

Sessão 19

Fundamentos da Computação e Bioinformática

148

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA DINÂMICA DO LAC OPERON. *Patrícia Benelli, Ney Lemke, José Carlos Merino Mombach (orient.) (UNISINOS).*

O interesse em simular sistemas biológicos deve-se aos novos métodos experimentais, que geram uma grande quantidade de dados, surgindo a necessidade de desenvolvimento de técnicas computacionais para simular redes de reações bioquímicas complexas. O entendimento das interações entre os compostos moleculares se faz necessário para reproduzir o comportamento do organismo através da resolução de equações matemáticas ou simulações computacionais. A simulação da dinâmica de redes regulatórias, que envolvem a ação dos genes responsáveis pelo controle dos processos celulares, é um campo de estudo para o desenvolvimento de modelos matemáticos, que sejam capazes de fornecer informações e descrever o comportamento destes complexos celulares. Estes sistemas biológicos possuem uma grande complexidade e sua modelagem matemática baseia-se em assumir que as interações entre os componentes moleculares sejam similares a uma rede de reações bioquímicas. O presente trabalho consiste em implementar um modelo matemático para a regulação da indução do *lac operon* em *Escherichia coli*, originalmente proposto por *Yildirin e Mackey (2003)*, utilizando o software *Mathematica 5.0*. O *lac operon* consiste de uma região promotora e outra operadora e de três genes, *lacZ*, *lacY* e *lacA*, necessários para o metabolismo da lactose. O modelo matemático consiste de cinco equações diferenciais não-lineares com atraso. Este atraso é decorrente dos processos de transcrição e tradução. O modelo leva em consideração a dinâmica da permease, que facilita a entrada da lactose externa; da lactose interna; da *B*-galactosidase, que está envolvida na conversão de lactose em alolactose, glicose e galactose; das interações da alolactose com o repressor *lac* e mRNA. Foi desenvolvido com o *Mathematica* um "notebook" que resolve as equações diferenciais e realiza gráficos das concentrações das quantidades de interesse. O modelo foi comparado com sucesso com resultados experimentais.