

Kompiuterinis biojutiklių su perforuota ir selektyvia membrana modeliavimas vienmačiu keturių sluoksnių modeliu

Karolis Petrauskas

Vilniaus universiteto Matematikos ir informatikos fakulteto doktorantas
Vilnius University, Faculty of Mathematics and Informatics, PhD student
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius
Tel. +370 614 90606
El. paštas: k.petrauskas@gmail.com

Straipsnyje pateikiamas vienmatis biojutiklio su perforuota ir selektyvia membrana modelis. Šis modelis sudarytas pakeičiant perforuotą membraną dviem homogeniškais sluoksniais atitinkamai membranos dalims, kur skylutės yra užpildytos fermento ir kur fermento nėra. Pasiūlytas modelis buvo ištirtas vykdant skaitinius eksperimentus, kad būtų nustatytos sąlygos, kuriomis jis gali būti taikomas tiksliam biojutiklio veikimo modeliavimui. Šio modelio tikslumas buvo vertinamas lyginant juo gautamus rezultatus su dvimačio modelio rezultatais. Pasiūlyto modelio rezultatai taip pat buvo palyginti su vienmačio modelio, kuriame perforuota membrana pakeičiama vienu homogenišku sluoksniu, rezultatais. Biojutiklis buvo modeliuojamas reakcijos-difuzijos lygtimis su netiesiniu nariu, aprašančiu fermentinės reakcijos Michaelio–Menteno kinetiką. Modelio lygčių sistema buvo sprendžiama skaitiškai, naudojant baigtinių skirtumų metodą.

Įvadas

Biojutikliai yra analiziniai įrenginiai medžiagų koncentracijoms tirpaluose matuoti. Šie įrenginiai yra patikimi, sąlyginai pigūs ir labai jautrūs, todėl plačiai taikomi medicinoje, aplinkos ir maisto produktų tyrimuose, naudojami narkotinėms medžiagoms aptikti (Yu et al., 2005; Malhotra, Chaubey, 2003; Wollenberger et al., 1997). Biojutiklių veikimas yra pagrįstas medžiagų difuzija ir fermentine reakcija. Pagrindinės biojutiklio sudedamosios dalys yra elektrodas ir ant jo paviršiaus įtvirtintas fermento sluoksnis. Šiame sluoksnyje vyksta fermento katalizuojama reakcija, kurios metu tiriamoji medžiaga – substratas – virsta produktu. Produktas vėliau dalyvauja elektrocheminėje reakcijoje ties elektrodo paviršiumi. Amperometriniuose biojutikliuose šios reakcijos metu elektrode yra sukeliama srovė, kurios stiprumas yra pro-

porcingas substrato koncentracijai tiriamajame tirpale. Platesnį biojutiklių naudojimą riboja palyginti trumpa tiesinė kalibravimo kreivė ir fermento molekulių nestabilumas. Šios problemos gali būti iš dalies sprendžiamos naudojant perforuotas membranas (Turner et al., 1987; Wollenberger et al., 1997).

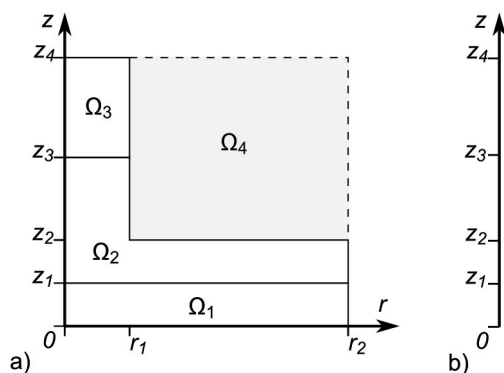
Kuriant naujus biojutiklius tenka atlikti daug eksperimentų. Šie eksperimentai yra brangūs. Siekiant atpiginti biojutiklių gamybą taikomas kompiuterinis modeliavimas. Biojutiklių veikimas yra modeliuojamas reakcijos-difuzijos lygtimis. Tai dalinių išvestinių lygtys su netiesiniu nariu. Analiziniai sprendiniai tokioms lygtims yra žinomi tik atskirais atvejais, tad jos sprendžiamos skaitiniais metodais. Tiksliam biojutiklių su perforuota membrana modeliavimui naudojami matematiniai modeliai, formuluojami dvimatėje erdvėje. Tokiems biojutikliams žinomi ir vienmačiai (1-D) modeliai, kuriems reikia

