

- [19] Huston A. L., Reimann C. T.//J. Chem. Phys. 1991. 149, N 3. P. 401.
[20] Левшин Л. В., Рыжиков Б. Д., Савельев А. С.//Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1974. 15, № 5. С. 530.

Поступила в редакцию
18.10.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 3

АКУСТИКА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА

УДК 534.222

НЕЛИНЕЙНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ ШИРОКОПОЛОСНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ В ДИССИПАТИВНОЙ СРЕДЕ

А. А. Сухоруков
(кафедра акустики).

Исследуется распространение в вязкой нелинейной среде акустических сигналов, содержащих небольшое число осцилляций давления. Найдены точные аналитические решения уравнения Бюргерса, описывающие эволюцию волновых пакетов S - и N -типа. Проследжены этапы формирования и рассасывания ударных фронтов с последующей трансформацией волнового пакета в автомоделный биполярный импульс.

1. Введение

В настоящей работе рассматривается эволюция в нелинейной диссипативной среде широкополосных акустических сигналов, представляющих собой волновые пакеты с небольшим числом осцилляций давления. В предельных случаях такие сигналы представляют собой биполярные возмущения. Малопериодные акустические импульсы, возбуждаемые различными способами, например с помощью пьезоэлементов, взрывами или ударами, достаточно часто встречаются на практике, и поэтому исследование их поведения в нелинейной среде представляет значительный интерес. В частности, последовательности биполярных импульсов применяются в акустической микроскопии и ультразвуковой медицине.

Теория нелинейного распространения малопериодных сигналов в вязкой среде строится с помощью решения уравнения Бюргерса [1—4]. Большинство работ, посвященных решению уравнения Бюргерса, относится к исследованию нелинейных искажений синусоидальных (гармонических) волн. Однако очевидно, что поведение малопериодных сигналов должно быть в значительной степени другим. Действительно, на такие возмущения вязкое трение влияет двояко: 1) диссипация высокочастотных спектральных компонент определяет конечную ширину ударного фронта и темпы рассасывания фронта при последующем распространении волны и 2) диссипация низкочастотных компонент, проявляющаяся на больших расстояниях, приводит к расплыванию сигнала как целого.

В настоящей работе выбран путь нахождения точных аналитических решений уравнения Бюргерса для малопериодных сигналов. Такая возможность представляется в связи с существованием замены Хопфа—Коула [5, 6], которая позволяет найти общее решение уравнения Бюргерса через квадратуры при произвольном граничном условии. Можно вычислить квадратуры (интегралы) с помощью метода перевала [1, 3] или в случае подходящего начального профиля представить

их в виде достаточно простых аналитических формул. Что касается метода перевала, то он несет определенную ошибку как любой асимптотический метод и, кроме того, его использование для малопериодных сигналов затруднительно из-за необходимости анализа нескольких точек перевала с учетом их слияния.

Точные аналитические решения уравнения Бюргерса, известные в литературе, описывают, как правило, лишь рассасывание ударных фронтов, а важный этап образования фронтов не охватывается соответствующими выражениями. Поэтому задача состояла в нахождении точных аналитических решений, которые описывали бы как первый этап — формирование ударных фронтов, так и второй — их рассасывание, и третий — взаимодействие фронтов и распыление сигнала в целом. Ниже рассматривается нелинейное распространение сигналов, состоящих из нескольких N - или S -импульсов при разных значениях коэффициента диффузии в уравнении Бюргерса. Полученные аналитические выражения позволяют проследить все этапы нелинейной эволюции малопериодного сигнала. На последнем этапе в результате процесса распыления профиль возмущения становится автомодельным, соответствующим одиночному N - или S -импульсу.

2. Решение уравнения Бюргерса для волновых пакетов

Распространение акустических возмущений в вязкой среде с квадратичной нелинейностью, как известно, описывается уравнением Бюргерса, которое в безразмерных переменных имеет вид [1]

$$\frac{\partial V}{\partial z} = V \frac{\partial V}{\partial \theta} + \Gamma \frac{\partial^2 V}{\partial \theta^2}, \quad (1)$$

где $V = u/u_0$ — нормированный профиль волны, $\theta = \omega\tau$, $\tau = t - z/c_0$, $\Gamma = \omega b / (2\varepsilon\rho_0 c_0 u_0)$, $z = \varepsilon\omega u_0 x / c_0^2$, ω — характерная частота сигнала, u_0 — характерная амплитуда колебательной скорости, b — диссипативный коэффициент, ρ_0 — равновесная плотность, c_0 — скорость звука, ε — нелинейный параметр.

