

SIMUNO - Simulação do Sistema Imunológico



Rodrigo Januário da Silva
Marcos Tiago Garcia da Silva

Orientador: Prof. Marcelo Finger.
Colaborador: Prof. Eduardo Finger.

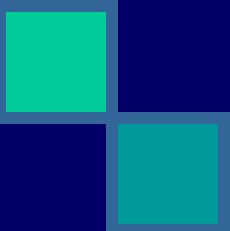



Motivação

- Dificuldade de experimentação em seres vivos.
- Alta complexidade das reações bioquímicas leva à altos custos de experimentação.
- Agilidade obtida com experimentos simulados em computadores.
- Possibilidade da modelagem matemática / computacional de problemas encontrados no dia a dia dos imunologistas.




Problema

- 
- Modelar / implementar computacionalmente processos imunológicos.
 - Foco no passo inicial da reação imunológica:
 - Da entrada de corpos estranhos à detecção de antígenos.
- 



Um pouco de Biologia

- Como funciona o sistema imunológico:
 - Sistema “avisa” sobre invasão;
 - APC / DC fagocitam invasores;
 - Invasores são apresentados para reconhecimento;
 - Linfócitos T4 reconhecem invasores e iniciam ataque;
 - Invasores vencidos, fim de ataque;
- 

Um pouco de Biologia

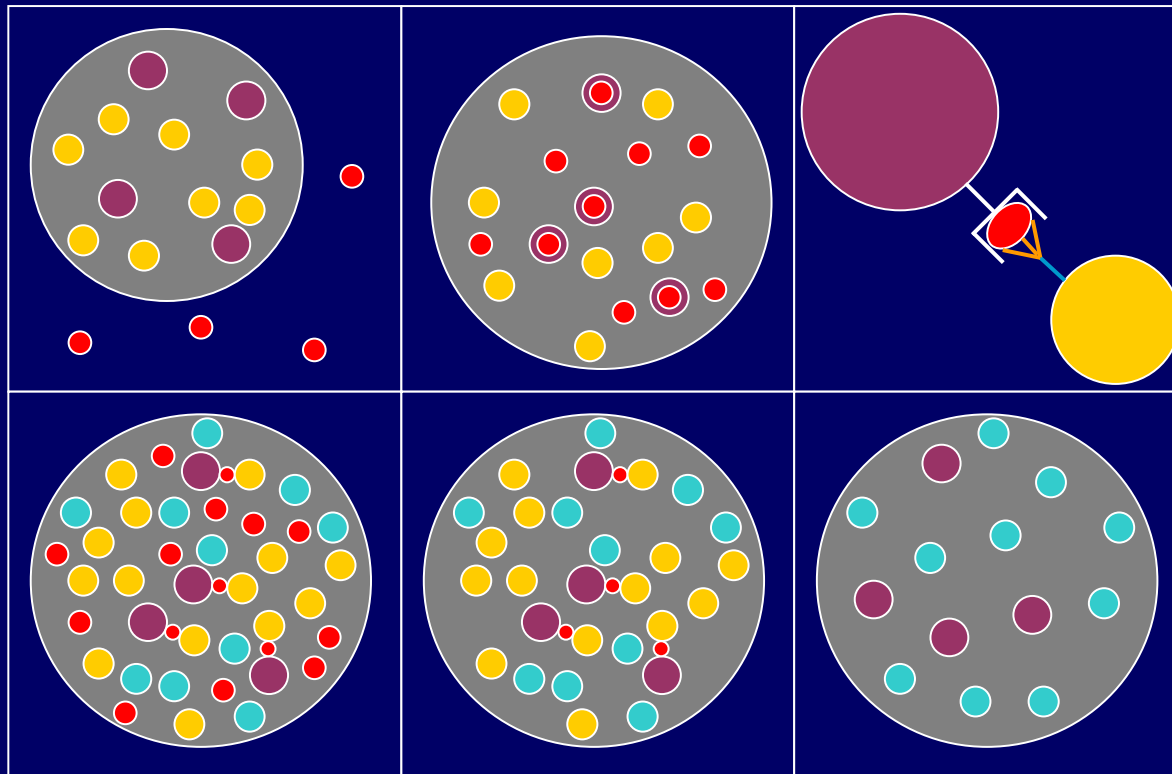
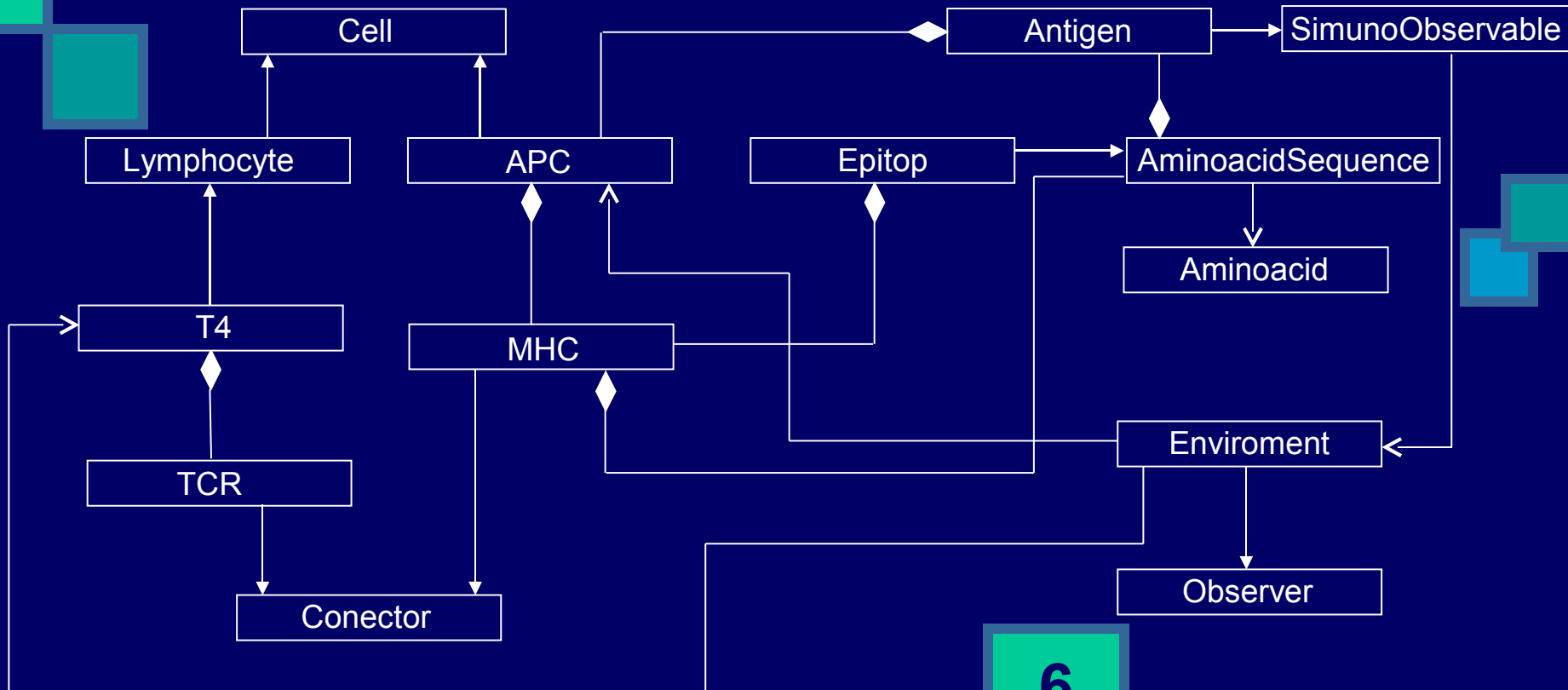


