

ALGORITMO HEURÍSTICO HÍBRIDO DE BUSCA DIRETA APLICADO NA ANÁLISE CONFORMACIONAL DE MOLÉCULAS CÍCLICAS.

Maurício Rodrigues Silva

Universidade Federal Fluminense – UFF - Instituto do Noroeste Fluminense – INFES
Departamento de Ciências Exatas Biológicas e da Terra – PEB
Av. João Jasbick, Bairro Aeroporto, CEP 28470-000, Santo Antônio de Pádua, RJ, Brasil
e-mail: dscmauricio@gmail.com

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo a aplicação de um algoritmo híbrido baseado em natureza estocástica e determinística, com atuação generalizada em problemas de programação não linear irrestrita com múltiplos ótimos, ou sistemas de equações lineares e não lineares com múltiplas raízes. É composto de dois métodos, o primeiro estocástico tem como base o algoritmo de Luus Jaakola (1973), e o segundo de natureza determinística, Hooke e Jeeves (1961). O algoritmo híbrido possui duas etapas principais referente aos métodos acima respectivamente, contendo três laços principais, onde os dois mais internos pertencem ao método Luus Jaakola, e o laço externo, à estrutura híbrida. A etapa Luus Jaakola tem como objetivo uma solução inicial aleatória que após o processo, resulta em uma solução viável, e através da etapa Hooke e Jeeves, a refina chegando a uma solução final melhor. Como garantia, o algoritmo híbrido executa as etapas repetidas vezes com seu laço externo forçando o encontro de todas as raízes. Devido a esta característica, foi proposto para solução do problema da análise conformacional de moléculas cíclicas, especificamente o sistema não linear desenvolvido por Emiris (1994) com três equações e três incógnitas resultando em oito raízes distintas. Este sistema representa as conformações moleculares do ciclohexano, onde a análise conformacional permite a enumeração das diversas configurações energeticamente favoráveis (Emiris e Mourrain, 1999), assim como o cálculo de suas propriedades físico-química, que resolvido, resulta em oito soluções reais. A identificação da estrutura molecular tem um papel importante na indústria química, farmacêutica, e pesquisa médica. Segundo Bini e Mourrain (2004), a análise conformacional permite a especificação da estrutura tridimensional da molécula, sendo que a configuração de mínima energia pode ser obtida permitindo-se a variação dos ângulos diédricos, de modo que os comprimentos das ligações químicas e dos ângulos das ligações mantenham-se fixos. O sistema de equações algébricas não-lineares foi obtido fixando-se os comprimentos e os ângulos das ligações. As variáveis correspondem então aos ângulos diédricos para a minimização energética, associadas aos coeficientes das entradas do sistema desenvolvido por Emiris (1994). Para testar o algoritmo, foram executadas instâncias, onde se variou os números de laços internos e externos, sendo a instância com o número de 100 e 200 laços internos da rotina Luus Jaakola, com 300 laços da estrutura externa híbrida, obteve o maior índice de ocorrências, com 81% de acerto na localização de todas as oito raízes do problema, com o tempo de execução de 5,19 segundos, e com erro máximo da função objetivo da ordem de 10^{-10} aproximadamente. Por fim, o algoritmo híbrido alcançou os resultados encontrando as oito raízes, que comparado com o método original de Luus Jaakola isoladamente, não obteve sucesso.

PALAVRAS CHAVES: Algoritmo híbrido, programação não linear, análise conformacional.