

XVIII Encontro de Jovens Pesquisadores Universidade de Caxias do Sul - 2010

Diagramas de Voronoi - Aplicação na Rede de Integração Protéica

Jaqueleine Celestini (Voluntaria), Diego Bonatto, Daniel Luis Notari (orientador)

A bioinformática permite a realização de experimentos com processamento computacional, a partir da interação das áreas de biologia, informática e matemática. Esta junção permite a geração, teste e comprovação de hipóteses através de experimentos que envolvem um grande volume de dados de análises globais de células e organismos. O grande objetivo é determinar a função e o papel biológico de cada uma das sequências de genes e proteínas. As proteínas determinam os aspectos da estrutura e função celulares, além de expressarem a maior parte das informações genéticas. A visualização destes dados através de uma representação gráfica é uma maneira de descrever, explorar e condensar um grande volume de informações. Assim, é possível visualizar a interação entre as proteínas e perceber que estas geram estruturas complexas, costumeiramente representadas sob a forma de redes, conhecidas matematicamente como redes de livre escala, por facilitar a análise e a visualização. Este trabalho testou uma representação gráfica das redes de interação de proteínas com o uso dos mosaicos de voronoi. Estes são representados como um grupo de poliedros e, pois possuem propriedades matemáticas interessantes para a representação das redes, tais como, a associação entre pontos vizinhos. Através dessas associações é possível identificar e analisar as proteínas com maior número de conexões, conhecidas como *hubs*. Essas proteínas são associadas de maneira empírica a funções mais importantes. A metodologia utilizada foi a implementação do algoritmo do Mosaico de Voronoi na linguagem Java na forma de um *plugin* utilizado no software Cytoscape. Os resultados foram obtidos com o estudo de caso de três redes de interação de proteínas de tamanhos diferenciados obtidas do banco de dados STRING, respectivamente, as proteínas Cox-1 com 11 nodos, p53 com 356 nodos e uma rede de interações físicas entre proteínas da *Saccharomyces cerevisiae* com mais de 4000 nodos. Nos testes realizados foi possível avaliar que, se a rede for manipulada previamente no Cytoscape e, posteriormente, aplicada no *plugin*, a representação pode ser prejudicada na localização de algumas coordenadas, que podem ficar negativas. Foi constatado também que, sem um algoritmo recursivo no cálculo do vizinho mais próximo e sem o uso de escalas a representação de redes acima de 600 nodos se torna inviável. Além disto, os mosaicos de Voronoi gerados não estão de acordo com a forma original.

Palavras-Chave: Mosaico de Voronoi, Biologia de Sistemas, Interação de Proteínas

Apoio: UCS

XVIII Encontro de Jovens Pesquisadores - Setembro de 2010
Universidade de Caxias do Sul