

Geometria de Distâncias e Álgebra de Clifford em Geometria de Proteínas

Carlile Lavor

O problema em questão é o cálculo da estrutura 3D de uma molécula de proteína, utilizando distâncias entre átomos próximos provenientes de experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). É um problema NP-difícil, conhecido na literatura por Molecular Distance Geometry Problem (MDGP). Diferentemente dos métodos tradicionais (baseados em otimização contínua), estamos trabalhando em um modelo combinatório, baseado em propriedades de rigidez do grafo relacionado ao problema (cada vértice está relacionado a um átomo da proteína e quando a distância é conhecida entre dois átomos, definimos uma aresta entre os respectivos vértices, com peso dado pelo valor da distância). Resolver o MDGP é obter uma imersão do grafo associado no espaço 3D, de tal maneira que as distâncias euclidianas calculadas entre pares de átomos sejam iguais aos pesos das arestas correspondentes. Para valores precisos de distâncias, a abordagem combinatória permite que o espaço de busca do problema seja representado por uma árvore binária, onde um método exato, tipo Branch e Prune (BP), foi desenvolvido para explorar a árvore em busca de soluções, conectadas por simetrias que caracterizam cada instância do MDGP. Entretanto, considerando as incertezas dos dados experimentais (com as distâncias sendo representadas por intervalos de números reais), o algoritmo BP torna-se uma heurística, quando amostras sobre tais intervalos devem ser selecionadas. À medida que refinamos o processo, o espaço de busca pode aumentar exponencialmente e, mesmo assim, não há mais garantia que uma solução será encontrada, pois a distância correta pode ter se “perdido” durante o procedimento de amostragem. Para manter as propriedades da abordagem combinatória (com destaque para as simetrias mencionadas acima) e, ao mesmo tempo, considerar as “distâncias intervalares” dos dados experimentais, estamos propondo representar a molécula de proteína em um espaço de 5 dimensões (o Espaço Conforme), utilizando uma linguagem mais poderosa que a Álgebra Linear: a Álgebra de Clifford. O Espaço Conforme pode ser visto como uma extensão do Espaço Projetivo, que utiliza coordenadas homogêneas (4 dimensões), muito utilizado em problemas de Geometria Computacional.