



E0485

DESENVOLVIMENTO DE ALGORITMOS PARA PROBLEMAS DE CÁLCULO DE ESTRUTURA MOLECULAR

Fernando Nakatani de Oliveira Lopes (Bolsista PIBIC/CNPq), Carlile Campos Lavor (Co-orientadora) e Prof. Dr. Antonio Carlos Moretti (Orientador), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica - IMECC, UNICAMP

O conhecimento da estrutura tridimensional de uma molécula fornece informações importantes sobre a sua função no organismo, principalmente no estudo de drogas e proteínas. A conformação mais estável, que determina a maior parte das propriedades da molécula, corresponde ao mínimo global da sua função de energia potencial. Os principais métodos de cálculo de estrutura molecular utilizam otimização contínua para encontrar o mínimo global dessa função que também gera inúmeros mínimos locais. Nesse trabalho foi estudada uma forma de discretização desse problema, chamada de Discretizable Molecular Distance Geometry Problem (ou MDGP). Junto com o MDGP foi estudado o algoritmo de Branch-and-Prune (BP) que resolve esse problema em tempo exponencial no número de átomos da molécula. Por ser discreto, o MDGP fornece uma solução precisa muito mais rapidamente do que métodos de otimização contínua. Para permitir uma melhor análise da busca por resultados, foi produzido um método de visualização da árvore binária pela qual o BP procura uma solução e outro método que permite verificar a variação do erro da solução ao longo da árvore, levando uma função $f: \mathbb{R}^{3n} \rightarrow \mathbb{R}$ para uma função $g: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$, onde n é o número de átomos da molécula.

Otimização discreta - Programação linear inteira - Branch-and-prune