



شبیه‌سازی عددی زیست‌حسگر چندلایه با استفاده از روش تفاضل متناهی فشرده

آمنہ طالعی*، راضیہ حسن پور، اسماعیل حسام الدینی

دانشکده ریاضی، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز، ایران

a.taleei@sutech.ac.ir

چکیده: پیشرفت زیست‌حسگرها در علوم مختلف پزشکی، صنایع غذایی، صنایع شیمیایی، تولید محصولات دارویی و غیره موجب گردیده تا مطالعه آن‌ها بسیار حایز اهمیت باشد. در این مقاله، به شبیه‌سازی عددی مدل زیست‌حسگر چند لایه با استفاده از روش تفاضل متناهی فشرده می‌پردازیم.

کلید واژه‌ها: روش تفاضل متناهی فشرده، زیست‌حسگر چندلایه، شبیه‌سازی عددی، معادله نفوذ- واکنش، مدل دو بخشی.

۱. مقدمه

زیست‌حسگرها در سال‌های اخیر توجه محققان را در طیف گسترده‌ای از علوم به خود جلب نموده‌اند. اساس کار زیست‌حسگرها تبدیل پاسخ بیولوژیکی به یک پیام است که با شبیه‌سازی عددی می‌توانیم عملکرد زیست‌حسگر و پیام دریافتی از آن را بدون نیاز به انجام آزمایش‌های پرهزینه و زمان‌بر مورد مطالعه قرار دهیم [۱]. نخستین بار در سال ۱۹۵۰ کلارک^۱ (پدر مفهوم زیست‌حسگر) در سن سنای آمریکا، زیست‌حسگر اکسیژن را برای اندازه‌گیری غلظت اکسیژن حل شده در خون ساخت [۲]. الکتروود اکسیژن ابداعی او به الکتروود کلارک معروف است [۳]. ایده کلارک در سال ۱۹۷۵ برای اولین بار توسط کمپانی اوهیو^۲ به صورت تجاری در آمد [۴]. عملکرد زیست‌حسگرها را اغلب می‌توان با معادلات دیفرانسیل غیرخطی مدل کرد که حل تحلیلی آن‌ها در بسیاری از موارد به دلیل جمله غیرخطی حاکم بر معادلات تنها در شرایط خاص و با اعمال محدودیت‌هایی امکان‌پذیر است. اسواری^۳ و همکاران در سال ۲۰۱۰ معادله حاکم بر جریان و غلظت را که در الکتروود آنزیمی در حسگری آمپرومتریک رخ می‌دهد را با در نظر گرفتن شرایطی خاص با استفاده از روش تداخلی هموتوبی حل کردند [۴]. به دلیل محدودیت‌ها و مشکلاتی که در حل تحلیلی مدل ریاضی زیست‌حسگر وجود دارد، مدل‌سازی عددی عملکرد آن‌ها بسیار حایز اهمیت است. باروناس^۴ و همکاران با استفاده از روش تفاضل متناهی به شبیه‌سازی عددی عملکرد زیست‌حسگرها پرداخته‌اند [۵، ۶]. در این مقاله مدل ریاضی یک زیست‌حسگر چندلایه با استفاده از روش تفاضل متناهی فشرده را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

نفوذ سوبسترا و محصول، توسط معادلات نفوذ-واکنش با جمله غیرخطی طرح میکائیلیس-منتن مدل سازی می شود و در هر لایه از زیست حسگر،

¹Clark²Ohio

3Eswari

⁴Baronas

معادله‌ای به صورت زیر خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S^{(k)}}{\partial t} &= D_S^{(k)} \frac{\partial S^{(k)}}{\partial x^2} - \frac{V_{max}^{(k)} S^{(k)}}{K_M^{(k)} + S^{(k)}}, \\ \frac{\partial P^{(k)}}{\partial t} &= D_P^{(k)} \frac{\partial P^{(k)}}{\partial x^2} + \frac{V_{max}^{(k)} S^{(k)}}{K_M^{(k)} + S^{(k)}},\end{aligned}\quad (1)$$

$$x \in (a_{k-1}, a_{k-1} + d_k), \quad a_k = a_{k-1} + d_k, \quad k = 1, 2, \dots, K,$$

که در آن k نشان‌دهنده شماره لایه آنزیم است و d_k ضخامت لایه k ام را نشان می‌دهد. در حالی که $x = a_K$ مرز بین غشای آنزیمی و محلول کلی را نشان می‌دهد.

