

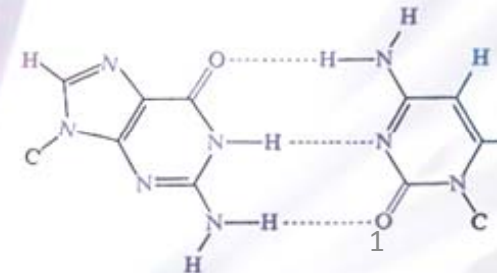
Международная молодежная школа-конференция «Математика. Компьютер. Образование»

Волкова Е. В., Урманчеев С. Ф.

Институт механики УНЦ РАН
Научный руководитель: д.ф.-м.н., Урманчеев С.Ф.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРАЗНОЙ ЦЕПНОЙ РЕАКЦИИ ПРИ ЕСТЕСТВЕННОЙ КОНВЕКЦИИ

Пушино - 2010

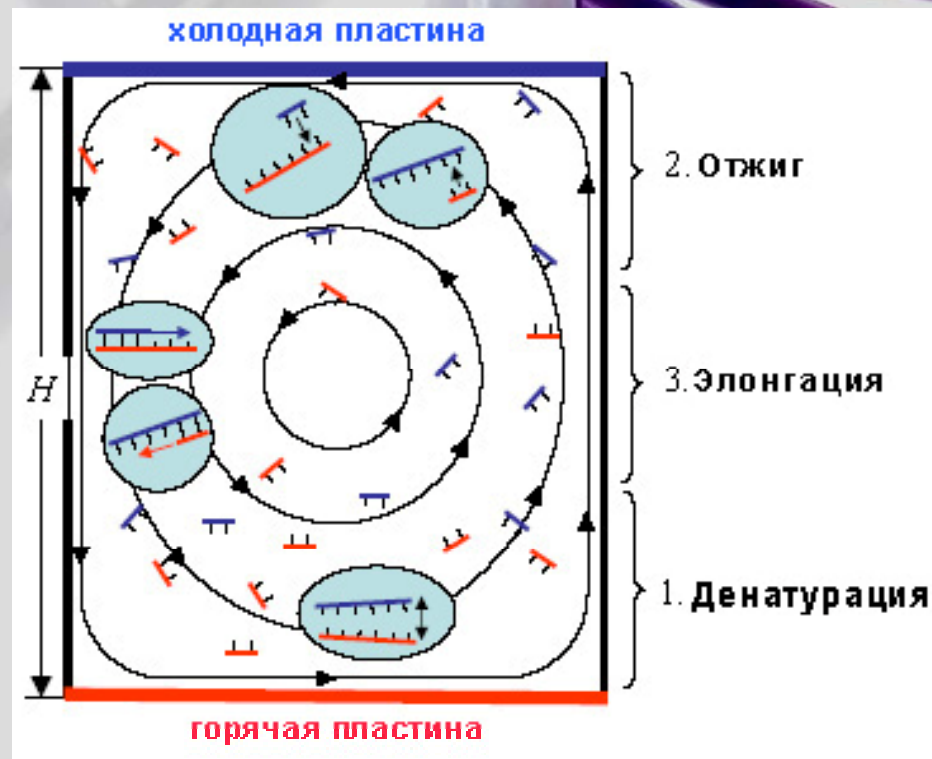


ПЦР – Полимеразная Цепная Реакция

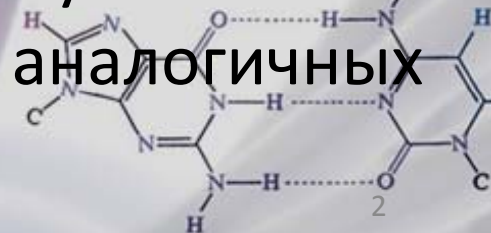
Три стадии ПЦР

- 1) Денатурация - (94°C)
- 2) Отжиг - ($50\text{-}65^{\circ}\text{C}$)
- 3) Элонгация - (72°C)

денатурация отжиг элонгация
[2] \longrightarrow 2[1] \longrightarrow 2[1*] \longrightarrow 2[2]
конвекция + диффузия + реакция



Цель работы – исследование влияния различных параметров на процесс развития и успешность выполнения ПЦР; достижение условий, аналогичных условиям в обычном термоциклере.



Постановка задачи

Уравнения эволюции для концентраций c_i ($i = 1, 2, 3$)

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + \frac{1}{Da^C} \vec{u} \cdot \nabla c_1 = \frac{1}{Da^D} \nabla^2 c_1 + 2k_d f_d(x) c_2 - k_a f_a(x) c_1, \quad c_1 - \text{Однонитевые ДНК}$$

$$\frac{\partial c_3}{\partial t} + \frac{1}{Da^C} \vec{u} \cdot \nabla c_3 = \frac{1}{Da^D} \nabla^2 c_3 + k_a f_a(x) c_1 - k_e f_e(x) c_3, \quad c_3 - \text{Отожженные ДНК}$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} + \frac{1}{Da^C} \vec{u} \cdot \nabla c_2 = \frac{1}{Da^D} \nabla^2 c_2 + k_e f_e(x) c_3 - k_d f_d(x) c_2. \quad c_2 - \text{Двунитевые ДНК}$$

$u(x)$ - Поле скорости

k_a, k_e, k_d - Безразмерные константы скоростей соответствующих реакций

f_a, f_e, f_d - Интенсивности соответствующих реакций

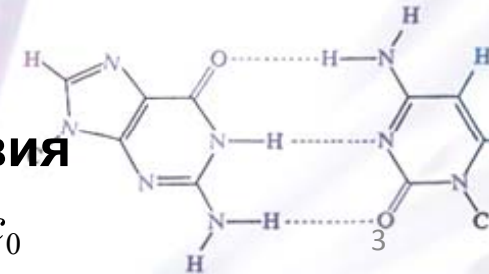
$$Da^C = \frac{kH}{U}, \quad Da^D = \frac{kH^2}{D} \quad - \text{Числа Дамкелера}$$

