

PGDM: Um Problema Real

Guilherme Philippi^{*}, orientado por Felipe Delfini Caetano Fidalgo[†]

Campus Blumenau

Universidade Federal de Santa Catarina

UFSC

guilherme.philippi@grad.ufsc.br^{*}, felipe.fidalgo@ufsc.br[†]

30 de maio de 2019

Resumo

Existe uma relação muito forte com a forma geométrica das moléculas orgânicas e suas funções em organismos vivos [1]. Pode-se fazer uma analogia destes organismos com um grande quebra-cabeça, cheio de peças tão variadas quanto se queira, onde cada peça tem um local e função específica no grande quebra-cabeça, de forma que tal local e função é dado justamente pela forma geométrica de cada peça. Imagine este imenso jogo de tabuleiro em forma tridimensional ao invés de plana, imaginando as peças com formas espaciais diversas e escalafobéticas, logo você não estará tão longe de entender como funciona um organismo vivo.

Outrora, em pesquisas sobre a molécula de DNA (ácido desoxirribonucleico), descobriu-se que esse produzia um dos pilares para a vida, a proteína [2]. Perceba a importância fundamental que tem-se em conhecer a estrutura geométrica de cada uma dessas proteínas. Para sanar essa necessidade desenvolveram-se alguns métodos para a determinação da estrutura tridimensional de uma molécula de proteína, como difração de raios X, onde se cristaliza a molécula para determinar-se o espaçamento dos átomos pela medida da localização e da intensidade dos pontos produzidos por um feixe de raios X. Porém, é claro, o ambiente físico em um cristal não é idêntico ao ambiente em solução ou em uma célula viva [1], dando espaço interessante para outro método que consegue medir distâncias entre (não restritos à) átomos de hidrogênios próximos em uma molécula: o chamado experimento de *Ressonância Magnética Nuclear* (NMR).

Infelizmente um experimento de NMR não dá localizações bem definidas em um plano cartesiano, a saída desse experimento são apenas distâncias entre alguns dos pontos dos quais deseja-se obter as localizações. Sabendo que conhece-se (através da literatura [3]) a medida de ângulos e distâncias entre ligações atômicas, pode-se montar um conjunto de dados em outro sistema de coordenadas, muito parecido com as coordenadas esféricas, onde se utiliza de uma distância e dois ângulos para descrever pontos. Este é o sistema de *coordenadas internas*. Note, então, que nosso problema se resume em transformar pontos no sistema de coordenadas internas para pontos em coordenadas cartesianas [4]. Este problema é conhecido na literatura como *Problema de Geometria de Distâncias Moleculares*, ou simplesmente, MDGP [5].

Neste trabalho mostra-se um estudo aprofundado sobre o tema, bem como sobre um método de reordenação nas moléculas do sistema para redução da cardinalidade do conjunto solução deste problema [6] (o qual pode ser muito grande), discretizando-o, gerando o *Problema de Geometria de Distâncias Moleculares Discretizado* (DMDGP) [7], tal qual pode-se representar seu conjunto solução através de uma árvore binária [2], onde se tem um magnífico algoritmo para sua resolução, conhecido como *Branch & Prune* (BP) [2].

Referências

- [1] David L Nelson and Michael M Cox. *Lehninger: principios de bioquímica*. 2015.
- [2] Felipe Delfini Caetano Fidalgo. *Dividindo e conquistando com simetrias em geometria de distâncias*. PhD thesis, UNICAMP, Campinas, SP, Fevereiro 2015.
- [3] Gordon M Crippen, Timothy F Havel, et al. *Distance geometry and molecular conformation*, volume 74. Research Studies Press Taunton, 1988.
- [4] C. Lavor, N. Maculan, M. Souza, and R. Alves. *Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular*. IMPA, Rio de Janeiro, RJ, 31^o colóquio brasileiro de matemática edition, 2017.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] Audrey Lee-St. John Leo Liberti Antonio Mucherino Carlile Lavor, Jon Lee and Maxim Sviridenko. Discretization orders for distance geometry problems. *Optimization Letters*, 6(Issue 4):783–796, April 2012.