daug mažiau skaičiavimų nei dvimačiams. Tai yra ypač naudinga tiriant biojutiklio elgseną plačiame modelio parametrų reikšmių diapazone. Sudarant 1-D modelius biojutikliams su perforuota membrana, atsižvelgiama ne į visas biojutiklio geometrijos savybes. Tokiems biojutikliams 1-D modeliai sudaromi perforuotą membraną pakeičiant panašias savybes turinčia homogeniška terpe (Schulmeister, Pfeiffer, 1993; Baronas ir kt., 2006).

Šiame straipsnyje pateikiamas keturių sluoksnių 1-D modelis biojutikliui su perforuota membrana. Pasiūlytas modelis yra sudaromas perforuotą membraną pakeičiant dviem homogeniškais sluoksniais. Šie sluoksniai atitinkamai pakeičia perforuotos membranos dalis, kuriose skylutės užpildytos fermento ir kuriose fermento membranos skylutėse nėra. Šis modelis ištirtas atliekant skaitinius eksperimentus. Modelio tikslumas buvo vertinamas lyginant juo gaunamus rezultatus su dvimačio (2-D) modelio rezultatais, kurie šiame darbe yra laikomi tiksliais (Baronas ir kt., 2006a). Pasiūlyto keturių sluoksnių 1-D modelio rezultatai buvo palyginti ir su žinomu trijų sluoksnių 1-D modelio rezultatais. Pastarasis yra sudaromas visą perforuotą membraną pakeičiant vienu homogenišku sluoksniu, neišskiriant membranos dalies, kurioje skylutės užpildytos fermento (Petrauskas, Baronas, 2009).

Matematinis modelis

Šiame darbe nagrinėjamas biojutiklis sudarytas iš trijų skirtingas savybes turinčių sluoksnių. Pirmasis – tai ant elektrodo paviršiaus įtvirtinta selektyvi membrana. Ji yra laidi tik fermentinės reakcijos produktui. Ant šios membranos yra imobilizuotas fermentas. Jame vyksta substrato ir produkto difuzija bei fermentinė reakcija, kurios metu reakcijos substratas virsta produktu. Fermento sluoksnis yra uždengtas perforuota membrana, pagaminta iš medžiagos, nelaidžios nei substratui, nei produktui. Šios membranos skylutėse vyksta substrato ir produkto difuzija. Mūsų darbe nagrinėjamas atvejis, kai perforuotos membranos skylutės yra iš dalies užpildytos fermento. Skylių dalyje, užpildytoje fermen-



1 pav. Modeliuojamos biojutiklio sritys 2-D (a) ir 1-D (b) atvejais. Paveiksle mastelis neišlaikytas

to, be medžiagų difuzijos, vyksta ir fermentinė reakcija. Kuriant matematinį šio biojutiklio modelį daroma prielaida, kad perforuotos membranos skylutės yra cilindro formos, jos yra viena nuo kitos ir išsidėsčiusios šešiakampe schema. Tokios struktūros biojutiklį galima padalyti į lygias šešiakampes prizmes ir modeliuoti tik vieną iš jų. Siekiant supaprastinti matematinį modelį, ši prizmė pakeičiama cilindru, kurio pagrindo plotas sutampa su šešiakampės prizmės pagrindo plotu. Dėl šio cilindro simetrijos pakanka nagrinėti pusę šio cilindro pjūvio (Baronas ir kt., 2006a). Šio pjūvio schema pateikiama 1(a) paveiksle.

