Liet. matem. rink, **47***, spec. nr.,* 2007, 119–122

Substrato pasiskirstymo biokatalizinėje membranoje matematinio modelio analizė, apibrėžiant specialiąją funkciją

Aleksandras KRYLOVAS, Juozas KULYS (VGTU)
el. paštas: akr@fm.vgtu.lt

Reziumė. Nagrinėjamas substrato pasiskirstymo biokatalizinėje membranoje matematinis modelis. Kai substrato koncentracija yra maža arba didelė, uždaviniui spręsti konstruojami asimptotiniai artiniai. Bendruoju atveju formuluojamas suderintos su asimptotiniais skleidiniais aproksimacijos uždavinys.

1. Stacionarusis substrato pasiskirstymas $[S](x)$ biokatalizinėje membranoje modeliuojamas netiesine antrosios eilės diferencialine lygtimi ([1], 76 p.):

$$D\frac{\mathrm{d}^2[S]}{\mathrm{d}x^2} = V_{max}\,\frac{[S]}{K_m + [S]}. \tag{1}$$

Čia D – difuzijos koeficientas, x – atstumas nuo elektrodo paviršiaus, V_{max} – maksimalus fermentinės reakcijos greitis, K_m – Michaelio konstanta.

(1) uždavinys papildomas kraštinėmis sąlygomis:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}[S]}{\mathrm{d}x} = 0, & \text{kai } x = 0, \\ [S] = [S]_0, & \text{kai } x = d. \end{cases} \tag{2}$$

Čia d – fermentinės membranos storis.

Pažymėkime $\alpha = \sqrt{\frac{V_{max}}{K_m D}}$, $y = \alpha x$, $S(y) = \frac{[S]}{K_m}$. Tada funkcijai $S(y)$ rasti užrašome diferencialinę lygtį

$$\frac{\mathrm{d}^2 S}{\mathrm{d}y^2} = \frac{S}{1+S}, \tag{3}$$

kurios bendrasis integralas randamas standartiniu kintamojo keitiniu $\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}y} = p(S)$:

$$\frac{\mathrm{d}^2 S}{\mathrm{d}y^2} = p\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}S} = \frac{S}{1+S}, \quad p = \pm\sqrt{2\left(S - S(0) - \ln\left(1 + \frac{S - S(0)}{1 + S(0)}\right)\right)}. \tag{4}$$

Pažymėkime

$$\int_0^S \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{t-\ln\left(1+\frac{t}{\kappa}\right)}} \equiv \mu(S;\kappa) = u \equiv \sqrt{2}y, \quad \kappa = 1+S(0) > 1. \tag{5}$$

Funkcijos $\mu(S;\kappa)$, $S\in[0,+\infty)$, $\kappa\in(1,+\infty)$ savybės:

1. $\mu(0;\kappa)=0$;
2. $\mu(S;\kappa)$ monotoniškai didėja pagal S;
3. $\mu(S;+\infty)=2\sqrt{S}$;
4. $\mu(S;+1)=+\infty$.

Pirmosios dvi savybės yra akivaizdžios. Trečioji įrodoma tiesioginiu integravimu. Ketvirtoji išplaukia iš tokių įverčių:

$$\mu(S;+1) = \int_0^S \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{t-\ln(1+t)}} \geqslant \int_0^{\min\{1,S\}} \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{t-\left(t-\frac{t^2}{2}+\frac{t^3}{3}-\cdots\right)}}$$

$$\geqslant \int_0^{\min\{1,S\}} \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{\frac{t^2}{2}}} = +\infty.$$

Iš 1 ir 2 savybių gauname, kad egzistuoja atvirkštinė funkcija $\nu(u;\kappa)=\mu^{-1}(u;\kappa)$: $\mu(\nu(u;\kappa))\equiv u$. Tada iš (3) – (5) gauname (1), (2) uždavinio sprendinį

$$\frac{1}{K_m}[S](x) = S(y) = \nu\left(\sqrt{2}\alpha x; 1+S_0^0\right) + S_0^0. \tag{6}$$

Parametrui S_0^0 (6) formulėje rasti reikia išspręsti lygtį

$$\mu(S_0^d - S; 1+S) = \sqrt{2}\alpha d, \quad S_0^d = \frac{[S]_0}{K_m}. \tag{7}$$

