

Modelação de Processos Biológicos

Ocorrência: 5º semestre

Carga horária: T 22.5h; PL 30h; OT 7.5h

ECTS: 5,0

Área disciplinar: Biotecnologia

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

O objectivo desta UC é dar aos estudantes as capacidades matemáticas necessárias para modelar e simular sistemas biológicos/bioquímicos de um ponto de vista cinético e metabólico. Esta formulação matemática advém da teoria dos sistemas bioquímicos, em que os sistemas podem ser modelados por equações diferenciais que englobam não só a cinética e os fluxos do sistema mas também os aspectos de regulação e compartimentalização. Esta UC inclui também modelos de aplicação farmacocinética, que foram inicialmente introduzidos na UC “Metabolismo e Regulação” e serão explorados também na UC “Laboratório de Bioinformática”.

Conteúdos programáticos:

1. Modelação de reacções enzimáticas: cinética enzimática, activação e inibição; modelação de sistemas uni-enzimáticos – leis de acção de massa e de potências, lei de Henri-Michaelis-Menten.
2. Modelação de redes metabólicas I: descrição de sistemas metabólicos de 1 compartimento; análise do controlo metabólico de sistemas.
3. Modelação de redes metabólicas II: vias paralelas alternativas e transição entre vias
4. Modelação de redes metabólicas III: genes; modelos de gene único, probabilístico para genes procarióticos, e de regulação cis de genes eucarióticos

5. Modelação de redes metabólicas IV: metabolismo de fármacos.
6. Modelação de compartimentos I: fluxo e transportadores
7. Modelação de compartimentos II: a célula multicompartimentada; sinalização entre compartimentos e sinalização extracelular
8. Modelação de compartimentos III: farmacocinética

Bibliografia principal:

Fell, D., Understanding the Control of Metabolism (Frontiers in Metabolism), Portland Press, ISBN 978-1- 855-78047-7. Bower, J.M., Bolouri, H. (eds.), Computational Modeling of Genetic and Biochemical Networks, A Bradford Book, ISBN 978-0-262-52423-0.

Britton, N.F., Essential Mathematical Biology, Springer, ISBN 978-1-852-33536-6. Peters, S.A., Physiologically-Based Pharmacokinetic (PBPK) Modeling and Simulations: Principles, Methods, and Applications in the Pharmaceutical Industry Hardcover, Wiley, ISBN 978-0-470-48406-7.