Уравнение (1) необходимо решать, задавая граничное условие при $z=0$:

$$V(\theta, z=0) = V_0(\theta). \quad (2)$$

Большинство работ, посвященных решению уравнения Бюргерса, относится к исследованию нелинейных искажений синусоидальных (гармонических) волн. В то же время на практике начали применяться акустические сигналы, содержащие всего несколько осцилляций давления. Можно предложить несколько вариантов задания коротких сигналов. Например, представляет интерес рассмотреть волновые пакеты, составленные из биполярных импульсов

$$V_0 = \sum_{j=1}^p [2V_{0j}(\theta + a_j)/(1 + (\theta + a_j)^2)], \quad (3a)$$

$$V_0 = \sum_{j=1}^p \left[\frac{-2V_{0j}(\theta + a_j) \exp\{-(\theta + a_j)^2\}}{g_j + \exp\{-\theta + a_j\}^2} \right]. \quad (3b)$$

Сигнал (3a) представляет собой серию из биполярных импульсов S -типа, разнесенных во времени на величины a_j и имеющих парциальные амплитуды V_{0j} . Возмущение (3b) составлено из следующих друг

за другом биполярных импульсов N -типа, где g_j — константы. Очевидно, что, меняя число импульсов p , их парциальные амплитуды V_{0j} и временные сдвиги a_j , можно промоделировать с хорошей точностью достаточно произвольный профиль волнового пакета с нулевой площадью $\int V d\theta = 0$. Нетрудно также сконструировать волновой пакет из совокупности биполярных импульсов разного типа, сложив выражения (3а) и (3б).

В настоящее время разработаны методы прямого численного интегрирования уравнения Бюргера (1). Однако в ряде случаев удается получить точные аналитические решения, используя переход от (1) с помощью замены Хопфа—Коула [1]

$$V = 2\Gamma \frac{\partial}{\partial \theta} \ln U \quad (4)$$

к линейному уравнению типа уравнения теплопроводности, или диффузии

$$\frac{\partial U}{\partial z} = \Gamma \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} \quad (5)$$

С учетом граничного условия (2) можно записать решение уравнения (5) в следующей интегральной форме:

$$U = \frac{1}{(4\pi\Gamma z)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} U_0(\theta_2) \exp\left[-\frac{(\theta - \theta_2)^2}{4\Gamma z}\right] d\theta_2 \quad (6)$$

$$U_0(\theta_2) = \exp\left\{\frac{1}{2\Gamma} \int_0^{\theta_2} V_0(\theta_1) d\theta_1\right\}.$$

Подставляя U из (6) в (4), легко выписать решение уравнения Бюргера $V(\theta, z)$. Трудность этого подхода связана с интегрированием в (6). Здесь можно использовать асимптотические методы типа метода перевала или попытаться свести интеграл к табличному. Успех последнего зависит от начального профиля $V_0(\theta)$. Оказывается, для волновых пакетов (3) можно получить достаточно простые аналитические выражения интеграла в (6) и тем самым найти точные решения уравнения Бюргера, описывающие нелинейную эволюцию малопериодных сигналов.

Действительно, с учетом (3а) и (3б) начальные условия для вспомогательной функции U выражаются в виде следующих произведений:

$$U_0 = \prod_{j=1}^p [1 + (\theta + a_j)^2]^{V_{0j}/2\Gamma} \quad (7a)$$

$$U_0 = \prod_{j=1}^p [g_j + \exp\{-(\theta + a_j)^2\}]^{V_{0j}/2\Gamma} \quad (7б)$$

для сигналов S - и N -типа соответственно. Если показатели $V_{0j}/2\Gamma$ равны целым числам $N_j = 1, 2, 3, \dots$, то выражения (7) представляют собой конечные ряды вида

$$U_0 = \sum_{m=0}^N b_m \theta^m, \quad (8a)$$

$$U_0 = \sum_{m=0}^N b_m \exp\{-m(\theta + a_j)^2\}. \quad (8б)$$

Интегралы (6) от каждого члена этих рядов легко вычисляются, после чего нетрудно найти аналитические формулы для профиля соответствующего сигнала $V(z, \theta)$.

