

Suite of enterprise applications that is designed to increase productivity, organization, collaboration between employees, considering these important business objectives, such as: control of information flows, making- decision and workflow management. In product there is a focus on the social component, the cloud and mobility. Microsoft SharePoint 2013 offers new tools for simple administration, effective protection of communication and information and flexible collaboration. Social features make it easy to share ideas, keep track of the actions of colleagues, find experts and information. Advantages: good technical support, the configurability of the software product Windows. Disadvantages: high cost of implementation, lack of cross-platform.

Another product that we would like to note is Detrix [2]. It refers to free software, but supporting, maintenance and consulting are paid. Developed by a community of programmers around the world, including Kazakhstan. Advantages: low cost, cross-platform, designed to Kazakh standards reference document. Disadvantages: lack of technical support (for free use), insufficient study of the program by itself.

The above software products because of there are shortcomings unacceptable for using for institution. Therefore, we have decided to develop your own software product for accounting of incoming and outgoing documentation.

As a result of functioning of the information system of the account of incoming and outgoing documents, economic efficiency of work of the institution. Is increases efficiency is saving money spent on the purchase of paper supplies for copiers, office supplies.

#### Literature

1. Miklos, Colspans. Microsoft SharePoint 2010. Panarotto = Microsoft SharePoint 2010 Unleashed. M. : Williams, 2011.
2. URL: [www.detrrix.kz](http://www.detrrix.kz)
3. URL: <http://www.directum.ru/3464036.aspx>
4. URL: <http://www.zakon.kz/4527440-vvedenie-jelektronnogo-dokumentooborota.html>

## **ЭНЕРГОИНФОРМАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ ЦЕПЕЙ ВЛАГОПЕРЕНОСА И ДИФФУЗИОННОЙ ЦЕПИ ДЛЯ СИНТЕЗА БИОСЕНСОРОВ**

***В. М. Зарипова***

*Астраханский государственный*

*архитектурно-строительный университет*

Энергоинформационный метод моделирования позволяет показать взаимодействие процессов различной физической природы в биосенсоре введением физико-технических эффектов, связывающих величины одной физической природы с величинами или параметрами другой физической природы, а также предложить структурно-формализованное описание возможных вариантов принципа действия биосенсора в виде параметрических структурных схем, каждое звено которых

отображает элементарное преобразование одной физической величины в другую величину или параметр цепи. В работе приведены энергоинформационные модели цепей диффузионной и влагопереноса, которые наиболее часто используются для описания процессов в биологических объектах.

**Ключевые слова:** энергоинформационный метод моделирования, биосенсор, влагоперенос, диффузия, моделирование.

## **ENERGY-INFORMATION MODELS OF CHAINS OF MOISTURE TRANSFER AND DIFFUSION NATURE FOR THE SYNTHESIS OF BIOSENSORS**

**V. M. Zaripova**

*Astrakhan State University of Architecture and Civil Engineering*

Method of Energy and information modelling allows to show the interaction of processes of different physical nature in a biosensor. Method introduces physical and technical effects, links the value of the one physical nature to the values or parameters of the other physical nature. Method also offers structural and formal description of the physical principals of biosensors as parametric structural diagrams. Each link of such diagram displays an elementary transformation of a physical quantity to another quantity or chain value. The paper presents the energy-information models of the chains of diffusion and moisture transfer nature. These chains most often used to describe the processes in biological objects.

**Keywords:** energy and information modeling method, biosensor, moisture transfer, diffusion, model design.

Процесс проектирования биосенсоров можно разбить на 2 этапа. Сначала в базе данных биорецепторов подбираются варианты, распознающие требуемое вещество, и определяется выходная величина этого биорецептора. После этого осуществляется синтез трансдюсера, для которого выходная величина биорецептора является входной, на основе информации, хранящейся в разработанной базе данных.

Различные виды биорецепторов можно комбинировать с различными трансдюсерами. Это позволяет создавать большое разнообразие различных типов биосенсоров и отбирать лучшие решения по совокупности эксплуатационных характеристик. Для выбора тест-объекта и объединения его с трансдюсером необходимо дополнительно создать базу данных тест-объектов и программное обеспечение, позволяющее выбрать тест-объект по заданным параметрам и перейти к синтезу трансдюсера.

