

УДК 532.51.013.4:536.24.01:537.363

© 1995 г.

М. Ю. ЖУКОВ, О. А. ЦЫВЕНКОВА

## РАСЧЕТ НЕЙТРАЛЬНЫХ КРИВЫХ МОНОТОННОЙ ПОТЕРИ УСТОЙЧИВОСТИ ДЛЯ ЗАДАЧИ КОНВЕКЦИИ В БЕСКОНЕЧНОКОМПОНЕНТНОЙ СМЕСИ

Построена модель Обербека — Буссинеска для концентрационной конвекции в случае бесконечнокомпонентной смеси. Подробно описаны особенности постановки задачи. Для линейной задачи гидродинамической устойчивости строится асимптотика по большому параметру. Удастся существенно упростить задачу и получить уравнения, ранее не встретившиеся в гидродинамической теории устойчивости. Для несамосопряженной краевой задачи получена асимптотика собственных значений и собственных функций. Даны численные результаты, которые, в частности, показали, что спектр краевой задачи является несвязным. Найденные критические значения позволяют решить практически важную задачу улучшения процесса разделения смесей методом изоэлектрического фокусирования.

**Введение.** Построена модель концентрационной гравитационной конвекции в бесконечнокомпонентной смеси при наличии внешнего электрического поля, описывающая процесс изоэлектрофокусирования при наличии рН-градиента [1].

Метод изоэлектрофокусирования успешно используется в биотехнологии и медицине для выделения отдельных компонент из смеси биополимеров, т. е. белков, пептидов, аминокислот и др. Подвижность биополимеров в электрическом поле зависит от рН среды (величина  $pH = -\lg [H^+]$ , где  $[H^+]$  — концентрация ионов водорода в моль/л.), и может обращаться в ноль при некоторых значениях рН, называемых изоэлектрическими точками  $pI$ . Процесс изоэлектрофокусирования проводится в электрофоретической камере, заполненной буферным раствором, роль которого заключается в предварительном создании вдоль камеры монотонного распределения рН — так называемого рН-градиента. Смесь биополимеров, подлежащая фракционированию, помещается в электрофоретическую камеру и ее отдельные компоненты, мигрируя под действием электрического поля, сосредотачиваются в окрестностях тех точек камеры (зонах), где величина рН буферного раствора совпадает со значением  $pI$  соответствующей компоненты смеси. Подробное описание процесса изоэлектрофокусирования содержится, например, в [2] (см. также [1, с. 153—157], где приведен обзор литературы, и [3]).

В практике изоэлектрофокусирования для создания рН-градиента в качестве буферной смеси часто используются биополимеры, схожие по структуре с биополимерами смеси, подлежащей разделению (см. [2, 4] и [5], где описаны иные способы создания рН-градиента). Как правило, количество компонент в смеси настолько велико (порядка тысяч компонент), что такую смесь удобно описывать как бесконечнокомпонентную, вводя непрерывный параметр сорта и характеризуя смесь, в частности подвижность компонент, соответствующими функциями распределения по параметру сорта. При этом нет необходимости в детальной информации о смеси — достаточно знать лишь некоторые особенности поведения таких функций распределения (соответствующий пример см. ниже, а также в [1, 6—10]).

Процесс изоэлектрофокусирования в отличие от изотахофореза и зонального фокусирования [1] позволяет эффективно бороться с диффузионными эффектами, приводящими к размытию зон. В финальной стадии процесса вещества сосредоточены в окрестности изоэлектрических точек  $pI$ , ширина которых определяется шириной внешнего электрического поля и коэффициентом диффузии. Однако очевидно, что такое разбиение смеси на отдельные компоненты приводит к сильной стратификации плотности смеси и делает процесс неустойчивым относительно конвективного перемешивания, способного полностью исказить картину разделения смеси. Подробности экспериментов и описание способов борьбы с конвективным перемешиванием содержится в сборнике [11], посвященном проблемам электрофореза, и статье [12].

В финальной стадии процесса, отвечающей также механическому равновесию, следует рассматривать три возможных типа стратификации плотности: однородное распределение плотности, обусловленное наличием буферного раствора, обеспечивающего электропроводность смеси; слабое неоднородное распределение плотности, вызванное формированием рН-градиента; сильные локальные неоднородности плотности, возникающие в окрестности зон сосредоточения отдельных компонент.

