



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Experimento "in silico" de matéria ativa sujeita a restrições geométricas
<b>Autor</b>	PAULO CASAGRANDE GODOLPHIM
<b>Orientador</b>	LEONARDO GREGORY BRUNNET

# Experimento *in silico* de matéria ativa sujeita a restrições geométricas.

Paulo Casagrande Godolphim

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Gregory Brunnet

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL - INSTITUTO DE FÍSICA

O ramo da física *Matéria Ativa* começou, para muitos, com o trabalho de 1995 de Vicsek onde foi introduzido um modelo mínimo de partículas autopropelentes sujeitas somente a interações simples e locais. O modelo é capaz de descrever comportamentos emergentes (de movimento coletivo sem liderança) bem como a transição de fase entre o movimento coletivo desordenado e ordenado, propriedades essas características de uma gama de sistemas complexos biológicos e não biológicos. Baseado na estrutura de *boids* de Craig Reynolds 1986, o modelo de Vicsek desenvolve a dinâmica de partículas livres puntiformes interagindo entre si dentro de uma caixa 2D finita com contorno periódico e com passo de velocidade de módulo constante sujeitas somente a duas simples interações: uma que tende a alinhar (*ordenar*) a velocidade da partícula com as velocidades de suas vizinhas - dentro de um raio crítico de interação - e um ruído branco intrínseco à velocidade das partículas que tende a desalinhar (*desordenar*) as mesmas. Como o módulo da velocidade é mantido sempre constante, as interações no sistema atuam somente nas posições angulares dos vetores velocidade. Em 2003 Grégoire introduziu um modelo uma interação radial, derivada de um potencial harmônico, possibilitando a coesão do sistema mesmo para um limite de densidade zero e um volume de exclusão (esfera rígida), impedindo que haja sobreposição e cruzamento entre partículas. Tais modificações construíram um modelo mais fidedigno às características de certos sistemas, tendo sido usado para descrever o movimento de amebas de dicty, segregação celular. Com o modelo de *Vicsek-Grégoire* é possível obter não somente a transição ordem-desordem, mas também transições de fase do tipo sólido-líquido-gasoso (com ou sem movimento). Em 2011 Vedula realizou um experimento *in vitro* sobre migração celular (de tecidos) onde folhas de células epiteliais *MDCK* - *Mandin-Darbi canine kidney* - são liberadas de um reservatório para trilhos de fibronectina de larguras distintas (do diâmetro de uma célula até dezenas), porém pequenas em relação a largura do reservatório. Comportamentos emergentes coletivos distintos foram identificados quando variou-se as larguras dos trilhos: nos trilhos largos foram identificados vórtices de dezenas de células de comprimento, nos trilhos finos as células apresentaram um movimento como o de lagartas (*caterpillar like*) e que quanto mais finos os trilhos, maior a velocidade de migração das células. Tais respostas às restrições geométricas levantaram hipóteses de como as interações microscópicas entre as células estariam conduzindo o movimento macroscópico coletivo das mesmas. O **objetivo** deste projeto se resume a duas perguntas: será possível reproduzir os comportamentos coletivos macroscópicos emergentes *caterpillar like* nos trilhos finos e de vórtices nos trilhos largos utilizando o modelo mínimo de Vicsek-Grégoire? Caso a resposta seja sim, quais seriam as variações no conjunto de parâmetros que possibilitariam tais transições de fase? Esperamos que a(s) resposta(s) a essa segunda pergunta nos possibilitem construir um modelo fenomenológico para a migração de células sujeitas a restrições geométricas capaz de reproduzir comportamentos *in vivo* e *in vitro* e até de prever certos comportamentos, possibilitando assim (mais) um *interplay* entre estas duas áreas da ciência: a física e a biologia. **Metodologia:** Desenvolvemos um programa em FORTRAN para aplicar o modelo de Vicsek-Grégoire e garantir que o nosso programa esteja apresentando resultados de acordo com a literatura. O passo seguinte foi desenvolver o programa, sem otimização, afim de obter intuição sobre como as variações dos parâmetros induzem características de movimento distintas. Utilizando condição de contorno aperiódica do tipo de parede rígida, construiremos um reservatório retângular com capacidade de armazenar centenas de células. Ao reservatório será conectado os trilhos de tamanhos variados, onde as células serão liberadas. O contorno aperiódico das paredes dos trilhos ainda será definido e, possivelmente, será um dos parâmetros. Esperamos identificar, a partir de uma análise visual, para quais conjuntos de parâmetros obtêm-se os movimentos emergentes, definindo-se assim qual será o espaço de parâmetros bem como as quantidades de interesse a serem medidas. Uma vez tendo uma boa intuição sobre a dinâmica do sistema partiremos para a otimização do programa (utilizado o método das caixas) e à determinação dos métodos de medição. Tendo o programa otimizado (e os métodos de medição definidos), iremos variar os parâmetros, medir para quais conjuntos de parâmetros emergem os comportamentos coletivos distintos (as transições de fases) e assim construir o espaço de parâmetros. Vale salientar que a metodologia detalhada acima depende de conseguirmos, utilizando o modelo proposto, obter um conjunto de parâmetros que apresente os movimentos emergentes descritos.