با توجه به شرایط اولیه زیر، عملکرد زیست‌حسگر زمانی آغاز می‌شود که سوبسترا در سطح لایه فوقانی ظاهر می‌شود ($t = 0$):

$$\begin{aligned}S^{(k)}(x, 0) &= 0, \quad x \in [a_{k-1}, a_k], \quad k = 1, 2, \dots, K-1, \\ S^{(K)}(a_K, 0) &= S_0.\end{aligned}\quad (2)$$

در ابتدا هیچ محصولی در کل دامنه وجود ندارد:

$$P^{(k)}(x, 0) = 0, \quad x \in [a_{k-1}, a_k], \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (3)$$

در سطح الکتروود شرایط مرزی زیر را داریم:

$$\begin{aligned}D_S^{(1)} \frac{\partial S^{(1)}}{\partial x} \Big|_{x=0} &= 0, \\ P^{(1)}(0, t) &= 0.\end{aligned}\quad (4)$$

غلظت سوبسترا و محصول بر روی سطح آنزیم لایه فوقانی در طول عملکرد زیست‌حسگر ثابت است ($t > 0$):

$$\begin{aligned}S^{(K)}(a_K, t) &= S_0, \\ P^{(K)}(a_K, t) &= 0.\end{aligned}\quad (5)$$

پاسخ زیست‌حسگر، در حقیقت شارش ماده الکترو فعال یا همان محصول، در سطح الکتروود است که منجر به جریان الکتریکی می‌شود. جریان اندازه‌گیری شده به طور صریح از قوانین فیک و فارادی به دست می‌آید و متناسب با شیب غلظت محصول در سطح الکتروود می‌باشد که به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$i(t) = n_e F D_P \frac{\partial P}{\partial x}(0, t), \quad (6)$$

که در آن F ثابت فارادی است و n_e تعداد الکترون‌هایی است که در انتقال شار نقش دارند.

۲. روش تفاضل متناهی فشرده

ساده و درست‌نویسی از معیارهای مهمی هستند که به درک درست معنا و مفهوم کمک می‌کنند. به نویسندگان گرامی خواندن این مطلب (برخی اصول نگارشی و ویرایشی) پیشنهاد می‌شود.

هر مقاله پژوهشی (Original article) باید به ترتیب شامل این بخش‌های اصلی باشد: چکیده فارسی، کلیدواژگان، مقدمه، مواد و روش، یافته‌ها، بحث و نتیجه‌گیری، مراجع، و چکیده انگلیسی.

در صورت نیاز، برای آشنایی بیشتر با ساختار یک مقاله پژوهشی و محتوای بخش‌های گوناگون آن، خواندن این مطلب (ساختار یک مقاله پژوهشی) پیشنهاد می‌شود.

هر مقاله مروری (Review article) باید به ترتیب شامل این بخش‌های اصلی باشد: چکیده فارسی، کلیدواژگان، مقدمه، مطالب اصلی، نتیجه‌گیری، مراجع، و چکیده انگلیسی. در هر بخش یا زیربخش یک یا چند بند (پاراگراف) وجود دارد. دقت شود که جملات هر بند زنجیروار به هم مربوط باشند و یک موضوع را دنبال کنند.