Paveiksle 1(a) sritis Ω_1 atitinka selektyvią membraną, joje vykstanti produkto difuzija yra modeliuojama lygtimi

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} = D_1 \Delta P_1, \quad (r, z) \in \Omega_1. \quad (1)$$

Šioje lygtyje $P_1 = P_1(r, z, t)$ yra produkto koncentracija, D_1 – produkto difuzijos koeficientas selektyvioje membranoje, o Δ yra Laplaso operatorius cilindrinėje koordinatų sistemoje (Samarskii, 2001). Fermento sluoksnyje, srityje Ω_2 , be substrato ir produkto difuzijos, vyksta ir fermentinė reakcija. Medžiagų kinetika aprašoma lygtimis:

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = D_2 \Delta S_2 - R(S_2), \quad \frac{\partial P_2}{\partial t} = D_2 \Delta P_2 + R(S_2), \quad (r, z) \in \Omega_2, \quad (2)$$

čia $S_2 = S_2(r, z, t)$ ir $P_2 = P_2(r, z, t)$ yra atitinkamai substrato ir produkto koncentracijos srityje Ω_2 , o D_2 – šių medžiagų difuzijos koeficientas fermente. Narys

$$R(S) = \frac{V_{\max} S}{K_M + S} \quad (3)$$

modeliuoja Michaelio–Menteno fermentinės reakcijos kinetiką. Čia V_{\max} yra maksimalus fermentinės reakcijos greitis, K_M – Michaelio konstanta, o S – reakcijos substrato koncentracija. Srityje Ω_3 , perforuotos membranos neužpildytoje fermento skylutės dalyje vyksta tik substrato ir produkto difuzija. Šis procesas modeliuojamas difuzijos lygtimis:

$$\frac{\partial S_3}{\partial t} = D_3 \Delta S_3, \quad \frac{\partial P_3}{\partial t} = D_3 \Delta P_3, \quad (r, z) \in \Omega_3; \quad (4)$$

čia $S_3 = S_3(r, z, t)$ ir $P_3 = P_3(r, z, t)$ yra atitinkamai substrato ir produkto koncentracijos, o D_3 – šių medžiagų difuzijos koeficientas srityje Ω_3 . Be pagrindinių lygčių (1), (2) ir (4), modelyje yra apibrėžiamos ir kraštinės bei pradinės sąlygos (Baronas ir kt., 2006a). Pradinės sąlygos apibrėžia biojutiklio būseną, nuo kurios pradedamas modeliavimas ($t = 0$). Šiame modelyje eksperimentas pradedamas nuo momento, kai biojutiklis panardinamas į tiriamą tirpalą. Šiuo momentu substrato ir produkto koncentracija biojutiklio viduje yra laikoma lygia 0. Perforuotos membranos skylučių dalis, kurioje nėra fermento, yra užpildyta tiriamojo tirpalo. Jame substrato koncentracija yra S_0 , o produkto nėra. Kraštinės modelio sąlygos apibrėžia procesus, vykstančius modeliuojamos srities kraštuose, kai $t > 0$. Visuose modeliuojamos srities kraštuose, lygiagrečiuose su simetrijos ašimi ($r = 0$) ir tuose, kur modeliuojama sritis liečiasi su nelaidžia perforuotos membranos medžiaga, galioja nepralaidumo sąlyga. Sudarant biojutiklio modelį tariama, kad tiriamasis tirpalas yra labai gerai maišomas, tad modelio krašte, kur biojutiklis liečiasi su tiriamuoju tirpalu ($z = z_4$), medžiagų koncentracijos yra laikomos pastoviomis: $S = S_0$ ir $P = 0$. Sričių sandūrose yra apibrėžtos derinimo sąlygos. Modeliuojant

amperometrinius biojutiklius daroma prielaida, kad elektrocheminė reakcija elektrodo paviršiuje vyksta labai greitai, tad fermentinės reakcijos produkto koncentracija čia visada lygi 0. Šios reakcijos generuojamos srovės tankis bet kuriuo laiko momentu yra

$$i = n_e F D_1 \frac{2}{r^2} \int_0^{r_2} \frac{\partial P_1}{\partial z} \Big|_{z=0} r dr; \quad (5)$$