Figura 1: Representação do ciclo imunológico

Solução

Principais classes do sistema:



Solução

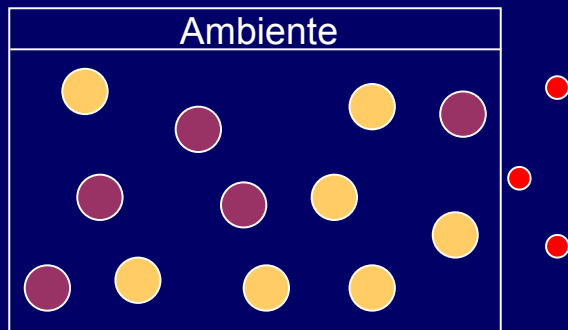


Figura 2: Sistema em equilíbrio.

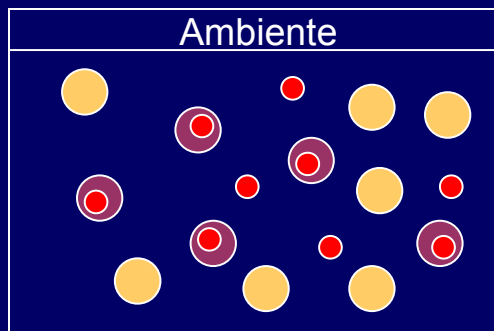


Figura 3: Sistema invadido.

