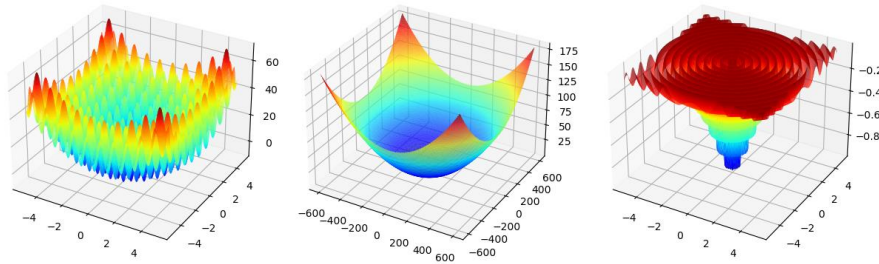
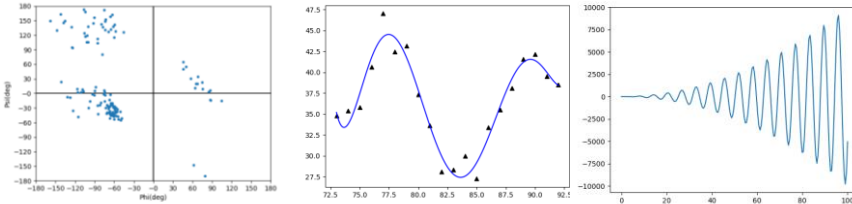


# Série de Taylor

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{b}{m}v$$

$$\frac{dy}{y} = -kdt$$

$$\frac{dv}{dt} = a_0 + a_1t + a_2t^2$$



$$\frac{dv}{dt} = a$$

$$\frac{dx}{dt} = v_0 + at$$

$$\frac{du}{dt} = -k(u - T)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_0 \sin \theta_0 - gt$$

- [Resumo](#)
- [Função  \$e^x\$](#)
- [Série de Taylor](#)
- [Função  \$\cos\(x\)\$](#)
- [Função  \$\sin\(x\)\$](#)
- [Energia Potencial do Sistema Massa-Mola](#)
- [Energia Potencial do Complexo Proteína-Ligante](#)
- [Referências](#)

O sistema-massa mola é um paradigma para modelagem de sistemas mais complexos. Nesta aula veremos como podemos usar a série de Taylor para aproximar a função energia potencial de um sistema massa-mola. Demonstraremos como podemos aproximar funções usando-se o recurso da série de Taylor. Iremos modelar a interação de fármacos com proteína como um sistema massa-mola e determinar sua energia potencial.

Palavras-chave: Física; força conservativa; energia potencial elástica; série de Taylor; função exponencial; função cosseno; função seno; sistema massa-mola; sistema molecular; interações intermoleculares; constante elástica; distância de equilíbrio; Taba; *Tool to Analyze Binding Affinity*.



#### Referência:

da Silva AD, Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo WF Jr. Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity. *J Comput Chem*. 2020 Jan 5;41(1):69-73. doi: 10.1002/jcc.26048. Epub 2019 Aug 13. PMID: 31410856.

Vamos considerar a expansão em série da função  $e^x$ . Podemos aproximar a função  $e^x$  pela série indicada abaixo.

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^6}{6!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$$

A expressão acima permite que aproximemos  $e^x$  a função por uma soma de termos da série.

Verificaremos a expansão em série para  $e^x$  com  $x = 2$ . Com a calculadora científica, calcule  $e^2$ . O resultado aproximado com quatro algarismos significativos é  $e^2 \approx 7,389$ . Usaremos a série acima para verificar a acurácia da aproximação. Calcularemos a série para um número crescente de termos na somatória.

A tabela a seguir mostra a evolução do cálculo de  $e^2$  conforme aumentamos o número de termos da série. Basta substituímos  $x = 2$  na série. Nas colunas 2 e 3 da tabela mostramos o **erro verdadeiro** ( $E_t$ ) e o **erro relativo porcentual verdadeiro** ( $\varepsilon_t$ ). As equações usadas para o cálculo do erro verdadeiro ( $E_t$ ) e do erro relativo porcentual verdadeiro ( $\varepsilon_t$ ) estão indicadas a seguir.

$$E_t = \text{Valor Verdadeiro} - \text{Aproximação}$$

$$\varepsilon_t = \frac{\text{Aproximação}}{\text{Valor Verdadeiro}} \times 100$$

No caso da expansão da série, consideraremos como valor verdadeiro o obtido com a calculadora científica. Na verdade usaremos uma aproximação também para o valor verdadeiro para facilitar os cálculos. Chamaremos valor verdadeiro é a aproximação fornecida pela calculadora científica com 4 algarismos significativo.

A aproximação da série será o valor calculado substituindo-se  $x = 2$  na série.

Série	$E_t$	$\varepsilon_t(\%)$
$1 + x = 1 + 2$	$7,389 - 3 = 4,389$	59,40
$1 + x + \frac{x^2}{2!} = 1 + 2 + 2$	$7,389 - 4 = 3,389$	45,87
$1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} = 1 + 2 + 2 + 1,33 \cdot$	$7,389 - 5,333 = 2,056$	27,83
$1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} = 1 + 2 + 2 + 1,33 \cdot + 0,666 \cdot$	$7,389 - 6,999 = 0,390$	5,278
$1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} = 1 + 2 + 2 + 1,33 \cdot + 0,666 \cdot + 0,266 \cdot$	$7,389 - 7,266 = 0,123$	1,665
$1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^6}{6!} = 1 + 2 + 2 + 1,33 \cdot + 0,666 \cdot + 0,266 \cdot + 0,088 \cdot$	$7,389 - 7,355 = 0,034$	0,4601
$1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^7}{7!}$ $= 1 + 2 + 2 + 1,33 \cdot + 0,666 \cdot + 0,266 \cdot + 0,088 \cdot + 0,0253968 \dots$	$7,389 - 7,380 = 0,009$	0,1218
$1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^8}{8!}$ $= 1 + 2 + 2 + 1,33 \cdot + 0,666 \cdot + 0,266 \cdot + 0,088 \cdot + 0,0253968 + 0,0063492$	$7,389 - 7,386 = 0,003$	0,04060

Pela tabela anterior, vemos que com uma série de oito termos já temos uma boa aproximação da função  $e^x$ , com um erro relativo porcentual verdadeiro de 0,04 %. A série que usamos é chamada de **série de Taylor**. Podemos expandir uma função  $f(x)$  que tem derivadas pela série indicada abaixo.

$$f(x) = c_0 + c_1(x - a) + c_2(x - a)^2 + c_3(x - a)^3 + c_4(x - a)^4 + \dots + c_n(x - a)^n + \dots$$

Para determinar as constantes  $c$ 's, podemos considerar um  $x$  conveniente, como  $x = a$ . Substituindo-se  $x = a$  na expressão acima, temos o seguinte resultado.

$$f(a) = c_0 + c_1(a - a) + c_2(a - a)^2 + c_3(a - a)^3 + c_4(a - a)^4 + \dots + c_n(a - a)^n + \dots$$

Os termos entre parênteses são zero. Assim, obtemos o  $c_0$ , como indicado a seguir.

$$f(a) = c_0 \rightarrow \boxed{c_0 = f(a)}$$

Como a função  $f(x)$  é diferenciável, podemos derivar  $f(x)$  para obter os outros  $c$ 's como segue.

