

A Conditional Rank-Count Theory for the Combinatorial Discretizable Distance Geometry Problem

Por Michael Souza, Wagner da Rocha e Carlile Lavor

Fonte: OpenAlex · UFC · [Publicação original](#)

INOVAÇÃO	APLICABILIDADE	POTENCIAL ECONÔMICO	MATURIDADE
9/10	7/10	8/10	Baixa

O trabalho apresenta uma teoria de contagem exata e uniforme por dimensão para o Problema Combinatório de Geometria de Distância Discretizável (cDDGP). A abordagem resolve ineficiências de métodos anteriores ao identificar reflexões parciais e utilizar matrizes de restrição binária, permitindo calcular soluções viáveis sem a necessidade custosa de enumerar a árvore de lateração completa.

NÚCLEO DA ANÁLISE

Ideia de startup ou produto

Desenvolvimento de uma *Deep Tech* que ofereça uma API ou biblioteca proprietária de alto desempenho para *solvers* de geometria de distância, focada inicialmente em laboratórios de pesquisa e empresas de biotecnologia para acelerar a triagem virtual de compostos.

Aplicações práticas

Modelagem molecular e descoberta de fármacos (determinação de conformações de proteínas), localização de redes de sensores sem fio, robótica (planejamento de movimento e cinemática inversa) e reconstrução de estruturas em engenharia.

Potencial de mercado

Alto potencial econômico, especialmente no setor de biotecnologia e farmacêutico, onde a aceleração de simulações moleculares representa economia de bilhões em P&D. Também aplicável em setores de telecomunicações e automação que dependem de localização precisa.

FUNDAMENTO CIENTÍFICO

Problema abordado

A incapacidade dos métodos de contagem baseados em simetria de lidar com conjuntos de predecessores não consecutivos no cDDGP. Isso gerava custos computacionais proibitivos e resultados incompletos na determinação de estruturas moleculares e problemas geométricos complexos.

Metodologia

Desenvolvimento de um teorema de contagem baseado em rank condicional, utilizando operações de grafo, identificação de reflexões parciais através de componentes livres de sementes e computações de rank sobre o campo binário ($GF(2)$). O método evita a enumeração explícita da árvore, focando na estrutura algébrica do problema.

Principais descobertas

Estabelecimento de um método exato para contar realizações factíveis que se aplica a qualquer dimensão Euclidiana (incluindo 1D). A técnica consegue distinguir e combinar escolhas de ramificação viáveis de forma eficiente, garantindo completude sob a premissa de um framework genérico.

LEITURA PARA GESTÃO PÚBLICA

Fortalecimento da política de inovação do Ceará através do financiamento de centros de excelência em computação de alto desempenho aplicados à saúde, utilizando este algoritmo para atrair contratos de pesquisa internacionais para a UFC.

PARCERIA UNIVERSIDADE × EMPRESA

Licenciamento da tecnologia para grandes players de *software* científico (ex: Schrödinger, Dassault Systèmes) ou cooperação técnica com a indústria petroquímica para aplicação em modelagem de cadeias moleculares complexas.

OPORTUNIDADES DERIVADAS

3 direções estratégicas identificadas

STARTUP · IMPACTO ALTO · HEALTHTECH

BioGeometry Accelerator

Startup de *HealthTech* focada em oferecer serviços de computação em nuvem usando o algoritmo para acelerar o processo de *docking* molecular e predição de estrutura proteica.

PRODUTO CORPORATIVO · IMPACTO MÉDIO · ROBÓTICA

Solver de Geometria de Alta Precisão

Integração do algoritmo em suites de engenharia (CAD/CAE) e sistemas de navegação autônoma para melhorar a precisão de localização em ambientes de sinais mistos.

Consórcio de Bioinformática UFC-Empresa

Parceria para validação industrial do algoritmo, onde a empresa fornece dados reais e a UFC o aprimoramento teórico, resultando em propriedade intelectual conjunta.

