.228	18.775	1.00	29.78	0
C0	636	0	NON	152	47.689	-4.111	19.254	1.00	32.30	0
C0	637	0	NON	153	46.334	7.895	21.242	1.00	45.20	0
C0	638	0	NON	154	46.226	9.770	17.175	1.00	29.65	0
C0	639	0	NON	155	54.055	0.969	21.054	1.00	30.42	0
C0	640	0	NON	156	50.004	7.527	19.817	1.00	31.52	0
C0	641	0	NON	157	60.452	-13.872	-0.935	1.00	42.47	0
C0	642	0	NON	158	61.145	-4.988	16.701	1.00	34.68	0
C0	643	0	NON	159	52.407	-8.067	18.646	1.00	35.64	0
C0	644	0	NON	160	85.152	-19.021	-0.540	1.00	58.01	0
C0	645	0	NON	161	40.181	3.870	9.351	1.00	47.77	0
C0	646	0	NON	162	88.699	-19.377	-2.750	1.00	39.22	0

# Реализация докинга



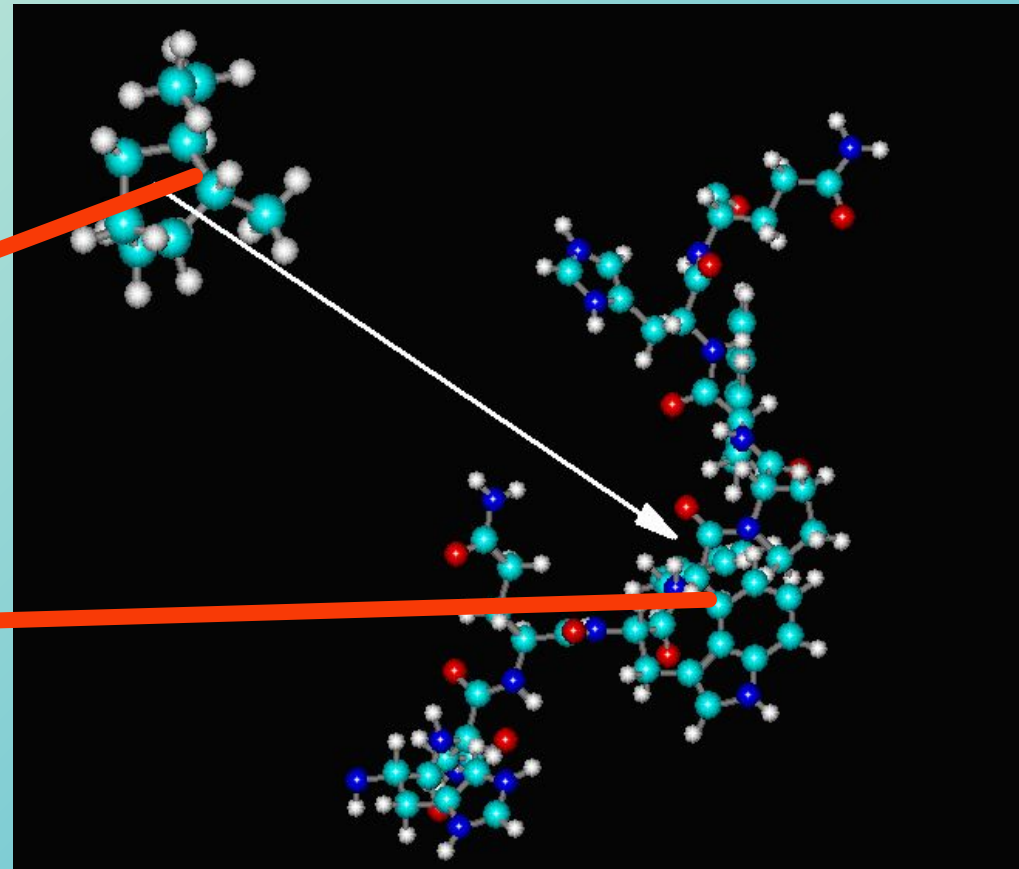
- **Первый этап** – случайное расположение молекулы лиганда (таблетки) на поверхности биомишени(протеина).
- **Второй этап** – расчет потенциальной энергии взаимодействия комплекса.
- **Цель** – минимизировать энергию взаимодействия.

