

# 175<sup>a</sup> DEFESA DE DISSERTAÇÃO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL - MAEI


PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI



## VINÍCIOS CABRAL BEDESCHI

 [pei@ufba.br](mailto:pei@ufba.br)

 [www.pei.ufba.br](http://www.pei.ufba.br)

 @peiufba

 @peiufba

 PEI TV

### Orientador:

- Profa. Dra. Rosana Lopes Lima Fialho (PEI-UFBA).

### Banca Examinadora:

- Profa. Dra. Rosana Lopes Lima Fialho (PEI-UFBA);
- Prof. Dr. José Garcia Vivas Miranda (IF-UFBA);
- Prof. Dr. José Carlos Costa da Silva Pinto (UFRJ);
- Prof. Dr. Vitor Passos Rios (UEMG).

### Suplentes:

- Prof. Dr. Raphael Silva do Rosário (IF-UFBA);
- Prof. Dr. Joyce Batista Azevedo (UFBA).

**Título:** SIMULAÇÃO COM MODELO BASEADO EM AGENTES PARA POLIMERIZAÇÃO NÃO ENZIMÁTICA DE NUCLEOTÍDEOS EM PROTOCÉLULAS.

**Data:** 18 de dezembro de 2023

**Horário:** 09h30min.

**Local:** Sala de Congregação da Escola Politécnica da UFBA e [https://conferenciaweb.rnp.br/webconf/pei\\_epufba](https://conferenciaweb.rnp.br/webconf/pei_epufba)

### Resumo:

A Origem da Vida é uma das questões fundamentais da Humanidade, amplamente discutida ao longo da História. Já tendo sido abordada em Mitos, nas Artes e na Filosofia, hoje é intensamente estudada pela ciência moderna, no ramo interdisciplinar de estudos da Origem da Vida. A hipótese atualmente aceita é a do aumento gradual de complexidade de pequenas moléculas da Terra primitiva, que interagindo entre si, tornam-se estruturas maiores e funcionais. Tais macromoléculas, ou blocos construtores da vida (como Nucleotídeos e Aminoácidos), interagem entre si para o surgimento de algum tipo de estrutura pré-celular, ou Protocélula. Tal Protocélula ainda não é um sistema vivo, mas apresenta um metabolismo rudimentar e hereditariedade, com seus processos funcionando por meios químicos e termodinâmicos. O aumento de complexidade de tais Protocélulas daria origem às primeiras células vivas. No entanto, há ainda muitas dúvidas não esclarecidas. Por exemplo, exatamente como moléculas simples e presentes na Terra primitiva teriam formado os chamados blocos construtores da vida, como Nucleotídeos, Lipídios e Aminoácidos. Uma vez formados, não se sabe como estes teriam se polimerizado em cadeias de Nucleotídeos (polímeros genéticos) ou Aminoácidos (proteínas). Ou como estes polímeros genéticos, após formados, iriam se autorreplicar (função hereditária). Como surge uma Protocélula, ou como esta origina uma célula viva, são mais alguns dentre os diversos temas de investigação da pesquisa atual. O presente trabalho apresenta um modelo computacional para o estudo de um destes temas: a polimerização não enzimática de Nucleotídeos. Realizando a validação do modelo, por meio de dados experimentais de polimerização de Nucleotídeos, realizados em laboratório. Com os resultados simulados prevendo, com razoável precisão, as funções distribuições de dados experimentais de polimerização de Nucleotídeos.

**Palavras-chave:** Origem da Vida, Protocélula, Modelo computacional, Modelos baseados em Agentes, MBA, polimerização de Nucleotídeos, Nucleotídeos.