

Modelagem Computacional de Quimiotaxia

Aluno: Pedro Cenci Dal Castel Orientadora: Rita Maria Cunha de Almeida

Motivação

Você já se perguntou como que o espermatozoide chega ao óvulo? Ou como o corpo consegue direcionar suas células de defesa exatamente para o local de uma infecção? Esse fenômeno chama-se quimiotaxia e é muito importante para entendermos o funcionamento do corpo humano.

Por enquanto, a quimiotaxia é pesquisada quase exclusivamente em experimentos. Nesse contexto, o LabCel, laboratório de física da UFRGS, está inovando o assunto com uma abordagem mais teórica e computacional. Meu trabalho é estudar mecanismos de locomoção da célula virtual dentro de uma simulação e comparar meus resultados com os experimentos feitos por outros cientistas pelo mundo.

(Para quem for leigo e quer entender meus resultados, dediquei o segundo parágrafo da conclusão para isso).

Objetivos

O objetivo dessa pesquisa é desenvolver um bom modelo computacional de quimiotaxia. Ou seja, queremos uma célula fictícia (computacional) que se comporte como uma célula real. Feito isso, poderemos utilizar nossas simulações para estudos aplicados à medicina, por exemplo. Especificamente nesse trabalho, o objetivo foi estudar o comportamento da célula sob ação de campo químico.

Metodologia

A célula que utilizamos é formada apenas por citoplasma, núcleo e lamellipodium, veja a figura 1. O modelo usado chama-se Cellular Potts Model, onde a evolução do sistema, pixel a pixel, é descrita por energias de contato e volume. Rodamos as simulações no ambiente CompuCell3D, plataforma que opera de acordo com esse modelo.

Uma das medidas para estudo do comportamento da célula dentro de um campo químico é o tempo característico de resposta da célula. Nesse trabalho, estudei especificamente o campo variável no tempo e como a célula se comporta sob ele, para então, tentar eleger uma boa medida de tempo de resposta, ou traçar novos rumos para minha pesquisa.

As medidas analisadas foram a posição e 3 possíveis medidas de polarização, as quais não detalharei nesse pôster. Minha abordagem foi usar transformada de Fourier para adquirir informação de fase e de intensidade de cada uma das quatro variáveis em relação ao campo. A fase de cada medida tem a ver com o tempo de resposta da célula, e a intensidade tem a ver com a correlação entre o campo e o sinal medido.

Resultados e Conclusões

Esperávamos que o gráfico da fase vs período tivesse um comportamento similar a um oscilador forçado, mas não é o que se vê nos gráficos da figura 2. Analisando os gráficos de intensidade, descobrimos que a correlação entre a frequência do campo e do sinal vai a zero rapidamente para altas frequências. Ou seja, toda uma porção dos gráficos de fase deve ser desconsiderada em função disso.

Esse comportamento apresentado pela célula pode ser melhor entendido com um simples exemplo: imagine que você esteja vendo uma luz piscante e sua tarefa é marcar um papel o mais rápido possível para cada piscada. Obviamente, você tem um tempo de reação limitado, então, se a lâmpada piscar muito rapidamente, você pode não conseguir mais acompanhá-la. A partir dessa frequência de corte, devo ignorar suas marcações, porque elas não têm mais correlação com a frequência de piscada da luz. É mais ou menos isso que acontece com a célula: ela para de responder às mudanças no campo para frequências altas. A intensidade espectral é a medida que me garante essa perda de correlação; ela vai a zero para frequências altas, veja a figura 2. Isso invalida possíveis interpretações sobre os gráficos de fase.

Referências:

CompuCell3D: <http://www.compuCell3d.org/FrontPage>

Cellular Potts Model: The Glazier-Graner-Hogeweg Model: Extensions, Future Directions, and Opportunities for Further Study

