АКУСТИКА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА

УДК 517.958; 535.4

О РЕШЕНИИ СКАЛЯРНОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ НА ТЕЛЕ ВБЛИЗИ ПЛОСКОСТИ МЕТОДОМ АНТЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА

В. В. Кравцов, П. К. Сенаторов

(кафедра математики)

Пусть в полупространстве D^+, границей которого является плоскость Σ, располагается тело D, ограниченное замкнутой поверхностью S. На поверхность S падает скалярная волна $u_0(M)$.

Обозначим через $U_0(M)$ решение задачи дифракции волны $u_0(M)$ на плоскости Σ. Полное поле в области $D^+\setminus D$ представим в виде $U_0(M)+u(M)$. Тогда для определения рассеянного поля $u(M)$ получим следующую краевую задачу:

найти функцию $u(M)$, удовлетворяющую уравнению Гельмгольца

$$\Delta u+k^2u=0 \tag{1}$$

в области $D^+\setminus D$, граничным условиям на поверхностях Σ и S:

$$a_1\frac{\partial u}{\partial n}+b_1u|_S=f(M)|_S, \tag{2}$$

$$a_2\frac{\partial u}{\partial n}+b_2u|_\Sigma=0, \tag{3}$$

где $\mathbf{n}$ — нормаль соответствующей поверхности, a_1, b_1, a_2, b_2 — постоянные, $f(M)|_S=-a_1\dfrac{\partial U_0}{\partial n}-b_1U_0|_S$, и условию излучения в бесконечности:

$$\frac{\partial u}{\partial r}-ikr=o\left(\frac{1}{r}\right) \quad \text{при} \quad r\to\infty. \tag{4}$$

В дальнейшем будем считать, что поставленная задача (1)—(4) имеет при этом единственное классическое решение.

Для построения решения задачи (1)—(4) используем метод антенных потенциалов [1]. Пусть $G(M,\ P)$ есть функция Грина уравнения Гельмгольца в D^+, удовлетворяющая граничному условию (3) и условию излучения (4). Решение задачи (1)—(4) будем искать в виде антенного потенциала:

$$u(M)=\int\limits_C G(M,\ P)\,\mu(P)\,dl_P, \tag{5}$$

где носителем C является отрезок кривой класса A, лежащий внутри D (см. [1]), а $\mu(P)$ — неизвестная плотность потенциала. Заметим, что антенный потенциал (5) удовлетворяет условиям (1), (3) и (4). Аналогично тому, как это сделано в [1], нетрудно доказать следующую теорему.

Теорема. Пусть $f(M)\in L_2(S)$. Для любого $\varepsilon>0$ существует непрерывная на C функция $\mu(P)$ такая, что

$$\left\|f(M)-\int\limits_C\left(a_1\frac{\partial}{\partial n}+b_1\right)G(M,\ P)\,\mu(P)\,dl_P\right\|^2_{L_2(S)}\leqslant\varepsilon.$$

Эта теорема обеспечивает приближение антенным потенциалом (5) граничных условий (2). Отсюда следует также, в силу устойчивости решения задачи (1)—(4), что антенный потенциал (5) в любой замкнутой подобласти $D^+\setminus D$ дает равномерное приближение решения краевой задачи (1)—(4). Это же означает, что мы получаем и приближение различных характеристик рассеянного поля (диаграмма направленности, рассеянная мощность и др.).

Таким образом, трехмерная краевая задача (1)—(4) сводится к задаче приближения заданной функции антенным потенциалом.

