

Geometria de Distâncias e Geometria Molecular

Andrês Rodrigues Oliveira, Carlile Lavor

Universidade Estadual de Campinas

andresroliveira@gmail.com, clavor@ime.unicamp.br



Resumo

Dada uma molécula, conhecendo algumas distâncias entre seus átomos, queremos encontrar sua estrutura 3D. Sabendo de uma ordenação específica nos vértices, foi implementado o algoritmo Branch & Prune que gera todas as soluções possíveis.

Introdução

Determinar a estrutura de moléculas é um problema importante para bioquímicos e farmacêuticos, pois sua funcionalidade está relacionada com essa estrutura 3D. Sabendo algumas distâncias entre os átomos da molécula, como é possível determinar sua estrutura? Dado um conjunto de vértices V (que serão os átomos da molécula) e um conjunto de arestas E (as distâncias conhecidas), definimos um grafo $G = (V, E, d)$, onde $d : V \rightarrow (0, \infty)$, a questão é encontrar $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que $\forall \{u, v\} \in E, \|x_u - x_v\| = d_{u,v}$, esse problema é chamado de Molecular Distance Geometry Problem (MDGP)[2].

Exemplo

Vamos dar um exemplo de uma molécula com 7 átomos, e as distâncias conhecidas entre esses átomos colocaremos em uma matriz onde a posição i, j estará a distância $d_{i,j}$. Caso a distância não seja conhecida, representamos com ∞ .

0	1.526	2.49139	3.06432	∞	3.11285	∞
1.526	0	1.526	2.49139	2.89562	∞	∞
2.49139	1.526	0	1.526	2.49139	2.92387	∞
3.06432	2.49139	1.526	0	1.526	2.49139	2.93805
∞	2.89562	2.49139	1.526	0	1.526	2.49139
3.11285	∞	2.92387	2.49139	1.526	0	1.526
∞	∞	∞	2.93805	2.49139	1.526	0

Branch & Prune

Para encontrar a estrutura 3D dessa molécula, teremos uma abordagem discreta. Usando informações da Geometria Molecular, é possível definir uma ordem em V , e assim rodar o algoritmo Branch & Prune [3], onde já temos uma realização válida \bar{x} para os 3 primeiros vértices. A chamada do algoritmo é $BP(4, \bar{x}, \emptyset)$.

Algoritmo $BP(v, \bar{x}, X)$

```
1:  $P = \bigcap_{u \in N(v) \cap \gamma(v)} S^2(\bar{x}_u, d_{u,v})$ 
2: for all  $x_v \in P$  do
3:    $x \leftarrow (\bar{x}, x_v)$ 
4:   if  $v = n$  then
5:      $X \leftarrow X \cup \{x\}$ 
6:   else
7:      $BP(v + 1, x, X)$ 
8:   end if
9: end for
```

As soluções do nosso problema estarão em X após rodarmos o algoritmo. A quantidade de soluções será dada por $|X|$.

Árvore do BP

Essa ordem em V faz com que o espaço de busca do BP seja uma árvore binária [1], onde os três primeiros vértices são fixados (evitando

soluções obtidas por translações e rotações), e, a partir do quarto vértice, temos duas possibilidades para a posição do vértice no espaço 3D [2]. Rodando o BP no nosso exemplo, a árvore de busca é representada na Figura 1.