Использование энергоинформационного метода моделирования позволяет разработать удобную и наглядную среду концептуального проектирования для синтеза принципа действия биосенсоров.

### **Принципы энергоинформационного моделирования процессов разной физической природы**

Энергоинформационные модели цепей (ЭИМЦ) позволяют перейти к структурно-формализованному описанию процессов в чув-

ствительных элементах датчиков с помощью параметрических структурных схем [1, 2]. Принцип действия любого элемента информационно-измерительных и управляющих систем основан на взаимодействии цепей различной физической природы, которое моделируется в ЭИМЦ с помощью последовательности физико-технических эффектов параметров цепей различной физической природы.

При энергоинформационном моделировании процессов различной физической природы используются следующие понятия:

Цепь определенной физической природы – это идеализированная материальная среда, имеющая определенные геометрические размеры и характеризующаяся физическими константами, присущими только явлениям данной физической природы.

Обобщенные величины цепи одной и той же физической природы изменяются в широких пределах и характеризуют внешнее воздействие на цепь данной физической природы и ее реакцию на него. Основные обобщенные величины ЭИМЦ:  $Q$  – заряд,  $P$  – импульс,  $I$  – реакция,  $U$  – воздействие.

Обобщенные параметры цепи характеризуют относительную неизменность материальной среды, в которой протекают физические процессы и определяются геометрическими размерами, физическими и химическими свойствами материалов. Основные обобщенные параметры ЭИМЦ:  $R$  – сопротивление,  $G=1/R$  – проводимость,  $C$  – емкость,  $W=1/C$  – жесткость,  $L$  – индуктивность,  $D=1/L$  – дедуктивность (величина, обратная индуктивности).

Критерии ЭИМЦ – это система уравнений, отражающих связи между обобщенными величинами и обобщенными параметрами. Простейший набор критериев для систем с сосредоточенными параметрами включает 6 уравнений (табл. 1).

Таблица 1

Критерии ЭИМЦ

Название критериев	Уравнение
Энергетический	$U \cdot I = N$ , где $N$ - мощность [Вт] Произведение величин воздействия и реакции должно измеряться в единицах мощности [Вт]
Статические критерии	$I \cdot L = P$ или $P \cdot D = I$
	$U \cdot C = Q$ или $Q \cdot W = U$
	$I \cdot R = U$ или $U \cdot G = I$
Динамические критерии	$U = \frac{dP}{dt}$ или $P = \int U dt$
	$I = \frac{dQ}{dt}$ или $Q = \int I dt$

Используя энергоинформационные модели для описания явлений различной физической природы, можно все многообразие взаимосвязей между величинами и параметрами представить в виде сложного графа [1, 2]. При заданной величине входа и выхода каждый путь, найденный по графу, представляет собой схематическое изображение принципа действия датчика.

Биологические объекты не находятся в состоянии равновесия. Процессы, проходящие в таких системах, являются необратимыми. Поэтому для описания этих процессов можно использовать методологию энергоинформационного моделирования, в основе которой лежат принципы неравновесной термодинамики [3, 4]. Это позволяет получить полную систему уравнений переноса и другие закономерности, не вскрывая их молекулярного механизма. Кроме того, в ЭИМЦ система величин и параметров, используемых в неравновесной термодинамике, расширена аналогично теории электрических цепей с целью применения разработанных в ней методов анализа и синтеза. Добавлены понятия параметров цепей (сопротивление, емкость, индуктивность и обратные им значения).

Мембрана клетки является избирательным барьером для различных веществ, находящихся внутри и снаружи клетки. Существует несколько специфических механизмов транспорта в мембранах. Все они могут быть подразделены на два типа: пассивный и активный транспорт. Все виды пассивного транспорта основаны на принципе диффузии и влагопереноса. Поэтому разработка энергоинформационной модели цепей диффузии и влагопереноса – актуальная задача.

### **Энергоинформационная модель процесса диффузии**

Диффузия незаряженных частиц вызывается их концентрационным градиентом и направлена в сторону уменьшения этого градиента. Частицы вещества перемещаются из области более высокой концентрации вещества в области, где концентрация этого вещества низкая. Диффузия постепенно уменьшает градиент концентрации до тех пор, пока не наступит состояние равновесия. При этом в каждой точке устанавливается равная концентрация, и диффузия в обоих направлениях будет осуществляться в равной степени. Диффузия является пассивным транспортом, поскольку не требует затрат внешней энергии.