Граничные условия

$$\vec{n} \cdot \nabla c_i = 0$$

Начальные условия

$$c_1 = c_3 = 0, \quad c_2 = c_0$$



Определение параметров

Интенсивность реакции

$$f_d = 1, \text{ если } y \in \left(0; \frac{1}{3}\right)$$

$$f_a = 1, \text{ если } y \in \left(\frac{2}{3}; 1\right)$$

$$f_e = 1, \text{ если } y \in \left(\frac{1}{3}; \frac{2}{3}\right)$$

Поле скорости

$$u = -\cos \frac{\pi x}{2} \sin \frac{\pi y}{2},$$

$$v = \sin \frac{\pi x}{2} \cos \frac{\pi y}{2}$$

Безразмерные константы скоростей соответствующих реакций

$$k_a = k_d = 1$$

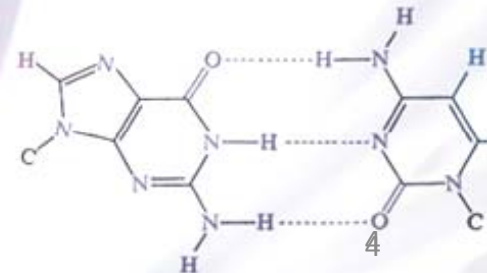
$$k_e = 0.5$$

Параметры расчетов

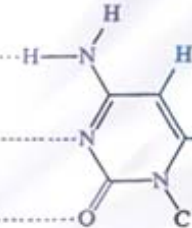
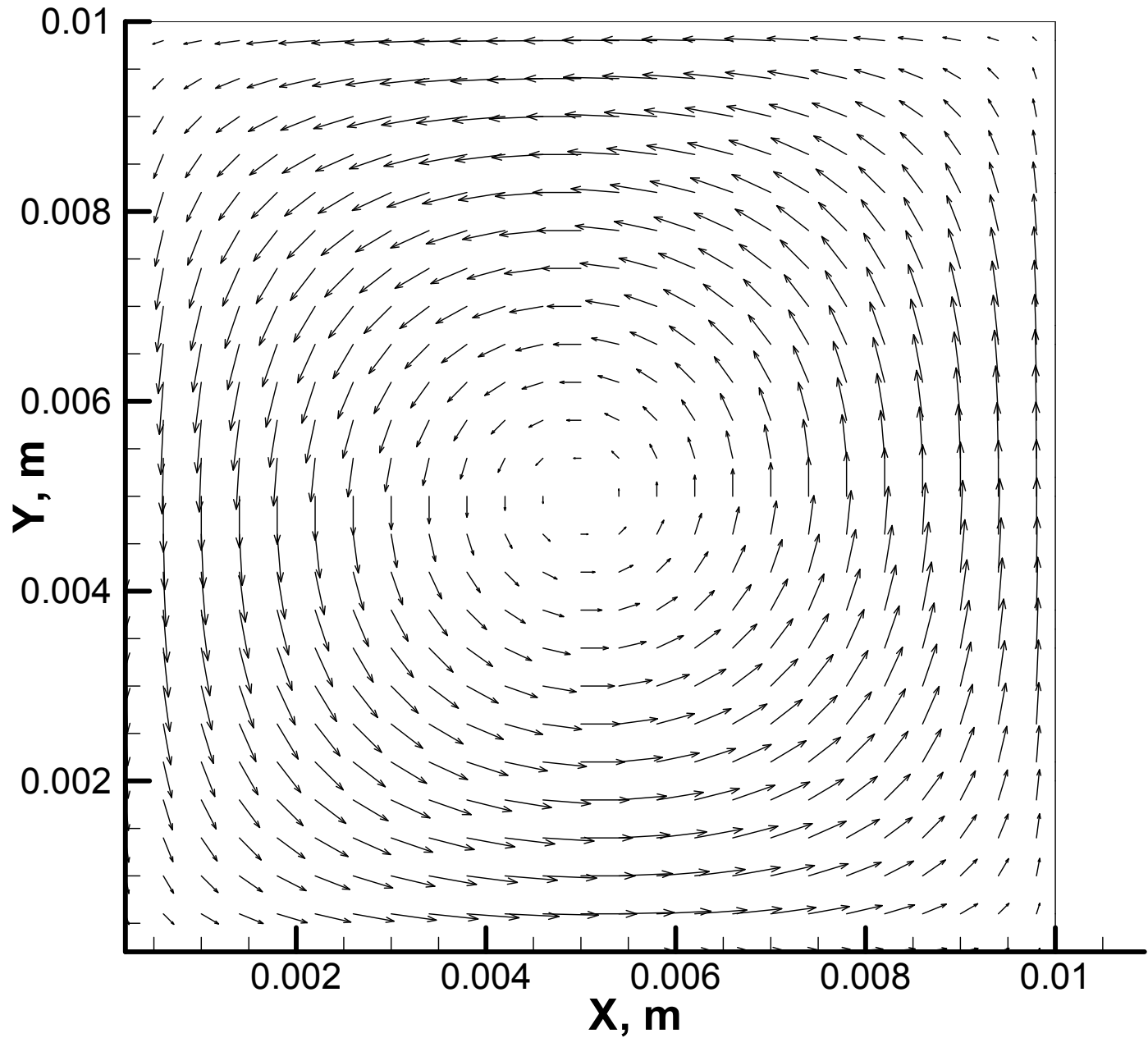
$$U = 0.01 \text{ m/s}$$