Tomando-se a primeira derivada de  $f(x)$ , temos o seguinte expressão.

$$f'(x) = c_1 + 2c_2(x - a) + 3c_3(x - a)^2 + 4c_4(x - a)^3 + \dots + nc_n(x - a)^{n-1} + \dots$$

Fazendo-se  $x = a$ , temos o seguinte resultado.

$$f'(a) = c_1 + c_2 2(a - a) + c_3 3(a - a)^2 + c_4 4(a - a)^3 + \dots + c_n n(a - a)^{n-1} + \dots$$

Como vimos para  $c_0$ , os termos entre parêntese são zero. Assim conseguimos o coeficiente  $c_1$ .

$$f'(a) = c_1 \rightarrow \boxed{c_1 = f'(a)}$$



Agora determinamos a segunda derivada de  $f(x)$ .

$$f''(x) = 2c_2 + 3 \cdot 2c_3(x - a) + 4 \cdot 3c_4(x - a)^2 + \dots + n(n - 1)c_n(x - a)^{n-2} + \dots$$

Fazendo-se  $x = a$ , temos o seguinte resultado.

$$f''(a) = 2c_2 + 3 \cdot 2c_3(a - a) + 4 \cdot 3c_4(a - a)^2 + \dots + n \cdot (n - 1)c_n(a - a)^{n-2} + \dots$$

De forma similar, conseguimos o coeficiente  $c_2$ .

$$f''(a) = 2c_2 \rightarrow c_2 = \frac{f''(a)}{2}$$

Partimos para a terceira derivada de  $f(x)$ .

$$f'''(x) = 3.2c_3 + 4.3.2c_4(x - a) + \dots + n(n - 1)(n - 2)c_n(x - a)^{n-3} + \dots$$

Fazendo-se  $x = a$ , temos a expressão abaixo.

$$f'''(a) = 3.2c_3 + 4.3.2c_4(a - a) + \dots + n.(n - 1)(n - 2)c_n(a - a)^{n-3} + \dots$$

Determinamos o coeficiente  $c_3$ .

$$f'''(a) = 3.2c_3 \rightarrow c_3 = \frac{f'''(a)}{3!}$$

Focando agora na quarta derivada de  $f(x)$ .

$$f^{(4)}(x) = 4.3.2c_4 + \dots + n(n-1)(n-2)(n-3)c_n(x-a)^{n-4} + \dots$$

Usando-se o recurso de fazer  $x = a$ , temos o resultado abaixo.

$$f^{(4)}(a) = 4.3.2c_4 + \dots + n.(n-1)(n-2)(n-3)c_n(a-a)^{n-4} + \dots$$

Isolando-se  $c_4$  na expressão acima, chegamos ao resultado indicado a seguir.

$$f^{(4)}(a) = 4.3.2c_4 \rightarrow c_4 = \frac{f^{(4)}(a)}{4!}$$

Já destacamos o padrão de geração dos coeficientes  $c$ 's. Assim, podemos explicitar o polinômio da série de Taylor, como segue.

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)}{2!}(x - a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x - a)^3 + \frac{f^{(4)}(a)}{4!}(x - a)^4 + \dots$$
$$+ \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x - a)^n + \dots$$

Como exemplo, determinaremos a expansão em série de Taylor da função  $\cos(x)$ . Vamos calcular as primeiras derivadas de  $\cos(x)$  para depois usar a equação da série de Taylor. As primeiras derivadas da função  $\cos(x)$  são as seguintes.

$$f'(x) = -\sin(x) \qquad f''(x) = -\cos(x)$$

$$f'''(x) = \sin(x) \qquad f^{(4)}(x) = \cos(x)$$

$$f^{(5)}(x) = -\sin(x) \qquad f^{(6)}(x) = -\cos(x)$$

$$f^{(7)}(x) = \sin(x) \qquad f^{(8)}(x) = \cos(x)$$

Na equação da série de Taylor, quando fazemos  $a = 0$  temos a **série de Maclaurin**. Assim, tomando-se  $a = 0$ , temos os seguintes valores para as derivadas.

$$f'(0) = -\sin(0) = 0 \quad f''(0) = -\cos(0) = -1$$

$$f'''(0) = \sin(0) = 0 \quad f^{(4)}(0) = \cos(0) = 1$$

$$f^{(5)}(0) = -\sin(0) = 0 \quad f^{(6)}(0) = -\cos(0) = -1$$

$$f^{(7)}(0) = \sin(0) = 0 \quad f^{(8)}(0) = \cos(0) = 1$$

Substituindo-se os valores das derivadas na equação da série, temos o seguinte resultado.

$$f'(0) = -\sin(0) = 0 \quad f''(0) = -\cos(0) = -1$$

$$f'''(0) = \sin(0) = 0 \quad f^{(4)}(0) = \cos(0) = 1$$

$$f^{(5)}(0) = -\sin(0) = 0 \quad f^{(6)}(0) = -\cos(0) = -1$$

$$f^{(7)}(0) = \sin(0) = 0 \quad f^{(8)}(0) = \cos(0) = 1$$

$$\cos(x) = \cos 0 + 0(x - 0) + \frac{-1}{2!}(x - 0)^2 + \frac{0}{3!}(x - 0)^3 + \frac{1}{4!}(x - 0)^4 + \frac{0}{5!}(x - 0)^5 + \frac{-1}{6!}(x - 0)^6 + \frac{0}{7!}(x - 0)^7 + \frac{1}{8!}(x - 0)^8 \dots$$

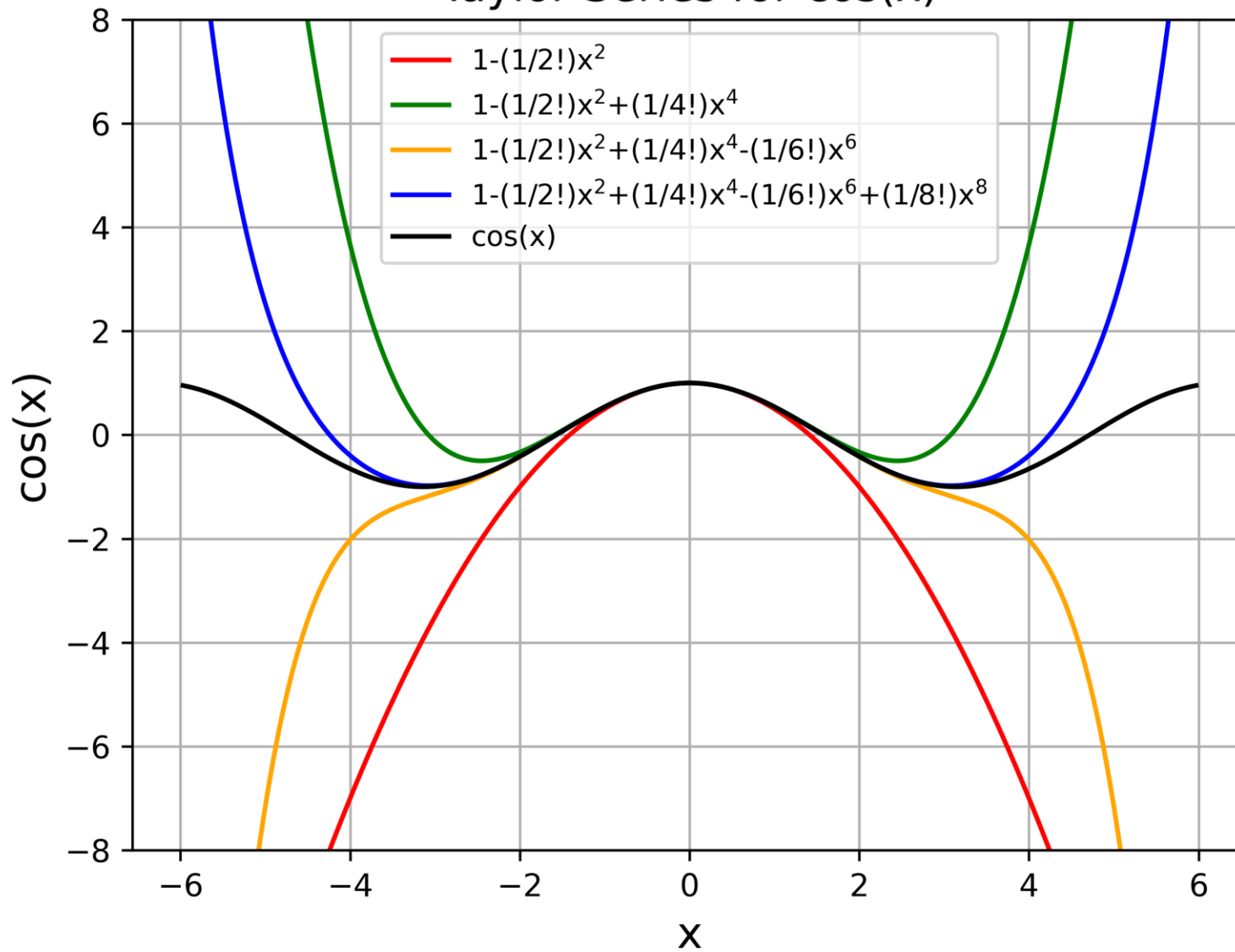
Assim, a expansão em série da função  $\cos(x)$  tem a seguinte expressão para os primeiros termos.