در مقاله پژوهشی یا مروری، بخش‌های دیگر مانند سپاس‌گزاری، پیوست‌ها و زیرنویس‌ها اختیاری است. همان‌گونه که در این فرم می‌بینید، این بخش‌ها باید در آخر مقاله و پیش از بخش مراجع قرار گیرند، به جز بخش زیرنویس‌ها که در پانویس هر صفحه می‌آیند.^۵

اگر در متن مقاله به سال میلادی اشاره می‌شود، پس از نوشتن سال میلادی، سال خورشیدی درون پرانتز نوشته شود: در سال ۲۰۲۰ میلادی (۱۳۹۹ خورشیدی).

۱-۲. ویژگی‌های عنوان و نویسندگان مقاله

عنوان مقاله در عین کوتاهی باید تمام ویژگی‌های کار پژوهشی را نشان دهد. عنوان مقاله را در یک یا نهایت دو سطر بنویسید. در هنگام نوشتن نام نویسندگان از آوردن عناوینی مانند استاد، دکتر، مهندس، و غیره خودداری کنید. در صفحه نخست مقاله، اطلاعات همایش در بالای صفحه می‌آید (همانی که بالای صفحه‌ی اول می‌بینید). اما، از صفحه دوم به بعد، ابتدا نام خانوادگی نویسنده اول، اگر مقاله بیش از یک نویسنده داشته باشد، پس از نام خانوادگی نویسنده اول عبارت «و همکاران»، و سپس عنوان کوتاه مقاله در حد ده واژه یا کمتر نوشته شود.

۲-۲. واژه‌گزینی

معیار واژه‌گزینی اصطلاحات آماری، کتاب «واژه‌ها و اصطلاحات آماری (ویرایش سوم)» است که از سوی پژوهشکده‌ی آمار به چاپ رسیده است و در آغازهی وبگاه پژوهشکده آمار (<http://www.srtc.ac.ir>) نیز با عنوان «واژه‌نامه‌ی آمار» قرار دارد. معیار واژه‌گزینی اصطلاحات ریاضی نیز واژه‌نامه انجمن ریاضی ایران است.

۳-۲. پیشینه پژوهش

نویسندگان حتماً باید مقالات مربوط به سه تا پنج سال گذشته را نیز بررسی نمایند. گفتنی است که نام بردن مقالات کافی نیست و نویسندگان باید وجه تمایز کار خود با مقالات گذشته را کوتاه و گویا روشن کنند و بنویسند.

^۵ بخش ۳-۴ زیرنویس‌ها، صفحه ۴ را ببینید.

۳. بخش‌های مشترک بین دو مقاله پژوهشی و مقاله مروری

۱-۳. برتری‌ها و کاستی‌های پژوهش

نوشتن این بخش اختیاری است. در این بخش، نویسنده گرامی می‌تواند با برشمردن نقاط قوت و مثبت کار، به کاستی‌ها و سختی‌های پژوهش خود اشاره نماید که ممکن است بر کیفیت نتایج پژوهش اثر منفی داشته باشند. نوشتن این بخش اثر منفی بر پذیرش مقاله ندارد. همچنین، نویسنده گرامی می‌تواند ضمن برشمردن نوآوری‌های پژوهش خود، پیشنهادهایی برای پژوهش‌های آینده مطرح کند.

۲-۳. معادله‌ها، جدول‌ها، شکل‌ها و نمودارها

بهتر است جدول‌ها، شکل‌ها و نمودارها بالا یا پایین صفحه گذاشته شوند. در صورت امکان از قرار دادن آنها در وسط صفحه خودداری نمایید. جدول‌ها، شکل‌ها و نمودارها باید شماره داشته باشند و در همان بخشی بیایند که به آنها ارجاع داده شده است. جدول‌ها، شکل‌ها و نمودارها را با یک سطر خالی فاصله از متن پیش و پس از آن قرار دهید. اگر شکل، جدول یا نموداری از منبعی گرفته شده‌اند، نوشتن منبع الزامی است. همچنین، نوشتن واحدهای اندازه‌گیری و سنجش پارامترها نیز ضروری است. شکل‌ها و جدول‌ها حتماً پس از اولین اشاره به آنها در متن مقاله ظاهر شوند. اطراف عنوان‌ها، شکل‌ها و جدول‌ها از کادر اضافی استفاده نشود. در متن تنها به تغییرات مهم و یافته‌های مهم اشاره شود و داده‌های تکراری همزمان در جدول‌ها، شکل‌ها و متن ارائه نشوند. همه معادله‌ها، جدول‌ها و نمودارها به صورت شماره‌های ۱، ۲، ۳، ... و مستقل از بخش شماره گذاری شوند.

