

Modelos e níveis de representação

Guilherme Menegon Arantes

garantes@iq.usp.br

<http://gaznevada.iq.usp.br>



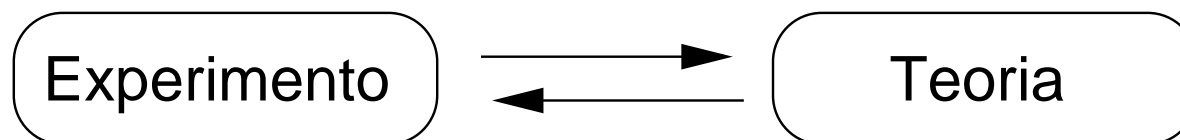
Teoria

- Não é o contrário de fato. Linguagem popular
- Def: Explicação sobre um conjunto de fenômenos, experimentalmente testável e capaz de fazer previsões

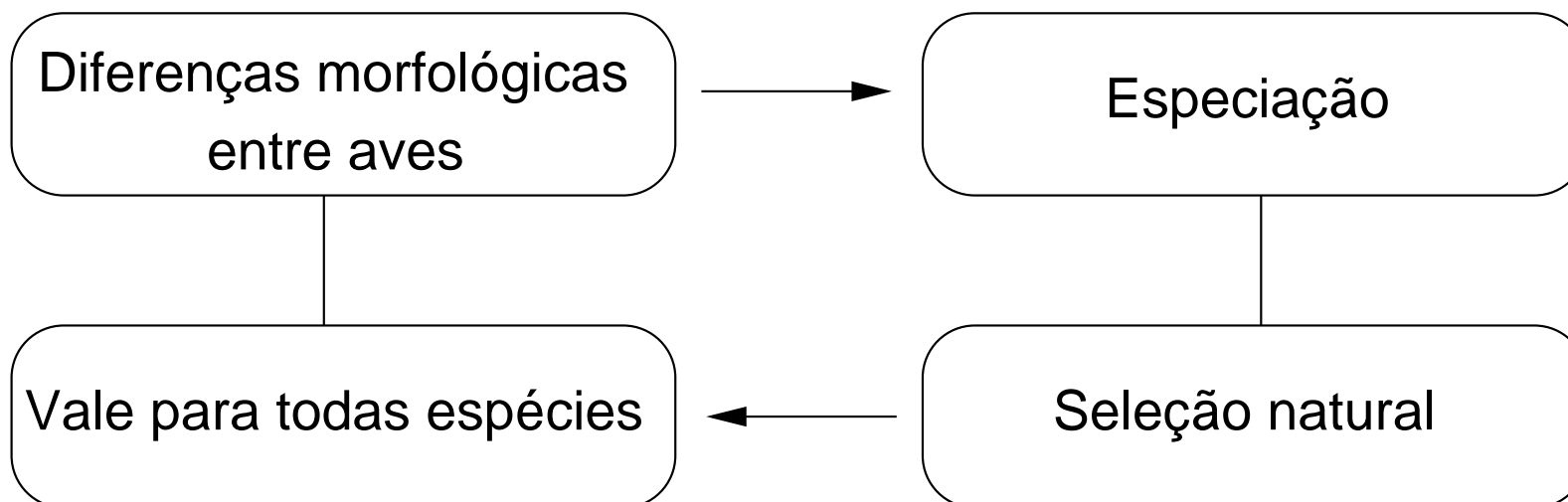
Modelos e representações

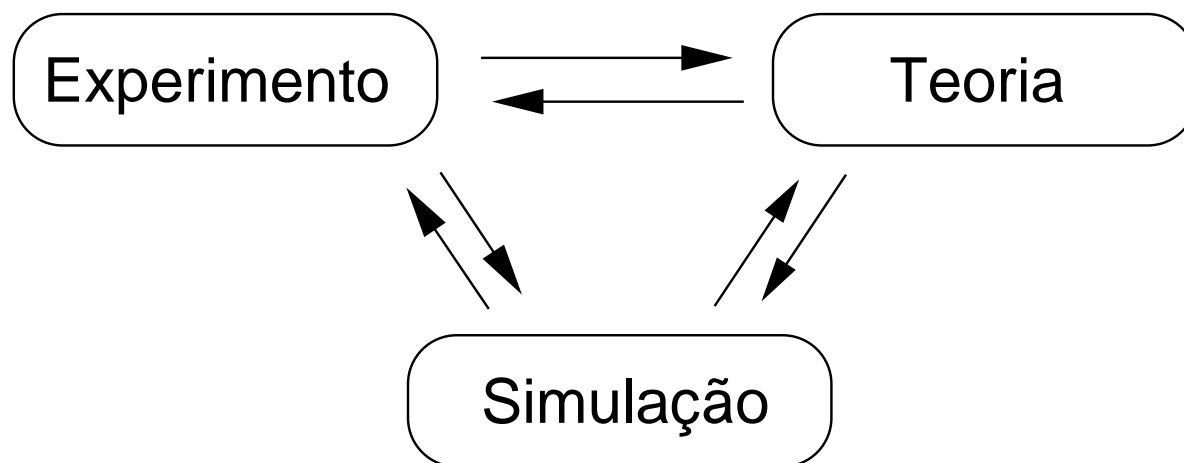
- Idealização, abstração ou simplificação. Objeto diferente da realidade
- Crítica comum: “Este modelo não é real”. Nenhum modelo é! O importante é que seu modelo seja consistente e explique os fenômenos
- Linguagem matemática usada para descrever fenômeno





- Exemplo. Charles Darwin (1859):