Для определения плотности $\mu(P)$ антенного потенциала (5), наилучшим образом в $L_2(S)$ приближающего граничные условия (2), удобнее всего решать уравнение Эйлера для функционала

$$\Phi[\mu] = \left\| f(M) - \int\limits_C \left(a_1 \frac{\partial}{\partial n} + b_1 \right) G(M, P)\, \mu(P)\, dl_P \right\|^2_{L_2(S)}. \tag{6}$$

Уравнением Эйлера для функционала (6) будет интегральное уравнение Фредгольма первого рода, для решения которого следует применять метод регуляризации А. Н. Тихонова. Поэтому проще метод регуляризации сразу же использовать для нахождения минимума функционала (6) и определять $\mu(P)$ как экстремаль сглаживающего функционала

$$M_\alpha[\mu] = \Phi[\mu] + \alpha \left\{ \|\mu\|^2_{L_2(C)} + \left\| \frac{d\mu}{dl} \right\|^2_{L_2(C)} \right\}. \tag{7}$$

Уравнением Эйлера для функционала (7) является интегро-дифференциальное уравнение второго рода, численное решение которого на ЭВМ трудностей не вызывает. Решается оно стандартным образом путем сведения его к системе линейных алгебраических уравнений с квадратной матрицей.

Численное решение задачи дифракции на теле вблизи плоскости проводилось для сферы и эллипсоида. Рассматривались случаи рассеяния плоской и сферической волн $u_0(M)$. Расстояние от тела до плоскости варьировалось в широких пределах.

В качестве контура C был взят отрезок винтовой линии. Аппроксимация контура проводилась по 11 его точкам. При этом сравнительно малом числе точек в случае граничных условий Дирихле на сфере была достигнута невязка в удовлетворении граничных условий порядка 10% от величины поля падающей волны.

Для иллюстрации на рис. 1—3 приводятся амплитудные диаграммы направленности рассеянного поля для некоторых случаев рассеяния плоской и сферической волн и различного взаимного расположения тела и плоскости. Амплитуда диаграм-

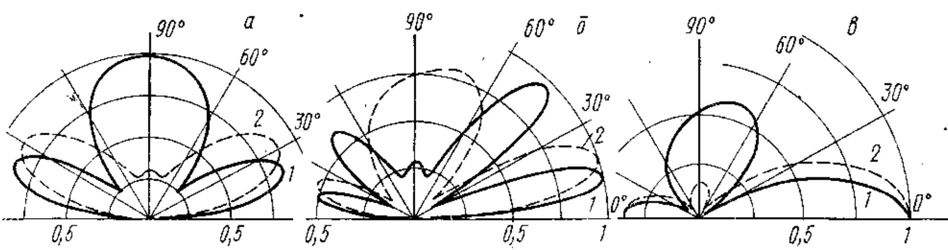

Рис. 1. Дифракция на сфере $x^2+y^2+z^2=1$; *а*: плоскость $x=-5$, $k=1$, плоская волна падает нормально к плоскости, на сфере и плоскости — граничное условие Дирихле; *б*: плоскость $x=-3{,}5$, $k=1$, плоская волна падает под углом $\pi/4$ к плоскости, на сфере и плоскости — граничное условие Дирихле; *в*: плоскость $x=-3$, $k=1$, точечный источник (0, 0, 10), на сфере — граничное условие Дирихле, на плоскости — граничное условие Неймана

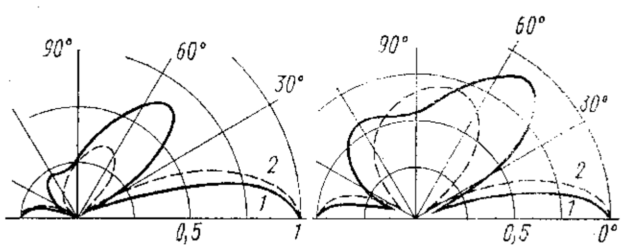

Рис. 2. Дифракция на эллипсоиде $x^2+y^2+z^2/4=1$, плоскость $x=-3{,}5$, плоская волна распространяется вдоль плоскости, на эллипсоиде — граничное условие Дирихле, на плоскости — граничное условие Неймана

Рис. 3. Дифракция на сфере $x^2+y^2+z^2=1$, плоскость $x=-3{,}5$, плоская волна распространяется вдоль плоскости, на сфере — граничное условие Дирихле, на плоскости — граничное условие Неймана мы направленности нормирована на единицу в максимальном значении. Во всех случаях $k=1$, а уравнение плоскости имеет вид $x=x_0$, плоская волна распространяется параллельно плоскости $y=0$, в случае сферической волны источник расположен в той же плоскости $y=0$. На всех рисунках кривая *1* является сечением диаграммы плоскостью $y=0$, кривая *2* — сечением диаграммы плоскостью $y=x$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Кравцов В. В. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15, Вычислит. матем. и кибернетика. 1977. № 2. С. 78—81.