čia n_e yra elektrocheminės reakcijos metu išlaisvinamų elektronų skaičius, o F – Faradėjaus konstanta. Biojutiklio naudotojui dažnai yra įdomus tik galutinis rezultatas – nusistovėjusi srovė ir jos tankis

$$I = \lim_{t \rightarrow \infty} i(t). \quad (6)$$

Trijų sluoksnių 1-D matematinis modelis

Biojutiklį su perforuota membrana galima modeliuoti ir matematiniais modeliais, suformuluotu vienmatėje erdvėje (Schulmeister, Pfeiffer, 1993; Baronas ir kt., 2006). Vienmačiai tokių biojutiklių modeliai yra mažiau tikslūs, nes perforuotos membranos geometrija negali būti tiksliai aprašoma 1-D erdvėje. Taip yra dėl to, kad ji nėra homogeniška ir negali būti modeliuojama vienodai kiekviename biojutiklio ploto taške. Sudarant 1-D biojutiklio modelį, perforuota membrana yra pakeičiama homogenišku sluoksniu, kurio savybės artimos perforuotos membranos savybėms (Schulmeister, Pfeiffer, 1993; Bakhvalov, Panasenko, 1989).

Nagrinėjamo biojutiklio 1-D modelio struktūra pavaizduota 1(b) paveiksle. Šiame modelyje selektyvi membrana ($z \in [0, z_1]$) yra modeliuojama lygtimi, analogiška 2-D modelio lygčiai (1). Šiuo atveju Δ yra Laplaso operatorius vienmatėje Dekarto koordinatų sistemoje (Samarskii, 2001), o $P_1 = P_1(z, t)$ yra atitinkamai produkto koncentracija pagal laiką bei vieną erdvės koordinatę – z . Fermento sluoksnis taip pat modeliuojamas analogiškai dvimačio modelio lygtimis (2). Fermento sluoksniu čia laikoma ta biojutiklio sritis, kur ši medžiaga yra homogeniška ($z \in [z_1, z_2]$). Perforuota membrana 1-D modelyje yra pakeičiama vienu homogenišku sluoksniu.

Substrato ir produkto kinetika šiame sluoksnyje yra modeliuojama lygtimis:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_3}{\partial t} &= D_3^* \Delta S_3 - \gamma R(S_3), \\ \frac{\partial P_3}{\partial t} &= D_3^* \Delta P_3 + \gamma R(S_3), \quad z \in [z_2, z_3].\end{aligned}\quad (7)$$

Šiose lygtyse yra du nauji parametrai: D_3^* – apibendrintas substrato ir produkto difuzijos koeficientas ir γ – fermentinės reakcijos greičio korekcijos koeficientas. Abu šie parametrai neturi fizikinės prasmės (Schulmeister, Pfeiffer, 1993), tad negali būti gaunami tiesiogiai. Šių parametru reikšmės galima rasti analiziniais metodais arba atliekant skaitinius eksperimentus (Bakhvalov, Panasenko, 1989; Petrauskas, Baronas, 2009).

Srovės tankis 1-D modelyje skaičiuojamas analogiškai kaip ir 2-D modelyje, tačiau 1-D atveju tankį užtenka skaičiuoti viename erdvės taške:

$$i = n_e F D_1 \left. \frac{\partial P_1}{\partial z} \right|_{z=0}. \quad (8)$$

Srovės, generuojamos nusistovėjus biojutiklyje vykstantiems procesams, tankis yra apibrėžiamas analogiškai kaip ir 2-D modelyje.