$$H = 0.01 \text{ m}$$

$$T = 60 \text{ s}$$



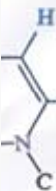
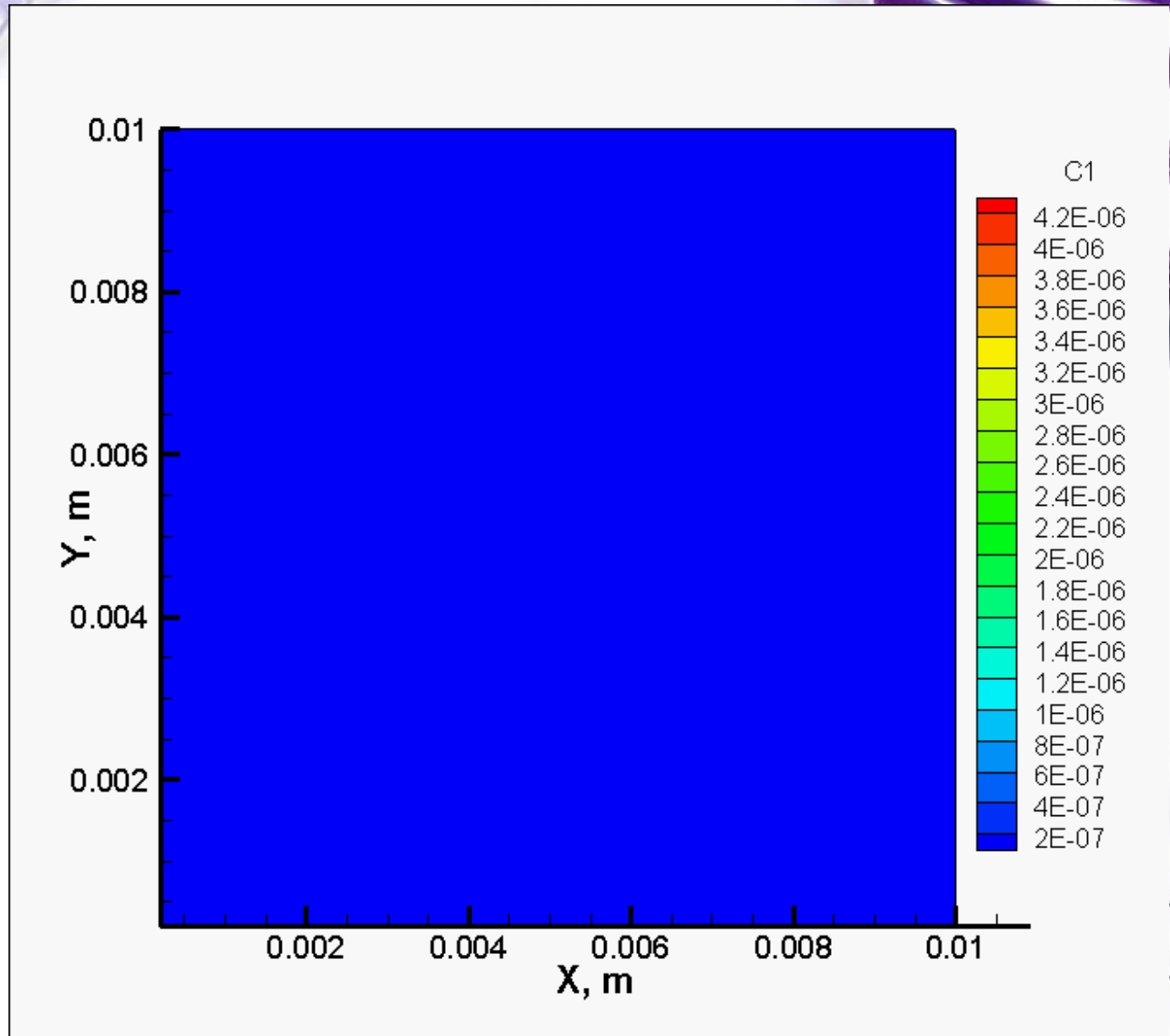
Поле скорости



Основные результаты: рост C1

$$D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s}$$

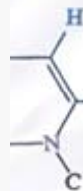
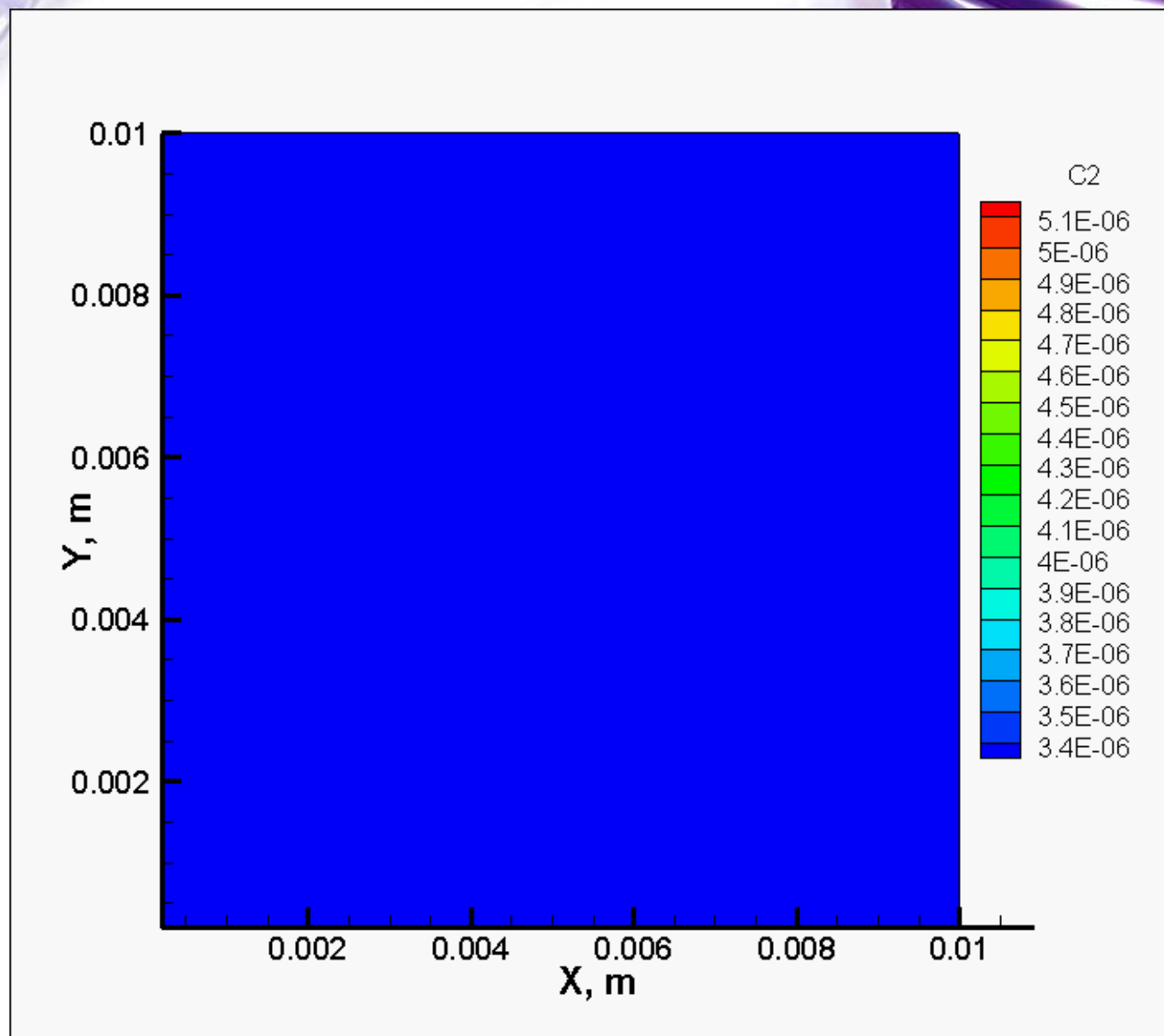
$$k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$