1 LEMA. *Esant bet kurioms teigiamoms parametrų α, d, $[S]_0$, K_m reikšmėms,* (7) *uždavinys turi vienintelį sprendinį S_0^0.*

Įrodymas. Nagrinėsime funkciją $F(S)=\mu(S_0^d-S;1+S)$, $S\in(0,S_0^d)$. Iš funkcijos $\mu(S;\kappa)$ savybių turime $F(0)=+\infty$, $F(S_0^d)=0$. Parodykime, kad funkcija $F(S)$ yra mažėjanti:

$$\frac{\mathrm{d}F(S)}{\mathrm{d}S} = -\frac{1}{\sqrt{S_0^d - S - \ln\left(1+\frac{S_0^d-S}{1+S}\right)}}$$

$$+\int_0^{S_0^d-S}\left[\left(-\frac{1}{2}\right)\cdot\left(t-\ln\left(1+\frac{t}{1+S}\right)\right)^{-\frac{3}{2}}\cdot\left(-\frac{1}{1+\frac{t}{1+S}}\right)\cdot\left(-\frac{t}{(1+S)^2}\right)\right]\mathrm{d}t < 0.$$

Pateiksime kelias funkcijos $\nu(u;\kappa)$ reikšmes:

$u_0 \setminus k$	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0, 1263	0, 1674	0, 1880	0, 2003	0, 2086	0, 2145	0, 2189	0, 2223
2	0, 5193	0, 6781	0, 7573	0, 8050	0, 8370	0, 8599	0, 8772	0, 8807
3	1, 2143	1, 5532	1, 7218	1, 8238	1, 8925	1, 9419	1, 9793	2, 0085
4	2, 2532	2, 8182	3, 0989	3, 2694	3, 3847	3, 4681	3, 5314	3, 5810
5	3, 6740	4, 4970	4, 9052	5, 1543	5, 3225	5, 4464	5, 5400	5, 6138

2. Taigi visą informaciją apie modeliuojamą procesą gauname iš apibrėžtos (5) formule funkcijos $\nu(u;\kappa)$. Perrašome funkcijos apibrėžimą taip:

$$\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}u} = \sqrt{\nu - \ln\Big(1 + \frac{\nu}{\kappa}\Big)}, \qquad \nu(0;\kappa) = u. \tag{8}$$

Raskime (6) funkcijos asimptotiką, kai $S_0^0 \to +\infty$. Šiuo atveju ir $\kappa = 1 + S_0^0 \to +\infty$. Todėl

$$\int_0^\nu \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{t - \ln\big(1 + \frac{t}{\kappa}\big)}} \approx \int_0^\nu \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{t\big(1 - \frac{1}{k}\big)}} = u.$$

Iš čia gauname $\nu = \frac{u^2}{4}(1 + \mathrm{O}(\frac{1}{\kappa}))$ ir $\frac{1}{K_m}[S](x) = S_0^0 + \frac{\alpha^2 x^2}{2} + \mathrm{O}(\frac{1}{S_0^0})$. Arba pastebėję, kad $S_0^0 = S_0^d - \frac{\alpha^2 d^2}{2} + \mathrm{O}(\frac{1}{S_0^0})$, užrašome reiškinį substrato pasiskirstymui rasti, esant aukštoms fermento koncentacijoms

$$\frac{1}{K_m}[S](x) = S_0^d + \frac{\alpha^2(x^2 - d^2)}{2} + \mathrm{O}\Big(\frac{1}{S_0^d}\Big). \tag{9}$$

Sunkiau rasti asimptotiką, kai $S_0^d \to +0$, kadangi iš trečiosios funkcijos $\mu(S;\kappa)$ savybės matome jos singuliarumą ($\kappa = 1 + S_0^0 \to +1$, $S_0^d > S_0^0 \to +0$). Todėl (8) lygtyje turime $S_0^0 \leqslant \nu \leqslant S_0^d \approx 0$ ir $\kappa \approx 1$. Taigi

$$\int_0^\nu \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{t - \ln\big(1 + \frac{t}{\kappa}\big)}} \approx \int_0^\nu \frac{\kappa\sqrt{2}\,\mathrm{d}t}{\sqrt{2tk(k-1) + t^2}} = u.$$

