

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Uma Implementação Eficiente em Maple para o Problema de Conformação de Proteínas

Demétrio Aquino Torgan¹Dr. Valter Soares de Camargo²

Universidade Estadual do Paraná-UNESPAR, Paranavaí, PR

1 Introdução

Este trabalho trata-se de uma implementação computacional aplicada à uma classe de problemas de Geometria de Distâncias (GD), relacionadas a moléculas, mais especificamente proteínas. De modo geral, problemas de GD se resume em determinar um conjunto de pontos em um dado espaço geométrico, cujas distâncias entre alguns deles são conhecidas. Assim, problemas relacionados a moléculas consistem em determinar a posição espacial de cada átomo da molécula em \mathbb{R}^3 , conhecidos na literatura como *Discretizable Molecular Distance Geometry Problem* (DMDGP) [2, 3]. O trabalho fundamenta-se na criação de instâncias artificiais de moléculas que satisfazem as hipóteses do DMDGP e em um método de solução do DMDGP gerado. Para isso propomos dois algoritmos, que foram implementados em Maple e usado o programa GeoGebra para visualização das soluções obtidas.

2 Instâncias do DMDGP e implementação em linguagem Maple

No cálculo estrutural de uma proteína com n átomos, todas as ligações covalentes $d_{1,2}, \dots, d_{n-1,n}$ e os ângulos de dobras $\theta_{1,3}, \dots, \theta_{n-2,n}$ (formado por três átomos consecutivos) são conhecidos a priori [1]. Assim, para definir uma estrutura espacial de uma molécula artificial, basta obter os ângulos de torção $\omega_{1,4}, \dots, \omega_{n-3,n}$ (definido pelos vetores normais aos planos definidos pelos átomos $i-3, i-2, i-1$ e $i-2, i-1, i; \forall i = 4, \dots, n$). Por meio de um vetor de valores aleatórios para os $\omega_{i-3,i}$ e usando as matrizes de [2], que geram as coordenadas cartesianas, propomos o algoritmo gerador de proteínas artificiais. Propomos ainda um segundo algoritmo em linguagem Maple para resolver o DMDGP, detalhado no diagrama da Figura 1.

¹demetriotorgan@hotmail.com²vsc.unespar@gmail.com (Orientador)

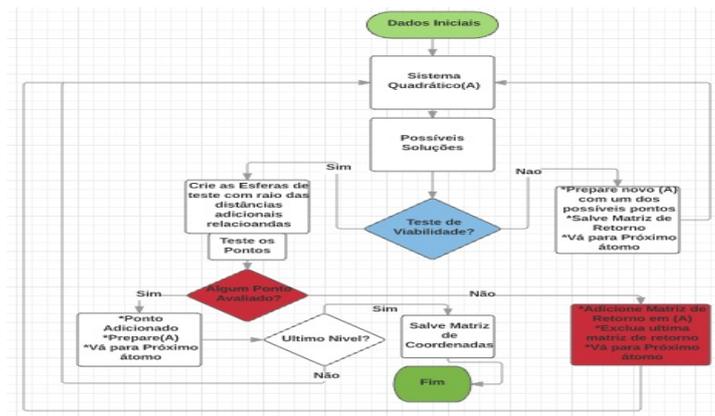


Figura 1: Diagrama detalhado do algoritmo implementado em linguagem Maple

3 Conclusões

A proposta em linguagem Maple aborda de maneira direta a resolução dos sistemas não lineares, oriundos de intersecções de esferas no processo de discretização do problema, o que a difere do método tradicional, denominado *Branch-and-Prune* [2]. Como pode ser visto no estudo detalhado de [3], as soluções da instância *lavor11* [2] é dada na Figura 2.

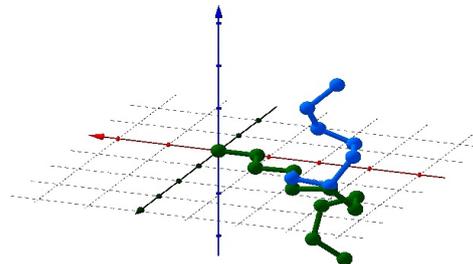


Figura 2: Resultado da instância Lavor11 em GeoGebra via linguagem Maple

Referências

- [1] J. Rosen, A. Phillips, and V. Walke, *Molecular structure determination by convex global underestimation of local energy minima*, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science **23**, 181 - 198, American Mathematical Society, 1996.
- [2] L.Liberti, C. Lavor, and N.Maculan. A branch-and-prune algorithm for the molecular distance geometry problem. *International Transaction in Operational Research*, 15(1):1-17, 2008. Janeiro.
- [3] V. S. Camargo, *Álgebra Geométrica Conforme e Geometria de Distância*, Ph.D. thesis, UNICAMP - IMECC, 2015.