Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

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

Guilherme Philippi[1]
UFSC, Blumenau, SC
Felipe Fidalgo[2]
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 [2]. 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 ponderado positivamente, não direcionado e simples $G = (V, E, d)$, e um inteiro $k > 0$, deseja-se encontrar uma função $x : V \to \mathbb{R}^k$ (dita realização de G em $\mathbb{R}^k$) tal que $\forall \ \{u, v\} \in E$, $||x(u) - x(v)|| = d(\{u, v\})$.

Em particular, é de interesse prático uma restrição desse problema. Trata-se do DGP com $k = 3$, chamado de *Molecular Distance Geometry Problem* (MDGP) — carrega o termo molecular pois, mesmo que não seja exclusivo para essa aplicação [2], 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 [1]. A busca pela segunda possibilidade está associada ao conceito de *ordem nos vértices* do grafo G do MDGP (a procura por essa ordem é conhecida 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 [1] [3]:

Discretizable Molecular Distance Geometry Problem (DMDGP): Dados um grafo simples, ponderado e não-direcionado $G = (V, E, d)$, onde $d : E \to \mathbb{R}_+$, o subconjunto de vértices $U_0 = \{v_1, v_2, v_3\}$ e uma relação de ordem total $v_1, \ldots, v_{|V|} \in V$ que satisfaça as seguintes 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 $x : V \to \mathbb{R}^3$ 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 [1]. 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 [4]. Isto é, a partir do quarto, sempre temos duas possibilidades para a realização de um vértice [3]. Analisando essa estrutura, foi proposto um algorítimo chamado *Branch-and-Prune* (BP), que consiste em uma estratégia numérica recursiva para resolver o DMDGP eficientemente, utilizando uma busca combinatória no espaço

[1]guilherme.philippi@hotmail.com
[2]felipe.fidalgo@ufsc.br

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 sistema onde um vértice v não respeita uma das distâncias $d(\{u,v\})$ definidas pelo grafo, isto é, $\|x(u)-x(v)\| \neq d(\{u,v\})$. Desde que esse algoritmo foi publicado, tem se verificado tanto sua beleza matemática quanto a sua eficiência numérica-computacional para resolver problemas em Geometria de Distâncias [4].

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq – Brasil. Agradeço a Família, ao Felipão e a organização que prorrogou o período de submissão.

ORDENAR AS REFERENCIAS!!!

Referências

[1] Lavor, C., Maculan, N., Souza, M. and Alves, R. *Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular, 31º Colóquio Brasileiro de Matemática.* IMPA, Rio de Janeiro - RJ, 2017.

[2] Liberti, L., Lavor, C., Maculan, N. and Mucherino, A. Euclidean distance geometry and applications, *SIAM REVIEW*, Society for Industrial and Applied Mathematics, volume 56, number 1, pages 3-69, 2014. DOI. 10.1137/120875909.

[3] Lavor, C., Liberti, L., Maculan, N., and Mucherino, A. The discretizable molecular distance geometry problem, *Computational Optimization and Application*, Springer, volume 52, number 1, pages 115-146, 2012. DOI. 10.1007/s10589-011-9402-6.

[4] Fidalgo, F. Dividindo e conquistando com simetrias em geometria de distâncias. Tese de Doutorado, IMECC/UNICAMP, Campinas - SP, 2015.