Iš čia gauname $\ln(\frac{\kappa(\kappa-1)+\nu+\sqrt{\kappa(\kappa-1)\nu+\nu^2}}{\kappa(\kappa-1)}) \approx \frac{u}{\sqrt{2\kappa}}$ ir $\nu \approx \kappa(\kappa - 1)(\mathrm{ch}\,(\frac{u}{\sqrt{2k}}) - 1)$. Užrašome substrato pasiskirstymo formulę, kai fermento koncentacija yra maža:

$$\frac{1}{K_m}[S](x) = S_0^0 \mathrm{ch}\,(\alpha x) + \mathrm{O}\big((S_0^0)^2\big), \qquad S_0^0 = \frac{S_0^d}{\mathrm{ch}\,(\alpha d)}. \tag{10}$$

Formulės (9) ir (10) gautos [1] monografijoje, keičiant (3) lygtį atitinkamai lygtimis $\frac{\mathrm{d}^2 S}{\mathrm{d}y^2} = 1$ ir $\frac{\mathrm{d}^2 S}{\mathrm{d}y^2} = S$. Gautos šiame straipsnyje (9), (10) formulių asimptotinės paklaidos, rodo jų tikslumą, t.y. modelių taikymo ribas.

Kai $0 \ll S_0^d \ll \infty$, šios formulės nėra taikytinos. Apytiksles substrato pasiskirstymo reikšmes galima gauti iš pateiktos funkcijos $\nu(u;\kappa)$ reikšmių lentelės (kurią reikia praplėsti), perskaičiuojant uždavinio parametrus α, κ pagal straipsnyje pateiktas formules (panašiai kaip [2]).

3. Suformuluokime šio darbo rezultatus ir tolesnių tyrimų uždavinius.

- Kai fermento koncentracija yra didelė ($S_0^d \to \infty$), subsrato pasiskirstymas aproksimuojamas aimpotiniu sklediniu, kurio pavidalas nurodomas (9) formulę. Iš šios formulės matome, kad uždavinio singuliarumui įveikti pakanka įtraukti į asimptotiką vieną narį, proporcingą dideliam parametrui S_0^d.
- Kai fermento koncentracija yra maža ($S_0^d \to 0$), pasiskirstymą aproksimuoja tiesioginis (10) skleidinys mažojo parametro laipsniais.
- Atvejui $0 \ll S_0^d \ll \infty$ galima konstruoti funkcijos

$$\mu(S;\kappa)\colon\ [0,+\infty)\times(1,+\infty)\ \to\ [0,+\infty)$$

aproksimaciją, kuri turi būti suderinta su (9) ir (10) asimptotikomis. Čia yra taikytinos žinomo *asimptotinių sleidinių suauginimo* metodo [3] idėjos ir tai yra mūsų tolesnių tyrimų uždavinys.

Literatūra

1. J. Kulys, V. Razumas, *Biokatalizė organinių junginių elektrochemijoje*, Mokslas, Vilnius (1983) (rusų k.).
2. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, M. Abramowitz and I.A. Stegun (Eds.), National Bureau of Standards (1964). (Yra šios knygos vertimas į rusų kalbą: *Spravočnik po specialnym funkcijam*, Nauka, Moskva (1979).)
3. A.M. Ilyin, Matching of asymptotic expansions of solutions of boundary value problems, in *Translation of Mathematical Monographs*, vol. 102, AMS, Providence, Rhode Island, 1992. (Vertimas iš rusų kalbos: *Soglasovanie asimptotičeskich razloženij rešenij kraevych zadač*, Nauka, Moskva (1989).)

SUMMARY

A. Krylovas, J. Kulys. Definition of a mathematical function for analysis of a model for distribution of substratum in biocatalytic membrane

Mathematical model for distribution of substratum in biocatalytic membrane described by second order nonlinear differential equation, which solution is presented as a special mathematical function. In the paper authors construct asymptotical approximations of the function for small and big concentration of substratum.

Keywords: modeling, asymptotical analysis, differential equations.