Основные результаты: рост C2

$$D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s}$$

$$k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$

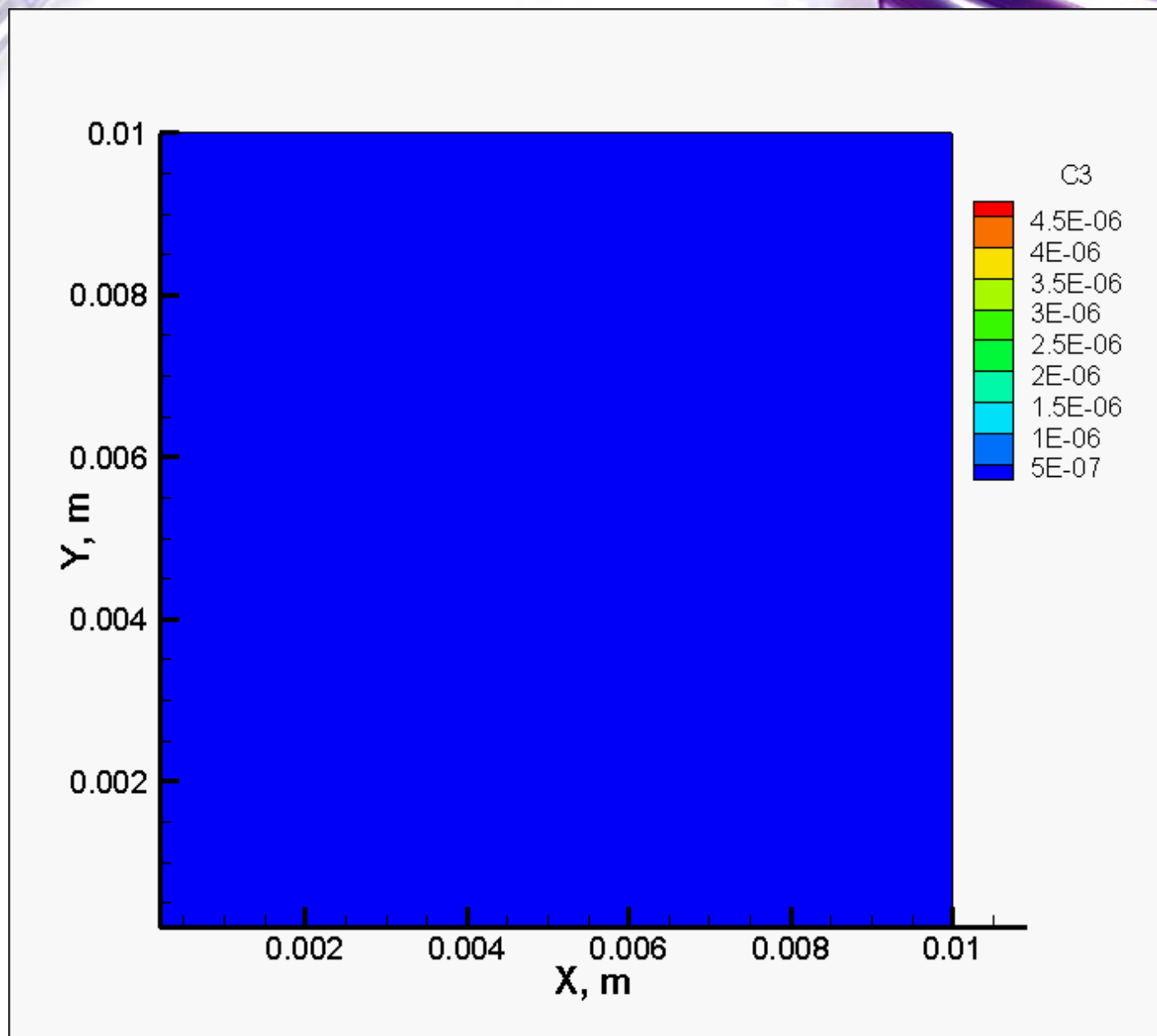


H

Основные результаты: рост C3

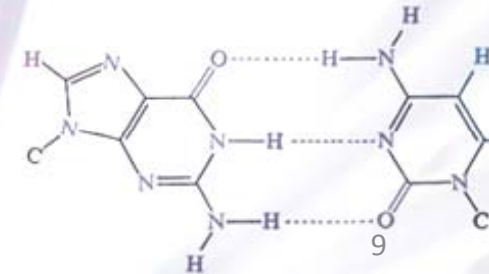
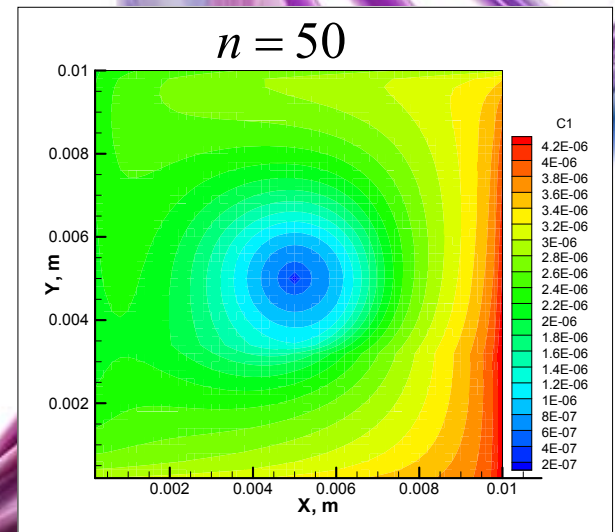
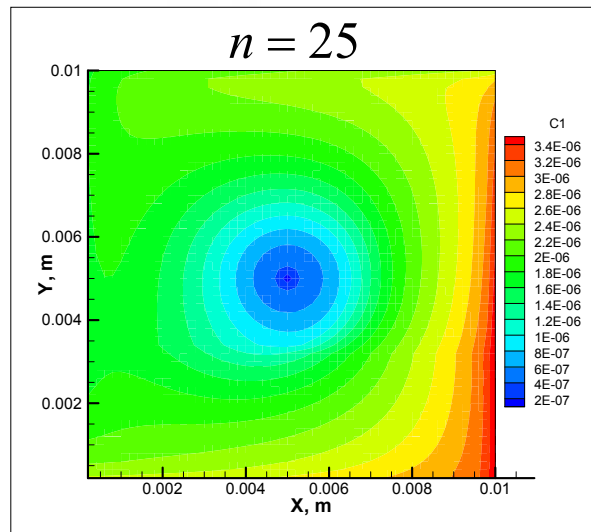
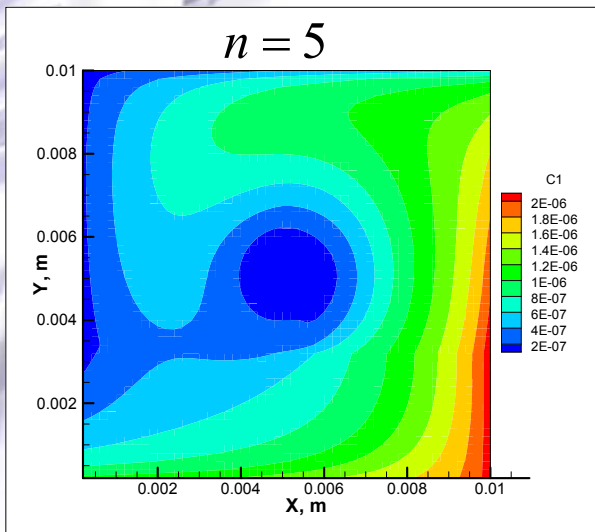
$$D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s}$$