# Расчет энергии взаимодействия

- Энергия электростатического взаимодействия
- Энергия Ван-дер-Ваальса

Лиганд

Биомишень



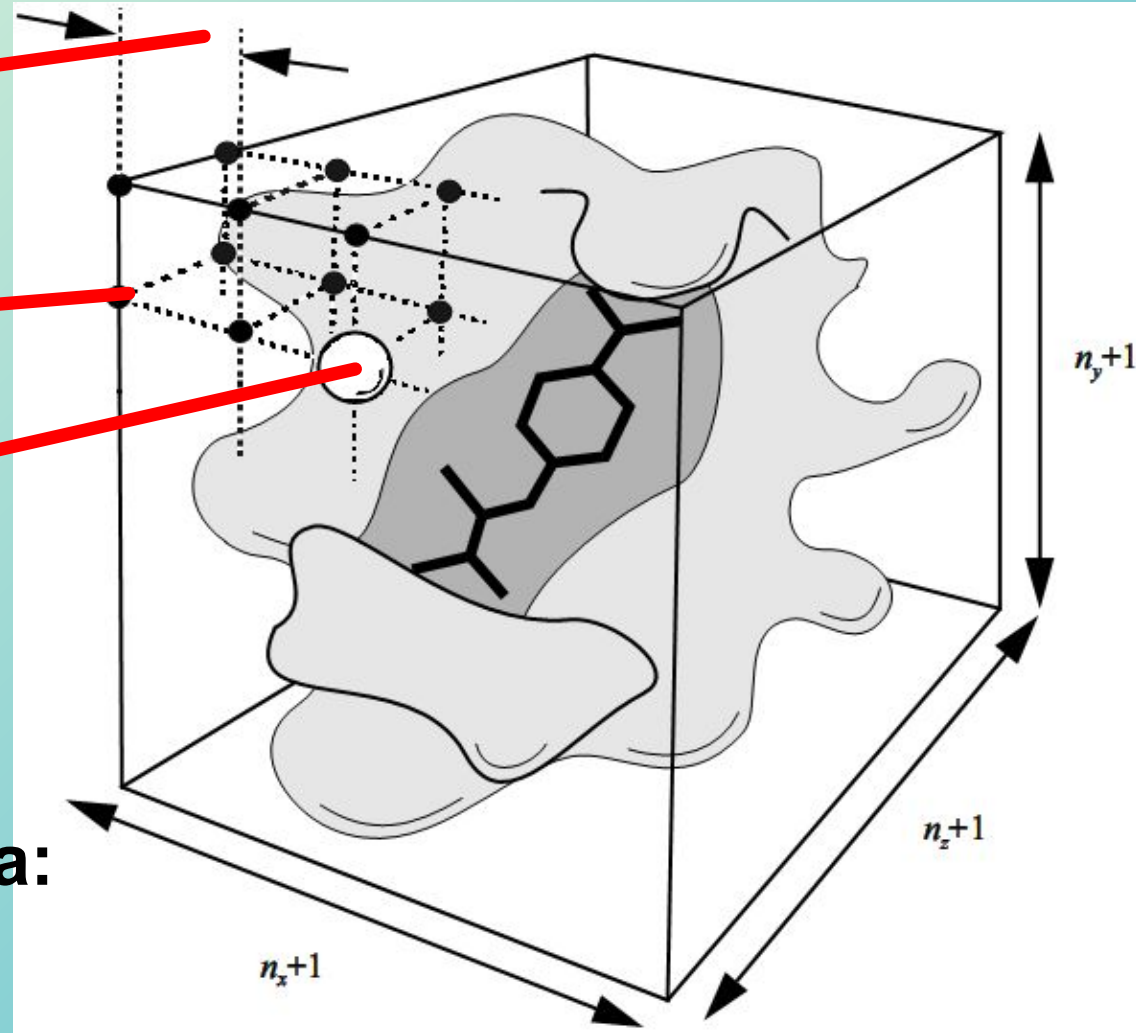


# Генетический алгоритм

Размер ячейки

Вершина решетки

Пробный атом



Сложность алгоритма:

