

Um estudo teórico-computacional da aplicação da Geometria de Distâncias no problema de conformação proteica

Guilherme Philippi¹

UFSC, Blumenau, SC

Felipe Fidalgo²

MAT/UFSC, Blumenau, SC

A Geometria de Distâncias originou-se dos esforços de Menger (1928), seguido por Blumenthal (1953), na caracterização de vários conceitos geométricos (como congruência e convexidade de conjuntos) em termos de distâncias [4]. Isso permitiu a formulação do *Distance Geometry Problem* (DGP), conhecido como problema fundamental de Geometria de Distâncias. Trata-se de um problema inverso, onde, dado um grafo simples, ponderado positivamente e não direcionado $G = (V, E, d)$, e um inteiro $k > 0$, deseja-se encontrar uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$ (dita realização de G em \mathbb{R}^k) tal que $\forall \{u, v\} \in E, \|x(u) - x(v)\| = d(\{u, v\})$.

Em particular, a restrição do DGP para $k = 3$ é de interesse prático e é conhecido como *Molecular Distance Geometry Problem* (MDGP) — carrega o termo *molecular* pois, mesmo que não seja exclusivo para essa aplicação [4], teve sua origem associada as estruturas moleculares. Supondo que o conjunto solução de um MDGP seja não vazio, sabe-se que ele é não enumerável ou finito [2]. A busca pela segunda possibilidade está associada ao conceito de *ordem nos vértices* do grafo G do MDGP (a procura por essa ordem é caracterizado como *Discretization Vertex Order Problem*, ou, DVOP). Munido de tal ordem, o MDGP pode ser discretizado, gerando o problema principal desse trabalho, como segue formalmente definido [2]:

Discretizable Molecular Distance Geometry Problem (DMDGP): Dados um grafo simples, 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 $v_1, \dots, v_{|V|} \in V$, que satisfaça as propriedades

1. U_0 é um 3-clique em G ;
2. $\forall v_i \in V$ tal que $i > 3$ nessa ordem:
 - $U_i = \{v_i, v_{i-1}, v_{i-2}, v_{i-3}\}$ é um 4-clique em G ;
 - vale a desigualdade $d_{i-3, i-1} < d_{i-3, i-2} + d_{i-2, i-1}$,

encontre uma realização $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que valha, $\forall \{u, v\} \in E, \|x(u) - x(v)\| = d(\{u, v\})$.

A ordenação no DMDGP garante, de fato, a finitude do conjunto solução do problema [2]. Além disso, ela 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 [1]. Isto é, a partir do quarto, sempre temos duas possibilidades para a realização de um vértice [4]. Analisando essa estrutura, propuseram um algoritmo chamado *Branch-and-Prune* (BP), que consiste em uma estratégia numérica recursiva para resolver o DMDGP eficientemente, utilizando uma busca combinatória no espaço de busca por soluções. Nele, realiza-se vértice por vértice do grafo, seguindo a ordenação definida pelo DMDGP, “podando” (descartando) todo sub-conjunto solução do problema onde

¹guilherme.philippi@hotmail.com

²felipe.fidalgo@ufsc.br