$$k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$



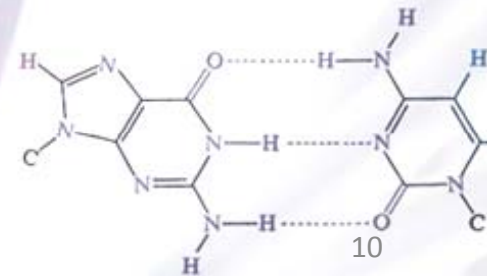
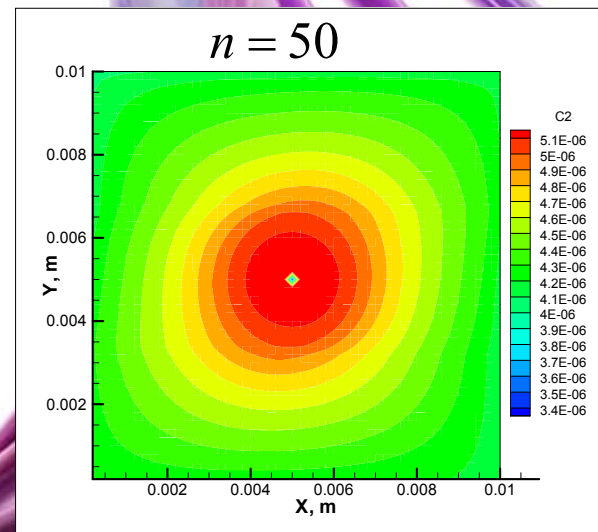
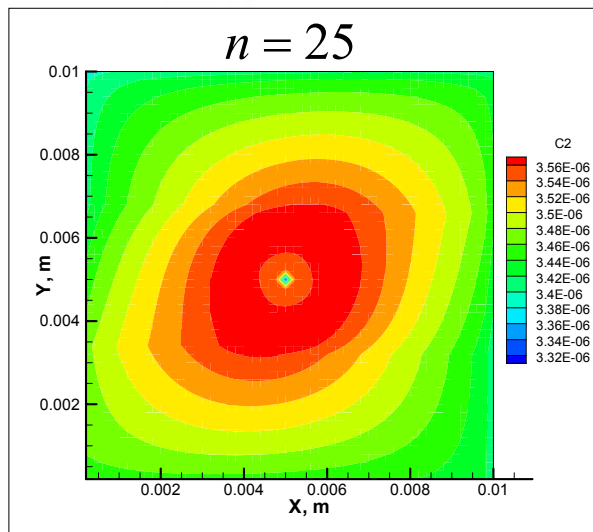
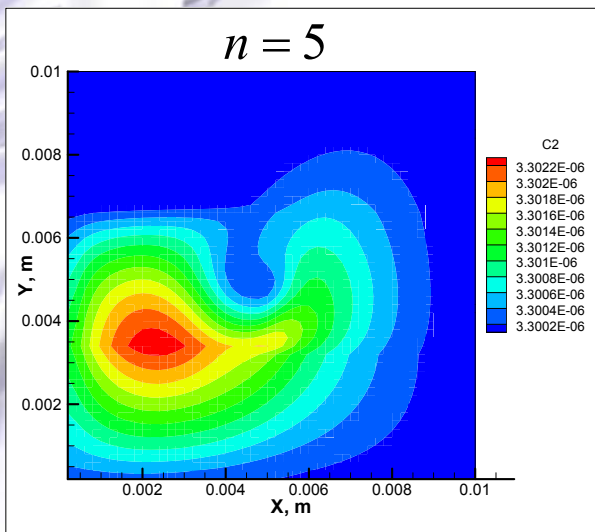
Основные результаты: рост C1

$$D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s}, \quad k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$



