



Defesa de Tese de Doutorado em Modelagem Computacional

DATA: 31/03/2016

HORÁRIO: 14h

LOCAL: Auditório 2 do Prédio Engenheiro Itamar Franco/Faculdade de Engenharia

“Reprodução de Experimentos Biológicos *in silico*”

Doutorando: Igor de Oliveira Knop

Orientador: Prof. Ciro de Barros Barbosa

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Ciro de Barros Barbosa (Presidente/Orientador) – UFJF, D. Sc.

Prof. Rodrigo Weber dos Santos (Coorientador) – UFJF, D. Sc.

Prof. Alcione de Paiva Oliveira – UFV, D. Sc.

Prof. Márcio de Oliveira Barros – UNIRIO, D.Sc.

Prof. Marcelo Lobosco – UFJF, D. Sc.

Prof. Heder Soares Bernardino – UFJF, D. Sc.

RESUMO:

A biologia sistêmica é uma das áreas emergentes mais poderosas no terceiro milênio por combinar de forma interdisciplinar conhecimentos e ferramentas da biologia, ciência da computação, medicina, química e engenharia. Entretanto, o contínuo desenvolvimento de experimentos computacionais é acompanhado por problemas como a integração manual de ferramentas para simulação e análise; a perda de modelos pela obsolescência de *software*; e a dificuldade para reprodução dos experimentos devido à falta de detalhes do ambiente de execução utilizado. A maioria dos modelos quantitativos publicados em biologia são perdidos porque eles, ou não estão mais disponíveis, ou porque são insuficientemente caracterizados para permitir sua reprodução. Este trabalho propõe uma abordagem para guiar o registro de experimentos *in silico* com foco na sua reprodução. A abordagem prevê a criação de uma série de anotações durante um trabalho em modelagem computacional, amparado por um ambiente de *software*, onde o pesquisador realiza as etapas de integração de ferramentas, descrição de processos e execução de experimentos. O objetivo é capturar o processo de modelagem de forma não invasiva para aumentar a troca de conhecimento, permitir repetição e validação dos resultados e diminuir o retrabalho em grupos de pesquisa interdisciplinares. Um ambiente computacional protótipo foi construído e dois fluxos de trabalho de ferramentas diferentes foram integradas como estudos de caso. O primeiro usa modelos da eletrofisiologia cardíaca para se construir novas aplicações sobre o ambiente. O segundo apresenta um novo uso para os metamodelos de dinâmica de sistemas para simular a resposta do sistema imune inato em uma seção planar de tecido. Foi observada a completa captura dos *workflows* de simulação e tratamento dos dados de saída nos dois experimentos de controle. O ambiente permitiu a reprodução e adaptação dos experimentos em três níveis diferentes: a criação de novos experimentos utilizando a mesma estrutura do original; a definição de novos aplicativos que utilizam variações da estrutura do experimento original; reaproveitamento do fluxo de trabalho para alterações nos modelos e condições originais.