

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 004.942

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ВОЗНИКНОВЕНИЯ «НЕГАУССОВСКИХ» РЕЖИМОВ ПРИ ЧИСЛЕННОМ ИНТЕГРИРОВАНИИ ЗАДАЧИ ИЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФОКУСИРОВАНИЯ

Л.В. САХАРОВА

(Филиал Морской государственной академии имени адмирала Ф.Ф. Ушакова в г. Ростове-на-Дону)

Проведен математический анализ проблемы возникновения так называемых «негауссовских» режимов при численном решении интегро-дифференциальной задачи изoeлектрического фокусирования. В результате аналитического преобразования задачи, составления оптимизационных алгоритмов и численного асимптотического тестирования установлено, что «негауссовские» режимы являются свойством исходной математической задачи, а не результатом накопления вычислительной погрешности.

Ключевые слова: математическое моделирование, краевая задача, «негауссовские» режимы, гауссовское распределение, оптимизационный алгоритм.

Введение. Гауссовское (нормальное) распределение является одним из важнейших и наиболее часто встречающихся распределений в естественных науках. Теория гауссовского распределения лежит в основе математической теории изoeлектрического фокусирования (ИЭФ) – эффективного и универсального метода фракционирования и анализа белков [1]. Практика подтверждает, что гауссовское распределение применимо к широкому классу так называемых амфолитов-носителей, т. е. амфотерных кислот с высокой буферной емкостью. Распределение концентраций компонент смеси имеет гауссовский вид:

$$C = C_0 \exp(-pEx^2 / 2D),$$

где C – концентрация; E – напряженность поля; D – коэффициент диффузии; p – градиент электрофоретической подвижности амфолита, $p = -\frac{du}{dx}$.

Гауссовское распределение концентраций амфолитов многими зарубежными авторами было получено при компьютерном моделировании ИЭФ [2 – 4], а также искажение гауссовского распределения (рис. 1) [5 – 7].

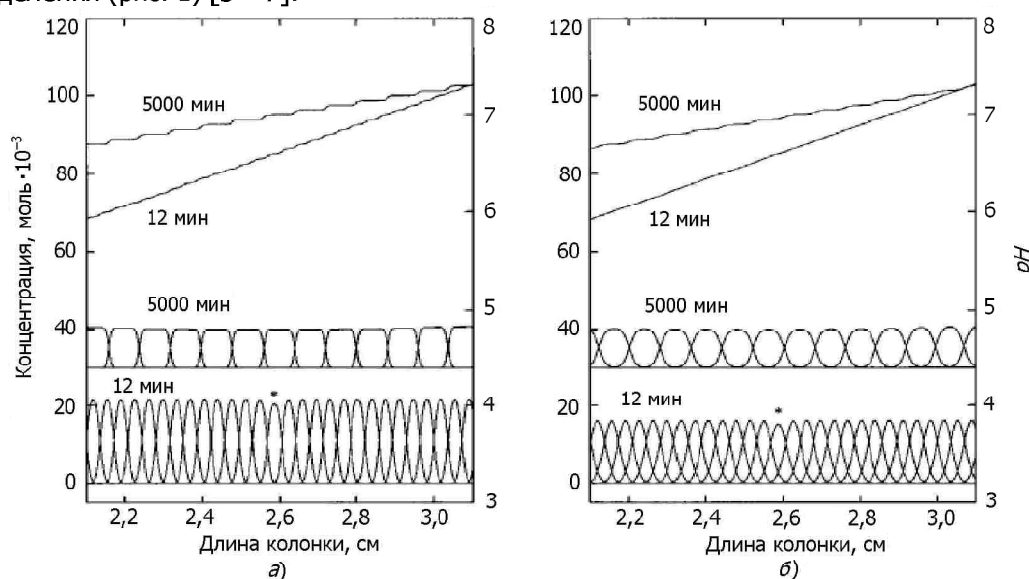


Рис. 1. Негауссовские (а) и классические гауссовские режимы (б) [6]