Описанное механическое равновесие исследуется на устойчивость в линейном приближении. Рассмотрение ограничено лишь предельным асимптотическим случаем, когда параметр, характеризующий величину разности потенциалов, стремится к бесконечности.

В работе показано, что существуют такие условия разделения смеси, при которых удастся уменьшить опасность возникновения конвективной неустойчивости и тем самым повысить разрешающую способность метода изоэлектрофокусирования. Наиболее предпочтительным является фокусирование зон в нижней части электрофоретической камеры в градиенте рН, создающем дополнительно равномерную стратификацию плотности смеси. Полученные результаты возможно использовать для создания эффективных методик проведения процесса изоэлектрофореза. Работа является естественным продолжением [3, 6—9], где подробно обсуждаются различные варианты борьбы с конвективными неустойчивостями.

1. Постановка задачи. Механическое равновесие. Будем моделировать электрофоретическую камеру плоским бесконечным горизонтальным слоем, к которому приложена разность потенциалов. Область внутри слоя предполагается заполненной смесью биополимеров, подлежащей разделению, и одновременно создающей градиент рН. Ввиду большого количества компонент смеси характеризуем ее непрерывным параметром сорта  $s$ , а ее физико-химические свойства — соответствующими функциями распределения. В дальнейшем в качестве параметра сорта используем координату соответствующей изоэлектрической точки внутри электрофоретической камеры (см. (2.5)) [1, 6—9]. Система уравнений, описывающая поведение смеси в приближении Обербека — Буссинеска, в безразмерных переменных имеет вид (ср. с [6])

$$\frac{dv}{dt} = -\nabla p + \Delta v - k \int G(s) a(s, x, t) ds, \operatorname{div} v = 0 \quad (1.1)$$

$$P(s) \frac{da(s, x, t)}{dt} + \operatorname{div} i(s, x, t) = 0, -0,5 \leq z \leq 0,5$$

$$i(s, x, t) = -\nabla a(s, x, t) + Ua(s, x, t) \nabla H(s, x), s \in \Gamma$$

Краевые условия, отвечающие твердым непроницаемым для смеси границам, возьмем в форме

$$v = 0, (ik) = 0; z = \mp 0,5 \quad (1.2)$$

Распределение среднего количества вещества в смеси по параметру сорта  $s$  задаем условием

$$\int_{-0,5}^{0,5} a(s, z, t) dz = M(s) \quad (1.3)$$

Здесь  $v(x, t)$  — скорость смеси;  $p(x, t)$  — давление;  $a(s, x, t)$ ,  $i(s, x, t)$ ,  $M(s)$  — распределения по параметру сорта  $s$  концентрации компонент смеси, плотности потока концентрации, среднего количества вещества;  $H(s, x)$  — распределение потенциала внешних сил, возникающих в результате наличия электрического поля, действующих на компоненты сорта  $s$ ;  $\Gamma$  — пространство параметров сорта;  $k$  — орг оси  $z$ , направленной против действия силы тяжести.

Безразмерные распределения по параметру сорта диффузионных аналогов чисел Грасгофа  $G(s)$ , Прандтля  $P(s)$  и параметр  $U$ , характеризующий величину разности потенциалов электрического поля, имеют вид

$$U = \frac{\gamma_* U_*}{d_*}, \quad P(s) = \frac{\mu_*}{d_* \delta(s)}, \quad G(s) = \frac{\beta_* \beta(s) a_* g_* L_*^3}{\mu_*^2}$$

где  $d_*$ ,  $\gamma_*$ ,  $L_*$ ,  $a_*$ ,  $\mu_*$ ,  $g_*$ ,  $\beta_*$ ,  $U_*$  — характерные величины коэффициента диффузии, электрофоретической подвижности, длины электрофоретической камеры, концентраций, вязкости смеси, ускорения силы тяжести, коэффициента концентрационного сжатия и разности потенциалов;  $\beta_* \beta(s)$ ,  $d_* \delta(s)$  — распределение коэффициентов концентрационного сжатия и диффузии по параметру сорта.

Кроме этого, предполагаем отсутствующими поток жидкости и электрический ток вдоль слоя.

