

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ «АНОМАЛЬНЫХ» (НЕГАУССОВСКИХ) РЕЖИМОВ ЗАДАЧИ ИЭФ: АСИМПТОТИКА

Сахарова Л.В.

Филиал ФГОУ ВПО «Морская Государственная Академия имени адмирала
Ф.Ф.Ушакова» в г. Ростове-на-Дону
Кафедра общенаучных дисциплин
Россия, 344006, г. Ростов-на-Дону, ул. Седова, 8, корпус 3,
Тел/ факс: (863) 2633-571
E-mail: L_Sakharova@mail.ru

Построено асимптотическое решение «аномальных» режимов задачи математического моделирования изоэлектрического фокусирования (ИЭФ) амфолитов в равновесных градиентах pH . При достижении некоторой критической величины плотности тока J классические гауссовские кривые профилей концентраций амфолитов деформируются. На их вершинах формируются «плато», расширяющиеся по мере увеличения плотности тока. Исследование различных систем ИЭФ показало устойчивый характер деформаций и очевидную трансформацию гауссовского распределения в некоторое новое «платообразное» (отличное от стандартных бета-, гамма, Фишера и пр.). Графический анализ полученных профилей позволил автору выдвинуть гипотезу: полученное распределение является, по крайней мере, суперпозицией экспонент с отрицательными четными степенями переменной x в показателе; асимметрия профилей для неравномерных распределений обусловлена наличием в показателе нечетных степеней.

Гипотеза была подтверждена построением асимптотического решения на основе метода перевала. В окрестности изоэлектрической точки k -го амфолита x_k асимптотика его аналитической концентрации имеет вид:

$$\xi_k(x) = a_0 \frac{\varphi_k(\psi)}{\varphi_k(\psi_k)} \exp \left\{ -\frac{(x-x_k)^2}{2\sigma^2} - \sum_{n=3}^{\infty} (\lambda J)^{n-2} k_n \frac{(x-x_k)^n}{n!} \right\}, \quad \sigma = \frac{m_k}{\sqrt{2\pi} a_0}, \quad H = k_w \cdot e^\psi,$$
$$k_n = \frac{(1+\delta_k)^{n-2}}{\mu_k^{n-2} a_0^{n-2}} \cdot \frac{2\pi}{m_k^2} \sum_{l=0}^{n-2} \theta_{k+1}^l \theta_{k-1}^{n-l-1}, \quad \varphi_k(\psi) = \delta_k + ch(\psi - \psi_k), \quad \theta_k = \frac{\varphi_k'(\psi)}{\varphi_k(\psi)},$$

где H – концентрации ионов водорода: a_0 – начальная концентрация смеси амфолитов, m_k – начальная концентрация k -го амфолита, $\lambda = F/RT$ – стандартный электрохимический параметр, δ_k , μ_k , ψ_k – известные параметры системы ИЭФ, определяемые на основе констант диссоциации и коэффициентов подвижности амфолитов. Для равномерного распределения параметров в показателе экспоненты присутствуют лишь слагаемые с четными степенями, и, следовательно, асимметрия профилей отсутствует.

На основе построенной асимптотической формулы, а также полученной ранее асимптотики методом касательных, был получен критерий выхода системы в «аномальный» режим. Критерий имеет вид неравенства для определения критической плотности тока через известные параметры рассматриваемой системы.