Keturių sluoksnių 1-D matematinis modelis

Konstruojant biojutiklius, kuriuose fermentas uždengiamas perforuota membrana, fermentas patenka į šios membranos skylutes. 1-D modelyje, siekiant geriau atspindėti tokio biojutiklio struktūrą, galima išskirti dvi perforuotos membranos dalis. Viena šios membranos dalis – tai sluoksnis, kuriame skylutės yra užpildytos fermento ($z \in [z_2, z_3]$). Čia be medžiagų difuzijos vyksta ir fermentinė reakcija. Antroje perforuotos membranos dalyje, kur skylutėse fermento nėra ($z \in [z_3, z_4]$), vyksta tik substrato ir produkto difuzija. Perforuotą membraną pakeitus dviem sluoksniais, biojutiklio 1-D modelis turi būti atitinkamai pakoreguotas. Vienmačiame modelyje lygtys (7) turi būti pakeistos lygtimis:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_3}{\partial t} &= D_3^* \Delta S_3 - \gamma R(S_3), \\ \frac{\partial P_3}{\partial t} &= D_3^* \Delta P_3 + \gamma R(S_3), \quad z \in [z_2, z_3], \\ \frac{\partial S_4}{\partial t} &= D_4^* \Delta S_4, \quad \frac{\partial P_4}{\partial t} = D_4^* \Delta P_4, \quad z \in [z_3, z_4].\end{aligned}\quad (9)$$

Lygtys (9) aprašo medžiagų kinetiką tame homogenizuotos perforuotos membranos sluoksnyje, kuriame skylutės yra užpildytos fermento. Koeficientai D_3^* bei γ turi tokią pačią prasmę kaip ir trijų sluoksnių 1-D modelyje. Lygtys (10) modeliuoja perforuotos membranos sluoksnį, kurio skylutėse fermento nėra. Šiose lygtyse D_4^* yra apibendrintas substrato ir produkto difuzijos koeficientas. Šis modelio parametras fizikinės prasmės taip pat neturi, tačiau gali būti gana tiksliai apskaičiuojamas analiziniais metodais, nenaudojant skaitinių eksperimentų (Petrauskas, Baronas, 2009). Žinant parametro D_4^* reikšmę, D_3^* galima nesunkiai apskaičiuoti, atliekant skaitinius eksperimentus pagal (Petrauskas, Baronas, 2009) aprašytą procedūrą.

Skaitinis modeliavimas

Biojutiklių veikimas yra modeliuojamas dalinių išvestinių lygtimis su netiesiniu nariu. Tokioms lygtims analiziniai sprendiniai žinomi tik ribiniais atvejais: kai substrato koncentracija tiriamame tirpale yra labai maža arba labai didelė (Schulmeister, 1990). Biojutiklio elgsenos tyrimams platesniame koncentracijų diapazone, modelio lygčių sistemai spręsti naudojami skaitiniai metodai. Šiame darbe buvo pasitelktas baigtinių skirtumų metodas (Samarškii, 2001). Remiantis šiuo metodu biojutiklio veikimą modeliuojančios lygtys buvo pakeistos skirtuminių lygčių sistema. Pastaroji buvo sudaryta naudojant neišreikštinę schemą. Dvimačio modelio skaitiniam sprendimui, be baigtinių skirtumų, buvo naudojamas ir kintamų kryptų metodas (Baronas ir kt., 2006a; Samarškii, 2001). Taikant šiuos metodus, biojutiklio modelį sudaranti lygčių sistema yra pakeičiama skirtuminių

lygčių sistema, sudarančia trijstrižainę matricą. Lygčių sistemos, sudarančios trijstrižaines matricas, yra sėkmingai sprendžiamos kompiuteriu. Biojutiklio skaitiniams modeliams automatizuotai sudaryti ir jiems spręsti buvo taikoma programinė įranga, sukurta naudojant Java kalbą dvimačiams ir C++ vienmačiams biojutiklių modeliams.