Поступила в редакцию 25.11.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27. № 5

УДК 539.196.3; 547.466; 547.962:538.955

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДЫ С АМИНОКИСЛОТАМИ И БЕЛКАМИ, ИЗУЧЕННОЕ МЕТОДАМИ ЯМР-РЕЛАКСАЦИИ

Н. Г. Вострикова, В. П. Денисов, Ю. М. Петрусевич, О. П. Ревокатов

(кафедра молекулярной физики)

Взаимодействие в системе белок — вода, интенсивно исследующееся многими авторами [1], в последнее время вызывает все больший интерес. Молекулярный механизм этого взаимодействия до сих пор еще недостаточно изучен.

Известно, что в растворе биополимера часть воды связана с его поверхностью, в результате чего ее молекулярное движение заторможено. Различают фракции свободной воды с невозмущенным временем вращательной корреляции молекул $\tau_1^{\text{вр}}$ и связанной воды, время корреляции которой увеличено из-за взаимодействия с белком. Кроме того, было показано [1, 2], что связанная вода не может рассматриваться как единая фракция, а состоит как минимум из двух компонент, обладающих различными временами корреляции. Эти фракции можно характеризовать как прочно связанную воду (обладающую наибольшим временем корреляции $\tau_3^{\text{вр}}$) и слабо связанную воду с $\tau_2^{\text{вр}}$.

Скорости спин-решеточной (R_1) и спин-спиновой (R_2) магнитной релаксации протонов i-й фракции даются выражениями [3, 4]

$$R_1^i \equiv \frac{1}{T_1^i} = M\left[\frac{\tau_i}{1+\omega^2\tau_i^2} + \frac{4\tau_i}{1+4\omega^2\tau_i^2}\right],$$

$$R_2^i \equiv \frac{1}{T_2^i} = M\left[1,5\tau_i + \frac{2,5\tau_i}{1+\omega^2\tau_i^2} + \frac{\tau_i}{1+4\omega^2\tau_i^2}\right],$$

где M — второй момент диполь-дипольного взаимодействия протонов воды, ω — резонансная частота, τ_i — эффективное время корреляции молекулы i-й фракции, равное [5, 6]

$$\tau_i = \tau_i^{\text{вр}} \cdot \tau_i^{\text{ж}}/(\tau_i^{\text{вр}} + \tau_i^{\text{ж}}),$$

где $\tau_i^{\text{ж}}$ — среднее время жизни молекулы в i-й фракции.

В растворе происходит быстрый протонный и молекулярный обмен между всеми фракциями воды, в результате чего в спектре ЯМР наблюдается лишь одна линия воды, скорости релаксации которой [7]

$$R_1 = \Sigma\, q_i R_1^i; \quad R_2 = \Sigma\, q_i R_2^i,$$

где q_i — относительная заселенность i-й фракции.

В настоящее время нет единого мнения о том, какие взаимодействия воды с белком определяют принадлежность воды к каждой из фракций. Обычно считают, что слабо связанная вода состоит из молекул, взаимодействующих с полярными аминокислотными остатками на поверхности белка. Прочно связанной считают воду, молекулы которой не вращаются относительно белка. Воду, взаимодействующую с заряженными остатками, относят как к одной, так и к другой фракции.

Цель данной работы — исследование зависимости скоростей релаксации растворов белков и аминокислот от величины заряда на их поверхности, которая определяется заданным значением pH раствора.