یادآوری می‌گردد، اعداد در سراسر متن و فرمول‌ها باید فارسی باشند. همین شیوه در مورد معادله‌ها و جدول‌ها نیز باید تا حد امکان رعایت شود. متغیرها نیز ایتالیک نوشته شوند.

۱-۲-۳. معادلات ریاضی

معادله‌ها را مستقل از شماره بخش مربوط به‌طور ساده و پیوسته شماره‌گذاری کنید. اندازه معادلات باید متناسب با متن باشد. برای نمایش روابط و فرمول‌های ریاضی مشابه نمونه زیر عمل کنید.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u - \frac{\partial^2}{\partial y^2} u = \frac{1}{r} \nabla^2 \omega \left(\int_0^T \frac{\dot{\theta}}{\sin(\pi - \tau)} dt + e^{-i\omega t} \right) \quad (7)$$

$$\Delta C \cong \frac{\partial C}{\partial V_1} \Delta V_1 + \frac{\partial C}{\partial V_2} \Delta V_2 \quad (8)$$

$$C(w, b) = \frac{1}{n} \sum_x \|y(x) - a\|^2 \quad (9)$$

$$\nabla C \equiv \left(\frac{\partial C}{\partial V_1}, \frac{\partial C}{\partial V_2} \right)^T \quad (10)$$

۲-۲-۳. جدول‌ها

هر جدول باید بدون نیاز به مطالعه متن مقاله گویا و قابل فهم باشد. عنوان جدول در بالای آن نوشته شود. از درج جدول‌ها به صورت عکس یا تصویر خودداری شود. محتوای جدول به‌صورت وسط‌چین مرتب شود. در صورت نیاز به ذکر توضیحاتی درباره محتوای جدول، آن را در زیر جدول

قرار دهید، نه در عنوان جدول. در صورت نیاز، به محتوای جدول در جای مناسب ارجاع داده شود. در جدول نمونه زیر، در ستون سمت راست، ردیف سوم، محتوای آن خانه جدول، به مرجع [۳] ارجاع داده است.

جدول ۱: عنوان جدول

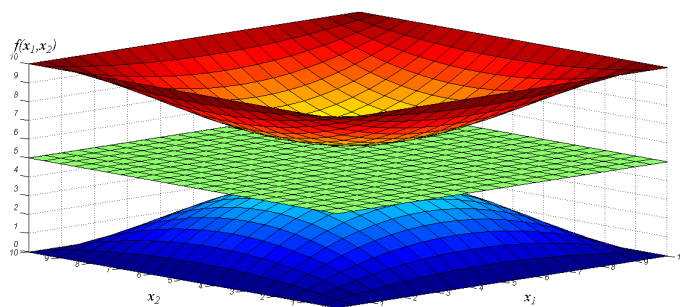
جدول Table	Table Column Head		عنوان جدول column
	ستون column	ستون column	ستون column
فرمول copy	فرمول‌های بیشتر ^a More table copy ^a	فرمول ^b copy ^b	اطلاعات بیشتر [۳]

^a Sample of a Table footnote. (Table footnote)
^b توضیح زیرنویس جدول

در جدول‌ها باید از عددهای فارسی و عنوان‌های فارسی استفاده شود. از به‌کار بردن نقطه به‌جای ممیز خودداری فرمایید.