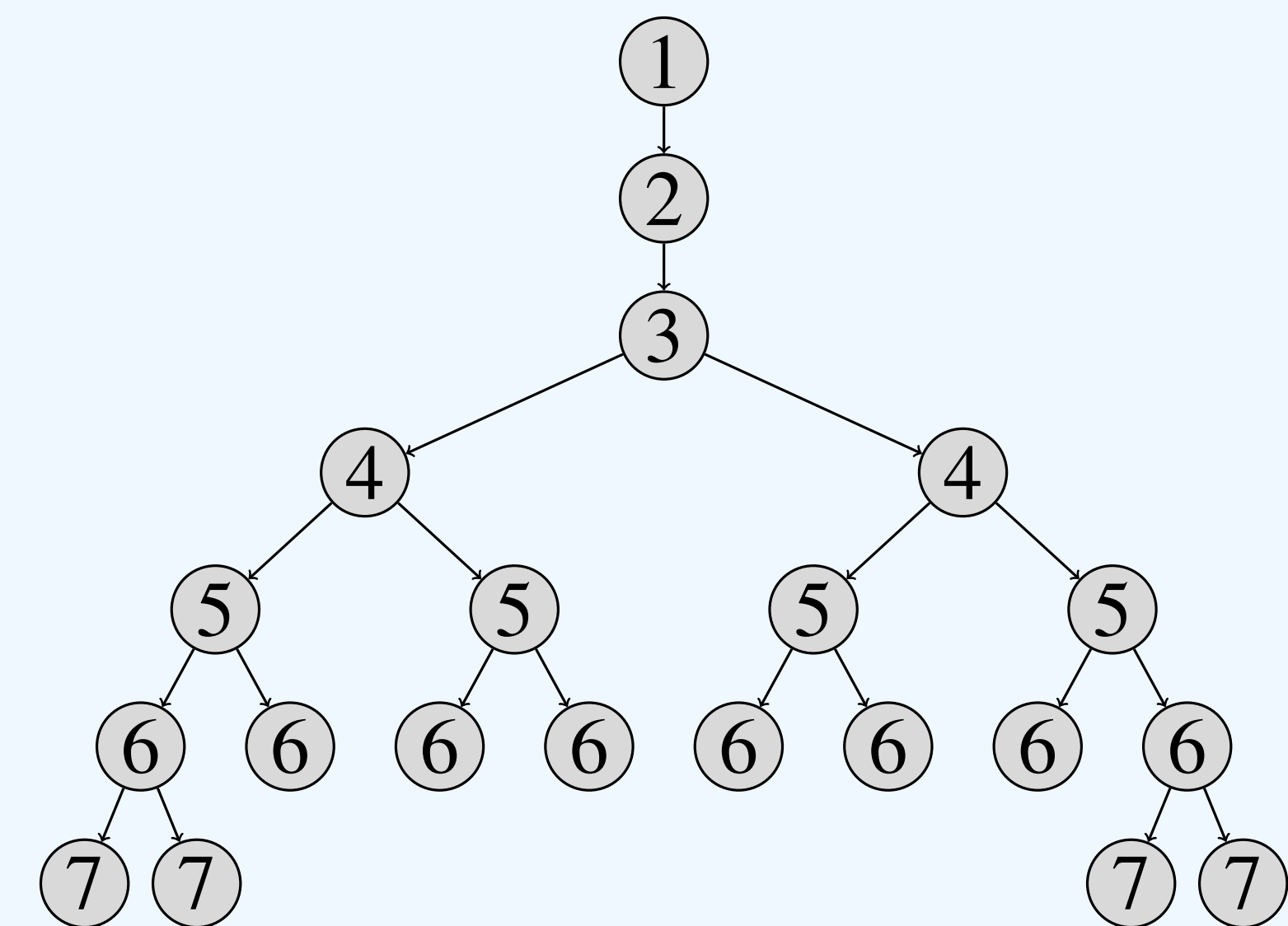


Figura 1: Árvore do BP.

Estruturas Geradas

As soluções do exemplo geradas pelo algoritmo são representadas na Figura 2. Os átomos em amarelo são os primeiros 3 vértices (que são fixos), e a partir do quarto vértice estão em verde.