$$\cos(x) = 1 - \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \frac{1}{6!}x^6 + \frac{1}{8!}x^8 + \dots$$

No próximo slide temos o gráfico da função  $\cos(x)$  e das expansões truncadas em  $x^2$ ,  $x^4$ ,  $x^6$  e  $x^8$ . Vemos claramente a melhora da sobreposição da aproximação em série de Taylor, conforme aumentamos o número de termos da série.



### Taylor Series for $\cos(x)$

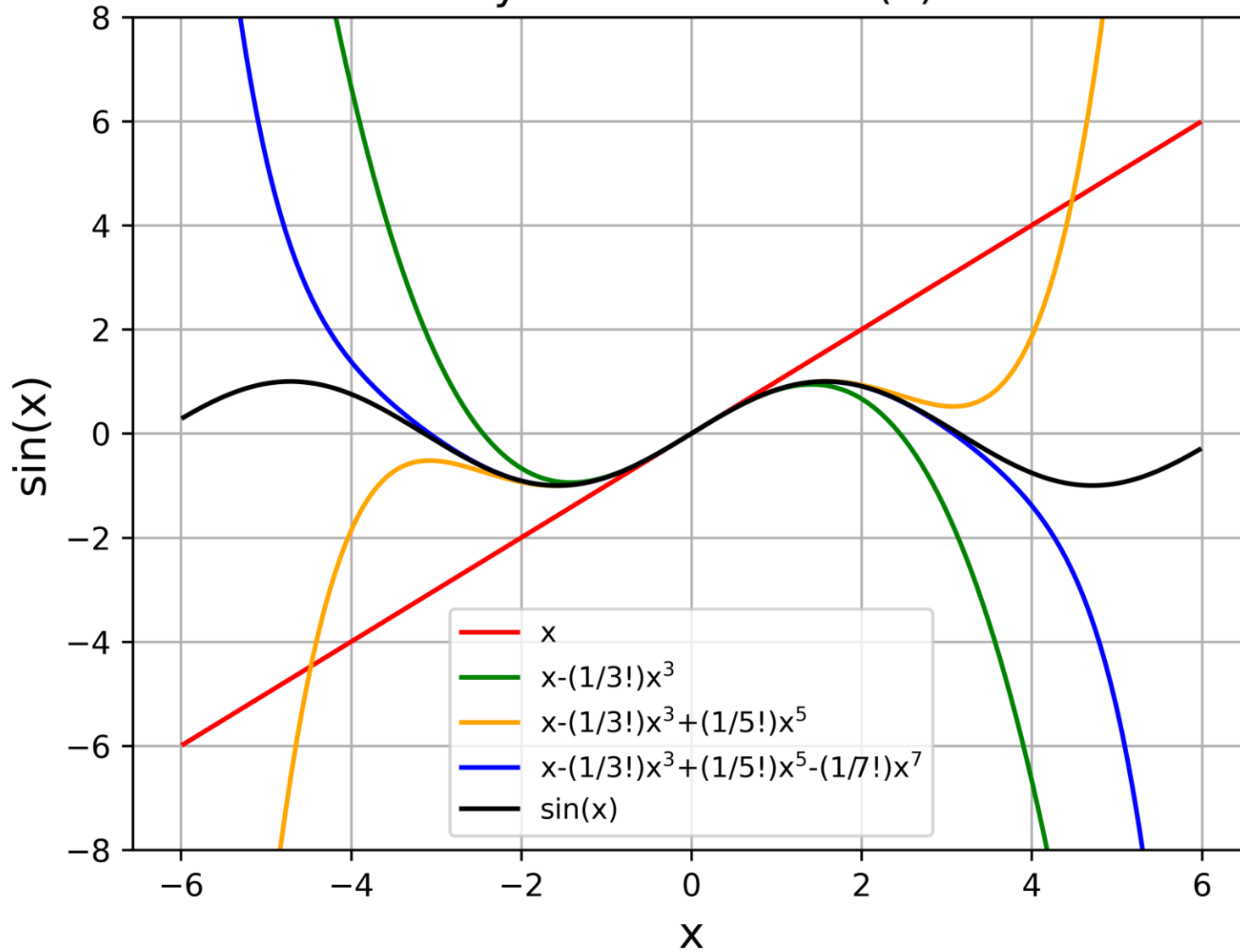


Repetindo o processo para a função  $\sin(x)$ , temos a seguinte expressão para os primeiros termos.

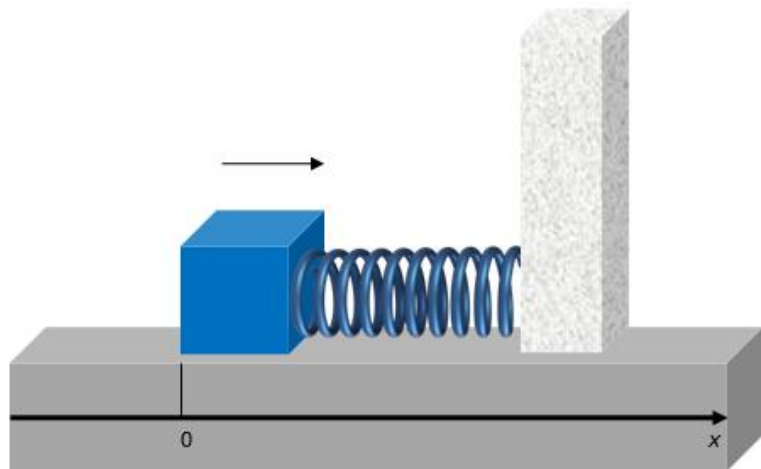
$$\sin(x) = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 + \dots$$

No próximo slide temos o gráfico da função  $\sin(x)$  e das expansões truncadas em  $x$ ,  $x^3$ ,  $x^5$  e  $x^7$ . Como visto para função  $\cos(x)$ , ocorre melhora da sobreposição da aproximação em série de Taylor conforme aumentamos o número de termos da série.