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





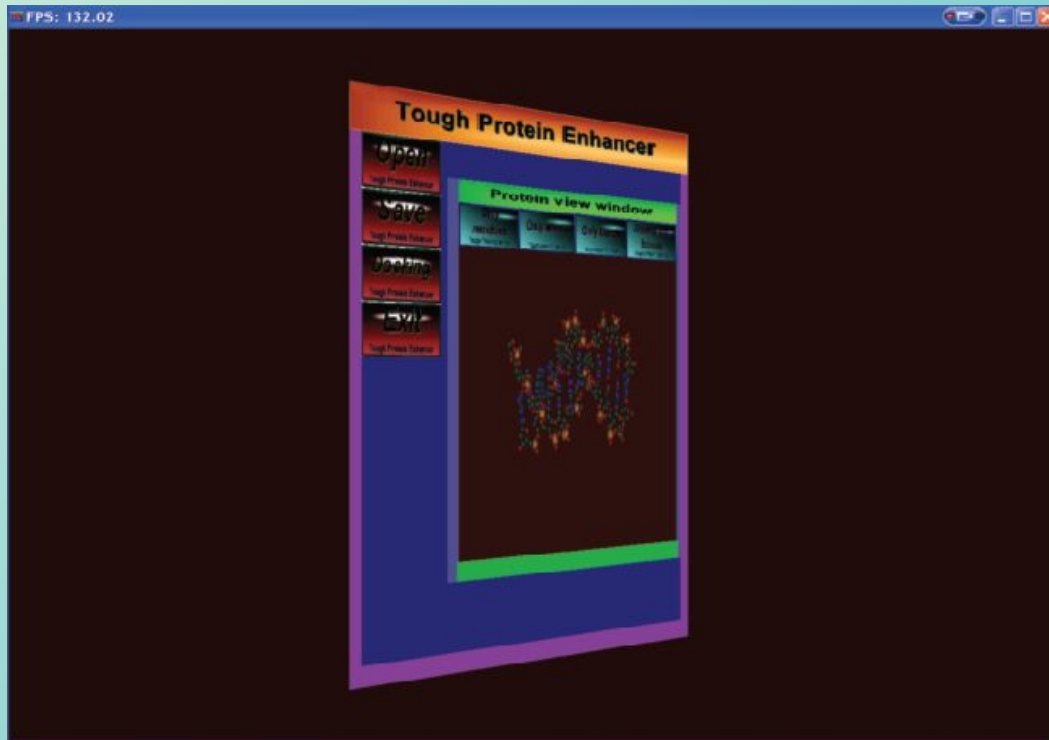
# Визуализация

## Низкий уровень

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

