

## TEORIA ALGÉBRICA DOS GRAFOS E A ESTRUTURA SECUNDÁRIA DO RNA

Universidade Federal de Viçosa

Ana Paula de Paiva Lima<sup>1</sup>, Rogério Carvalho Picanço<sup>2</sup>, Aline Marçal Rossinol<sup>3</sup>

Graduanda em Biologia-UFV<sup>1</sup>, Professor do DMA-UFV<sup>2</sup>, Graduanda em Matemática-UFV<sup>3</sup>

anapauladepaivalima@gmail.com<sup>1</sup>, rogerio@ufv.br<sup>2</sup>, alinerossinol@gmail.com<sup>3</sup>

Área temática: Matemática Aplicada

Grande área: Ciências Exatas e Tecnológicas

Categoria: Pesquisa

Palavras-chave: RNA, Grafos, Biomatemática

### Introdução

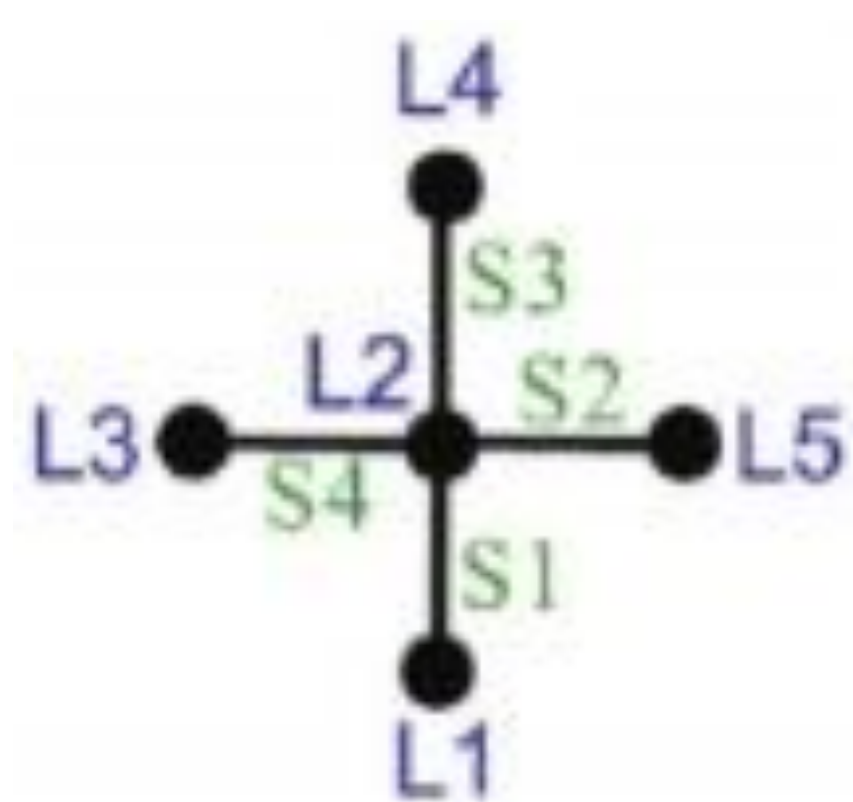
O projeto se baseia em combinar a Teoria dos grafos com o estudo da estrutura secundária do RNA. Por definição temos que um grafo  $G$  consiste num conjunto finito e não vazio  $V(G)$  de elementos chamados vértices e um conjunto finito  $A(G)$  de elementos chamados arestas. Grafos podem ser representados por um desenho ou por uma matriz de adjacência. Já o RNA é um polímero de fita única, extremamente versátil devido a capacidade de formar estruturas bidimensionais diversas.

### Objetivos

O objetivo da pesquisa é estudar a predição da estrutura secundária do RNA, a partir da estrutura primária, por meio dos grafos e suas variadas propriedades.

### Material e Métodos

Associamos à estrutura secundária do RNA um grafo. Através da construção da matriz de adjacência, formada pelo número de arestas que ligam cada par de vértices, podemos obter importantes informações sobre o RNA calculando os autovalores e autovetores, além do polinômio característico associado a essa matriz.



