

Ordenamento por energia virtual de redes de interações protéicas: estudo da *Arabidopsis thaliana*

Aluno: Carlos Eduardo Gasparoni Santos

Orientador: Leonardo Gregory Brunnet

Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O projeto consiste em utilizar o processo de ordenamento por energia virtual na lista de correlação dos genes da *Arabidopsis thaliana* e, a partir dos resultados obtidos, identificar a relação entre as propriedades físicas da rede com o papel dos genes nas funções biológicas conhecidas.

Para isso, parte-se de uma lista que relaciona os genes em pares, com base no fato de que, em alguma função biológica, a ativação de um dos genes causa ou implica na ativação do outro. A partir dessa lista monta-se uma matriz quadrada, de tamanho igual ao número de genes, onde cada elemento possui valor 1 se os genes estão correlacionados, ou valor 0 se os genes não estão correlacionados. A seguir é feito o ordenamento por energia virtual, que consiste em atribuir a cada elemento uma energia proporcional à sua distância da diagonal principal e ao número de vizinhos não nulos. Usa-se uma dinâmica do tipo Monte Carlo para inverter a posição de dois genes escolhidos aleatoriamente, com o propósito de minimizar a energia total da matriz.

Com a matriz ordenada e próxima do mínimo absoluto de energia, começa a análise do sistema. São feitos os cálculos de modularidade, conectividade e clusterização de cada gene da rede e, a partir disso, se espera encontrar uma relação entre esses valores físicos e a ativação dos genes nas funções biológicas, ou seja, se espera provar que o ordenamento feito anteriormente agrupa os genes de acordo com seu papel nas funções biológicas.