



Defesa de Dissertação de Mestrado em Modelagem Computacional

DATA: 28/02/2014
HORÁRIO: 10h
LOCAL: Sala 4118 – Anfiteatro “Escadinha”
(Faculdade de Engenharia)

“Estratégias Numéricas e de Otimização para Inferência da Dinâmica de Redes Bioquímicas”

Mestrando: Carlos Roberto Lima Ladeira
Orientador: Prof. Carlos Cristiano Hasenclever Borges

Banca Examinadora:

Prof. Carlos Cristiano Hasenclever Borges – UFJF (Presidente/Orientador), D.Sc.
Prof. Helio José Corrêa Barbosa – UFJF, D.Sc.
Prof. Wagner Antônio Arbex – EMBRAPA, D.Sc.

Resumo:

Estimar parâmetros de modelos dinâmicos de sistemas biológicos usando séries temporais é cada vez mais importante, pois uma quantidade imensa de dados experimentais está sendo mensurados pela biologia molecular moderna. Uma abordagem de resolução baseada em problemas inversos pode ser utilizada na solução deste tipo de problema. A escolha do modelo matemático é uma tarefa importante, pois vários modelos podem ser utilizados, apresentando níveis diversos de precisão em suas representações.

A Teoria dos Sistemas Bioquímicos (TSB) faz uso de equações diferenciais ordinárias e expansões de séries de potências para representar processos bioquímicos. O Sistema S é um dos modelos usados pela TBS que permite a transformação do sistema original de equações diferenciais em um sistema algébrico desacoplado, facilitando a solução do problema inverso. Essa transformação pode comprometer a qualidade da resposta se o valor das derivadas nos pontos das séries temporais não for obtido com precisão. Para estimar as derivadas pretende-se explorar o método do passo complexo, que apresenta vantagens em relação ao método das diferenças finitas, mais conhecido e utilizado.

A partir daí pode então ser realizada a busca pelas variáveis que definirão as equações do sistema. O método da Regressão Alternada é um dos mais rápidos para esse tipo de problema, mas a escolha inicial dos parâmetros possui influência em seu resultado, que pode até mesmo não ser encontrado. Pretende-se avaliar o método da Entropia Cruzada, que possui a vantagem de realizar buscas globais e talvez por esse motivo a escolha dos parâmetros iniciais não cause tanta influência nos resultados. Além disso, será avaliado um método híbrido que fará uso das principais vantagens da Regressão Alternada e do Entropia Cruzada para resolver o problema.

Experimentos numéricos sistemáticos serão realizados tanto para a etapa de estimativa das derivadas quanto para a etapa de otimização para obtenção das variáveis das equações do sistema.