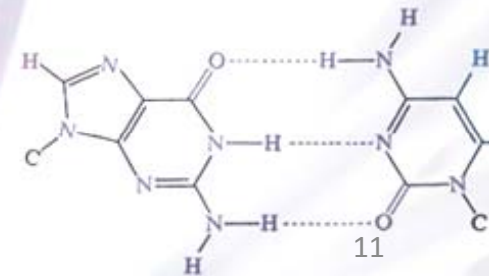
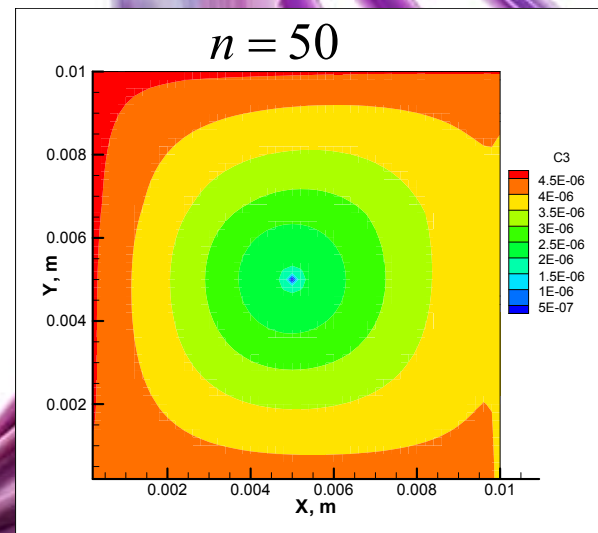
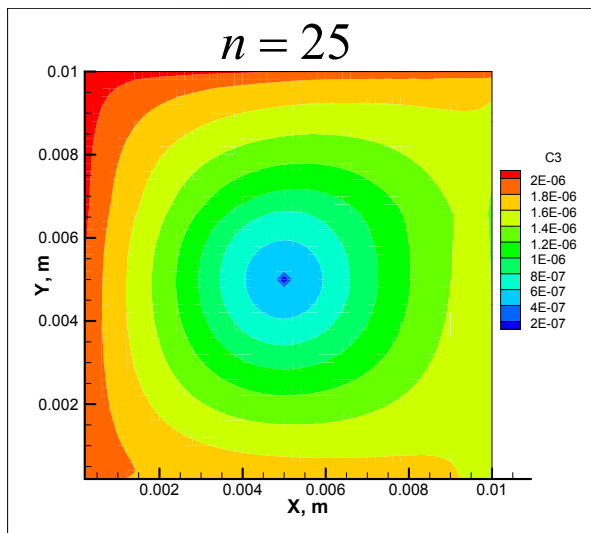
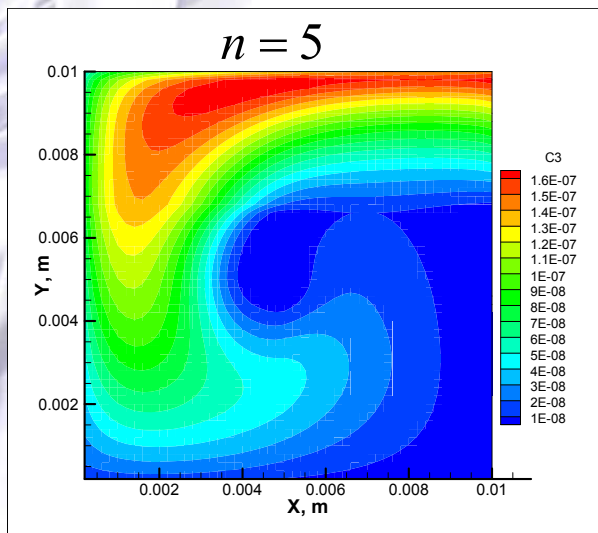
Основные результаты: рост C2

$$D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s}, \quad k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$



Основные результаты: рост C3

$$D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s}, \quad k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$

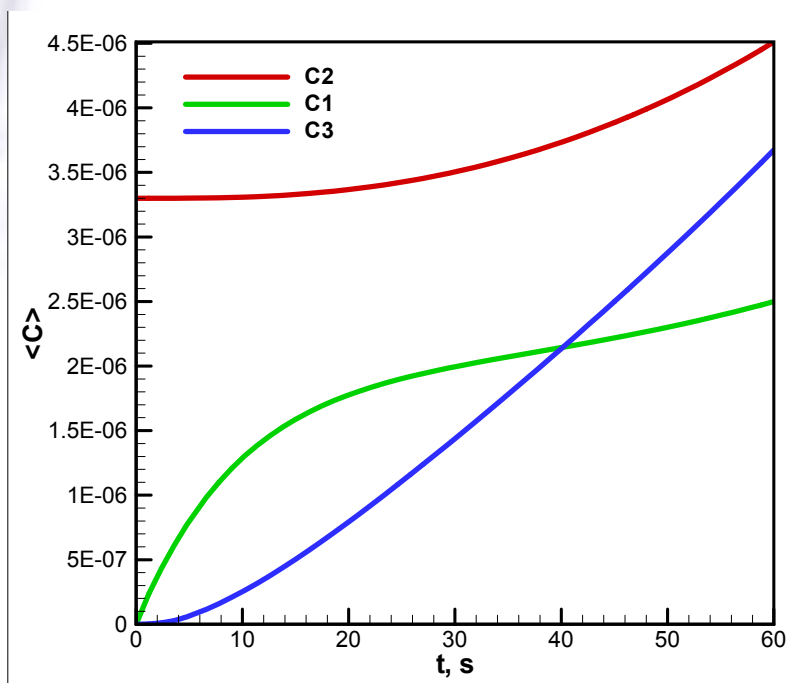


Основные результаты

Графики зависимости $C1$, $C2$, $C3$ от времени при:

$$D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s},$$

$$k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$



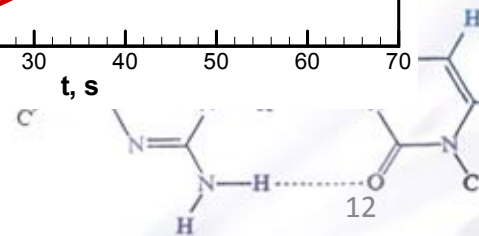
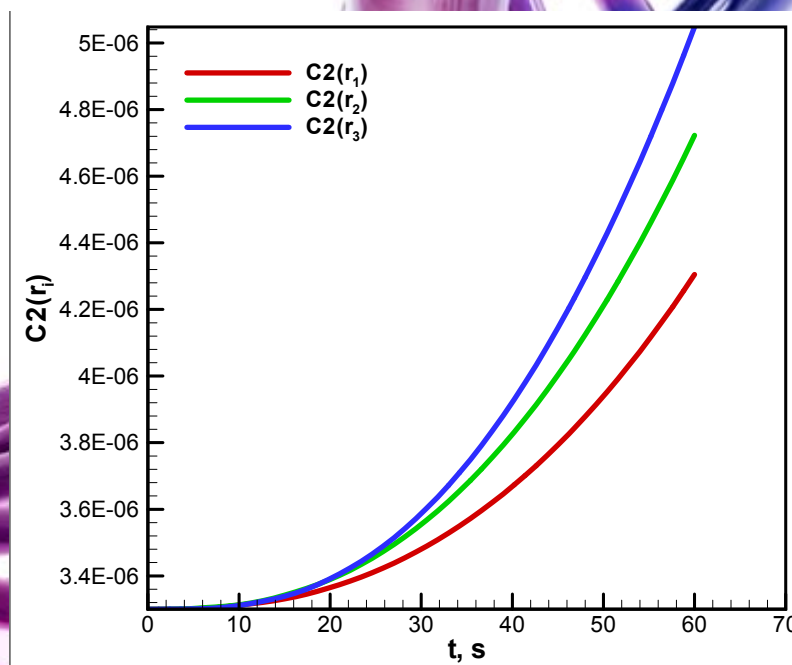
Графики зависимости $C2$ от времени в точках с координатами (см):