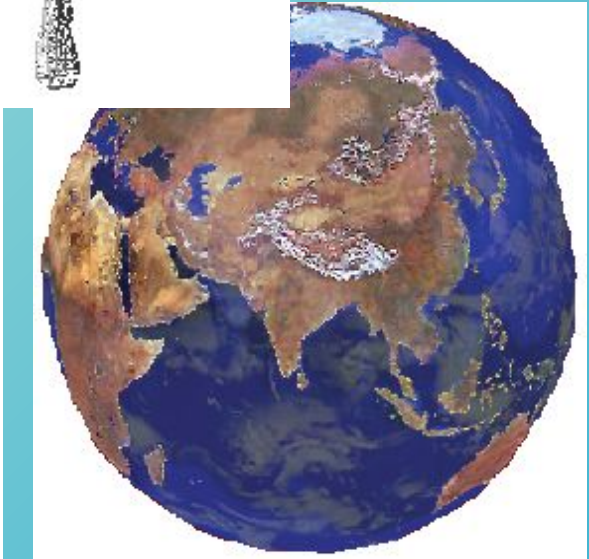
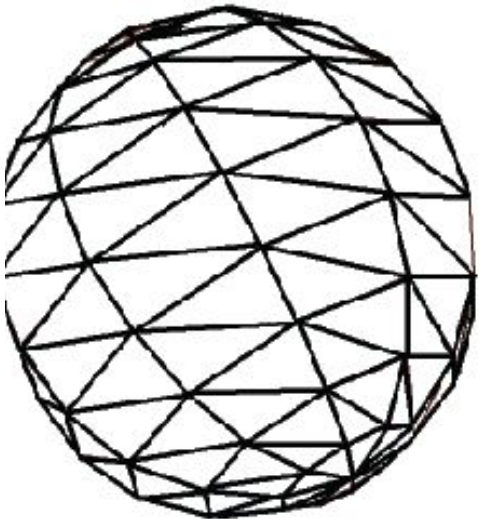
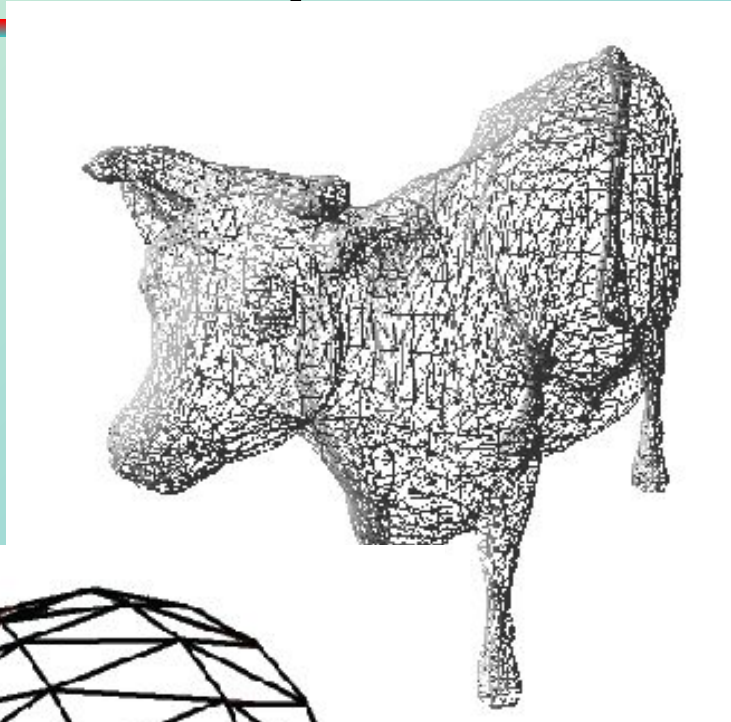
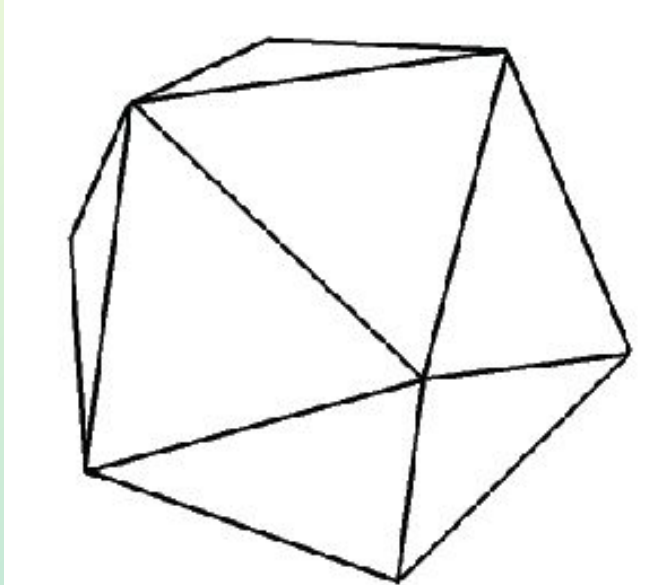
## Оконная система