Для количественной характеристики диффузии используют физическую величину – плотность потока вещества ( $J$ ):  $J = \frac{1}{S} \cdot \frac{dn}{dt}$  [моль/м<sup>2</sup> с], где  $n$  – количество вещества в молях, перемещающееся посредством диффузии через поверхность  $S$ , перпендикулярную потоку вещества, за единицу времени. Тогда диффузионный ток (или величина реакции) в терминах ЭИМЦ:

$$I_d = J \cdot S = \frac{dn}{dt} \text{ [моль/с]} \quad (1)$$

В терминах энергетических переменных движущей силой диффузии является не градиент концентрации, а градиент химического потенциала. Для примера рассмотрим случай простой реакции  $A \leftrightarrow B$ , протекающей в идеальном растворе при наличии одномерной диффузии компонентов в направлении оси  $x$ . Диффузионный поток  $J_k$   $k$ -ого компонента определяется законом Фика:

$$J_k = -D_k \frac{\partial c_k}{\partial x}, \quad (2)$$

где  $D_k$  – коэффициент диффузии  $k$ -го компонента. Перейдем в равенстве (2) к энергетическим переменным, воспользовавшись известной связью между концентрацией  $C_k$  и химическим потенциалом  $\mu_k$   $k$ -го компонента в идеальном растворе [5]:

$$\mu_k = \mu_k^0 + RT \ln(C_k) \quad (3)$$

Дифференцируя (3) по координате  $x$ , получим

$$\frac{\partial C_k}{\partial x} = \frac{C_k}{RT} \frac{\partial \mu_k}{\partial x} \quad (4)$$

Подставим (4) в (2) и затем перейдем к конечным разностям, в результате получим

$$J_k \cong -\frac{D_k C_k}{RT \Delta x} \cdot \Delta \mu_k \quad (5)$$

Здесь  $J_k$  – диффузионный поток  $k$ -го компонента [моль/м<sup>2</sup> с];  $D_k$  – коэффициент диффузии  $k$ -го компонента [м<sup>2</sup>/с];  $C_k$  – концентрация  $k$ -го компонента [моль/м<sup>3</sup>];  $R$  – газовая постоянная [Дж/моль К];  $T$  – температура [К];  $\Delta x$  – длина участка [м];  $\Delta \mu_k$  – химический потенциал [Дж/моль].

Умножим правую и левую части уравнения на площадь поперечного сечения  $S$  [м<sup>2</sup>]:

$$J_k S \cong -\frac{D_k C_k S}{RT \Delta x} \cdot \Delta \mu_k \quad (6)$$

В этом уравнении можно принять, что:  $I_d = J_k S$  – величина диффузионного тока [моль/с],  $U_d = \Delta \mu_k$  – величина диффузионного воздействия (напряжение) [Дж/моль],  $G_d = -\frac{RT \Delta x}{D_k C_k S}$  – параметр диффузионной проводимости [моль<sup>2</sup>/Дж с].

А величину обратную  $G_d$  можно считать диффузионным сопротивлением  $R_d = \frac{1}{G_d} = -\frac{D_k C_k S}{RT \Delta x}$  [Дж с/моль<sup>2</sup>].

Проверим выполнение 1 критерия ЭИМЦ: мощность  $N = I_d \cdot U_d$  [Вт].

В качестве величины диффузионного заряда  $Q_d$  можно принять количество вещества [моль], тогда выражение для параметра диффузионной емкости согласно ЭИМЦ можно представить в виде:

$$C_d = \frac{Q_d}{U_d} = \frac{Q_d}{\Delta \mu_k} \quad \text{или} \quad C_d = \frac{dQ_d/dt}{U_d/dt} = \frac{I_d}{d\mu_k/dt} \quad (7)$$

С другой стороны, дифференцируя (3) по времени, получим выражение, связывающее диффузионный ток (изменение концентрации во времени) и изменение химического потенциала во времени:

$$I_d = \frac{\partial C_k}{\partial t} S = \frac{S C_k}{RT} \frac{\partial \mu_k}{\partial t} \cong C_d \frac{\Delta U_d}{\Delta t} \quad (8)$$

Таким образом, параметр емкости диффузионной цепи

$$C_d = \frac{SC_k}{RT} \text{ [моль}^2\text{/Дж]} \quad (9)$$

Используя критерии ЭИМЦ, о которых говорилось выше (табл.1), можно записать следующие соотношения для величин и параметров диффузионной цепи (табл. 2).