Распределение потенциала  $H(s, x)$  выбираем в виде

$$H(s, x) = H(s, z) = -\frac{b(s)}{2} [z - z_0(s)]^2, \quad b(s) > 0, \quad \frac{dz_0(s)}{ds} > 0 \quad (1.4)$$

где  $z_0(s)$  — монотонная (для определенности, возрастающая) функция распределения изоэлектрических точек по параметру сорта [1],  $b(s)$  — функция распределения интенсивности действия силы внешнего поля в окрестности изоэлектрической точки для компоненты сорта  $s$ ; функция  $z_0(s)$  характеризует местоположение точек в слое, в которых вещество сорта  $s$  неподвижно, т. е. моделирует амфотерные свойства компонент.

Выбор  $H(s, z)$  в виде (1.4) в случае  $U \rightarrow \infty$  практически не уменьшает общности задачи — при построении главного члена асимптотики важен лишь характер зависимости функции от  $z$  в окрестности точки  $z = z_0(s)$ . Более того, величина  $b(s)$  при условии  $b(s) = O(1)$  не входит в окончательные ответы.

Решение (1.1)–(1.4), отвечающее механическому равновесию, имеет вид (величина  $p_0(z)$  не выписана ввиду того что в дальнейшем не используется)

$$v_0 = 0, \quad a_0(s, x) = a_0(s, z) = A(s) \exp(UH(s, z)) \quad (1.5)$$

$$A(s) = M(s) \left[ \int_{-0,5}^{0,5} \exp(UH(s, y)) dy \right]^{-1}$$

Функция  $A(s)$  характеризует распределение максимумов равновесной концентрации  $a_0(s, z)$

$$\max_{-1/2 \leq z \leq 1/2} a_0(s, z) = a_0(s, z_0(s)) = A(s) \quad (1.6)$$

2. Асимптотика при  $U \rightarrow \infty$  для линеаризованной задачи. Линеаризуем задачу (1.1)—(1.4) в окрестности механического равновесия (1.5) и разыскиваем решение, периодическое вдоль слоя с периодами  $2\pi/k_1, 2\pi/k_2$

$$\{v, p - p_0, a - a_0\} = \{v_1(z), v_2(z), w(z); q(z), \frac{\theta(s, z) e^{UH(s, z)}}{G(s)}\} e^{\lambda + i(k_1 z_1 + k_2 z_2)} \quad (2.1)$$

где  $v_1, v_2, w, q, \theta$  — амплитуды возмущений механического равновесия;  $\lambda$  — декремент затухания;  $k_1, k_2$  — волновые числа.

Подставляя (2.1) в задачу (1.1)—(1.4), отбрасывая нелинейные члены и исключая величины  $v_1, v_2, q$ , получаем линеаризованную задачу

$$\begin{aligned} \lambda P(s) \theta(s, z) e^{UH(s, z)} + P(s) G(s) A(s) w(z) D e^{UH(s, z)} = \\ = D(e^{UH(s, z)} D \theta(s, z)) - k^2 \theta(s, z) e^{UH(s, z)} \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\lambda (D^2 - k^2) w(z) = (D^2 - k^2)^2 w(z) + k^2 \int_{-0,5}^{0,5} \theta(z, s) e^{UH(s, z)} ds \quad (2.3)$$

$$D = \frac{d}{dz}, \quad k^2 = k_1^2 + k_2^2; \quad w(\pm 0,5) = 0, \quad Dw(\pm 0,5) = 0, \quad D\theta(\pm 0,5) = 0 \quad (2.4)$$

Построим асимптотику задачи (2.2)—(2.4) при  $U \rightarrow \infty$ .

Такое построение существенно упрощается, если выбрать специальным образом параметр сорта  $s$ , который до сих пор не был конкретизирован. Возьмем в качестве параметра сорта величину  $z_0$ , тем самым идентифицируя каждую компоненту смеси координатой точки, в которой она имеет максимум при механическом равновесии (см. (1.6)). Такое возможно, если  $z_0(s)$  — монотонная функция и в каждой точке слоя присутствует вещество сорта  $s$ .

Иными словами, потребуем

$$z_0(s) = s, \quad -0,5 \leq z_0 \leq 0,5, \quad \Gamma = [-0,5, 0,5] \quad (2.5)$$

Интегрируя (2.2) по  $z$  от  $-0,5$  до  $0,5$  с учетом краевых условий (2.4), имеем

$$\begin{aligned} \lambda P(s) \int_{-0,5}^{0,5} \theta(s, z) e^{UH(s, z)} dz + P(s) G(s) A(s) \int_{-0,5}^{0,5} w(z) D e^{UH(s, z)} dz = \\ = -k^2 \int_{-0,5}^{0,5} \theta(z, s) e^{UH(s, z)} dz \end{aligned} \quad (2.6)$$

