

## XXV CNMAC

## XXV CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL

O Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC) realizado pela SBMAC é o mais importante evento de Matemática Aplicada e Computacional do país.

A cada ano, com aproximadamente mil participantes, a SBMAC promove um fórum privilegiado para a permanente discussão das necessidades e dos rumos a serem seguidos, para melhor condução das atividades de Matemática Aplicada e Computacional. São convidados proeminentes conferencistas nacionais e internacionais, que estimulam frutíferas cooperações e trocas de informações. Participam também dos CNMACs representantes das agências de fomento e avaliação da pesquisa e do ensino no país, bem como representantes de setores produtivos que utilizam a Matemática Aplicada em suas atividades.

O XXV CNMAC conta com a parceria do Departamento de Modelagem Computacional (DMC) do Instituto Politécnico (IPRJ) da Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) e oferece como atividades 13 conferências, 06 mini-simpósios, 06 mini-cursos, e 460 comunicações técnicas.

A realização deste evento está sendo possível devido ao apoio recebido das seguintes fontes: CAPES, CNPq, CNPq/CTPETRO, FAPERJ, FINEP, UERJ, WOC/SMB e do Instituto do Milênio "Avanço Global e Integrado da Matemática Brasileira".

Estamos certos de que o participante do XXV CNMAC encontrará entre as atividades oferecidas aquelas que mais se adequam ao seu perfil acadêmico-profissional.

Desejamos a todos um bom congresso.

Nova Friburgo, setembro de 2002.

Comissões Organizadoras

RESUMOS

# SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DOS PROCESSOS DE FORMAÇÃO DE PARES DE BASES BIOLÓGICAS CONSIDERANDO PRINCÍPIOS GEOMÉTRICOS E ENERGÉTICOS.

S. Carvalho<sup>1</sup>, D. Samios<sup>2</sup>, D. A.R. Justo<sup>3</sup>, A. L. De Bortoli<sup>4</sup>, P. A. Netz<sup>5</sup>

<sup>1</sup> PGCIMAT – UFRGS – sani@mat.ufrgs.br

<sup>2</sup> Instituto de Química – UFRGS – dsamios@iq.ufrgs.br

<sup>3</sup> University of New Mexico – E.U.A. – djusto@math.unm.edu

<sup>4</sup> Departamento de Matemática Pura e Aplicada - UFRGS – dbortoli@mat.ufrgs.br

<sup>5</sup> Faculdade de Química - ULBRA – Netz@iq.ufrgs.br

## Resumo

Neste trabalho, analisam-se os processos de formação de ligações de hidrogênio entre as bases biológicas Adenina, Timina, Guanina e Citosina através de um modelo geométrico de pareamento das bases, utilizando o método Monte Carlo probabilístico. Investigam-se, entre todos os possíveis padrões de ligações de hidrogênio existentes, a possibilidade de formação de cada par, considerando princípios geométricos e energéticos. Para a representação geométrica das bases no espaço de simulação, utiliza-se a técnica de transformações geométricas. As coordenadas atômicas de todas as bases são armazenadas num gráfico estrutural, em formato PDB (Protein Data Bank), que podem ser visualizadas usando o programa Rasmol. As distâncias entre as bases são avaliadas utilizando métricas e as moléculas são movimentadas estocasticamente no espaço bidimensional. A possibilidade de formação de pares é primeiro verificada considerando princípios geométricos (distância e orientação das moléculas) seguida pela análise da probabilidade relacionada a princípios energéticos. O fator de probabilidade energético  $P$  relacionado a cada modelo de par de base é proporcional ao fator de Boltzmann,  $e^{-\Delta E/KT}$ , onde  $\Delta E$  é a energia de ligação relativo a cada par de base, avaliada usando o programa SPARTAN.

Resultados numéricos preliminares, considerando princípios geométricos, mostram que a formação de heteropares contam com uma maior probabilidade de formação em relação aos homopares, em concordância com dados encontrados na literatura. A formação das ligações de hidrogênio simples, entre as bases Adenina e

Timina, apresentam diferenças quanto aos número de ligações obtidas para os modelos considerados. Quanto aos modelos de ligações de hidrogênio duplas entre as bases Adenina e Timina, pode-se observar pequena diferença no número de ligações de hidrogênio, também concordando com dados da literatura. Tal análise pode fornecer fundamentos básicos para a construção de modelos mais complexos e entender alguns mecanismos ocorridos em processos relacionados à mutações e compreender este tipo de fenômeno biológico.

## Referências

- [1] Donohue, J.. Hydrogen-bonded helical configurations of polynucleotides, *J.Proc. Natl.Acad. Sci. U.S.A.* v. 42, p.60-65, 1956.
- [2] González, E., Castro, I., López, E.. Simulation de la hidratacion de los pares de bases adenina-timina por el metodo de Monte Carlo, *Revista Mexicana de Física*, v. 44(5), p.473-478, 1998.
- [3] Nir, E., et all.. Pairing of isolated nucleic-acid bases in the absence of the DNA backbone, *Nature*, v.408,p.21-28, 2000.
- [4] Rogers, D. F., *Mathematical Elements for Computer Graphics*, McGraw-Hill, New York, 1989.
- [5] PC SPARTAN PLUS *Wavefunction, Inc.*, 1997