Tiriant pasiūlytą keturių sluoksnių 1-D biojutiklio modelį buvo naudota konkreti biojutiklio konfigūracija. Visuose kompiuteriniuose eksperimentuose parametrų reikšmės buvo tokios:

$$\begin{aligned} r_1 &= 100 \text{ nm}, r_2 = 1 \text{ } \mu\text{m}, \\ z_1 &= 2 \text{ } \mu\text{m}, z_2 = 4 \text{ } \mu\text{m}, z_4 = 14 \text{ } \mu\text{m}, z_3 = (z_2 + z_4)/2, \\ D_1 &= 1 \text{ } \mu\text{m}^2/\text{s}, D_2 = 300 \text{ } \mu\text{m}^2/\text{s}, D_3 = 600 \text{ } \mu\text{m}^2/\text{s}, \\ V_{\max} &= 10 \text{ } \mu\text{M}/\text{s}, K_M = 100 \text{ } \mu\text{M}, n_e = 2. \end{aligned} \quad (11)$$

Rezultatai

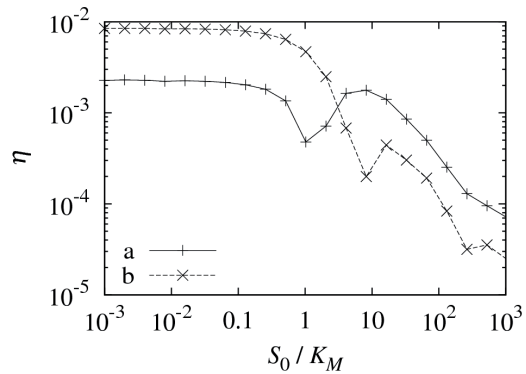
Siekiant ištirti atvejus, kuriais biojutiklio su perforuota membrana 2-D modelis gali būti pakeistas trijų ar keturių sluoksnių 1-D modeliu, buvo atliktas tyrimas vykdant skaitinius eksperimentus. Abiejų 1-D modelių tikslumas buvo vertinamas matuojant nusistovėjusios biojutiklio generuojamos srovės tankio santykinę paklaidą

$$\eta = \frac{|I - I^*|}{I}, \quad (12)$$

dvimačio modelio rezultatus laikant tiksliais. Lygtyje (12) I yra dvimačio, o I^* – vienmačio modelio generuojamos nusistovėjusios srovės tankis.

Praktikoje konkretus biojutiklis dažnai naudojamas įvairioms substrato koncentracijoms matuoti, todėl svarbu įvertinti modelių paklaidas plačiame substrato koncentracijų diapazone. Tyrimo metu santykinės 1-D modelių paklaidos η buvo matuojamos esant substrato koncentracijoms S_0 nuo 10^{-7} M iki 10^{-1} M.

Vienmačio modelio parametrai γ ir D_4^* buvo rasti naudojant analizines išraiškas. Apibendrintasis difuzijos koeficientas D_3^* buvo rastas atliekant skaitinius eksperimentus pagal K. Petrausko ir R. Barono (2009) pasiūlytą procedūrą. Šio koeficiento paieškai buvo naudoja-



2 pav. Trijų (a) ir keturių (b) sluoksnių 1-D modelio paklaidos priklausomybė nuo substrato koncentracijos

mi dvimačio modelio rezultatai, gauti esant $S_0 = 10^{-1}$ M. Tokia S_0 reikšmė pasirinkta remiantis procedūros tyrimo išvadomis.

Trijų ir keturių sluoksnių 1-D modelių paklaidos priklausomybė nuo substrato koncentracijos tiriamajame tirpale pateikiama 2 paveiksle. Grafiko horizontalioje skalėje atidėtas naudotos substrato koncentracijos S_0 santykis su Michaelio konstanta K_M , charakterizuojančia fermentinę reakciją. Šis grafikas rodo, kad keturių sluoksnių 1-D modelis turi didesnę maksimalią paklaidą nei trijų sluoksnių 1-D modelis. Keturių sluoksnių modelis yra tikslesnis, kai substrato koncentracija S_0 yra didesnė nei K_M .