Полагая в (2.6)  $U \rightarrow \infty$  и используя асимптотическую формулу Лапласа [5, 6], для главного члена асимптотики получаем

$$\lambda P(s) \theta(s, s) - P(s) G(s) A(s) Dw(s) \approx -k^2 \theta(s, s) \quad (2.7)$$

Аналогично, полагая в (2.3)  $U \rightarrow \infty$ , для члена, содержащего интеграл, имеем

$$\int_{-0,5}^{0,5} \theta(z, s) e^{UH(s, z)} ds \approx \theta(z, z) \frac{M(z)}{A(z)} \quad (2.8)$$

Исключая при помощи (2.7) из уравнений (2.3) с учетом (2.8) величину  $\theta(z, z)$ , получаем асимптотическую задачу (2.2)—(2.4) при  $U \rightarrow \infty$

$$\lambda (D^2 - k^2) w = (D^2 - k^2)^2 w + \frac{RF(z) Dw(z)}{P(z) \lambda + k^2} k^2 \quad (2.9)$$

$$\theta(z, z) = \frac{RF(z) Dw(z) A(z)}{P(z) \lambda + k^2 M(z)}$$

$$RF(z) = P(z)G(z)M(z), \quad F(z) = \frac{\beta(z)M(z)}{\delta(z)}, \quad R = g_* a_* \beta_* L_*^2 / (\mu_* d_*)$$

где  $R$  — концентрационный аналог числа Рэлея,  $F(z)$  — функция, характеризующая распределение параметров смеси.

Для веществ, плотность которых больше плотности растворителя, коэффициент концентрационного сжатия  $\beta(z) > 0$  и, следовательно,  $F(z) > 0$ , так как  $\delta(z) > 0$ ,  $M(z) > 0$ .

В случае, когда  $\beta(z) < 0$ , т. е. плотность вещества меньше плотности растворителя, функцию  $F(z)$  можно формально считать положительной, включая знак в параметр  $R$ , т. е. делая замену  $F \rightarrow -F$ ,  $R \rightarrow -R$ .

3. Асимптотика собственных значений при монотонной неустойчивости. **Изоэлектрическое фокусирование  $n$  веществ.** Полагая в (2.9)  $\lambda = 0$ , получаем спектральную задачу для определения критического значения параметра  $R$ , при котором возможно возникновение монотонной неустойчивости

$$(D^2 - k^2)^2 W + RF(z) Dw(z) = 0 \quad (3.1)$$

$$w(\pm 0,5) = 0, \quad Dw(\pm 0,5) = 0 \quad (3.2)$$

Легко показать, что при  $F'(z) < 0$  у спектральной задачи (3.1)—(3.2) нет положительных собственных значений и условие  $F'(z) < 0$  является достаточным критерием устойчивости относительно бесконечно малых возмущений.

Промоделируем финальную стадию процесса разделения  $n$  веществ в слабом рН-градиенте.

Особенный интерес представляет случай, когда  $\delta(s) = \text{const}$ . Тогда, полагая без умаления общности  $\delta(s) = 1$ , имеем  $F(z) = \beta(z)M(z)$ . Фактически это означает, что  $F(z)$  моделирует распределение плотности смеси в механическом равновесии.

Пусть в электрофоретической камере установился слабый рН-градиент и в точках  $z_k$  сфокусировались зоны разделяемых веществ. Предположим, что профиль плотности в этом случае сформировался в виде (см. [1])

$$F(z) = \varepsilon f(z) + \sum_{k=1}^n c_k e^{-Ub_k(z-z_k)^2} \quad (3.3)$$

Здесь  $c_k$  — максимальная величина концентрации разделяемых веществ;  $Ub_k$  — параметры, характеризующие качество разделения;  $z_k$  — координаты центров зон фокусирования;  $\varepsilon f(z)$  — функция, описывающая плотность смеси для созданного рН-градиента;  $\varepsilon$  — параметр, характеризующий слабость рН-градиента.

Функции  $e^{-Ub_k(x-z_k)^2}$ , описывающие распределение фокусируемых веществ имеют тот же вид, что и функция  $a_0$  в (1.5), характеризующая равновесную концентрацию. Фактически моделируется смесь, состоящая из бесконечного числа компонент (амфолитов), формирующих свойства среды и конечного набора разделяемых в этой среде веществ той же природы.