Таблица 2

Величины и параметры диффузионной цепи (d)  
и цепи влагопереноса (mo) в терминах ЭИМЦ

Вид модели	Наименование величины или параметра	Обозначение	Единица измерения	Физический смысл	Математическое описание
Диффузионная цепь	Воздействие	U <sub>d</sub>	Дж/моль	Химический потенциал	$U_d = \Delta\mu_k$
	Реакция	I <sub>d</sub>	моль/с	Интегральный диффузионный поток вещества	$I_d = JS$
	Заряд	Q <sub>d</sub>	Моль	Количество вещества	$Q_d = \int_0^t I_d dt$
	Сопротивление	R <sub>d</sub>	[Дж с/моль <sup>2</sup> ]	Сопротивление диффузии k-го компонента	$R_d = -\frac{RT\Delta x}{D_k C_k S}$
	Емкость	C <sub>d</sub>	моль <sup>2</sup> /Дж	Накапливающий элемент	$C_d = \frac{SC_k}{RT}$
	Воздействие	U <sub>mo</sub>	Дж/кг	Потенциал влагопереноса	$U_{mo} = \frac{U}{c_{mo}}$
	Реакция	I <sub>mo</sub>	кг/с	Поток влаги через капиллярно-пористое тело	$I_{mo} = \frac{dQ_{mo}}{dt}$
	Заряд	Q <sub>mo</sub>	кг	Количество влаги	$Q_{mo} = M_{mo}$
	Сопротивление	R <sub>mo</sub>	(Дж·с)/кг <sup>2</sup>	Сопротивление влагопереносу (величина, обратная влагопроводности)	$R_{mo} = \frac{1}{A_{mo} \rho_{mo} c_{mo}} \frac{l}{S}$
	Емкость	C <sub>mo</sub>	кг <sup>2</sup> /Дж	Накапливающий элемент	$C_{mo} = c_{mo} M_0$

### Энергоинформационная модель процесса влагопереноса

Для различных конструкций биосенсоров также важны явления влагопереноса. Процессы влагообмена через мембрану клетки и соответствующие физические и математические модели были разработаны А. В. Лыковым на основе неравновесной термодинамики [6, 7].

В этих работах ряд термодинамических понятий по аналогии применяется к массопереносу. Важнейшим из них является потенциал переноса влаги (потенциал массопереноса) – величина воздействия

для цепи влагопереноса в терминах энергоинформационной модели. В результате действия этой величины происходит перемещение влаги в капиллярно-пористом теле. В гигроскопическом состоянии материала жидкость связана адсорбционными силами, капиллярными силами и диффузионно-осмотическими силами. Поэтому можно в первом приближении считать, что потенциал влагопереноса равен химическому потенциалу данного вещества. Единица измерения  $U_{mo}$  [Дж/кг]. Потенциал влагопереноса - это некоторая функция влагосодержания и внешних параметров, которые в состоянии термодинамического равновесия одинаковы во всех частях тела:

$$U_{mo} = \frac{U}{c_{mo}} \text{ [Дж/кг]}, \quad (10)$$

где  $c_{mo}$  - удельная изотермическая влагоемкость (аналог удельной теплоемкости материала) [кг/Дж].

Количество влаги  $M_{mo}$  [кг], перешедшей от одного тела к другому при соприкосновении тел с разными потенциалами:

$$M_{mo} = c_{mo}M_o(U_{mo2} - U_{mo1}) = C_{mo}\Delta U_{mo}, \quad (11)$$

где  $U_{mo1}$  и  $U_{mo2}$  - потенциалы влагопереноса соответственно до и после влагообмена;  $M_o$  - масса абсолютно сухого тела,  $C_{mo} = c_{mo}M_o$  - влагоемкость тела [кг<sup>2</sup>/Дж]. Анализ экспериментальных материалов [7] показывает, что удельная влагоемкость мало зависит от температуры, поэтому в первом приближении можно считать, что изотермическая влагоемкость есть однозначная функция влагосодержания.