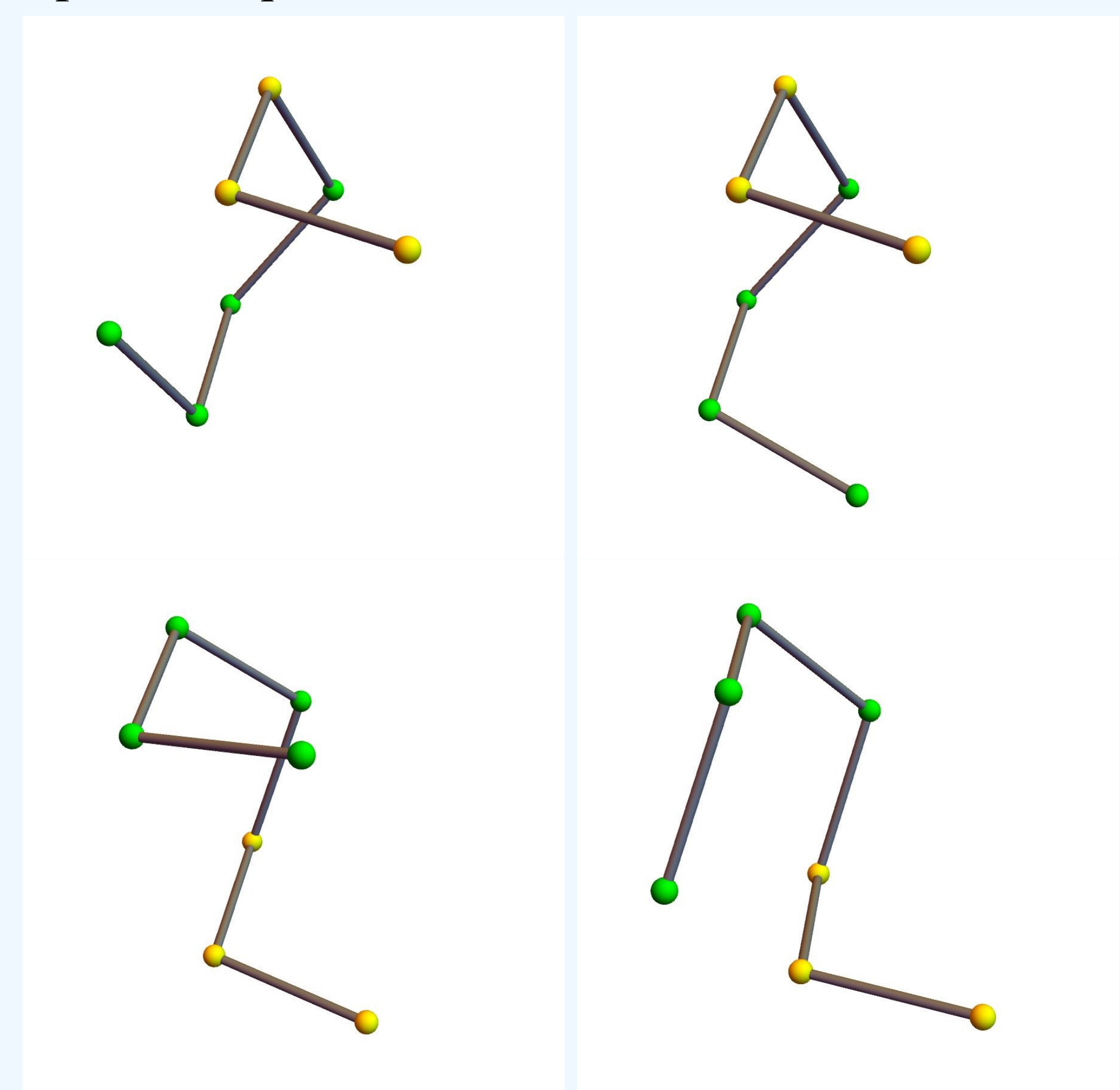


Figura 2: Estruturas geradas pelo BP.

Referências

- [1] C. LAVOR, L. LIBERTI, *Um Convite à Geometria de Distâncias*, Notas em Matemática Aplicada, SBMAC, 2014.
- [2] C. LAVOR, L. LIBERTI, N. MACULAN, A. MUCHERINO, *The discretizable molecular distance geometry problem*, Computational Optimization and Applications, 52: 115-146, 2012.
- [3] L. LIBERTI, C. LAVOR, N. MACULAN, AND A. MUCHERINO, *Euclidean distance geometry and applications*, SIAM Review 56:3-69, 2014.

Agradecimentos

Agradeço ao CNPq pelo financiamento da pesquisa, modalidade Iniciação Científica - PICME, processo 124135/2018-8.