Построим асимптотику для собственных значений спектральной задачи (3.1)—(3.2) в случае (3.3) (см. [9]).

Пусть  $T(z, x)$  — функция Грина, отвечающая оператору

$$L = (D^2 - k^2)^2, \quad \text{Dom } L = \{w \in C^4[-0,5, 0,5] \mid w(\mp 0,5) = Dw(\mp 0,5) = 0\} \quad (3.4)$$

Спектральную задачу (3.1)—(3.2) представим в виде интегрального уравнения

$$u(z) = -R \int_{-0,5}^{0,5} T_z(z, x) F(x) u(x) dx, \quad u \equiv Dw \quad (3.5)$$

Рассмотрим случай, когда  $\varepsilon = 0$ ,  $U \rightarrow \infty$ .

Подставляя  $F(z)$  в (3.5) и используя асимптотическую формулу Лапласа [13], имеем

$$u(z) \approx -R \sum_{j=1}^n T_x(z, z_j) \left( \frac{2\pi}{Ub_j} \right)^{1/2} c_j \mu(z_j) \quad (3.6)$$

Полагая в (3.6)  $z = z_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , получаем алгебраическую систему линейных уравнений для определения асимптотических значений критического параметра  $R_0$

$$u_i \approx -R_0 \left( \frac{2\pi}{U} \right)^{1/2} \sum_{j=1}^n T_x(z_i, z_j) \left( \frac{1}{b_j} \right)^{1/2} c_j \mu_j, \quad u_i = u(z_i), \quad i = 1 \dots n$$

Очевидно, что собственные функции задачи (3.1)–(3.2) при  $\varepsilon = 0$  имеют асимптотику (см. (3.5), (3.6) и краевые условия (3.2))

$$w_0(z) \approx -R_0 \left( \frac{2\pi}{U} \right)^{1/2} \sum_{j=1}^n T(z, z_j) \left( \frac{1}{b_j} \right)^{1/2} c_j \mu_j \quad (3.7)$$

Задачу (3.1)–(3.2) при достаточно малом  $\varepsilon \neq 0$  ( $\varepsilon \ll 1$ ) исследуем методами теории возмущений.

Пусть

$$(D^2 - k^2)^2 w_\varepsilon = -R_\varepsilon \{F_0(z) + \varepsilon f(z)\} Dw_\varepsilon \quad (3.8)$$

$$w_\varepsilon(\pm 0,5) = 0, \quad Dw_\varepsilon(\pm 0,5) = 0, \quad F_0(z) = F(z) \Big|_{\varepsilon=0}$$

Дифференцируя (3.8) по  $\varepsilon$  и полагая  $\varepsilon = 0$ , имеем

$$(D^2 - k^2)^2 \frac{\partial w_\varepsilon}{\partial \varepsilon} + R_0 F_0(z) D \frac{\partial w_\varepsilon}{\partial \varepsilon} = - \frac{\partial R_\varepsilon}{\partial \varepsilon} F_0(z) Dw_0 - R_0 f(z) Dw_0 \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial w_\varepsilon}{\partial \varepsilon}(\pm 0,5) = 0, \quad D \frac{\partial w_\varepsilon}{\partial \varepsilon}(\pm 0,5) = 0$$

Наряду с (3.1), (3.2) рассматриваем сопряженную задачу

$$(D^2 - k^2)^2 v_0 = R_0 D \{F(z) v_0(z)\}, \quad v_0(\pm 0,5) = 0, \quad Dv_0(\pm 0,5) = 0$$

Соответствующее интегральное уравнение будет

$$v_0(z) = -R_0 \int_{-0,5}^{0,5} T_x(z, x) F(x) v_0(x) dx$$

Аналогично соотношениям (3.6), (3.7) имеем

$$v_i \approx -R_0 \left( \frac{2\pi}{U} \right)^{1/2} \sum_{j=1}^n T_x(z_i, z_j) \left( \frac{1}{b_j} \right)^{1/2} c_j \nu_j, \quad i = 1 \dots n \quad (3.10)$$

$$v_0(z) \approx -R_0 \left( \frac{2\pi}{U} \right)^{1/2} \sum_{j=1}^n T_x(z, z_j) \left( \frac{1}{b_j} \right)^{1/2} c_j \nu_j \quad (3.11)$$