$$x = 0.1, y = 0.1: r_1 = 0.57$$

$$x = 0.3, y = 0.3: r_2 = 0.28$$

$$x = 0.5, y = 0.5: r_3 = 0.14$$

$$k = 0.19 \text{ s}^{-1} \quad D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s}$$



Основные результаты

Графики зависимости C_2 от времени при:

$$D = 10^{-2} \text{ m}^2 / \text{s},$$

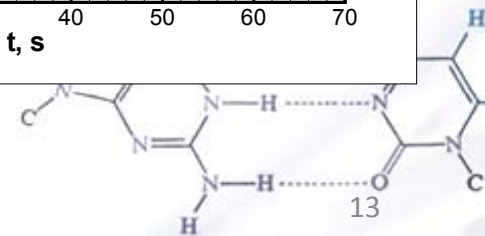
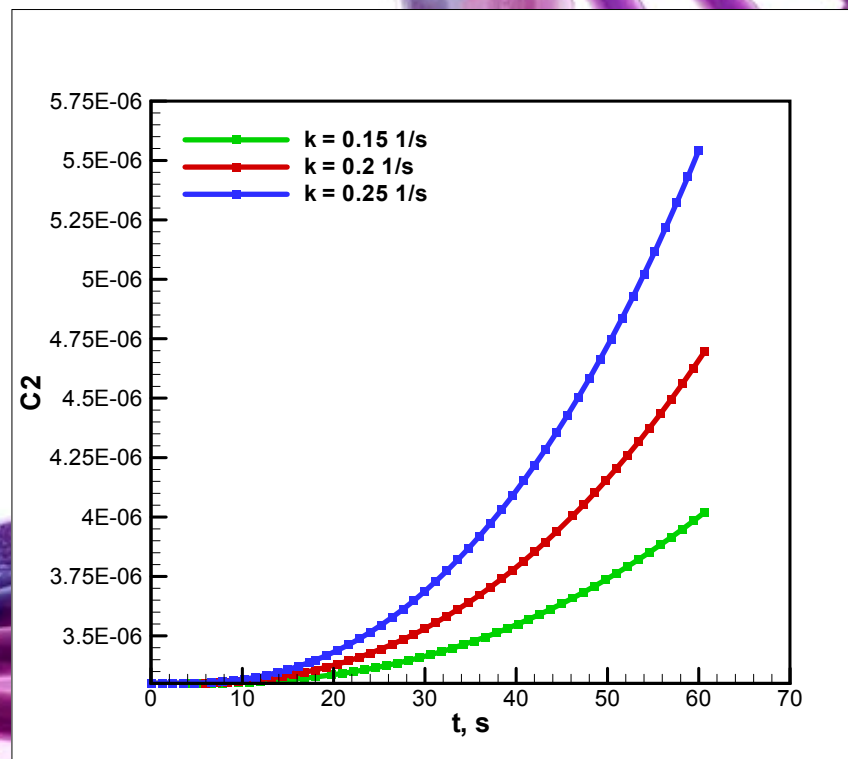
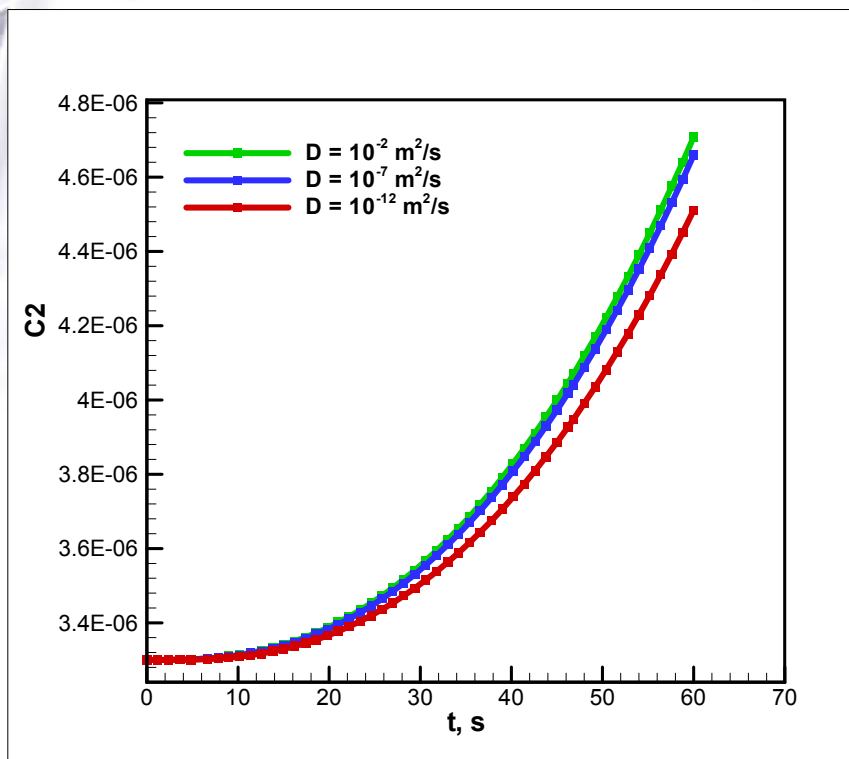
$$D = 10^{-7} \text{ m}^2 / \text{s},$$

$$D = 10^{-12} \text{ m}^2 / \text{s}, \quad k = 0.19 \text{ s}^{-1}$$

$$k = 0.15 \text{ s}^{-1},$$

$$k = 0.2 \text{ s}^{-1},$$

$$k = 0.25 \text{ s}^{-1}, \quad D = 10^{-11} \text{ m}^2 / \text{s},$$



Основные результаты

Графики зависимости C_2 от времени при:

$$Da^C = 2 \cdot 10^{-2}$$

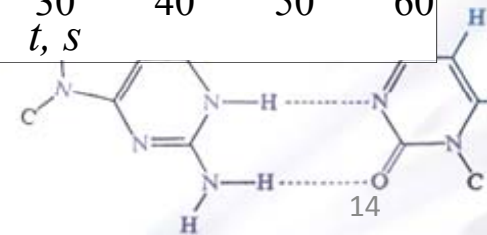
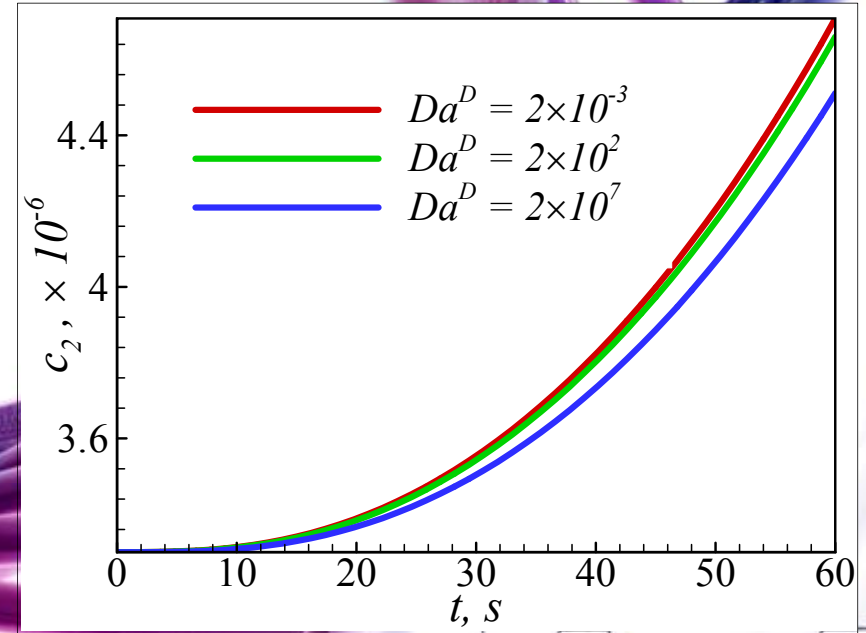
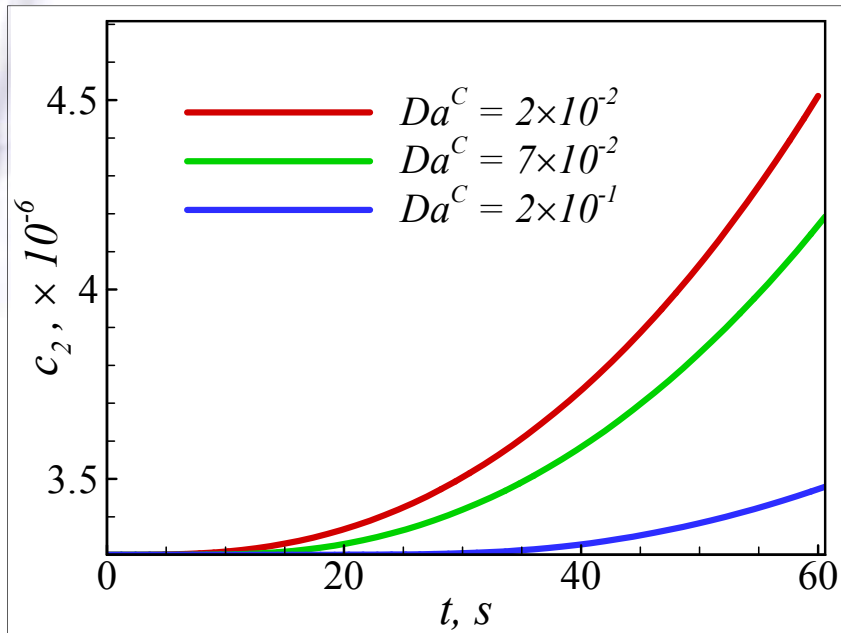
$$Da^C = 7 \cdot 10^{-2}$$

$$Da^C = 2 \cdot 10^{-1}$$

$$Da^D = 2 \cdot 10^{-3}$$

$$Da^D = 2 \cdot 10^2$$

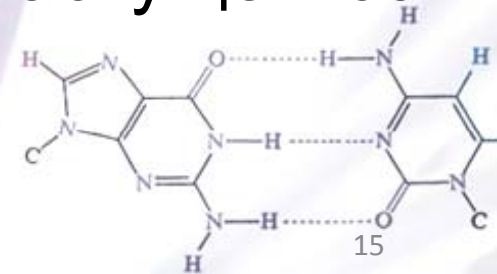
$$Da^D = 2 \cdot 10^7$$



Заключение

В результате численного моделирования:

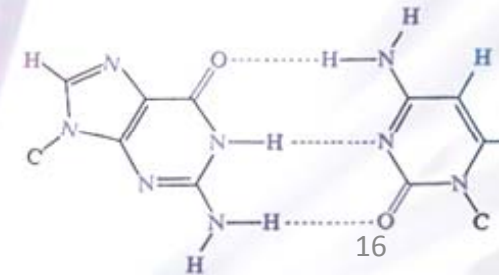
- изучено поведение полей концентрации компонентов реагирующей смеси;
- исследована зависимость выхода реакции от коэффициента диффузии и от характерной скорости реакции, а также от конвективного и диффузионного чисел Дамкелера;
- показано, что при типичных параметрах проведения ПЦР в конвективной ячейке, поля концентраций характеризуются значительной пространственной неоднородностью, растущей со временем.



Список литературы

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yariv E., Ben-Dov G., Dorfman K.D. Polymerase chain reaction in natural convection system: A convection-diffusion-reaction model // *Europhysics Letters*. 2005. Vol. 71. No. 6. pp. 1008–1014.
2. Allen J. W., Kenward M., Dorfman K. D. Coupled flow and reaction during natural convection // *Microfluid Nanofluid*. 2009. No. 6. pp. 121–130
3. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. Москва, 1984, 54с.





Спасибо за внимание