Solução

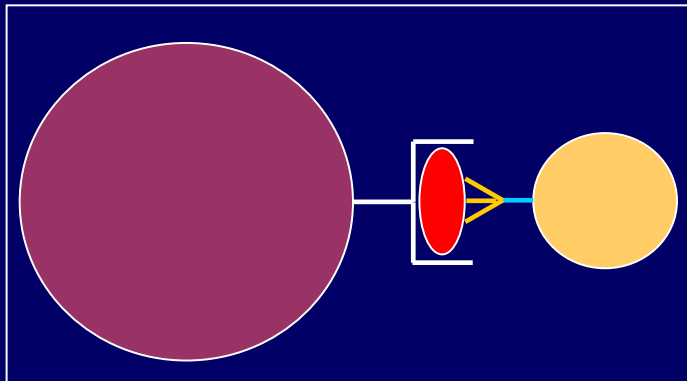


Figura 4: Reconhecimento de epítopo

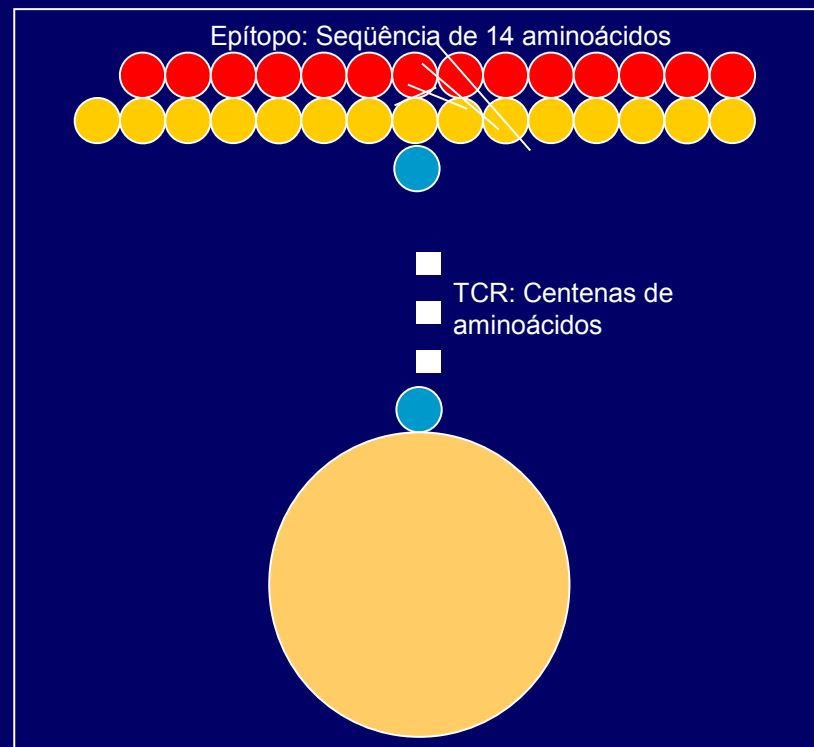


Figura 5: Pareamento para reconhecimento.

Solução

- Tabela de forças de interação entre aminoácidos.

Forças não covalentes	Origem
Forças Eletrostáticas	Ação entre cargas opostas
Pontes de hidrogênio	Hidrogênios compartilhados entre átomos eletronegativos.
Forças de Van der Waals	Flutuações em nuvens de elétrons ao redor das moléculas polarizam os átomos de maneira oposta.
Forças Hidrofóbicas	Grupos hidrofóbicos interagem desfavoravelmente com a água e tendem a se juntar para expulsar moléculas de água. Esta atração também envolve Forças de Van der Waals.

Referências:

- Immunobiologia (Janeway, Travers, Walpont, Shlomchik).
- **Cabaniols JP, Cibotti R, Kourilsky P, Kosmatopoulos K, Kanellopoulos JM.**
Dose-dependent T cell tolerance to an immunodominant self peptide.
Eur J Immunol. 1994 Aug;24(8):1743-9.
PMID: 8056033 [PubMed - indexed for MEDLINE]
- **Dubey C, Croft M, Swain SL.**
Naive and effector CD4 T cells differ in their requirements for T cell receptor versus costimulatory signals.
J Immunol. 1996 Oct 15;157(8):3280-9.
PMID: 8871622 [PubMed - indexed for MEDLINE]
- **Wulfig C, Rabinowitz JD, Beeson C, Sjaastad MD, McConnell HM, Davis MM.**
Kinetics and extent of T cell activation as measured with the calcium signal.
J Exp Med. 1997 May 19;185(10):1815-25.
PMID: 9151707 [PubMed - indexed for MEDLINE]
- **Kim S, Patrick SM, Braunstein NS, Thomas JL, Leonard EF.**
Modeling of early events in T cell signal transduction after controlled T cell activation by peptide major histocompatibility complex.
Ann Biomed Eng. 2001 May;29(5):373-83.
PMID: 11400719 [PubMed - indexed for MEDLINE]



Dúvidas?





Aplausos!!!