Высокий уровень –  
взаимодействие с пользователем



# Визуализация

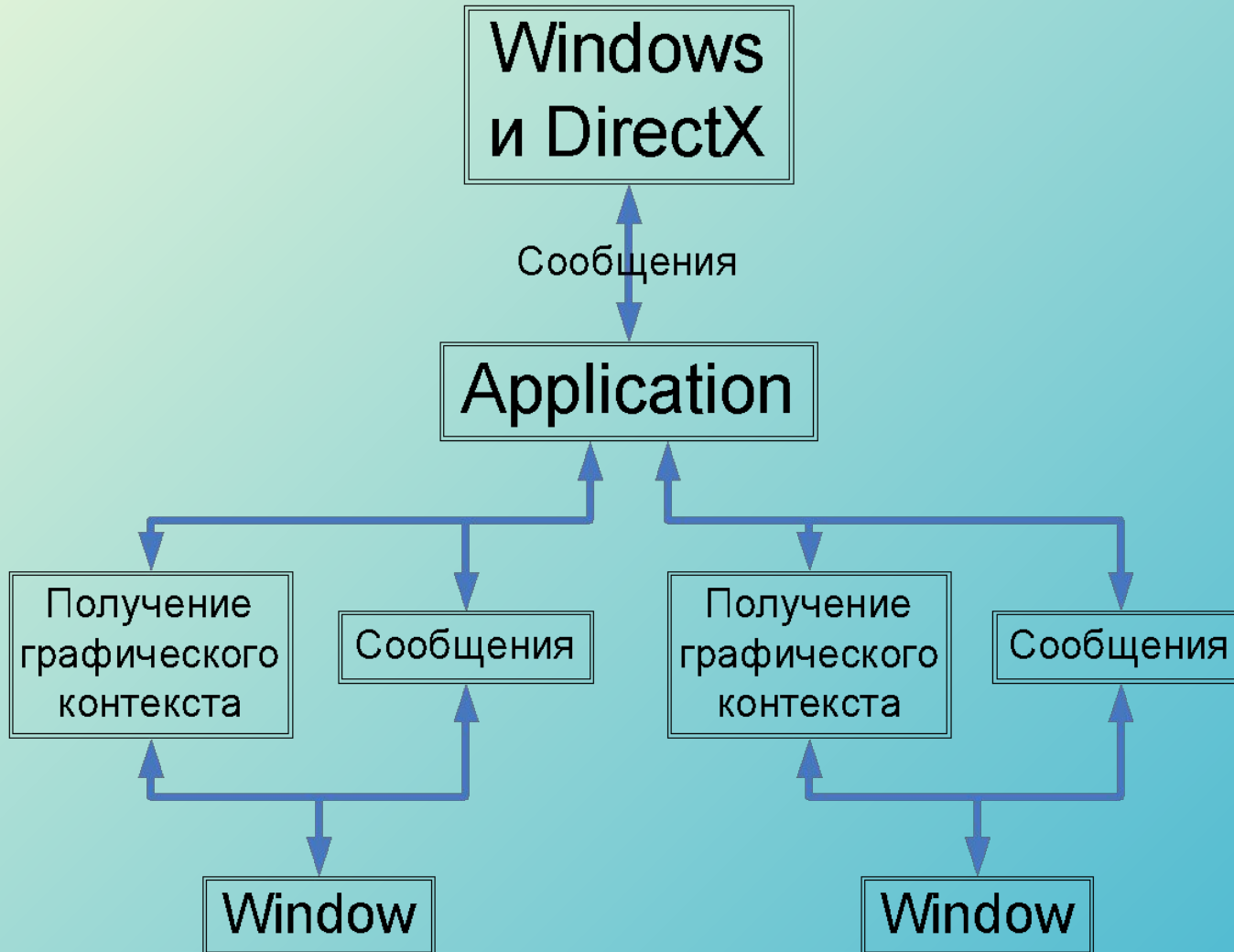
## Примеры примитивов





# 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