۳-۲-۳. شکل‌ها

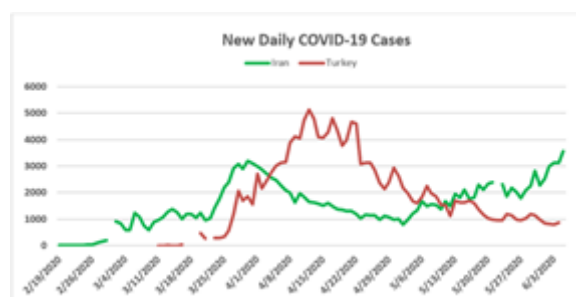
هر شکل باید بدون نیاز به مطالعه متن مقاله گویا و قابل فهم باشد. شکل‌ها می‌توانند به‌صورت رنگی یا سیاه و سفید باشند. شکل‌ها باید با کیفیت بالا (۳۰۰ dpi) آماده شوند. شکل ۱ را ببینید.



شکل ۱: یک شکل [۷]

۳-۳. نمودارها

نمودارها می‌توانند به‌صورت رنگی یا سیاه و سفید باشند. نوشتن واحد کمیت‌ها در نمودارها الزامی است. در متن مقاله باید به همه نمودارها ارجاع شود. اندازه اعداد، واژه‌ها، کمیت‌ها و راهنمای منحنی‌ها (legend) در نمودارها باید به اندازه کافی بزرگ باشد تا پس از درج در مقاله، کامل و به آسانی خوانا باشند. دقت فرمایید، اگر نمودار داخل مقاله به‌شکل تصویر (خروجی نرم‌افزار) است، باید وضوح کامل داشته باشد. بهتر است از فایل اصلی نمودارها در متن مقاله استفاده شود.



شکل ۲: کووید ۱۹ ایران و ترکیه [۴]

۳-۴. زیرنویس‌ها^۶

- زیرنویس فارسی از سمت راست بدون تورفتگی با عدد فارسی
- زیرنویس لاتین از سمت چپ بدون تورفتگی با عدد لاتین
- در زیرنویس‌های انگلیسی، نخستین واژه با حرف بزرگ انگلیسی آغاز شود (برای نمونه، Weber درست است، نه weber)
- از نوشتن نام نویسندگان خارجی در زیرنویس خودداری نمایید. در متن مقاله نام نویسنده خارجی به این شکل نوشته شود: Powell و همکارانش ...
- شماره زیرنویس‌ها در ادامه هم بیایند.^۷

۴. واحدها

- از واحدهای SI (MKS) و یا CGS استفاده نمایید. آن‌ها را با هم به کار نبرید، برای نمونه جریان را با آمپر و میدان الکتریکی را با اورستد بیان نکنید. با این کار، توازن معادله‌ها به هم می‌خورد و موجب کژفهمی می‌شود. پیشنهاد ما آن است که از واحدهای SI استفاده شود. اما، اگر ناگزیر به استفاده هم‌زمان از هر دو سیستم اندازه‌گیری بودید، روشن و دقیق بگویید که در هر معادله، هر پارامتر را با کدام واحد می‌سنجید.
- برای حجم مایعات از واحدهای لیتر (L)، میلی‌لیتر (mL) و میکرولیتر (μl) فراخور نیاز استفاده شود.
- در معادله‌ها، هم‌زمان از نام کامل و کوتاه شده در واحدها استفاده نشود. “Wb/m²” یا «وبر^۸ در هر متر مکعب» درست است، ولی “webers/m²” درست نیست. واحدها را در خود متن مقاله کامل بنویسید: «.....هنری^۹» نه «H...».
- در عددهای اعشاری، صفر پیش از اعشار را بنویسید: ۰/۲۵ درست است.

^۶ شاد و تندرست باشید

^۷With best wishes

^۸Weber

^۹Henrie

- واحدهای انگلیسی را نمی‌توانید به عنوان واحدهای اصلی استفاده نمایید؛ ولی در صورت استفاده، آن‌ها را درون پرانتز بنویسید. البته، برخی واحدهای انگلیسی مانند 3.5-inch disk drive استثنا هستند.