3. Нелинейное распространение волнового пакета S-типа

В случае волнового пакета (3а), составленного из биполярных импульсов S-типа, таких, что $V_{0j}/2\Gamma = N_j$, после интегрирования (6) с учетом разложения (8а) находим из (4) окончательное выражение для колебательной скорости на произвольном расстоянии z :

$$V = \frac{\sum_{m=1}^N \left[b_m i^m m (\Gamma z)^{(m-1)/2} \cdot 2i\Gamma H_{2m-1} \left(\frac{i\theta}{(4\Gamma z)^{1/2}} \right) \right]}{\sum_{m=0}^N \left[b_m \Gamma z^{m/2} i^m H_{2m} \left(\frac{i\theta}{(4\Gamma z)^{1/2}} \right) \right]}, \quad (9)$$

где $H_n(x)$ — полиномы Эрмита, определяемые для целых значений n выражением [7]

$$H_m(x) = (-1)^m \exp(x^2) \frac{d^m}{dx^m} [\exp(-x^2)].$$

Рассмотрим с помощью (9) ряд конкретных примеров нелинейной эволюции сигналов S-типа.

Для одиночного биполярного импульса, $p=1$, $V_{01}=1$, в среде с $\Gamma=1/2$ имеем $N=1$, и эволюция сигнала описывается очень простой формулой:

$$V = \frac{2\theta}{\theta^2 + 1 + z}. \quad (10)$$

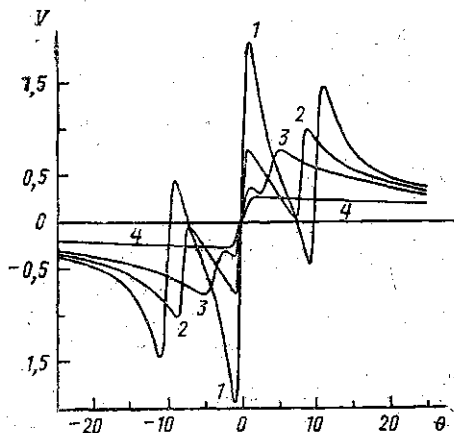
Это случай расплывания и фронта, и импульса как целого в среде с большой вязкостью. Крутизна фронта монотонно уменьшается с расстоянием как $2/(1+z)$. Если увеличить амплитуду импульса в два раза, то $N=2$ и профиль биполярного импульса искажается по закону

$$V = \frac{2\theta(\theta^2 + 1 + 3z/2)}{(1 + \theta^2)^2 + 3z\theta^2 + z + 3z^2/4}. \quad (11)$$

Крутизна фронта сначала незначительно растет до точки $z_f = 2(\sqrt{2} - 1)/3 \approx 0,27$, а затем уменьшается из-за диффузионного расплывания пропорционально $4/z$. Таким образом, при $\Gamma=1/4$ появляется этап формирования ударной волны $0 < z < 0,27$, но укрупнение фронта еще незначительно.

Рассмотрим теперь более интересный и менее известный случай эволюции короткого волнового пакета, составленного из трех биполярных импульсов S-типа, когда центральный импульс имеет вдвое большую амплитуду, чем боковые импульсы, смещенные по времени относительно центрального на $a_1=10$ и $a_2=-10$. В случае $\Gamma=1/8$ в выражении (7а) имеем $V_{01}=V_{03}=1$; $V_{02}=2$, $p=3$, $N_1=N_3=4$, $N_2=8$ и $N=2 \times (N_1+N_2+N_3)=32$, т. е. U содержит 32 члена. Результаты расчетов по формуле (9) представлены на рис. 1, на котором показаны последова-

тельные стадии эволюции профиля волнового пакета: 1) образование ударных фронтов при $z < 1$ в точках $\theta = 0$ и $\theta \approx \pm 10$ (кривая 1 и близкие к ней, не показанные на рисунке); 2) рассасывание ударных фронтов и слияние боковых импульсов с крыльями (передним и задним хвостами) центрального импульса (кривые 2 и 3); 3) образование одного биполярного импульса, испытывающего диффузионное расплывание (кривая 4).



