



1º Encontro Regional de Engenharia Química na Amazônia (I EREQ-Amazon)

“Os grandes desafios da Engenharia Química na região Amazônica”

SOLUÇÃO DE UM MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM UM BIOCHIP PARA DETECÇÃO DE DNA APLICANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA INTEGRAL GENERALIZADA E O MÉTODO DAS LINHAS

Max Pontes dos Santos ¹; Jhullia Yandra Cerdeira da Silva ²; Péricles Crisiron Pontes ³

¹Faculdade de Engenharia Química, Belém, Pará. eqpontes@ufpa.br.

Eixo Temático: Simulação, Otimização e Controle de Processos

Resumo: Biochips são dispositivos que podem ser aplicados na detecção de sequências de DNA desconhecidas, denominadas de DNA alvo, por meio da hibridização destas com sondas conhecidas fixadas no substrato. A leitura é feita a partir do efeito de fluorescência do composto presente no DNA alvo e um transdutor para identificação deste na solução de estudo. O objetivo deste trabalho foi empregar a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) e o Método das linhas (MOL) na construção de uma solução híbrida e numérica, respectivamente, para um modelo de transferência de massa difusivo-reativo, unidimensional, transiente e acoplado, constituído por um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) de segunda ordem, que governa o perfil de concentração de DNA alvo e DNA sonda durante a hibridização no biochip. A GITT fornece soluções de baixo custo computacional e acuradas baseadas em uma expansão de autofunções, enquanto que o MOL oferece as vantagens de uma discretização espacial que facilita a implementação computacional. Os resultados obtidos a partir das duas técnicas são confrontados para fins de verificação numérica e os algoritmos construídos poderão ser empregados em tarefas computacionais intensivas. A partir das soluções obtidas, uma análise

paramétrica foi realizada para investigar o efeito dos parâmetros do modelo nos perfis de concentração de DNA sonda e alvo. Em todos os resultados as duas soluções também foram comparadas com as obtidas integralmente pela subrotina *NDSolve* da plataforma de computação numérico-simbólica Mathematica 13.1. A análise evidenciou que as soluções obtidas pelos métodos apresentaram resultados gráficos coincidentes entre si e com os resultados numéricos obtidos pela *NDSolve*, verificando as metodologias e o código computacional implementado. Assim, ambas as metodologias se apresentam como uma estratégia eficiente para a solução de sistemas difusivo-reativos acoplados em biochips, oferecendo uma base sólida para futuras aplicações em análises inversas e otimização paramétrica.

Palavras-chave: Simulação; Modelagem; Hibridização; GITT; MOL.

Agradecimentos: à UFPA e ao GEPPES.