

## **Dinâmica não-linear de filmes líquidos de interesse biológico**

**Paulo M. Bisch**

**IBCCF - UFRJ**

As paredes e membranas que definem os compartimentos celulares onde ocorrem os processos bioquímicos vitais, são estruturas dinâmicas, semi-organizadas em um estado líquido-cristalino com espessuras nanométricas. O contacto entre células ou entre células e substratos, nos fenômenos de reconhecimento e de adesão celular, são mediados por filmes aquosos também com espessuras abaixo do microm. O estudo da estabilidade mecânica, deformação ou ruptura destes filmes, crucial para entender diversos fenômenos biológicos, necessitam uma descrição em uma escala mesoscópica, capaz de levar em conta não só o caráter líquido-viscoso do meio mas também as propriedades eletroquímicas e interações moleculares interfaciais. Desenvolvemos uma teoria eletroquímica e hidrodinâmica para descrever estes fenômenos discutindo a dinâmica e estabilidade em regimes de perturbação linear e não-linear. São utilizados: a teoria de sistemas dinâmicos, o estudo de bifurcações e métodos de integração numérica. Mostramos que existem vários regimes que regem os comportamentos dinâmicos, podendo levar a formação de padrões espacialmente não-homogêneos observados experimentalmente.

## **Global Stability of Steady Solutions for a Model in Virus Dynamics**

**Hermano Frid**

**IMPA**

We consider a simple model for the immune system in which virus are able to undergo mutations and are in competition with leukocytes. It is related to several other concepts which have been proposed in the literature like the concepts of quasi-species, shapes and virulence. When mutations are not present, the system admits a globally attractive critical point. Mutations do not affect this picture for small perturbations and under strong structural assumptions. Relaxing these assumptions leads to blow-up of the system. This is a joint work with P.-E. Jabin and B. Perthame.

## **Modelling Biological systems with delay differential equations.**

**Coraci P. Malta**

**Instituto de Física da USP**

Delay differential equations are used to model biological systems in which the characteristic times are comparable to the time of evolution. The dynamical properties of equations with monotonic feedbacks and multiple delays will be presented. These type of equation are used to model physiological control system, and neural networks (graded-response neuron model).

**Modelos de cadeias tróficas.**  
**Michel Iskin da Silveira Costa**  
**LNCC**

Serão apresentados alguns modelos de cadeias tróficas onde se avalia o efeito da variação da quantidade de nutrientes nos níveis de equilíbrio, bem como na dinâmica das populações.

**Modelagem e dinâmica molecular aplicada a proteínas e membranas.**  
**Pedro G. Pascutti**  
**IBCCF - UFRJ**

A Biologia Molecular tem avançado enormemente nos últimos anos, principalmente com a leitura completa do genoma humano e do genoma de diversos organismos de interesse biotecnológico. Com o objetivo de conhecer os detalhes atômicos e estruturais de macromoléculas biológicas e suas interações, técnicas experimentais, teóricas e computacionais têm sido desenvolvidas e aprimoradas. Dentre estas, a Modelagem Molecular e a Simulação por Dinâmica Molecular vêm recebendo acelerado desenvolvimento. Novos algoritmos vêm sendo planejados para a predição de conformações moleculares e novos protocolos e métodos de simulação molecular vêm sendo estabelecidos. Neste workshop será apresentado o método estocástico Generalized Simulated Annealing, que faz uso da recém proposta de generalização da Termodinâmica por Constantino Tsallis, e suas aplicações na otimização global de proteínas. Avanços na abordagem por Dinâmica Molecular de sistemas biológicos envolvendo enzimas e membranas serão também apresentados e discutidos.

**Threshold conditions for infection persistence in complex host-vectors interactions**  
**Eduardo Massad**  
**Departamento de Patologia FMUSP**

As classically defined by Macdonald in the early fifties, for the case of diseases with one vector and one host, the Basic Reproduction Number,  $R_0$ , is defined as the number of secondary infection caused by a single infective of the same type (vector or host), during its infectiousness period in an entirely susceptible population. In the case of a disease which has one vector and one host, it is easy to show that  $R_0$  coincides with the threshold for the establishment of an endemic state: if  $R_0 > 1$  ( $R_0 < 1$ ), the disease can invade (cannot invade) the host population. In this work we examine various epidemic situations in which there are more than one vector and/or host. We show that in those more complex systems it is not possible to deduce a single  $R_0$  but rather a threshold for infection persistence which is a composite of several quantities closely related to the classical expression of  $R_0$ . Another definition of  $R_0$  given by Diekmann, Heesterbeek and Metz, and denoted here as  $R_{NGO}$  is discussed and applied as an alternative to calculate the thresholds for infection establishment.

**Quando Modelos Comportamentais Determinísticos Encontram Observações  
Empíricas: Métodos de Calibração Bayesianos**  
**Claudio Struchiner (stru@procc.fiocruz.br)**  
**FIOCRUZ**

A atividade de formulação de políticas e tomada de decisões em várias áreas, inclusive a saúde pública, vem utilizando modelos quantitativos com frequência crescente. Desta forma, a discussão sobre a precisão e utilidade destes modelos mostra-se oportuna. Utilizando como exemplo um modelo compartimental determinístico desenvolvendo para representar a dinâmica de transmissão da malária, descrevemos a aplicação de procedimentos bayesianos para a calibração do modelo de transmissão, usando dados longitudinais coletados no campo sobre a prevalência de parasitemia por *P. falciparum*.