Išvados

Pasiūlytasis keturių sluoksnių 1-D biojutiklio modelis gali būti taikomas biojutiklių su perforuota membrana veiksmui modeliuoti. Apibendrintųjų difuzijos koeficientų, naudojamų pakeičiant perforuotą membraną homogeniška terpe, reikšmės gali būti gaunamos atliekant skaitinius eksperimentus. Šiems koeficientams nustatyti galima naudoti procedūrą, pasiūlytą trijų sluoksnių modeliui. Keturių sluoksnių 1-D modelis yra tikslesnis nei trijų sluoksnių modelis, kai biojutiklio veiksmo modeliavimas atliekamas naudojant tiriamosios medžiagos koncentracijas, didesnes nei K_M . Substrato koncentracijoms, mažesnėms nei K_M , tikslesnis yra trijų sluoksnių 1-D modelis.

LITERATŪRA

- BAKHVALOV, N. S.; PANASENKO, G. P. (1989). *Homogenization: Averaging Processes in Periodic Media*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
- BARONAS, R.; IVANAUSKAS, F.; KAUNIE-TIS, I.; LAURINAVIČIUS, V. (2006) Mathematical modeling of plate-gap biosensors with an outer porous membrane. *Sensors*, no. 7, vol. 6, p. 727–745.
- BARONAS, R.; KULYS, J.; IVANAUSKAS, F. (2006a). Computational modelling of biosensors with perforated and selective membranes. *Journal of Mathematical Chemistry*, no. 2, vol. 39, p. 345–362.
- YU, D.; BLANKERT, B.; VIRÉ, J.-C.; KAUF-FMANN, J.-M. (2005). Biosensors in drug discovery and drug analysis. *Analytical Letters*, vol. 38, p. 1687–1701.
- MALHOTRA, B. D.; CHAUBEY, A. (2003). Biosensors for clinical diagnostics industry. *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 91, p. 117–127.
- PETRAUSKAS, K.; BARONAS, R. (2009). Computational Modelling of Biosensors with an Outer Perforated Membrane. *Nonlinear Analysis: Modeling and Control*. Vilnius, vol. 14, no 1, p. 85–102.
- SAMARSKII, A. A. (2001). *The Theory of Difference Schemes*. New York–Basel: Marcel Dekker.
- SCHULMEISTER, T.; PFEIFFER, D. (1993). Mathematical modelling of amperometric enzyme electrodes with perforated membranes. *Biosensors & Bioelectronics*, no. 8, p. 75–79.
- SHULMEISTER, T. (1990). Mathematical modelling of the dynamic behaviour of amperometric enzyme electrodes. *Selective Electrode Review*, no. 12, p. 203–260.
- TURNER, A. P. F.; KARUBE, I.; WILSON, G. S. (1987). *Biosensors: Fundamentals and Applications*. Oxford University Press.
- WOLLENBERGER, U.; LISDAT, F.; SCHELLER, F. W. (1997). *Frontiers in Biosensorics 2, Practical Applications*. Basel: Birkhauser Verlag.

COMPUTER-AIDED MODELING OF A BIOSENSOR WITH SELECTIVE AND PERFORATED MEMBRANES USING A FOUR-LAYERED ONE-DIMENSIONAL MODEL

Karolis Petrauskas

Summary

This article presents a one-dimensional model for a biosensor with perforated and selective membranes. This model is constructed by replacing the perforated membrane with two homogeneous layers. These layers are used to model parts of the perforated membrane, where holes are filled with an enzyme and where is no enzyme in the holes, separately. The proposed model was investigated by performing numerical experiments in order to determine conditions, under which the proposed model can be used to simulate an operation of a biosensor with an outer perforated membrane

precisely. A preciseness of the model was measured by comparing its results with results of the corresponding two-dimensional model. Beside the measurement of the preciseness, results of the proposed model were compared to the results of the one-dimensional model, constructed by replacing the perforated membrane with one homogeneous layer. A biosensor was modeled using diffusion-reaction equations with a nonlinear member representing the Michaelis-Menten kinetic of an enzymatic reaction. These equations were solved numerically, using the method of finite differences.