

~~X~~ molécula, dada a priori. ~~Através da literatura [5], conhece-se a medida de ângulos e distâncias entre ligações atômicas e, pela bioquímica [1], conhece-se os padrões que se repetem para formar as proteínas (os aminoácidos).~~ Tendo posse de tais informações, pode-se percorrer os átomos da molécula, repetindo os que possuem propriedades conhecidas, afim de fazer valer os três axiomas do DMDGP [4]. Neste projeto, criou-se um programa para facilitar as simulações do problema, que aceita como entrada instâncias de proteínas do wwPDB e retorna um arquivo com a instância reordenada visando discretização do problema, conforme a literatura [4].

A ordem no DMDGP garante a finitude do conjunto solução do problema e, além disso, organiza o espaço onde devemos fazer a busca por uma solução. Na verdade, a ordem induz uma estrutura de *árvore binária* no espaço de busca [6]. De fato, sempre temos duas possibilidades para posicionar o ângulo de torção para o próximo átomo da molécula. Devido a esta estrutura, criou-se o algoritmo *Branch-&Prune* (BP), que consiste em uma estratégia numérica recursiva que resolve o DMDGP eficientemente utilizando uma busca combinatória no espaço de busca de soluções, onde realiza-se vértice por vértice do sistema, seguindo a ordem dada, "podando" todo sub-conjunto solução do sistema que não esteja de acordo com as informações pré-estabelecidas. Desde que ele foi publicado, tem se verificado tanto sua beleza matemática, quanto a sua eficiência numérica-computacional para resolver problemas em Geometria de Distâncias.

Por fim, simulou-se computacionalmente, neste trabalho, o algoritmo BP para solução do DMDGP com as instâncias ordenadas ~~(através da solução do DVOP)~~, geradas a partir do wwPDB.

através do re-order → citar [4]

Palavras-chave: DMDGP, Geometria de Distâncias, Otimização.

Referências

- [1] David L Nelson and Michael M Cox. *Lehninger: princípios de bioquímica*. 2015.
- [2] C. Lavor, N. Maculan, M. Souza, and R. Alves. *Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular*. IMPA, Rio de Janeiro, RJ, 31º colóquio brasileiro de matemática edition, 2017.
- [3] Leo Liberti, Carlile Lavor, Nelson Maculan, and Antonio Mucherino. Euclidean distance geometry and applications. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 56(1):3?69, February 2014.
- [4] Carlile Lavor, Leo Liberti, Bruce Donald, Bradley Worley, Benjamin Bardiaux, Thérèse E Malliavin, and Michael Nilges. Minimal nmr distance information for rigidity of protein graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 256:91–104, 2019.
- [5] Gordon M Crippen, Timothy F Havel, et al. *Distance geometry and molecular conformation*, volume 74. Research Studies Press Taunton, 1988.
- [6] Felipe Delfini Caetano Fidalgo. *Dividindo e conquistando com simetrias em geometria de distâncias*. PhD thesis, UNICAMP, Campinas, SP, Fevereiro 2015.

• falta citar o re-order (coloque uma figura)

antes de colocar a linha de "Neste trabalho", de um briefing sobre o re-order.

(não é DVOP!)

DMDGP: Um Problema Real

X

Felipe ~~Deifine Caetano~~ Fidalgo

X

Universidade Federal de Santa Catarina Departamento de Matemática
89036-004, Campus Blumenau, Blumenau, SC
E-mail: felipe.fidalgo@ufsc.br,

Guilherme Philippi*

X

Universidade Federal de Santa Catarina Departamento de Engenharia
89036-004, Campus Blumenau, Blumenau, SC
E-mail: guilherme.philippi@grad.ufsc.br,

RESUMO

Existe uma relação muito forte com a forma geométrica das moléculas orgânicas e suas funções em organismos vivos [1]. Sabe-se que uma das estruturas principais da vida é construída com os aminoácidos que formam as proteínas. Logo, para conhecer a estrutura geométrica das moléculas, é preciso estudar a geometria das proteínas [2]. Existe uma ferramenta muito importante para quem trabalha nesta área, trata-se de um repositório online que contém dados de todas as proteínas catalogadas conhecidas, chamado *Worldwide Protein Data Bank* (ou wwPDB). Neste trabalho, buscou-se estudar a geometria de distâncias aplicada a geometria molecular, afim de produzir realizações válidas das posições geométricas dos átomos em uma molécula de proteína.

O problema de encontrar as posições dos átomos de uma molécula é conhecido na literatura como *Problema de Geometria de Distâncias Moleculares* (MDGP) [3], que é uma particularização do *Problema de Geometria de Distâncias* (DGP). Tal problema, monido de uma ordem esperta para percorrer seus átomos (dado pelo *Discretization Vertex Order Problem*, ou simplesmente, DVOP), pode ser discretizado [4], gerando o *MDGP Discretizado* (ou DMDGP), como segue formalmente definido [4].

Discretizable Molecular Distance Geometry Problem (DMDGP): Dado um grafo ponderado e não-direcionado $G = (V, E, d)$, onde $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, o subconjunto de vértices $U_0 = \{v_1, v_2, v_3\}$ e uma relação de ordem total em V que satisfaz a seguinte relação de axiomas:

1. $G[U_0]$ é um clique em três vértices (iniciando a configuração);
2. para todo vértice v_i com posto $i = \rho(v_i) > 3$, $G[U_i]$ é clique com quatro vértices (ordem de discretização, dada anteriormente) e
3. para cada vértice v_i , com posto $i = \rho(v_i) > 3$, juntamente com $\{v_{i-3}, v_{i-2}, v_{i-1}\}$, vale a desigualdade

$$d_{i-3,i-1} < d_{i-3,i-2} + d_{i-2,i-1}, \quad (\text{Desigualdade Triangular Estrita})$$

encontre uma imersão $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que valha $\|x(v_i) - x(v_j)\| = d_{i,j}, \forall \{v_i, v_j\} \in E$.

Note que, para que seja possível estudar o problema acima, precisamos resolver o DVOP e, ao tentar criar uma ordem, utilizamos de algumas informações sobre a geometria da

*bolsista de Iniciação Científica PIBIC/CNPq