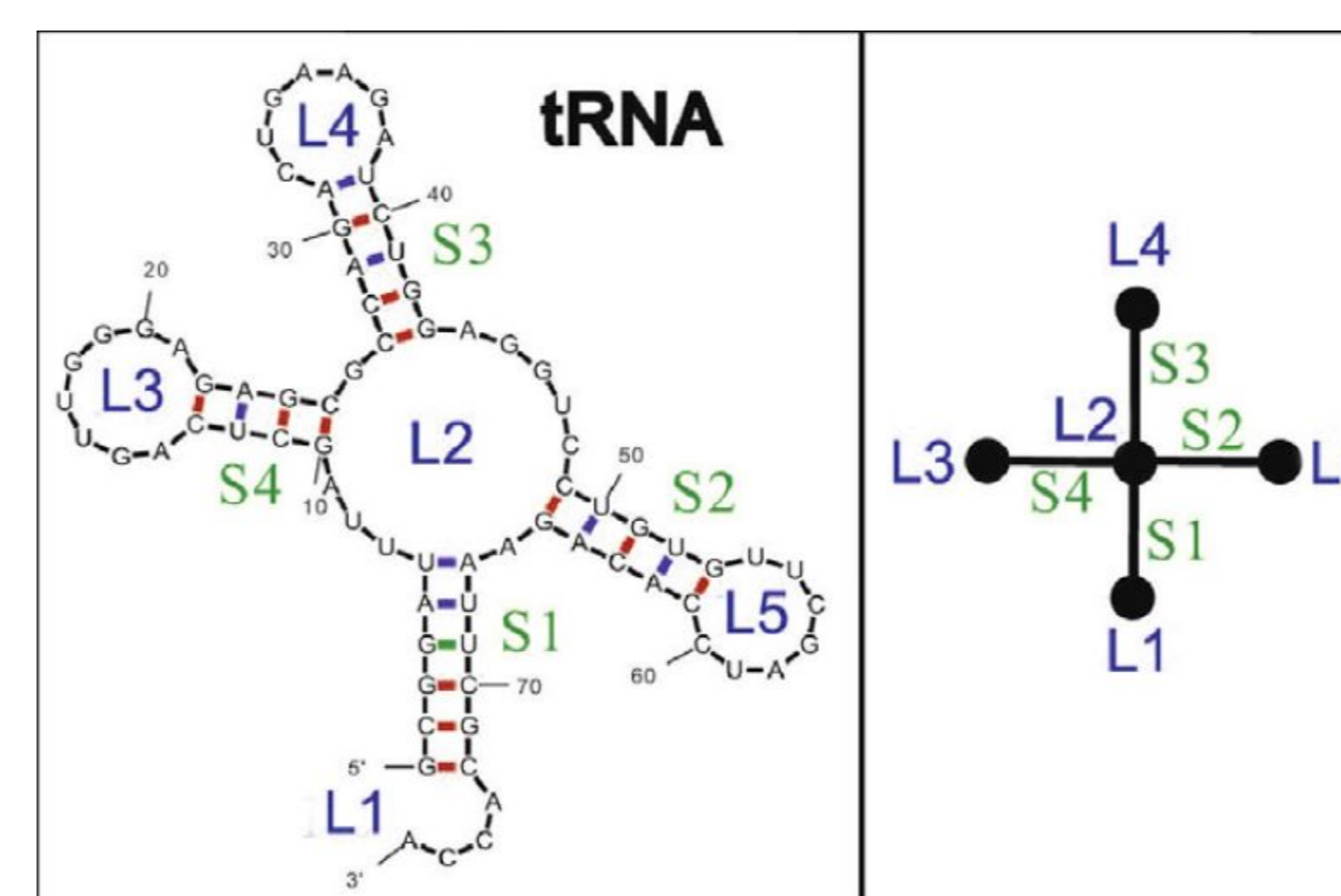
Grafo

	L1	L2	L3	L4	L5
L1	0	1	0	0	0
L2	1	0	1	1	1
L3	0	1	0	0	0
L4	0	1	0	0	0
L5	0	1	0	0	0

Matriz de Adjacência associada ao grafo

### Resultados e Discussão

Veja como o grafo anterior foi contruído, a partir de um RNA:



A região com as extremidades 3' e 5' (L1) é representado por vértice; Regiões em que há mais de um par de base não-pareado são vértices (L2, L3, L4 e L5); Regiões com dois ou mais pares de base pareados são arestas (S1, S2, S3 e S4).

O polinômio característico da matriz é  $-\lambda^5 + 4\lambda^3$ , através dele podemos saber algumas propriedades do grafo, por exemplo: o número de vértices (5) pela potência do fator  $-\lambda^5$ ; o número de arestas (4) pelo coeficiente do fator  $4\lambda^3$ ; e ausência de triângulos, já que o fator  $\lambda^{(n-3)}$  é inexistente. Estas propriedades se generalizam para todos os grafos.

### Conclusões

Esta pesquisa permite-nos obter propriedades e padrões estruturais do RNA. Suas aplicações são variadas, podendo ser usada desde para classificar essas moléculas até estudos de vacinas e doenças de origem genética.

### Bibliografia

GAN, Hin Hark; PASQUALI, Samuela; SCHLICK, Tamar. *Exploiring the repertoire of RNA secondary motifs using graph theory; implications for RNA design*. Nucleic Acids Research, [S. l.], p. 1-7, 17 mar. 2003.

### Apoio Financeiro