Умножая (3.9) на  $v_0(z)$ , т. е. используя условие разрешимости, получаем

$$\frac{\partial R_\varepsilon}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=0} \int_{-0,5}^{0,5} F_0(z) v_0(z) Dw_0(z) dz + R_0 \int_{-0,5}^{0,5} f(z) v_0(z) Dw_0(z) dz = 0$$

$z_1$	$ z_0  = 0$	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4	0,45	0,49
$z_0 > 0$											
-0,49	—	1,928	0,992	0,732	0,643	0,645	0,738	0,997	1,752	5,589	87,96
-0,45	—	2,351	1,039	0,748	0,652	0,651	0,744	1,003	1,763	5,625	88,25
-0,35	—	—	3,632	1,059	0,792	0,742	0,819	1,081	1,864	5,808	89,12
-0,3	—	—	—	1,858	0,986	0,845	0,895	1,151	1,944	5,935	89,68
-0,25	—	—	—	—	1,531	1,033	1,013	1,250	2,051	6,100	90,36
-0,2	—	—	—	—	—	1,533	1,225	1,406	2,209	6,333	91,22
-0,15	—	—	—	—	—	—	1,846	1,708	2,474	6,701	92,34
-0,1	—	—	—	—	—	—	—	2,997	3,101	7,415	93,91
-0,05	—	—	—	—	—	—	—	—	11,06	9,740	96,33
0,0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
0,05	—	0,959	0,861	—	—	—	—	—	—	—	—
0,1	—	0,861	0,495	0,456	0,495	0,650	—	—	—	1,023	0,991
0,15	—	—	0,456	0,366	0,358	0,324	1,614	1,370	1,832	0,733	0,732
0,2	—	—	0,495	0,358	0,321	0,333	0,383	0,473	0,581	0,636	0,643
0,25	—	—	0,650	0,394	0,333	0,322	0,355	0,432	0,547	0,630	0,645
0,3	—	—	—	1,614	0,383	0,355	0,369	0,438	0,572	0,707	0,737
0,35	—	—	—	1,370	0,473	0,432	0,438	0,498	0,662	0,914	0,995
0,4	—	—	—	1,832	0,581	0,547	0,572	0,662	0,876	1,410	1,742
0,45	—	—	1,023	0,733	0,636	0,630	0,707	0,914	1,410	2,794	5,393
0,49	—	—	0,991	0,732	0,643	0,645	0,737	0,995	1,742	5,393	43,95

$z_0 < 0$

0,0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
0,05	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2,351	1,928
0,1	—	—	—	—	—	—	—	3,632	1,331	1,039	0,992
0,15	—	—	—	—	—	—	1,858	1,060	0,835	0,748	0,732
0,2	—	—	—	—	—	1,531	0,986	0,792	0,696	0,652	0,643
0,25	—	—	—	—	1,553	1,033	0,845	0,742	0,682	0,651	0,645
0,3	—	—	—	1,846	1,225	1,013	0,895	0,819	0,770	0,744	0,738
0,35	—	—	2,997	1,708	1,406	1,250	1,151	1,081	1,032	1,003	0,997
0,4	—	11,06	3,101	2,474	2,209	2,051	1,944	1,864	1,804	1,763	1,752
0,45	—	9,740	7,415	6,701	6,333	6,100	5,935	5,808	5,707	5,625	5,589
0,49	—	96,33	93,91	92,34	91,22	90,36	89,68	89,12	88,66	88,25	87,96

Отсюда с учетом вида функций  $F_0(z)$ ,  $f(z)$  и выражений (3.7), (3.11) для  $w_0(z)$ ,  $v_0(z)$  определяем  $\frac{\partial R_\varepsilon}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=0}$  и получаем поправку к критическому числу  $R$  при  $\varepsilon \neq 0$

