RIGIDEZ EM GRAFOS DE PROTEÍNAS

CARLILE LAVOR[1]

[1] UNICAMP
clavor@ime.unicamp.br

1. Resumo do curso avançado

O principal objetivo do curso é discutir a matemática envolvida no cálculo da estrutura 3D de uma molécula de proteína, com dados de distâncias entre átomos próximos provenientes de experimentos de Ressonância Magnética Nuclear. É um problema NP-difícil, conhecido na literatura por Molecular Distance Geometry Problem (MDGP). O curso será apresentado utilizando um modelo combinatório que desenvolvemos ao longo dos últimos anos, baseado em propriedades de rigidez do grafo relacionado ao problema (cada vértice representa um átomo da proteína e quando a distância é conhecida entre dois átomos, definimos uma aresta entre os respectivos vértices, com peso dado pelo valor da distância). Resolver o MDGP é obter uma imersão do grafo associado no espaço 3D, de tal maneira que as distâncias euclidianas calculadas entre pares de átomos sejam iguais aos pesos das arestas correspondentes. Trata-se de um problema fundamental do complexo e custoso processo de desenvolvimento de novos medicamentos pela indústria farmacêutica.

2. Pré-requisitos do curso

Álgebra Linear e conhecimentos básicos de Teoria dos Grafos

3. Nacionalidade

1) Carlile Lavor: Brasil