ABSTRACT ORIGINAL

The Combinatorial Discretizable Distance Geometry Problem combines a finite binary lateration process with additional distance constraints. When predecessor sets are not consecutive, these pruning constraints interact in ways that make the symmetry-based counting methods available for molecular instances insufficient. We establish an exact, dimension-uniform counting theorem for seed-fixed feasible realizations under strict discretization and a generic feasible framework assumption. Our approach identifies partial reflections through seed-free connected components of the lateration skeleton. These reflections are encoded by binary masks, while a labeled constraint matrix detects combinations that preserve all pruning distances. The feasible branch choices split into constrained choices generated by compatible partial reflections and unconstrained choices outside the predecessor closure of the pruning endpoints. The resulting count is obtained from graph operations and rank computations over the binary field, without enumerating the lateration tree. Completeness follows from the characterization of generic realizations of the relevant joined graphs by partial reflections. The theorem applies in every Euclidean dimension, including dimension one.

MATÉRIA PARA LEIGOS

Para leigos: Nova teoria matemática simplifica a resolução de problemas de distância complexos

O cenário atual

Na ciência da computação e na matemática, existe um desafio complexo conhecido como o "Problema de Geometria de Distância Discretizável Combinatório". O objetivo é descobrir a posição exata de objetos usando apenas as distâncias entre eles. Atualmente, os métodos disponíveis baseados em simetria funcionam bem para moléculas, mas se tornam insuficientes quando as restrições de distância interagem de maneiras mais complicadas, especialmente em situações onde os conjuntos de predecessores não são consecutivos.

O que os pesquisadores fizeram

Os pesquisadores da Universidade Federal do Ceará (UFC) desenvolveram uma nova abordagem teórica, chamada de "Teoria de Contagem por Posto Condicional". Eles estabeleceram um teorema exato para contar o número de soluções possíveis (realizações viáveis) para esse problema geométrico. O trabalho foca em um cenário onde há uma semente fixa e uma discretização estrita, assumindo um quadro genérico viável.

Como funciona na prática

A metodologia proposta identifica "reflexões parciais" através de componentes conectados sem semente no esqueleto de lateração (a estrutura básica do problema). Essas reflexões são traduzidas em "máscaras binárias" (sequências de zeros e uns). Além disso, utiliza-se uma matriz de restrições rotulada para detectar quais combinações preservam todas as distâncias de poda. O processo divide as escolhas de ramificação em duas partes: escolhas restritas (geradas por reflexões parciais compatíveis) e escolhas irrestritas. O cálculo final é obtido por operações em grafos e computações de posto em campos binários, eliminando a necessidade de enumerar a árvore de lateração inteira.

Resultados e evidência

O principal resultado é a criação de uma fórmula de contagem que é "uniforme em relação à dimensão". Isso significa que ela funciona em qualquer dimensão euclidiana, incluindo a dimensão um. Os pesquisadores provaram a completude do método ao demonstrar que ele consegue caracterizar todas as realizações genéricas dos grafos relevantes através das reflexões parciais identificadas.

Implicações práticas

Embora o paper seja focado na teoria, as palavras-chave sugerem aplicações em áreas como análise química (uso de matrizes para estudo de moléculas) e aeronáutica (interseções). A capacidade de contar soluções exatas sem precisar listar cada uma delas pode tornar cálculos computacionais mais eficientes em campos que dependem de geometria e grafos.

Limitações e próximos passos

O paper não detalha experimentos práticos fora da demonstração matemática. A teoria se aplica sob condições específicas, como a "discretização estrita" e a "hipótese de quadro genérico viável". O texto não informa sobre testes com dados reais ou implementações em software, limitando-se à validação teórica do teorema proposto.

QUEM SÃO OS PESQUISADORES

Quem são os pesquisadores

O estudo foi realizado por Michael Souza, Wagner da Rocha e Carlile Lavor, pesquisadores vinculados à Universidade Federal do Ceará (UFC). O paper não detalha a formação acadêmica específica, outros títulos ou a trajetória profissional anterior dos autores, indicando apenas a sua afiliação institucional na UFC e a autoria desta pesquisa teórica.

PALAVRAS-CHAVE

Pruning · Binary number · Dimension (graph theory) · Computation · Completeness (order theory) · Graph theory · Matrix (chemical analysis) · Graph · Intersection (aeronautics)