### Taylor Series for $\sin(x)$



Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



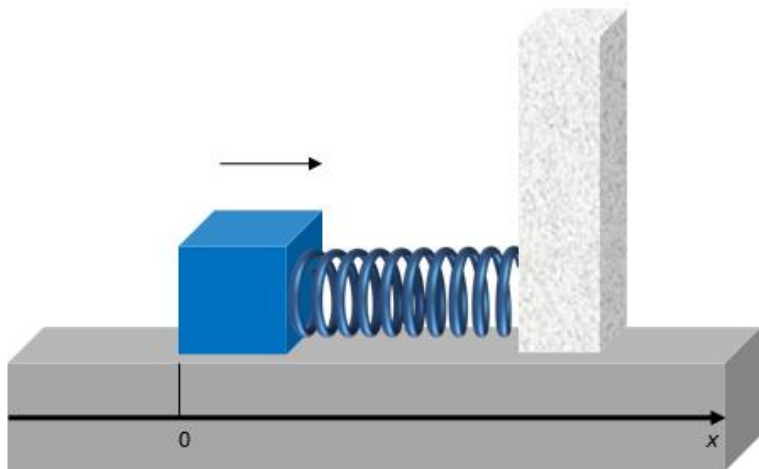
Resumo do Sistema Massa-Mola

$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

No sistema massa-mola temos uma massa ligada a uma mola, que está fixa numa das extremidades e ligada a um bloco que está apoiado numa superfície sem atrito. O bloco oscila sem atrito. A mola tem **constante elástica**  $k$ . Quando o bloco está na posição  $x_0$ , a **força elástica da mola** ( $F(x)$ ) é zero ( $F(x_0) = 0$ ). Consideramos que a **energia potencial do sistema massa-mola** é dada por  $U(x)$ . Vamos considerar que essa função energia potencial tem derivadas, assim podemos ter sua expansão em série de Taylor como indicada a seguir.

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

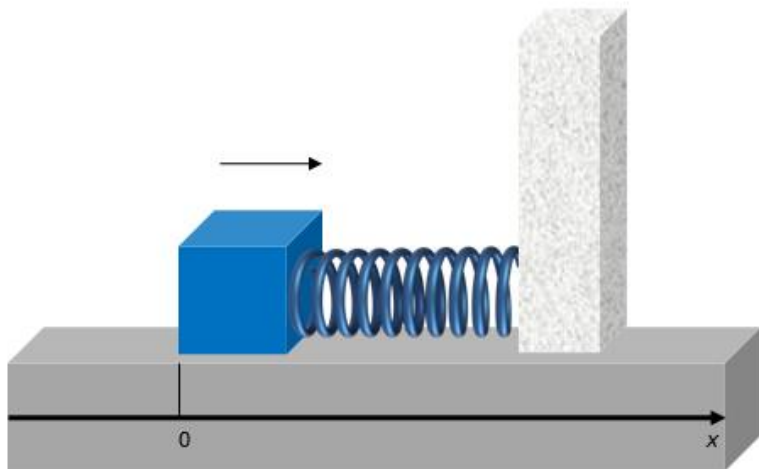
$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Abaixo temos a expansão em série de Taylor da função energia potencial do sistema massa-mola  $U(x)$  em torno do ponto  $x = a$ .

$$U(x) = U(a) + U'(a)(x - a) + \frac{U''(a)}{2!}(x - a)^2 + \frac{U'''(a)}{3!}(x - a)^3 + \frac{U^{(4)}(a)}{4!}(x - a)^4 + \dots + \frac{U^{(n)}(a)}{n!}(x - a)^n + \dots$$

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

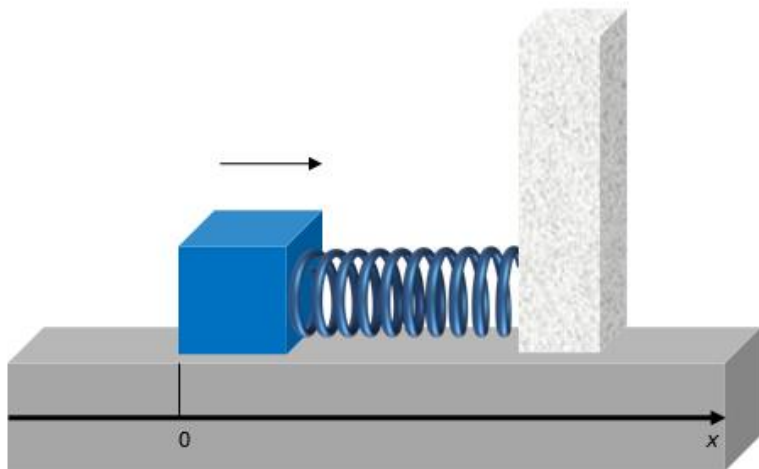
$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Vamos fazer  $a = x_0$ , a posição de equilíbrio do sistema massa-mola.

$$U(x) = U_0 + U'(x_0)(x - x_0) + \frac{U''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{U'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \frac{U^{(4)}(x_0)}{4!}(x - x_0)^4 + \dots + \frac{U^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \dots$$

Onde  $U_0 = U(x_0)$ .

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

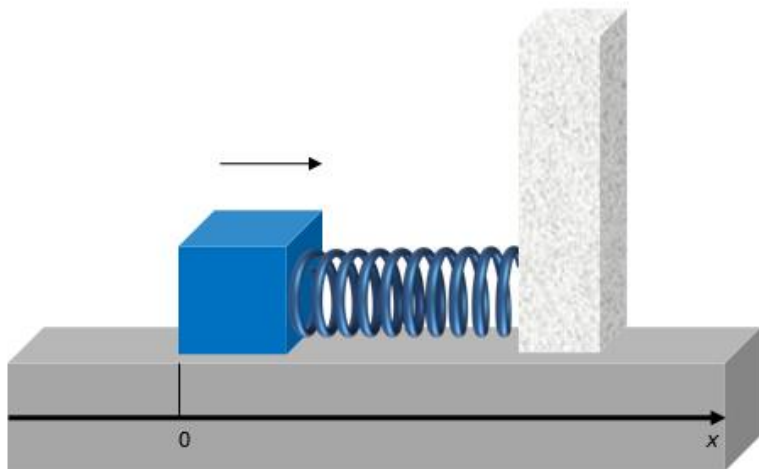
$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Sabemos que  $F(x) = -dU/dx = -U'(x)$ . Considerando-se  $x = x_0$ , temos  $F(x_0) = -U'(x_0)$ . No sistema massa-mola  $F(x_0) = 0$ . Pois é a situação onde não temos distensão ou compressão da mola, ou seja,  $F(x_0) = -U'(x_0) = 0$ .

$$U(x) = U_0 + \cancel{U'(x_0)}(x - x_0) + \frac{U''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{U'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \frac{U^{(4)}(x_0)}{4!}(x - x_0)^4 + \dots + \frac{U^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \dots$$