بخش‌هایی که در ادامه می‌آیند نیازی به شماره‌گذاری ندارند

اختصارات و نمادها: فقط از اختصارات استاندارد استفاده کنید. از استفاده از آن‌ها در عنوان و چکیده خودداری کنید. اصطلاح کاملی که نشان دهنده معنای کامل آن اختصار است؛ باید قبل از نخستین کاربرد اختصار مربوطه در متن آورده شود. نیازی به تعریف اختصاراتی مانند IEES، SI، MKS، CGS، sc، dc و rms نیست.

سپاس‌گزاری

در این بخش لازم است از همه همکارانی که به نویسندگان کمک کرده‌اند، اما معیارهای نویسندگی را ندارند، تشکر شود. این موارد می‌توانند افرادی باشند که کمک فنی یا نوشتاری کرده و یا برای نمونه مدیرانی باشند که فقط پشتیبانی کلی از مقاله داشته‌اند. منابع حمایت‌های مالی و مادی نیز باید ذکر شود.

مراجع

نویسنده گرامی، برای ارجاع‌دهی می‌توانید از الگوهای زیر استفاده نمایید. برای منابع فارسی هم از همین چارچوب استفاده شود، اما شماره منبع فارسی هم به فارسی نوشته شود.

نام همه نویسندگان نوشته شود و نماد et al را به کار نبرید.

همچنین، دقت کنید که تمامی مراجعی را که در قسمت مراجع وارد کرده‌اید، در جای مناسب در متن مقاله به آنها ارجاع داده شده باشد.

مراجع

- [۱] نام خانوادگی، نام (سال)، «عنوان مقاله»، نام مجله، شماره، صفحات.
- [2] G. Eason, B. Noble, and I. N. Sneddon, "On certain integrals of Lipschitz-Hankel type involving products of Bessel functions," Phil. Trans. Roy. Soc. London, vol. A247, pp. 529-551, April 1955.
- [3] J. Clerk Maxwell, A Treatise on Electricity and Magnetism, 3rd ed., vol. 2. Oxford: Clarendon, 1892, pp.68-73.
- [4] M. Young, The Technical Writer's Handbook. Mill Valley, CA: University Science, 1989.
- [5] Eli J. Bojd, A Numerical Scheme to Solve SDEs, Ph.D or MSc Thesis, Ferdowsi University of Mashhad, 2004.
- [6] I. S. Jacobs and C. P. Bean, "Fine particles, thin films and exchange anisotropy," in Magnetism, vol. III, G. T. Rado and H. Suhl, Eds. New York: Academic, 1963, pp. 271-350.
- [7] K. Elissa, "Title of paper if known," unpublished.
- [8] R. Nicole, "Title of paper with only first word capitalized," J. Name Stand. Abbrev., in press.
- [9] Y. Yorozu, M. Hirano, K. Oka, and Y. Tagawa, "Electron spectroscopy studies on magneto-optical media and plastic substrate interface," IEEE Transl. J. Magn. Japan, vol. 2, pp. 740-741, August 1987 [Digests 9th Annual Conf. Magnetism Japan, p. 301, 1982].

توجه: نویسنده گرامی، پیش از ارسال مقاله خود دقت نمایید که همه عبارت‌های این الگو را حذف نموده‌اید.

Paper Title* (use style: paper title)

Do not exceed two lines

*Note: Sub-titles are not captured in Xplore and should not be used

1st Author Given Name Surname¹, 2nd Author Given Name Surname², 3rd Author Given Name Surname³

¹ Faculty, University, City, Country

² Faculty, University, City, Country

³ Faculty, University, City, Country

The corresponding author should be marked with an asterisk before the name.

Authors might have two affiliations.

Please provide an E-mail address for the corresponding author.

damghan@du.ac.ir

Abstract— The English abstract must fully correspond to the Persian abstract. The abstract should state briefly in one or two paragraphs (up to 200 words) the purpose of the research, the problem and experimental approach, the principal results and major conclusions. References should be avoided through the abstract. ***CRITICAL: Do Not Use Symbols, Special Characters, Footnotes, or Math in Paper Title or Abstract.**

Keywords—component, formatting, style, styling, insert (5 to 7 key words)