Эти три стадии отчетливо видны на рис. 2, а, где изображены траектории движения нулей и вер-

Рис. 1. Профили волнового пакета S-типа в вязкой нелинейной среде с $\Gamma = 1/8$ на расстояниях $z=0$ (1), 4 (2), 12 (3) и 100 (4)

шин (локальных экстремумов) профиля, и на рис. 2, б, где показаны зависимости амплитуд в вершинах от пройденного расстояния. На первой стадии вершины трех составляющих биполярных импульсов сближаются попарно (кривые 1 и 2, 3 и 4, 5 и 6) —

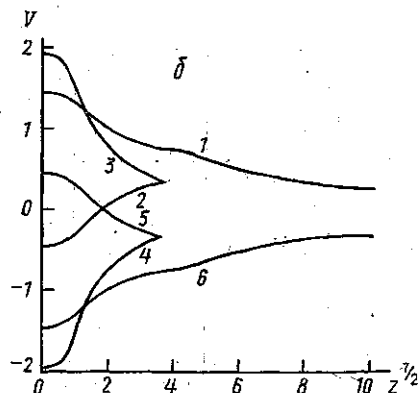
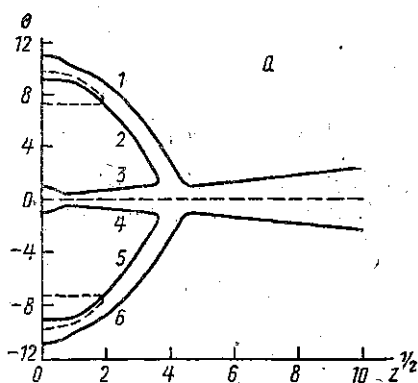


Рис. 2. Изменение положения нулей (пунктирные линии) и вершин — локальных экстремумов профиля волнового пакета S-типа (а) и изменение амплитуд в этих вершинах (б) при распространении в вязкой среде. Параметры сигнала и среды те же, что и на рис. 1. Нумерация вершин профиля и их траекторий $j=1 \div 6$ ведется справа налево по оси θ

это свидетельствует об образовании ударных фронтов на расстояниях $z \approx 0,5 \div 1$. Исчезновение четырех боковых нулей профиля (слияние пунктирных линий с кривыми 2 и 5) говорит о приподнятии (опускании) боковых импульсов крыльями центрального импульса вследствие диффузии энергии из центральной части на периферию. Этот этап заканчивается слиянием двух боковых вершин (2 и 5) с двумя центральными (3 и 4) и их исчезновением ($z \approx 9$). В результате этих процессов формируется один биполярный импульс, вершины которого (1 и 6) на отрезке $9 < z < 16$ сближаются, а затем, при $z > 16$, расходятся из-за диффузионного расплывания.

Эволюция профиля волнового пакета S-типа сопровождается характерными изменениями крутизны фронтов. Расчеты показывают, что ударный фронт ярко выражен в центре пакета ($\max \partial V / \partial \theta = 13$ при

$\partial V_0/\partial\theta(0)=4$) и значительно слабее у боковых импульсов ($\max \partial V/\partial\theta = 2,6$ при $\partial V_0/\partial\theta(10)=2$).

На больших расстояниях, $\Gamma z \gg 1$, волновой пакет трансформируется, как видно из рис. 1, 2, в биполярный импульс S-типа, профиль которого при $z \rightarrow \infty$ становится автомодельным. Из (9) следует, что автомодельный профиль описывается выражением

$$V_N^{\text{au}} = \frac{2(2N)^{1/2} i H_{2N-1}(i\theta/(2z/N)^{1/2})}{z^{1/2} H_{2N}(i\theta/(2z/N)^{1/2})} \quad (12)$$

При $N=1$ профиль (12) имеет простейший вид: $V_1^{\text{au}} = 2\theta/(z+\theta^2)$, который совпадает с (10) с точностью до сдвига по z . Таким образом, решение (10) является автомодельным с самого начала. Из (12) следует, что вершины автомодельного профиля расходятся как $\Delta\theta \approx \sqrt{z}$. Это ясно видно на рис. 2, а из хода кривых 1 и б в области $z > 25$.

4. Нелинейная эволюция волнового пакета N-типа

Волновой пакет N-типа (36) имеет другую последовательность чередования положительной и отрицательной частей профиля, чем сигнал (3а). Поэтому и его поведение будет отличаться от случая, рассмотренного в разделе 3. Выполняя интегрирование (6) с учетом (8а) и подставляя результат в (4), находим следующее общее решение:

$$V = \frac{-\theta \sum_{m=1}^N b_m \cdot 4\Gamma m (1 + 4\Gamma z)^{-3/2} \exp\{-m\theta^2/(1 + 4\Gamma z)\}}{\sum_{m=0}^N b_m (1 + 4\Gamma z)^{-1/2} \exp\{-m\theta^2/(1 + 4\Gamma z)\}} \quad (13)$$

В простейшем случае $N=1$, $\Gamma=1/2$ эта формула переходит в выражение $V = -2\theta(1 + 4\Gamma z)^{-3/2} \exp\{-\theta^2/(1 + 4\Gamma z)\} / [g + (1 + 4\Gamma z)^{-1/2} \exp\{-\theta^2/(1 + 4\Gamma z)\}]$, детально проанализированное в [2].