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

$$F(x) = -\frac{dU}{dx}$$

$$F(x_0) = 0$$

$$F(x) = -kx$$

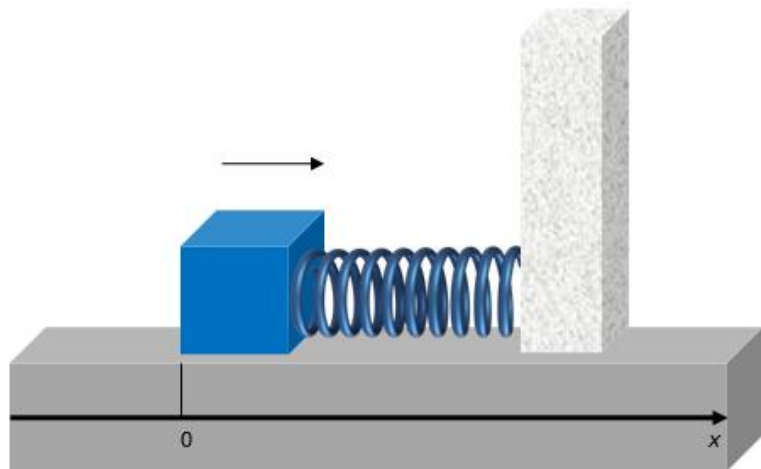
$$U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Rearranjando-se os termos da série, chegamos ao resultado abaixo.

$$U(x) - U_0 = \frac{U''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 + \frac{U'''(x_0)}{3!} (x - x_0)^3 + \frac{U^{(4)}(x_0)}{4!} (x - x_0)^4 + \dots + \frac{U^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n + \dots$$



Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

$$F(x) = -\frac{dU}{dx}$$

$$F(x_0) = 0$$

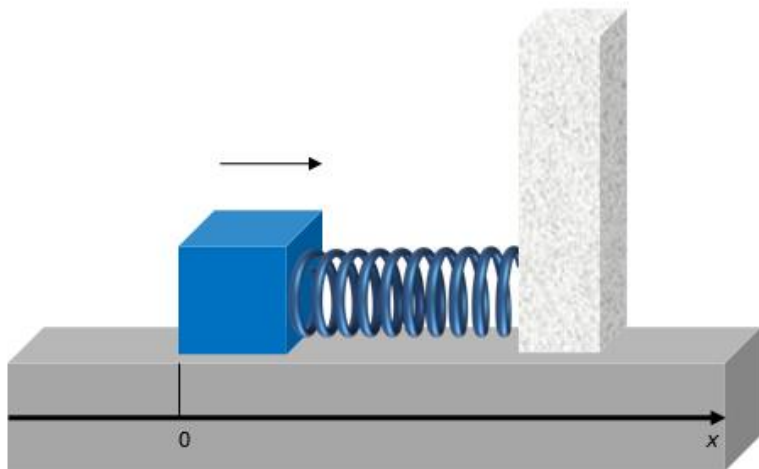
$$F(x) = -kx$$

$$U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Vamos considerar que o sistema só pode apresentar pequenas oscilações, onde  $x$  não se afasta muito da posição de equilíbrio  $x_0$ . Assim, os termos com potência de 3 em diante são desprezíveis e podem ser eliminados da série abaixo.

$$U(x) - U_0 = \frac{U''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 + \frac{U'''(x_0)}{3!} (x - x_0)^3 + \frac{U^{(4)}(x_0)}{4!} (x - x_0)^4 + \dots + \frac{U^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n + \dots$$

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

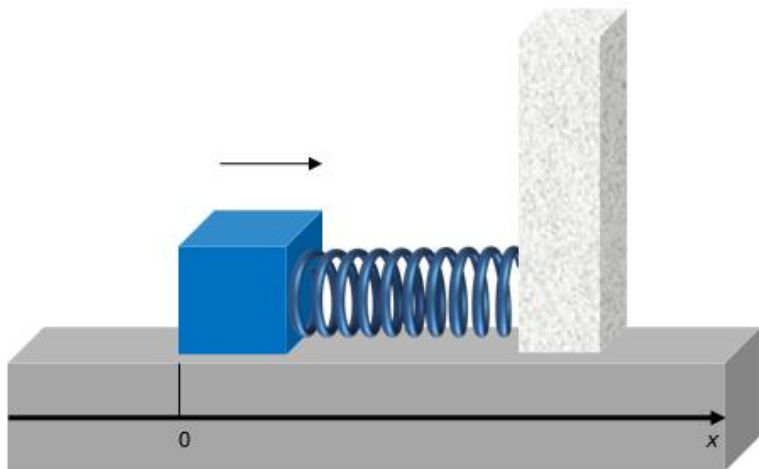
$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Eliminando-se os termos com expoente igual ou maior que 3, chegamos à expressão abaixo. Sabemos que  $F(x) = -U'(x)$  e que  $F(x) = -kx$ . Assim,  $-U'(x) = -kx$ , ou seja,  $U'(x) = kx$ .

$$U(x) - U_0 = \frac{U''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2$$

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

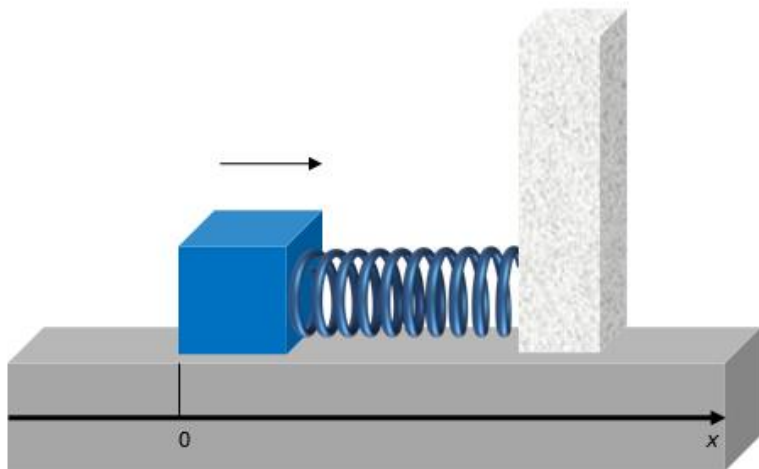
$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Calculando-se a segunda derivada de  $U(x)$ , temos o seguinte resultado:  $U''(x) = k$ , ou seja,  $U''(x_0) = k$ .

$$U(x) - U_0 = \frac{U''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2$$

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

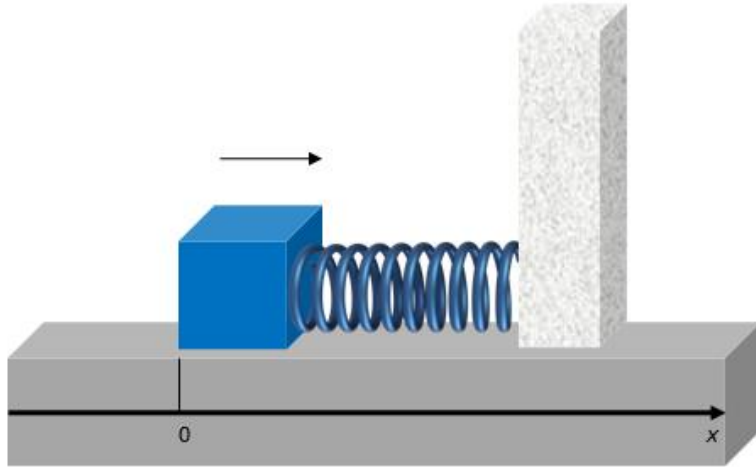
$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Substituindo-se  $U''(x_0) = k$  na expressão abaixo, temos a seguinte equação.

$$U(x) - U_0 = \frac{U''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 \rightarrow U(x) - U_0 = \frac{k}{2} (x - x_0)^2$$

$$U(x) - U_0 = \frac{k}{2} (x - x_0)^2$$

Sistema massa-mola com energia potencial elástica  $U(x)$ .



