# Modelagens em biotecnologia e Equações Diferenciais Parciais

Cálculo II – Aula 4 – Parte 2


Profa. Dra. Patricia Targon Campana

Grupo de Biomateriais e Espectroscopia

pcampana@usp.br

Sala 339C – Titanic

3091-8883

9 3775-3979

tumblr. sciencenebula.tumblr.com

facebook. /Campana.PT

twitter @profaPCampana

**Lei de Fick:** relaciona o fluxo à mudança na concentração quando as moléculas se movem aleatoriamente em um solvente.

A lei de Fick diz que: $$J = -D\frac{\partial c}{\partial x}$$ 

*D*: cte positiva (***constante de difusão)***

- fluxo é proporcional à mudança na concentração;
- o sinal negativo significa que o movimento líquido das moléculas é de regiões de alta concentração para regiões de baixa concentração

***equação de difusão***

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Difusão em biologia:

descrição do movimento aleatório das moléculas;
mudança nas frequências de alelos (genética aleatória);
invasão de espécies exóticas em habitat virgem;
movimento direcionado de organismos ao longo de gradientes químicos (quimiotaxia);
formação de padrões

Para a maioria das equações diferenciais parciais, não é possível encontrar uma solução analítica; tais equações muitas vezes podem ser resolvidas apenas numericamente (o que não é uma tarefa fácil) .A equação anterior é suficientemente simples, de forma que podemos encontrar uma solução:

$$c(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$

Verificando essa solução:
Para o lado esquerdo da equação da difusão, calculamos a primeira derivada parcial de c (x, t) em relação a t:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right] \\
&= -\frac{1}{2}\frac{4\pi D}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right] + \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\frac{x^2}{4Dt^2} \\
&= \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\left\{\frac{x^2}{4Dt^2\sqrt{4\pi Dt}} - \frac{2\pi D}{4\pi Dt\sqrt{4\pi Dt}}\right\} \\
&= \frac{1}{2t\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\left\{\frac{x^2}{2Dt} - 1\right\}
\end{aligned}$$

Para o lado direito da equação da difusão, calculamos a segunda derivada parcial de c (x, t) em relação a x:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$
$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\left(-\frac{2x}{4Dt}\right)$$

$$\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} = \frac{-1}{\sqrt{4\pi Dt}}\frac{1}{2Dt}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\left\{1 - x\frac{2x}{4Dt}\right\}$$
$$= \frac{1}{2Dt\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\left\{\frac{x^2}{2Dt} - 1\right\}$$

Juntando as duas:

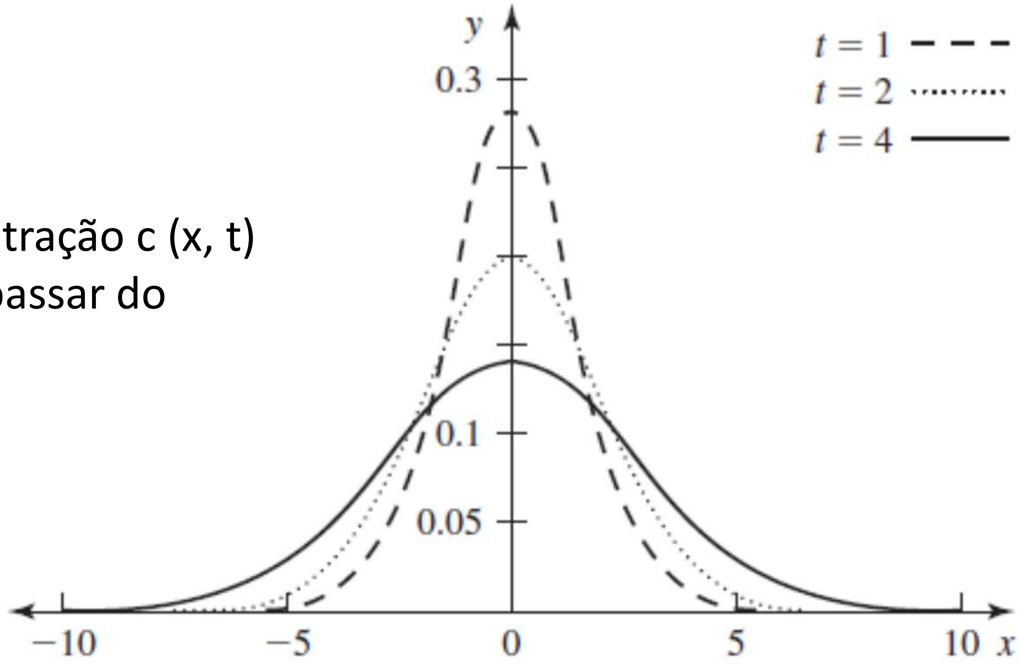
$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}$$

$$\frac{1}{2t\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\left\{\frac{x^2}{2Dt} - 1\right\} = \frac{1}{2Dt\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]\left\{\frac{x^2}{2Dt} - 1\right\}$$

***Densidade gaussiana***

$$c(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right]$$

c (x, t) para t = 1, 2 e 4:
indica claramente que a concentração c (x, t) se torna mais uniforme com o passar do tempo.



BEspec

# Referências


- Hughes-Hallett, Deborah. 2014 Applied calculus
- Calculus for Life Sciences Series, Claudia Neuhauser - Calculus For Biology and Medicine (2014, Pearson)