

Programa Institucional de Bolsas
de Iniciação Científica PIBIC

23 a 25
outubro

Pró-Reitoria de Pesquisa - Pibic/CNPq
Pró-Reitoria de Graduação - SAE/Unicamp



E0586

UMA ABORDAGEM COMBINATÓRIA PARA PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO DE GEOMETRIA MOLECULAR

Guilherme Bighetti Platzeck (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Carlile Campos Lavor (Orientadora), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica - IMECC, UNICAMP

O projeto de iniciação científica "Uma abordagem combinatória para problemas de otimização de geometria molecular" parte do problema de geometria de distâncias moleculares discretizável (PGDMD) que é uma subclasse do problema de geometria de distâncias (PGD). Dado um grafo que modele uma proteína, no qual cada vértice é um átomo e as arestas ponderadas representam as distâncias entre pares de átomos, busca-se uma imersão sua no R^3 através da discretização do espaço contínuo. Temos como objetivo da pesquisa a extensão do problema e algoritmo atuais para satisfazer certos critérios que aproximam o problema de uma aplicação do caso real. As distâncias interatômicas, fornecidas como instância para o problema, provém da simulação de dados colhidos por ressonância magnética nuclear (RMN). A implementação do algoritmo está sendo feita paralelamente em C e em Mathematica, visando desempenho e praticidade, respectivamente. No presente estágio, podem-se concluir os resultados favoráveis de alguns métodos e a inviabilidade de outros para solucionar a nova classe de problemas proposta que considera os dados de RMN, o problema de geometria de distâncias moleculares não atribuídas.

Geometria molecular - Estrutura de proteínas - Matemática discreta