Согласно энергоинформационной модели процессов различной физической природы количество влаги  $M_{mo}$ , перешедшей от одного тела к другому при соприкосновении тел с разными потенциалами влагопереноса, можно считать величиной заряда в процессе влагопереноса -  $Q_{mo}$ . Тогда величина реакции в цепи влагопереноса - это поток влаги  $I_{mo}$ . Она равна количеству влаги, переносимому через поперечное сечение -  $S$  капиллярно-пористого тела в единицу времени и измеряется в [кг/с]. При этом выполняется первый критерий энергоинформационной модели (энергетический):

$$N_{mo} = U_{mo}I_{mo} \text{ [Вт]} \quad (12)$$

Внутренний изотермический перенос влаги в капиллярно-пористом теле можно описать следующим законом:

$$I_{mo} = \frac{A_{mo}\rho_{mo}c_{mo}S}{l}\Delta U_{mo} = G_{mo}\Delta U_{mo} \quad (13)$$

где  $G_{mo}$  - проводимость цепи влагопереноса [кг<sup>2</sup>/(с Дж)],  $A_{mo}$  - коэффициент диффузии влаги [м<sup>2</sup>/с],  $\rho_{mo}$  - плотность вещества [кг/м<sup>3</sup>].

Произведение  $A_{mo}\rho_{mo}c_{mo} = g_{mo}$  называется коэффициентом массо- или влагопроводности [кг·с/м<sup>3</sup>]. Фактически это удельная влагопроводимость, тогда можно записать, что

$$G_{mo} = g_{mo} \frac{S}{l} \quad (14)$$

Величины жесткости и сопротивления при влагопереносе легко могут быть определены из (12)–(14) как величины обратные  $C_{вл}$  и  $G_{вл}$ .

В таблице 2 представлены эти величины-аналоги и параметры-аналоги для энергоинформационных моделей диффузии и влагопереноса.

### **Заключение**

Энергоинформационный метод моделирования позволяет:

- осуществить декомпозицию сложных процессов, происходящих в биосенсорах на процессы различной физической природы;
- описать процессы разной физической природы однотипными уравнениями (феноменологические уравнения неравновесной термодинамики);
- показать взаимодействие процессов различной физической природы в биосенсоре введением физико-технических эффектов, связывающих величины одной физической природы с величинами или параметрами другой физической природы.

В работе приведены энергоинформационные модели двух наиболее часто встречающихся процессов в мембранах клетки: диффузии и влагопереноса. Это позволяет разработать метод концептуального проектирования биосенсоров и предложить информационную технологию для его реализации.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-37-00258/16*

### **Список литературы**

1. Zaripova V., Petrova I. System of Conceptual Design Based on Energy-Informational Model // PROGRESS IN SYSTEMS ENGINEERING, Proceedings of the 23rd International Conference on Systems Engineering, August, 2014, Las Vegas, NV, Series: Advances in Intelligent Systems and Computing, Vol. 1089. 2015. P. 365–373. DOI 10,1007/978-3-319-08422-0\_54.
2. Zaripov M., Petrova I., Zaripova V. PROJECT OF CREATION OF KNOWLEDGE BASE ON PHYSICAL AND TECHNOLOGICAL EFFECTS // IMEKO TC1 Symposium on Education in Measurement and Instrumentation, Challenges of New Technologies Challenges of New Technologies. 2002. P. 171–176.
3. Де Гроот С. Неравновесная термодинамика / пер. с англ. П. Мазур. М. : Мир, 1964. 456 с.
4. Пригожин И. Р. Введение в термодинамику необратимых процессов : пер. с англ. Ижевск : НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 160 с.
5. Кафаров В. В., Дорохов И. Н. Системный анализ процессов химической технологии. Топологический принцип формализации. М. : Наука, 1979. 394 с.
6. Лыков А. В. Применение методов термодинамики необратимых процессов к исследованию тепло- и массообмена // Инженерно-физический журнал. 1965. Т. 9. № 3. С. 287–304.
7. Luikov A. V. Systems of differential equations of heat and mass transfer in capillary porous bodies // Int. J. Heat Mass Transfer. 1975. № 18. P. 1–14.