Resumo do Sistema Massa-Mola

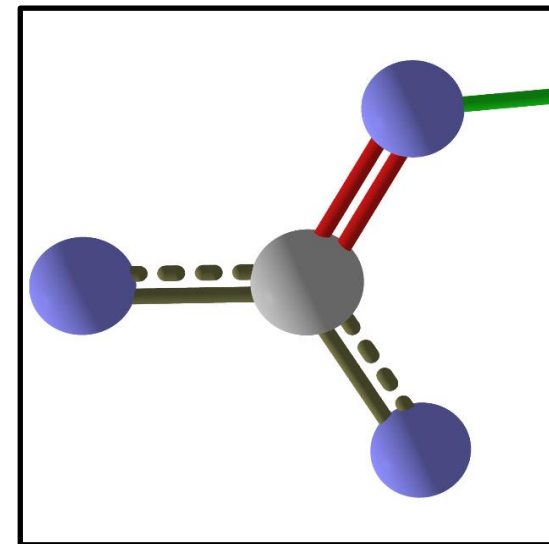
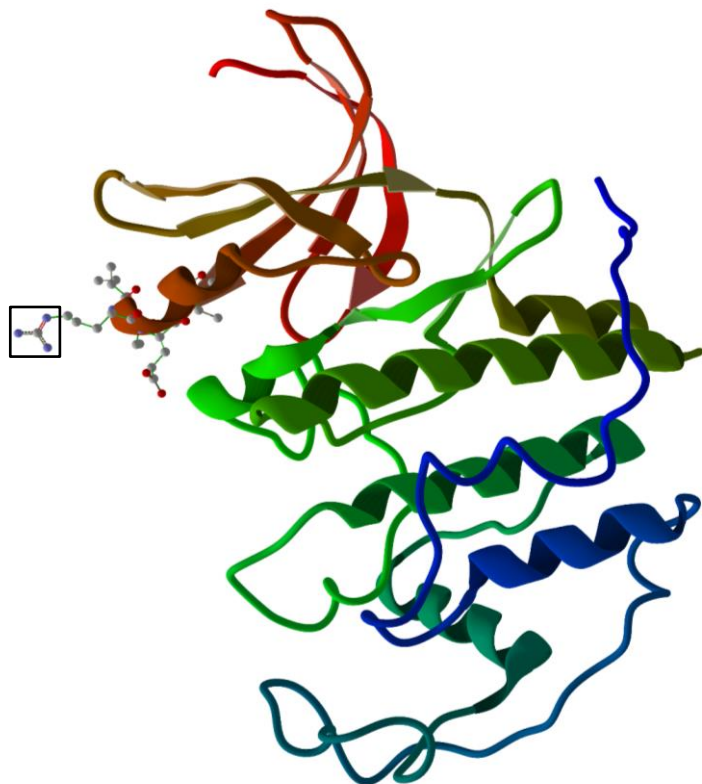
$$F(x) = -\frac{dU}{dx} \quad F(x_0) = 0$$

$$F(x) = -kx \quad U'(x_0) = \frac{dU(x_0)}{dx} = 0$$

Escolhendo-se  $x_0 = 0$  e  $U_0 = 0$ , temos o seguinte resultado.

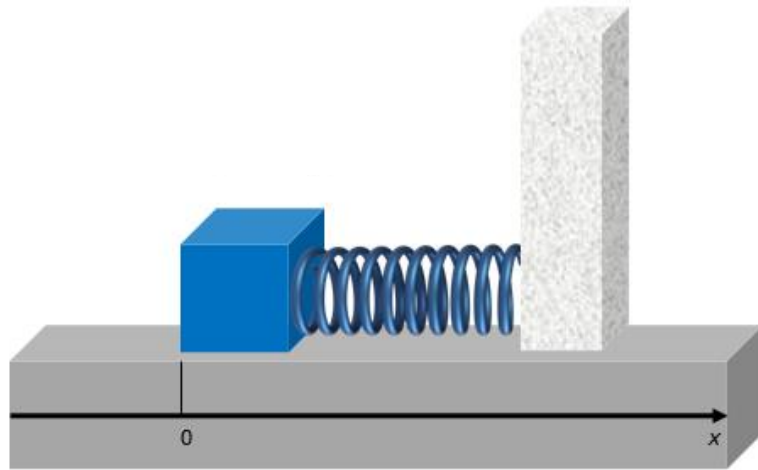
$$U(x) = \frac{k}{2}x^2$$

Abaixo temos a estrutura tridimensional de uma proteína com destaque para alguns átomos dos aminoácidos que formam sua estrutura.

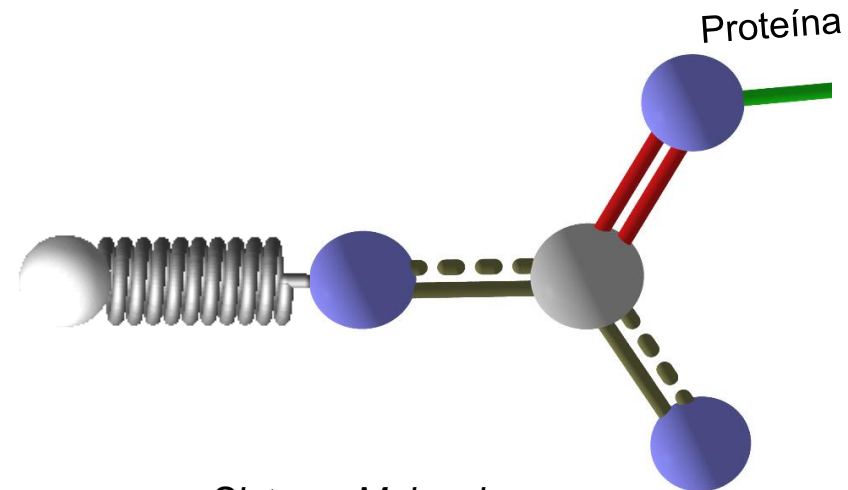


À esquerda temos a visão da proteína completa e à direita um zoom numa região com destaque para alguns átomos da cadeia lateral de um aminoácido. Podemos modelar as interações intermoleculares entre os átomos da proteína e um ligante considerando esta como se fosse um sistema massa-mola.

Modelamos as interações de um ligante e uma proteína como um sistema massa-mola.



