

II Encontro anual de  
**INICIAÇÃO**   
**CIENTÍFICA DA UNESPAR**

**IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL EM MAPLE PARA O CÁLCULO  
ESTRUTURAL DE PROTEÍNAS**

Demétrio Aquino Torgan (PIC)  
Unespar/Campus Paranavaí, demetiroorgan@hotmail.com  
Valter Soares de Camargo (Orientador)  
Unespar/Campus Paranavaí, vsc.unespar@gmail.com

**RESUMO**

Este trabalho é uma aplicação computacional de Álgebra Linear em uma classe de problemas de Geometria de Distâncias, conhecida na literatura como *Discretizable Molecular Distance Geometry Problem* (DMDGP). Nesta classe são estudados problemas práticos que envolvem distâncias, relacionados à conformação molecular de uma proteína, tais problemas consistem em se determinar a posição espacial de cada átomo da molécula a partir de um conjunto esparso de distâncias entre eles, obtidas via experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). O DMDGP é modelado por um grafo simples conectado, cujos vértices representam os átomos e, suas arestas, as distâncias intra-atômica conhecidas a priori. Por meio de um gerador artificial de moléculas simulamos algumas instâncias para um DMDGP, das quais extraímos suas matrizes de coordenadas cartesianas no espaço tridimensional. A partir dessas informações desenvolvemos um algoritmo capaz de encontrar uma estrutura tridimensional da proteína correspondente ao DMDGP simulado. O algoritmo foi implementado em linguagem Maple e todos os resultados podem ser visualizados usando o software GeoGebra.

Palavras-chave: Maple. Cálculo Estrutural de Proteínas. GeoGebra.