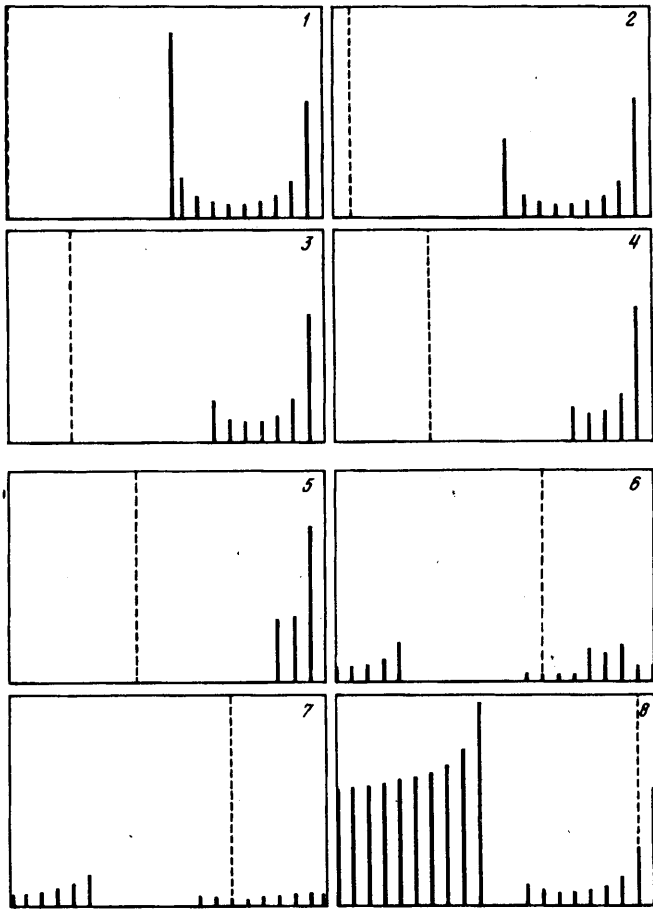
$$R_\varepsilon \approx R_0 + \varepsilon \frac{\partial R_\varepsilon}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=0}$$

В частности, асимптотические формулы используем как начальные приближения при проведении численных расчетов.

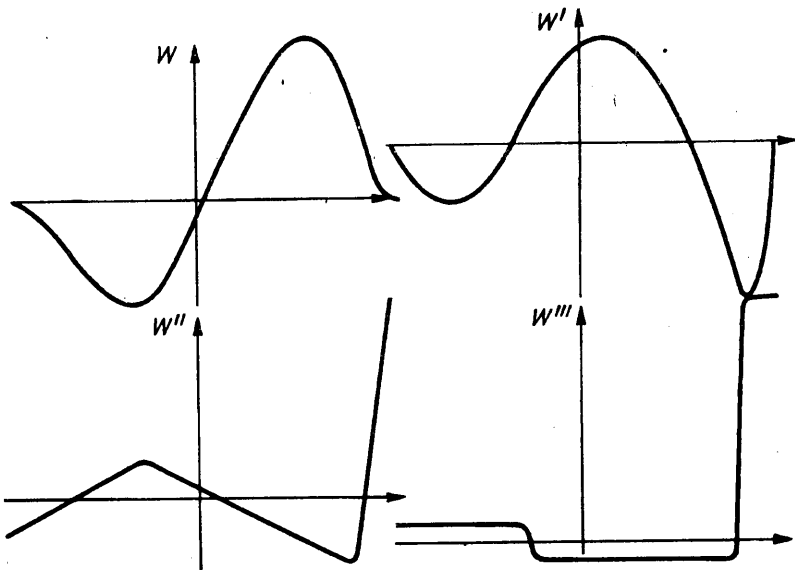
4. Результаты расчетов. Численные исследования проводились для модельной плотности вида (3.3) в случае двух веществ ( $n = 2$ ). Профиль плотности, возникающей при создании рН-градиента, задавался в виде линейной функции

$$f(z) = d_0 + z d_1 \tag{4.1}$$

где  $d_0$ ,  $d_1$  определяются по значениям плотности в точках  $z = \mp 0,5$ .



Фиг. 1



Фиг. 2



Параметры, характеризующие зоны разделяемых веществ, выбирались следующими:

$$c_1 = 1, c_2 = 1, Ub_1 = 2 \cdot 10^4, Ub_2 = 2 \cdot 10^4 \quad (4.2)$$

Критические значения  $R_* \cdot 10^{-4}$  при  $\varepsilon = 0$  приведены в таблице (минусам отвечают отрицательные значения  $R_*$ , а пропускам — отсутствие собственных значений). В результате расчетов выяснилось, что минимум критических значений  $R(k^2)$  достигается при  $k = 0$ , т. е. наиболее опасными для рассматриваемого случая являются длинноволновые монотонные возмущения.

Для удобства интерпретации результатов по данным таблицы строились диаграммы (фиг. 1), позволяющие ответить на вопрос о том, какое расположение зон является наиболее выгодным для предотвращения конвективной неустойчивости.