**Métodos Matemáticos no Estudo de Redes de Reações Bioquímicas.**  
**Fernando de M C Vieira (fmcv@biof.ufrj.br)**  
**IBCCF-UFRJ**

As redes de reações sobre as quais se baseiam todos os sistemas vivos apresentam enorme complexidade, e a identificação das etapas existentes em um dado processo é área de pesquisa em si. A abordagem quantitativa e mesmo qualitativa passa pela construção de equações diferenciais ordinárias que descrevam a dinâmica básica de tais redes. Nas últimas décadas, diversos resultados vêm permitindo a compreensão de processos a partir do comportamento não-trivial de tais redes. Questões ligadas às redes de reação-difusão e suas correspondentes equações diferenciais parciais também aparecem neste contexto.

**Genomic research activities at the bioinformatics laboratory- LABINFO (LNCC/MCT)**  
**Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos**  
**Bioinformatics Laboratory - LABINFO - LNCC**  
**<http://www.lncc.br/~labinfo>**

As the number of sequencing projects of prokaryotic genomes increases, effective and efficient new tools for genome annotation are required. This process has as input the raw DNA sequence produced by genome sequencing projects. The addition of various layers of analysis and interpretation are then required to extract biological meaningful information. Genome annotation comprises analysis at the nucleotide, protein and functional levels. The Bioinformatics Laboratory- LABINFO of National Laboratory of Scientific Computation is responsible for the genome assembly and analysis of some prokaryotes genomes. For the annotation of these genomes a new tool is being developed that integrates several public domain and newly developed software programs capable of dealing with several types of databases.

**Modelagem da Mecânica Respiratória**

**Walter Zin**  
**IBCCF-UFRJ**

O sistema respiratório, bem como as suas componentes pulmonares e da parede torácica, é formado de uma multitude de elementos. A necessidade de interpretar o significado de variáveis como volume, fluxo de ar, e pressão, tanto sobre condições fisiológicas como patológicas, impôs a necessidade de modelos relativamente simples que devem ser capazes de descrever tão precisamente quanto possível o comportamento mecânico do sistema. As componentes de tais modelos e de seus parâmetros associados devem naturalmente possuir contrapartidas fisiológicas.

### **Medidas de forma e textura no diagnóstico de nódulos pulmonares**

**Paulo C. P. Carvalho**  
**IMPA**

Serão discutidas técnicas para a análise e o diagnóstico de nódulos pulmonares que usam medidas baseadas no coeficiente de atenuação e na forma, extraídas de tomografias pulmonares. Uma vez obtidas estas medidas, aplica-se um procedimento estatístico multivariado (Análise Discriminante) com a finalidade de separar, de forma mais eficiente, os nódulos benignos dos malignos. As medidas baseadas no coeficiente de atenuação levam em conta a distribuição dos níveis de atenuação na tomografia. As medidas baseadas em forma utilizam noções de convexidade, esfericidade, curvaturas intrínsecas e curvaturas extrínsecas.

### **Mathematical challenges in biomedical imaging.**

**Jorge P. Zubelli**  
**IMPA**

X-ray computerized tomography brought a revolution in medicine. Such progress only happened because of the contribution from many mathematical areas. In particular, Fourier analysis, numerical analysis and inverse problems. The techniques of tomography are now being used to image macro-molecules at nano-metric scales through the use of electron microscopy. This opened up new frontiers in biology but posed new mathematical difficulties. During the early nineties the possibility of using infra-red radiation for medical imaging was considered and its potential in many fields has attracted the attention of several groups both in academia and industry. Still, some of the mathematical questions associated to it are formidable and mathematically challenging. In this talk we shall discuss some of those questions.

### **Representação Fractal de Membranas Confinadas.**

**Luiz Bevilacqua**  
**LNCC**

A compactação de membranas muito finas em espaços pequenos gera uma estrutura complexa com muitas dobras. Esta geometria pode eventualmente ser caracterizada por uma dimensão fracionária. Esta dimensão por sua vez pode ser determinante de certas propriedades funcionais da membrana como acontece no caso de membranas biológicas. O confinamento pode ser forçado mecanicamente ou resultado de um crescimento natural ou provocado artificialmente. Trataremos do caso de confinamento forçado como ponto de partida para o estudo do crescimento de membranas biológicas. Uma questão crítica é a determinação da dimensão de confinamento. Uma nova técnica associada às propriedades dinâmicas - espectro de frequências naturais - das estruturas com geometria fracionária será apresentada. Como aplicação ainda em desenvolvimento será tratado o caso do pulmão, particularmente no que se refere à distribuição do fluxo sanguíneo em diversas escalas. Um problema de extremo referente à construção de um poliedro complexo passando por "n" pontos no espaço será apresentado.