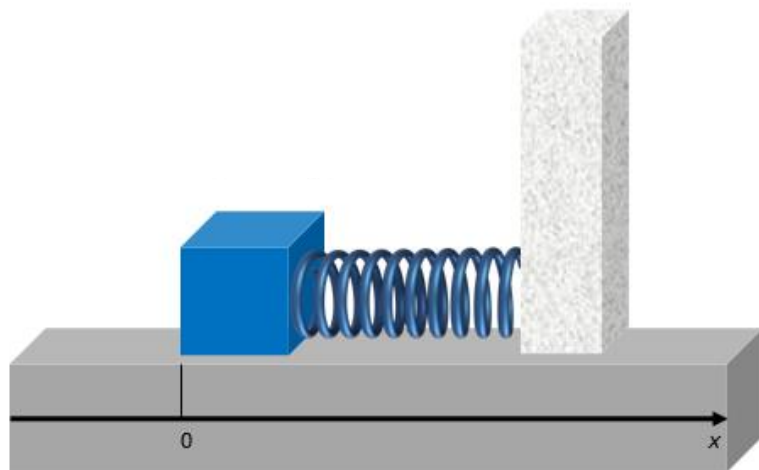
*Sistema Massa-Mola*



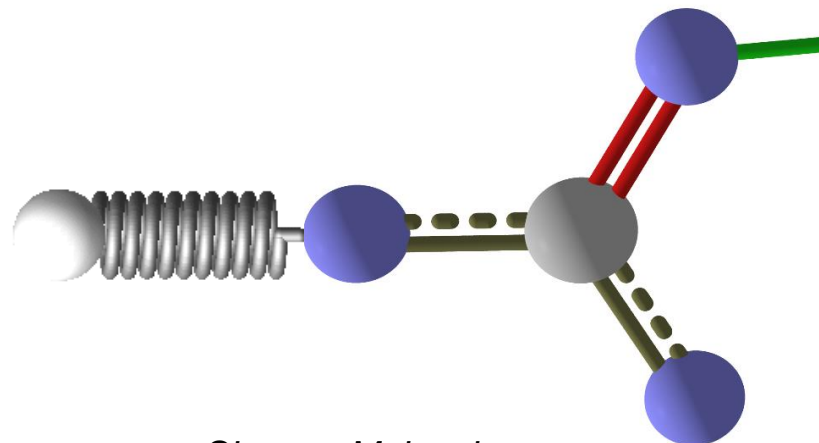
*Sistema Molecular*

O ligante interagindo com uma proteína pode ser um fármaco. Nessa abordagem, vemos cada átomo da proteína como fixo (átomos à direita) e os átomos do fármaco como livres para se moverem na extremidade de uma mola. Na figura acima, a esfera à esquerda da mola representa um átomo do fármaco. O **sistema molecular** (proteína-fármaco) é análogo ao **sistema massa-mola** mostrado à esquerda.

Modelamos as interações de um ligante e uma proteína como um sistema massa-mola.



*Sistema Massa-Mola*

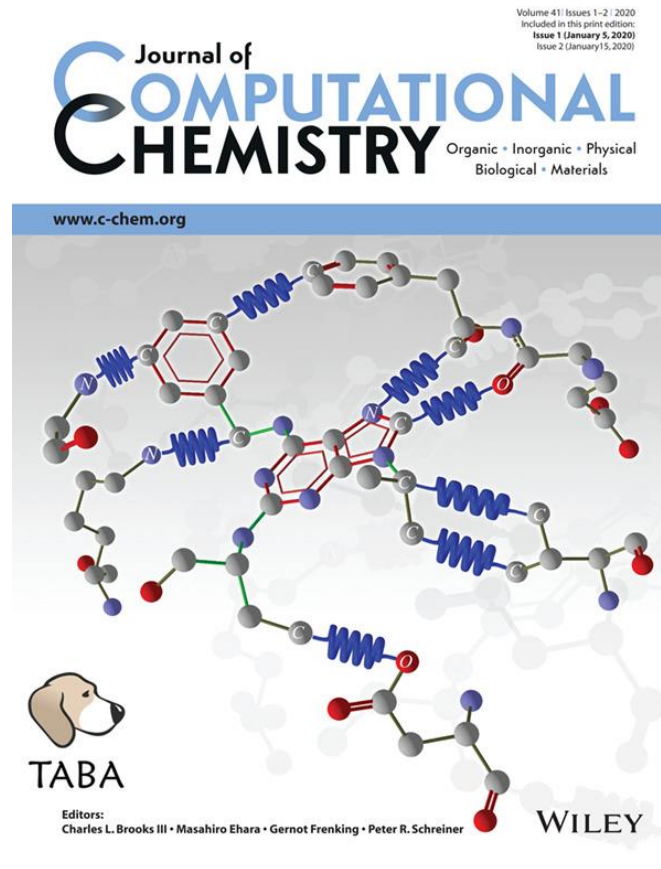


*Sistema Molecular*

Modelando-se as interações entre os átomos como massas ligadas a molas, podemos usar a equação da energia potencial do sistema massa-mola para fazer uma estimativa da energia potencial do fármaco interagindo com a proteína. Essa informação é importante, pois esperamos que para um fármaco ser eficaz este deve estar bem encaixado na sua proteína alvo. Quando melhor for o encaixe, menor será a energia potencial. Assim, a partir da análise da estrutura do fármaco em complexo com a proteína, podemos calcular sua energia potencial e dizer se este é eficaz ou não.



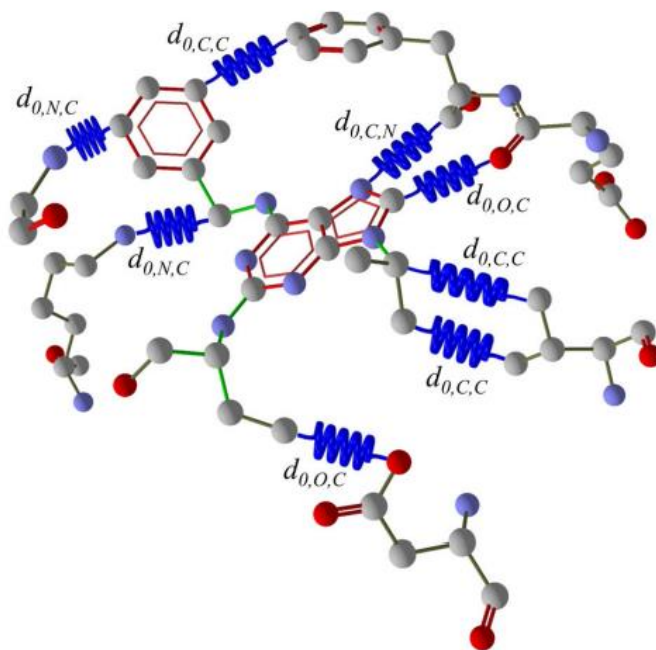
Foi usando esse sistema simples que propusemos em 2020 um programa de aprendizado de máquina que considera que as interações entre fármacos e proteínas podem ser representadas por pequenas molas ligando os átomos do fármaco aos da proteína ([da Silva AD et al., 2020](#)). O artigo teve grande repercussão e foi aceito para ser capa da revista científica *Journal of Computational Chemistry*, mostrada abaixo.



### Referência:

da Silva AD, Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo WF Jr. Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity. *J Comput Chem*. 2020 Jan 5;41(1):69-73. doi: 10.1002/jcc.26048. Epub 2019 Aug 13. PMID: 31410856.

Na figura abaixo vemos o sítio ativo de uma proteína interagindo com um fármaco. As interações de cada átomo do fármaco podem ser modeladas como um sistema massa-mola. Podemos imaginar minúsculas molas representando as interações em cada par de átomos, onde um átomo pertence à proteína e outro fica no fármaco. As distâncias indicadas próximas das molas representam as distâncias de equilíbrio da mola.