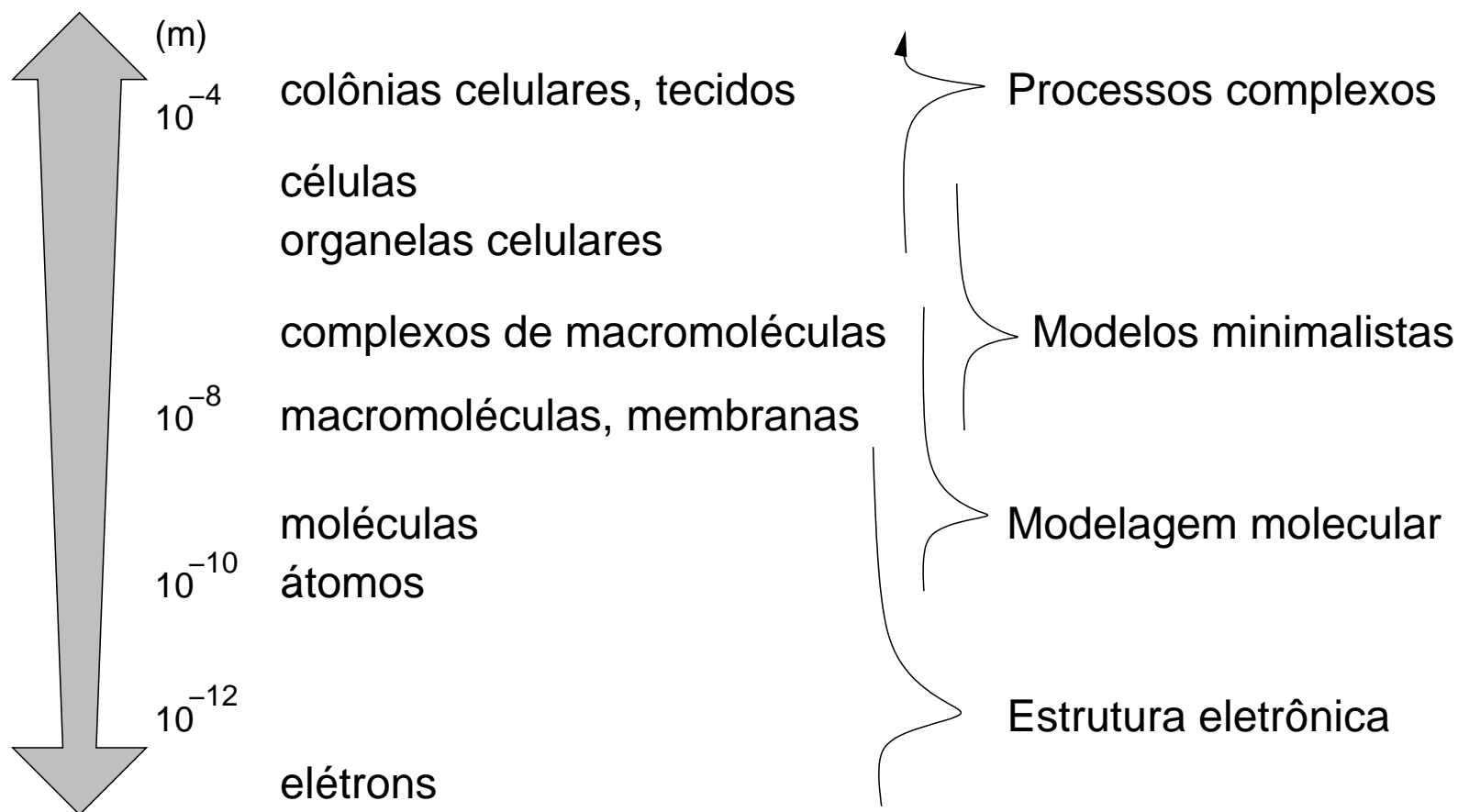




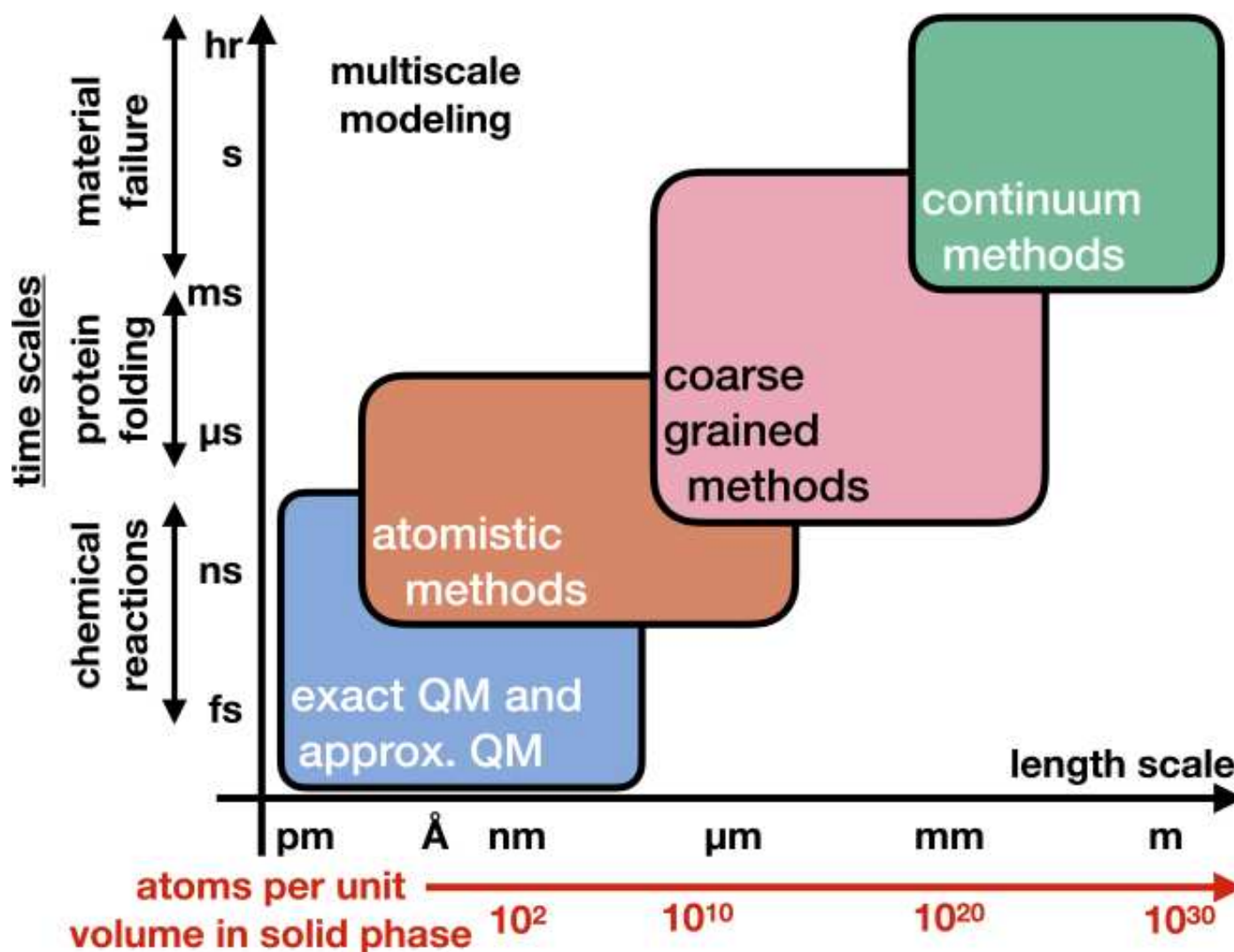
- Def: Imitação de um estado ou processo
- Depende de um modelo e de suas “leis” ou regras
- Modelos e/ou dados complexos \Rightarrow uso de computadores
- Simulação tem um papel central na ciência moderna
 - Testar modelos muito complicados. Ex: Funcionamento do ribossomo
 - Interpretar experimentos muito complicados. Ex: Espectro RMN de proteínas



