

II Encontro anual de
INICIAÇÃO 
CIENTÍFICA DA UNESPAR

Cálculo Estrutural de Proteínas

Ana Maria Lemes de Lima (PIC)

Unespar/Campus de Paranavaí, anamary_lemes@hotmail.com

Valter Soares de Camargo (Orientador)

Unespar/Campus de Paranavaí, vsc.unespar@gmail.com

RESUMO

Em biologia computacional, um dos problemas mais importantes é a determinação da estrutura tridimensional de uma proteína. Esta estrutura pode ser determinada experimentalmente de duas maneiras: através de técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) ou técnicas de Cristalografia Raios X. Nosso trabalho foi comparar dois métodos que se baseiam em dados da primeira. No entanto, de maneira geral, a RMN fornece apenas um conjunto esparsos de distâncias entre os átomos de uma molécula. Neste caso, o problema é determinar a estrutura tridimensional da proteína usando informação sobre distâncias, conhecido na literatura por *Discretizable Molecular Distance Geometry Problem (DMDGP)* ou Problema de Geometria de Distância Molecular Discretizável. Os métodos são: o *Branch and Prune (BP)* via matrizes de rotações e o *Clifford Symetric Branch and Prune (C-SymBP)* via Álgebra Geométrica Conforme desenvolvido pelo professor Valter em sua tese de doutorado. Ambos os algoritmos são muito eficientes, suas diferenças básicas são: o *BP* por resolver via matrizes de rotação, necessita de ângulos, de dobra e torção, como dados de entrada, este fato o torna menos flexível a problemas que envolvem outras dimensões além do \mathbb{R}^3 , ao contrário do *C-SymBP* que devido a uma interpretação natural dos objetos relevantes ao problema, via seu modelo de geometria, necessita apenas de algumas distâncias entre os átomos da molécula. Com esta formulação o *C-SymBP* basicamente faz cálculos de intersecções de esferas, oriundas dessas distâncias como seus raios, para localizar as coordenadas de pontos no espaço geométrico, portanto pode ser estendido facilmente para qualquer dimensão nesta álgebra.

Palavras-chave: Álgebra Geométrica Conforme; Estrutura Tridimensional da Proteína; *Branch and Prune*; *Clifford Symetric Branch and Prune*.