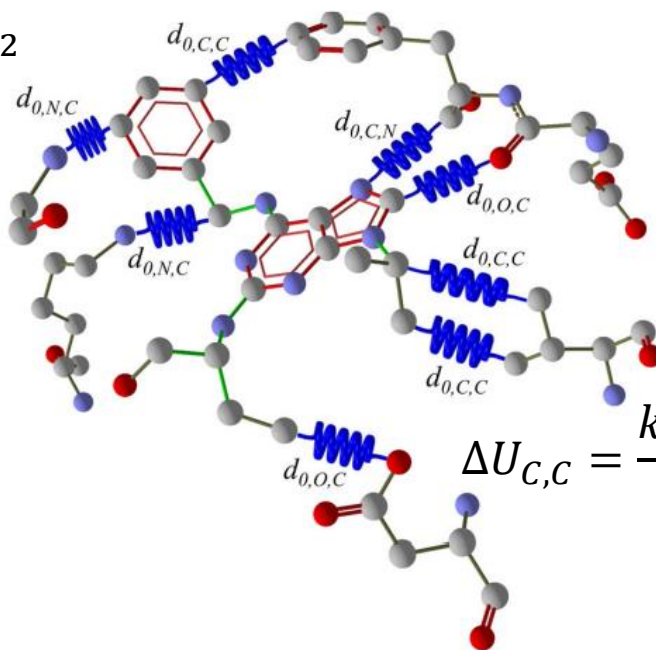


Referência:

da Silva AD, Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo WF Jr. Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity. J Comput Chem. 2020 Jan 5;41(1):69-73. doi: 10.1002/jcc.26048. Epub 2019 Aug 13. PMID: 31410856.

A energia potencial  $U$  do sistema molecular pode ser expressa pela soma de cada energia potencial dos pares de átomos. Por exemplo, para os pares de átomos de N e C, temos a expressão  $U_{N,C}$  para a energia potencial. Para os pares C e C, temos  $U_{C,C}$ . Temos expressão similares para cada tipo de par de átomos representados na figura abaixo. Os  $r$ 's representam as distâncias entre os pares de átomos.

$$U_{N,C} = \frac{k_{N,C}}{2} (r_{N,C} - d_{0,N,C})^2$$



$$U_{O,C} = \frac{k_{O,C}}{2} (r_{O,C} - d_{0,O,C})^2$$

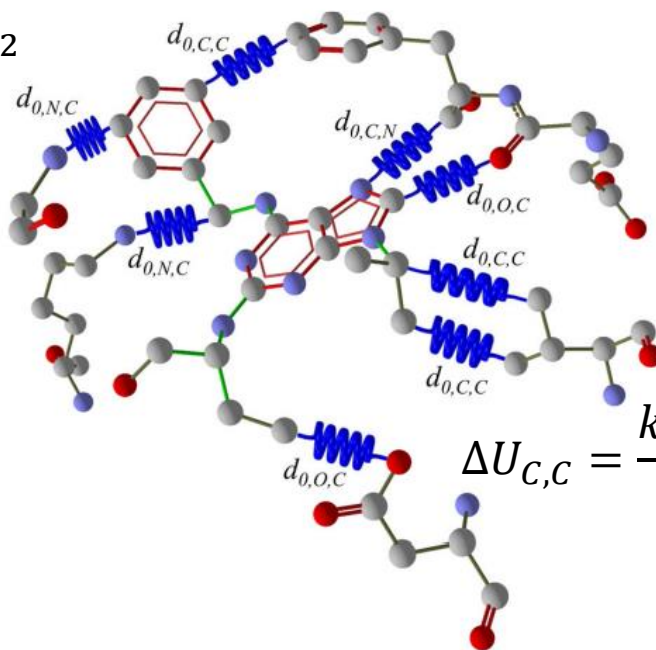
$$\Delta U_{C,C} = \frac{k_{C,C}}{2} (r_{C,C} - d_{0,C,C})^2$$

Referência:

da Silva AD, Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo WF Jr. Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity. J Comput Chem. 2020 Jan 5;41(1):69-73. doi: 10.1002/jcc.26048. Epub 2019 Aug 13. PMID: 31410856.

As constantes elásticas ( $k$ ) são específicas para cada par de átomos, por exemplo,  $k_{C,C}$  é para pares C e C. A energia potencial total será a soma de cada contribuição dos pares de átomos. Esse modelo simples mostrou um poder de previsão superior a outros modelos computacionais mais complicados de se determinar ([da Silva AD et al., 2020](#)).

$$U_{N,C} = \frac{k_{N,C}}{2} (r_{N,C} - d_{0,N,C})^2$$



$$U_{O,C} = \frac{k_{O,C}}{2} (r_{O,C} - d_{0,O,C})^2$$

$$\Delta U_{C,C} = \frac{k_{C,C}}{2} (r_{C,C} - d_{0,C,C})^2$$

## Referência:

da Silva AD, Bitencourt-Ferreira G, de Azevedo WF Jr. Taba: A Tool to Analyze the Binding Affinity. J Comput Chem. 2020 Jan 5;41(1):69-73. doi: 10.1002/jcc.26048. Epub 2019 Aug 13. PMID: 31410856.



**Que a luz da ciência acabe com  
as trevas do negacionismo.**



- BRESSERT, Eli. **SciPy and NumPy**. Sebastopol: O'Reilly Media, Inc., 2013. 56 p.
- CHAPRA, Steven C.; Canale, Raymond P. **Métodos Numéricos para Engenharia (Portuguese Edition)**. Edição do Kindle.
- DAWSON, Michael. **Python Programming, for the absolute beginner**. 3ed. Boston: Course Technology, 2010. 455 p.
- DOWNEY, Alan B. **Modeling and Simulation in Python**. San Francisco: No Starch Press, 2023. 311 p.
- HAL, Tim, STACEY, J-P. **Python 3 for Absolute Beginners**. Springer-Verlag New York, 2009. 295 p.
- HALLIDAY, David, RESNICK, Robert, WALKER, Jearl. **Fundamentos da Física - Mecânica - Volume 1**. GEN | LTC. Edição do Kindle.
- HETLAND, Magnus Lie. **Python Algorithms. Mastering Basic Algorithms in the Python Language**. Nova York: Springer Science+Business Media LLC, 2010. 316 p.
- IDRIS, Ivan. **NumPy 1.5. An action-packed guide dor the easy-to-use, high performance, Python based free open source NumPy mathematical library using real-world examples. Beginner's Guide**. Birmingham: Packt Publishing Ltd., 2011. 212 p.
- KIUSALAAS, Jaan. **Numerical Methods in Engineering with Python**. 2ed. Nova York: Cambridge University Press, 2010. 422 p.
- LANDAU, Rubin H. **A First Course in Scientific Computing: Symbolic, Graphic, and Numeric Modeling Using Maple, Java, Mathematica, and Fortran90**. Princeton: Princeton University Press, 2005. 481p.
- LANDAU, Rubin H., PÁEZ, Manuel José, BORDEIANU, Cristian C. **A Survey of Computational Physics. Introductory Computational Physics**. Princeton: Princeton University Press, 2008. 658 p.
- LUTZ, Mark. **Programming Python**. 4ed. Sebastopol: O'Reilly Media, Inc., 2010. 1584 p.
- NAGLE, R. Kent. **Equações diferenciais (Portuguese Edition)**. Edição do Kindle.
- TOSI, Sandro. **Matplotlib for Python Developers**. Birmingham: Packt Publishing Ltd., 2009. 293 p.