

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Modelagem computacional de flutuações térmicas em glóbulos vermelhos

Mateus Paranaíba Ribeiro¹

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, USP, São Carlos, SP

Roberto Federico Ausas²

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, USP, São Carlos, SP

Luca Meacci³

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, USP, São Carlos, SP

Gustavo Carlos Buscaglia⁴

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, USP, São Carlos, SP

1 Resumo

O comportamento micromecânico das hemárias ou glóbulos vermelhos tem grande relação com seu papel funcional [2]. Estes, consistem basicamente de uma bicamada lipídica fluídica, conectada por proteínas transmembranais à uma rede de espectrinas, chamada de citoesqueleto, que ajuda a manter seu formato durante o movimento. O citoesqueleto é modelado por junções ligadas por molas que são governadas pela uma lei não linear conhecida como "worm-like-chain" [3], [4] e [5]. Já para a bicamada lipídica um modelo contínuo é utilizado, no qual a superfície é dotada de uma energia de flexão e um comportamento viscoso superficial governado pela lei de Boussinesq-Scriven, junto com restrições de área e volume. Por simplicidade, nesta formulação matemática do problema, as componentes estão completamente ligadas. Do ponto de vista discreto, uma única triangulação é utilizada para representar ambas as componentes. Um aspecto importante a ser considerado é o das chamadas flutuações térmicas, pela interação da hemácia com o meio ambiente, as quais tem relevância pelas pequenas escalas espaciais e energéticas envolvidas. As flutuações térmicas são consideradas através de um termo estocástico, dependente da temperatura, a ser adicionado nas equações de equilíbrio dinâmico, o qual transforma o sistema a ser resolvido em um sistema de equações diferenciais estocásticas (SDE's), requerendo métodos de integração numérica apropriados. Neste trabalho, apresentamos a formulação matemática e numérica adotada para resolver o problema, e vários resultados computacionais, levando em consideração a presença das flutuações térmicas, obtidos com

¹mateusparanaiba@usp.br

²rfausas@icmc.usp.br

³luca.meacci@usp.br

⁴gustavo.buscaglia@icmc.usp.br

o simulador tridimensional de hemácias sendo desenvolvido no grupo de pesquisa, com o intuito de avaliar o impacto de diversos ingredientes numéricos da discretização.

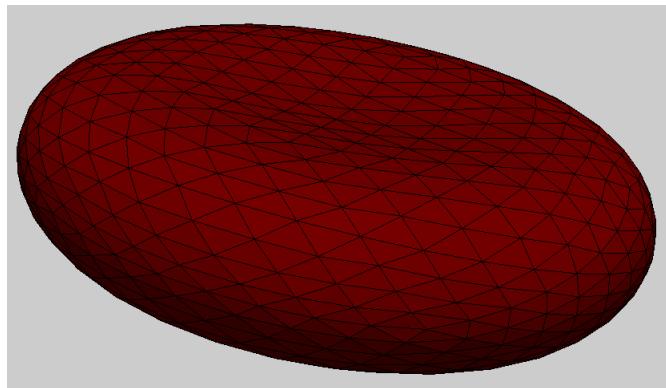


Figura 1: Modelo
Fonte: Arquivo pessoal do autor

Referências

- [1] P. J. Atzberger, P. R. Kramer and C.S. Peskin. A stochastic immersed boundary method for fluid-structure dynamics at microscopic length scales. *Journal of Computational Physics*. Elsevier, 224:1255–1292, 2007. DOI: 10.1016/j.jcp.2006.11.015.
- [2] G. Bao and S. Suresh. Cell and molecular mechanics of biological materials. *Nature materials*. Nature Publishing Group, 2:715, 2003. DOI: 10.1038/nmat1001.
- [3] D. A. Fedosov, B. Caswell and G. E. Karniadakis. A multiscale red blood cell model with accurate mechanics, rheology, and dynamics. *Biophysical journal*. Elsevier, 98:2215–2225, 2010. DOI: 10.1016/j.bpj.2010.02.002.
- [4] D. A. Fedosov, H. Lei, B. Caswell and S. Suresh, G. E. Karniadakis. Multiscale modeling of red blood cell mechanics and blood flow in malaria. *PLoS computational biology*. Public Library of Science, 7:1002270, 2011. DOI: 10.1371/journal.pcbi.1002270.
- [5] J. Hansen, R. Skalak, S. Chien and A. Hoger. An elastic network model based on the structure of the red blood cell membrane skeleton. *Biophysical journal*. The Biophysical Society, 70:146, 1996. DOI: 0.1016/S0006-3495(96)79556-5.
- [6] L. Meacci, G. C. Buscaglia y R. F. Ausas. A two-component fluid-solid finite element model of the red blood cell. In *XXIII Congreso sobre métodos numéricos y sus aplicaciones*. La Plata, Argentina, 2017.
- [7] R. A. Sauer and S. Li. A contact mechanics model for quasi-continua. *International journal for numerical methods in engineering*. Wiley Online Library, 71:931-962, 2007. DOI: 10.1002/nme.1970.