Escala de tamanho e níveis de simulação



Escala de tamanho e níveis de simulação



Níveis de simulação: Perguntas

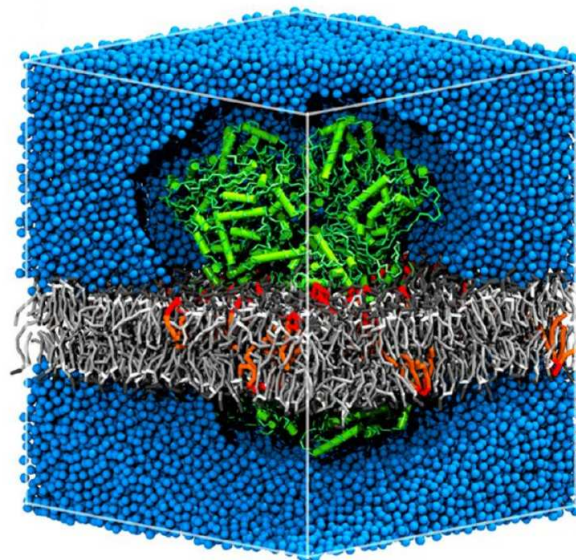
- Processos complexos: Como é a rede de regulação da expressão gênica?
- Modelos minimalistas: Qual mecanismo de transições alostéricas?
- Modelagem molecular: Qual conformação da macromolécula?
- Estrutura eletrônica: Aonde estão os elétrons?

- Potencial para estudar qualquer fenômeno quantitativo e/ou mecanístico em bioquímica!



O que precisamos para fazer uma simulação?

- Composição e estrutura 3D inicial do sistema (proteína, membrana, solvente, etc)



- Descrição das **interações**:
 - Mecânica Quântica descreve perfeitamente, mas é custosa (demorada) computacionalmente
 - Utilizamos aproximações (Mecânica Molecular, etc.)