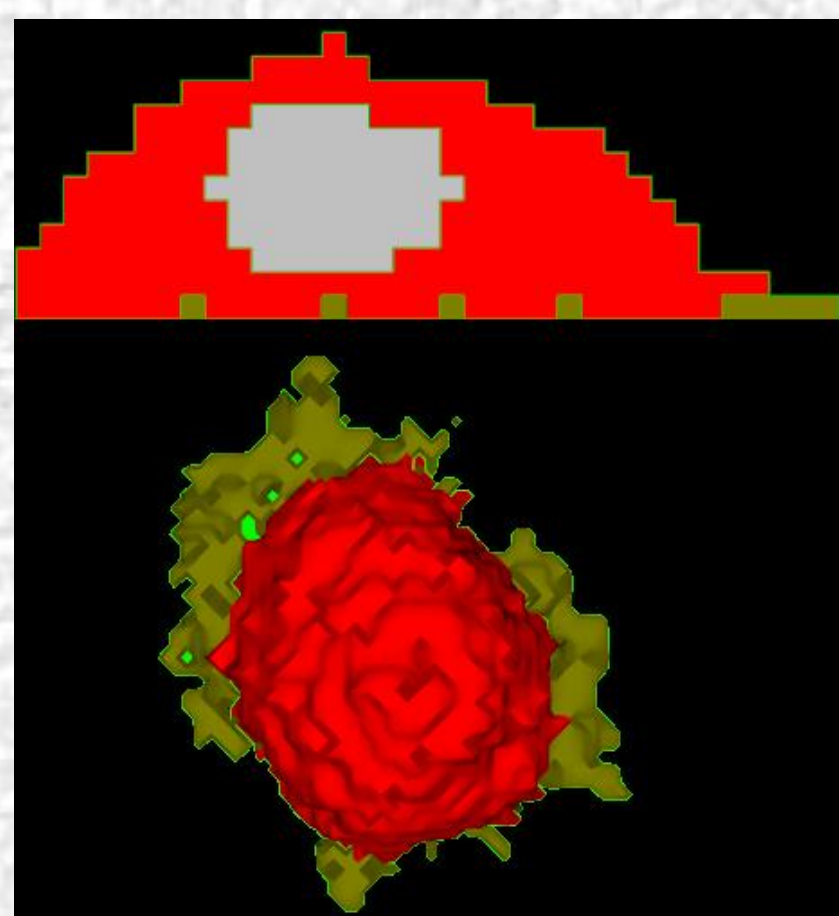


Figura 1: Essa é a célula computacional, vista por um corte vertical e vista de cima em 3D.

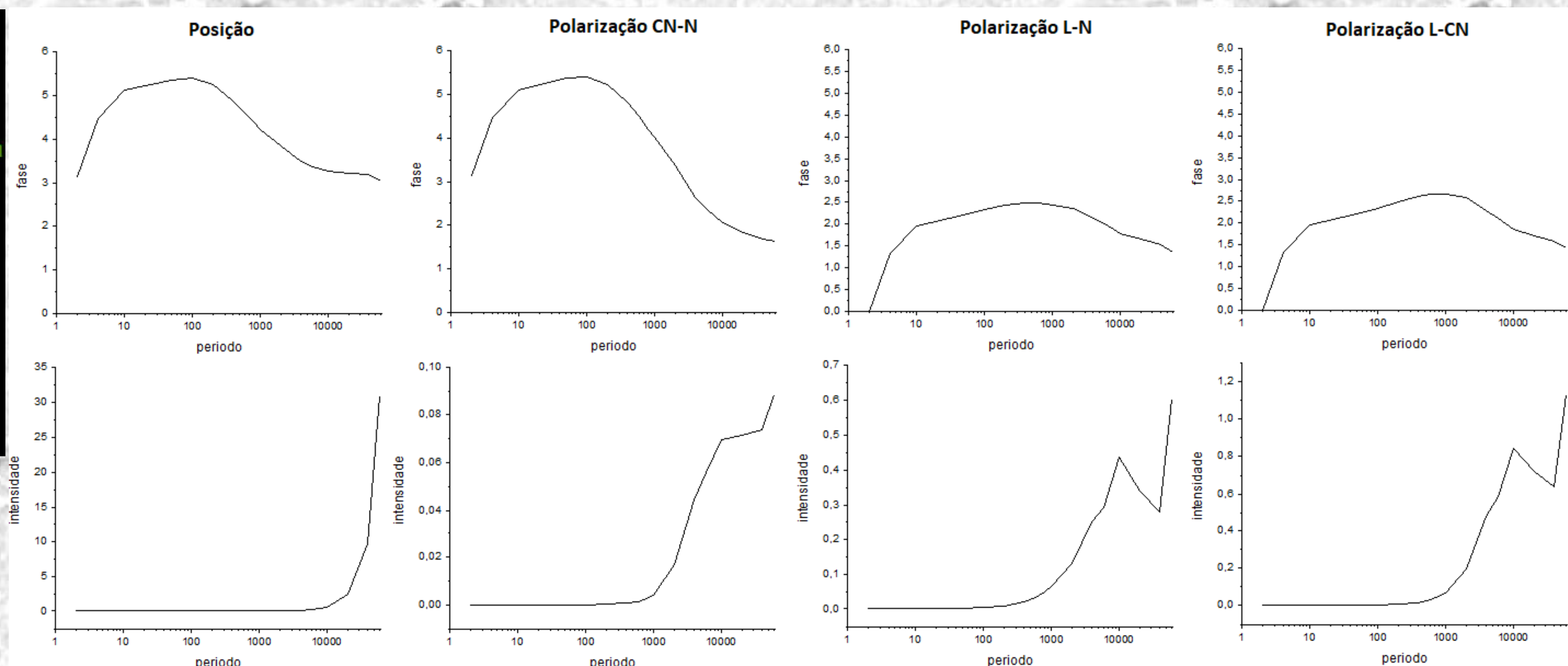


Figura 2: Na primeira linha: gráficos de diferença de fase em relação ao campo da posição e das três diferentes definições de polarização. Na segunda linha: gráficos com intensidade espectral para cada período, o qual é imposto pelo campo químico.