На каждой диаграмме пунктирной линией изображено положение некоторой фиксированной зоны вещества, а сплошными линиями показано расположение зоны второго вещества. Высота этих сплошных линий пропорциональна  $R_*$ . Таким образом, более высокие линии указывают наиболее благоприятное с точки зрения предотвращения конвекции расположение зоны второго вещества.

Анализ таблицы и диаграмм фиг. 1 позволяет сделать вывод о том, что для параметров (4.2) фокусирование обеих зон в нижней части слоя ( $z < 0$ ) не приводит к возникновению монотонной неустойчивости. В случае, когда одна из зон находится в нижней части слоя ( $z < 0$ ), а другая — в верхней его части ( $z > 0$ ) существует оптимальное расположение зон, наиболее благоприятное с точки зрения предотвращения конвекции.

На фиг. 2 приведен вид функции  $w, Dw, D^2w, D^3w$  в случае, когда  $z_0 = -0,15; z_1 = 0,4$ . Разрывное поведение  $D^3w$  достаточно очевидно — это разрывы третьей производной функции Грина  $T(z, x)$  (см. (3.7)).

Ниже показано влияние функции  $f(z)$  (см. (4.1)) на критическое значение числа  $R$ :

$d_0$	0,03	0,03	0,03	0,04	0,035	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,025	0,029
$d_1$	-0,06	-0,04	-0,01	-0,06	-0,06	-0,09	0,05	0,07	0,10	0,05	0,05	0,05
$R$	2,729	2,896	3,436	4,402	3,083	2,452	2,81	2,83	2,87	2,81	3,126	3,955

Здесь приведены значения  $R \cdot 10^{-4}$  в зависимости от параметров  $d_0, d_1$ , определяющих градиент рН. Устойчивым является профиль с положительным значением величины  $d_1$ . Увеличение этой величины приводит к росту критических чисел.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бабский В. Г., Жуков М. Ю., Юдович В. И. Математическая теория электрофореза. Применение к методам фракционирования биополимеров. Киев: Наук. думка, 1983. 202 с.
2. Righetti П. Изoeлектрическое фокусирование. Теория, методы и применение. М.: Мир, 1986. 398 с.
3. Мышкис А. Д., Бабский В. Г., Жуков М. Ю. и др. Методы решения задач гидромеханики для условий невесомости. Киев: Наук. думка, 1992. 590 с.
4. Righetti P. G. Immobilized pH gradients: Theory and methodology. Amsterdam, etc.: Elsevier; 1990. 397 p.
5. Троцкий Г. В., Ажицкий Г. Ю. Изoeлектрическое фокусирование белков в самоорганизующихся и искусственных рН-градиентах. Киев: Наук. думка, 1984. 219 с.

6. Жуков М. Ю., Цыбенкова О. А. Численное исследование влияния зоны вещества на концентрационную конвекцию при изозлектрофокусировании//Космическая наука и техника. Киев: Нук. думка, 1989. Вып. 4. С. 30—35.
7. Жуков М. Ю., Цыбенкова О. А. Ветвление решений, расчет и асимптотика нейтральных кривых монотонной потери устойчивости в задаче о концентрационной конвекции в электрическом поле//Изв. РАН. МЖГ. 1994. № 5. С. 150—157.
8. Жуков М. Ю., Цыбенкова О. А. Численное исследование вторичных режимов концентрационной конвекции в задаче об электрофорезе при высоких напряжениях. Ростов-на-Дону, 1994, 78 с. Деп. в ВИНТИ, № 333.
9. Жуков М. Ю., Сазонов Л. И. Асимптотика собственных чисел для краевой задачи с  $\delta$ -образными коэффициентами. Ростов-на-Дону, 1993, 29 с. Деп. в ВИНТИ, № 1231.
10. Жуков М. Ю. Разделение бесконечнокомпонентных смесей электрическим полем//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1994. Т. 34. № 4. С. 576—583.
11. Теория и практика ультрацентрифугирования и электрофореза//Молекулярная биология. Киев: Наук. думка, 1984. Вып. 36. 86 с.
12. Азимбаева Г. Т., Мусамбеков К. Б., Пасечник В. А., Шишов А. К. Исследование свойств алмалитов — амфолитов — носителей для изозлектрофокусирования//Космическая наука и техника. Киев: Наук. думка, 1989. Вып. 4. С. 20—23.
13. Федорюк М. В. Метод перевала. М.: Наука, 1977. 368 с.

Ростов-на-Дону

Поступила в редакцию  
27.IV.1994