

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC
**UFRGS**
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

Evento	Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2017
Local	Campus do Vale
Título	Modelos de Langevin para Mobilidade Celular
Autor	GUILHERME SHOITI YOSHIMATSU GIARDINI
Orientador	MENDELI HENNING VAINSTEIN

Modelos de Langevin para Mobilidade Celular

Guilherme S. Y. Giardini* and Mendeli H. Vainstein†

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul CP 15051, 91501-970 Porto Alegre RS, Brazil

O estudo realizado sobre dinâmica estocástica tem o objetivo de simular o movimento persistente aleatório de células, buscando validar as equações de Fürth modificadas que descrevem anomalias no deslocamento quadrático médio (DQM) de células. Para se simular as equações modificadas de Fürth, primeiro, foi necessário entender bem os conceitos de equações diferenciais estocásticas, equação diferencial de Langevin e as soluções de Fürth para uma equação de Langevin simples. Inicialmente, foi simulado o caminhante aleatório sem persistência, utilizando-se dos métodos de cálculo estocástico de Itô e Stratonovich e os métodos numéricos para soluções de equações diferenciais estocásticas de Euler-Maruyama e de Milstein. Para um movimento puramente difusivo, toma-se o termo de viscosidade na equação de Langevin tendendo a infinito (Langevin superamortecida) fazendo com que a partícula mude sua velocidade a cada instante, de maneira descorrelacionada, com um tempo de persistência efetivamente igual a zero.

Em seguida, foi simulado um sistema contendo uma partícula de movimento aleatório mas persistente em uma dimensão; para esta, a equação utilizada foi a de Langevin com viscosidade finita e obteve-se a equação de Fürth como sua solução. Os resultados da simulação foram analisados com medidas da média das posições, cujo resultado precisa ser zero, o DQM, $g(\tau) = \langle [x(t+\tau) - x(t)]^2 \rangle$, e a autocorrelação das velocidades, feita através da média da correlação entre as velocidades em dois instantes diferentes de tempo, ou seja, $f(\tau) = \langle v(t)v(t+\tau) \rangle$. Para a medida do DQM foi observado resultado semelhante ao que foi obtido por Fürth, em que para observações de tempo pequenas o regime difusivo da partícula obtido foi balístico (proporcional a t^2) e para análises de tempo longas, difusivo (proporcional a t).

Em seguida, simulou-se um caminhante em duas dimensões utilizando-se de duas equações diferenciais diferentes: a primeira, uma equação de Langevin com um eixo arbitrário e a segunda, correspondendo à Langevin superamortecida para o eixo perpendicular ao primeiro. A partir do resultado das simulações, o que se obteve calculando-se o DQM foram três tipos de regimes difusivos. Para períodos de tempo muito pequenos e muito grandes, o observado foi um comportamento difusivo; para tempos médios de medida, um regime balístico. Apesar dos resultados obtidos apresentarem DQM semelhante ao observado em dados experimentais e simulacionais com apenas duas equações diferenciais, não é possível criar um fenômeno de polarização, como se observa em células.

Por este motivo, adicionou-se uma terceira equação diferencial, cuja função é simular um mecanismo de polarização celular. As equações modificadas de Fürth são as soluções dessas três equações diferenciais acopladas, sendo que duas delas são de Langevin, enquanto que a terceira simula uma dinâmica de polarização. Estas equações de Langevin são estocásticas, pois simulam forças geradas pelos mecanismos internos de uma célula. Esta aleatoriedade é atribuída ao termo de ruído branco $\nu(t)$, onde $\langle \nu(t)\nu(t') \rangle = \delta(t-t')$, ou seja, a correlação entre o ruído em um tempo e outro, resulta numa delta de Dirac.

As equações diferenciais foram solucionadas numericamente utilizando-se dos métodos de Euler-Maruyama, Milstein, Runge Kutta 4 e um método quasi-simplético, também de Milstein. A primeira equação possui a solução de Fürth e representa a dinâmica num eixo arbitrário, a segunda apresenta solução com viscosidade $\gamma \gg 1$, num outro eixo perpendicular ao primeiro, e a terceira, constitui a dinâmica de polarização da célula.

Ao analisar os resultados, o deslocamento quadrático médio (DQM) apresentou resultados semelhantes aos da simulação 2D sem a função de polarização, obtidos também experimentalmente e por meio de simulações de Potts celular.

Para validar os resultados obtidos na simulação do sistema de equações diferenciais, foram calculados o DQM, a autocorrelação das velocidades e a correlação entre medidas como os ângulos da velocidade da célula e da direção de polarização. Os dados obtidos nas simulações foram consistentes com o obtido de forma experimental, ou seja, a presença dos três regimes parece ocorrer na realidade, não sendo erro de precisão como antes se pensava.

*Electronic address: guigagiardini@gmail.com

†Electronic address: vainstein@if.ufrgs.br