Рассмотрим с помощью (13) нелинейную эволюцию в среде с $\Gamma = 1/40$ профиля сигнала, составленного из трех биполярных импульсов N-типа ($g_j=1$), центральный из которых имеет вдвое большую амплитуду, чем боковые; $V_{02}=2V_{01}=2V_{03}$ (рис. 3). Как и в случае сигнала S-типа, здесь также можно выделить характерные этапы, связанные с формированием (кривая 2) и рассасыванием (3) ударных фронтов на фоне диффузионного расплывания волнового пакета, заканчивающегося образованием одиночной N-волны (4). Переход от одной стадии к другой можно проследить, рассматривая графики движения нулей и вершин профиля совместно с графиками изменения амплитуд в вершинах (рис. 4). Из анализа рис. 4 следует, что при нелинейной эволюции волнового пакета N-типа (36), (13) в среде с $\Gamma=1/40$ рассасываются боковые импульсы: на расстоянии $z \approx 40$ сливаются соответствующие им кривые 1 и 2, 5 и

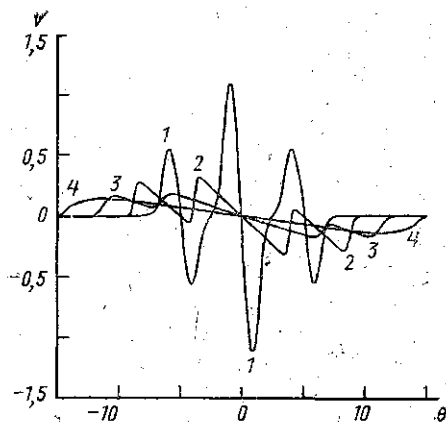


Рис. 3. Профили волнового пакета N-типа в вязкой нелинейной среде с $\Gamma = 1/40$ на расстояниях $z=0$ (1), 10 (2), 30 (3) и 70 (4)

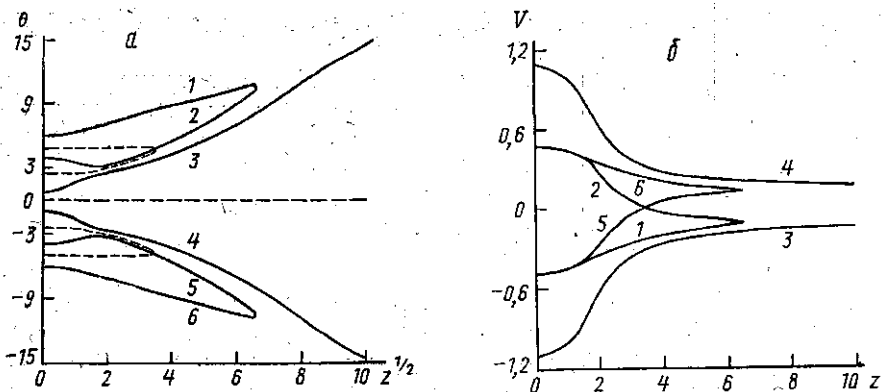


Рис. 4. Изменение положения нулей (пунктирные линии) и вершин — локальных экстремумов профиля волнового пакета N -типа (а) и изменение амплитуд в этих вершинах (б) при распространении в вязкой среде. Параметры сигнала и среды те же, что и на рис. 3. Нумерация вершин профиля и их траекторий $j=1+6$ ведется справа налево по оси θ

б, после чего формируется одиночный биполярный импульс.

Устремляя в (13) $z \rightarrow \infty$, можно найти автомодельный профиль N -импульса:

$$V_N^{\text{ав}} = -2 \left(\sum_{m=1}^N b_m m^{-1/2} \right) \theta \exp \left\{ -\theta^2 / (4\Gamma z) \right\} (4\Gamma z)^{-3/2}. \quad (14)$$

Выражение (14) является точным решением линеаризованного уравнения Бюргерса, когда амплитуда волны исчезающе мала, $V \rightarrow 0$. Поэтому выход на автомодельное решение происходит на значительно больших расстояниях, чем в случае S -импульса (ср. рис. 2 и 4).

5. Заключение

Таким образом, при анализе нелинейного распространения волновых пакетов N - и S -типов можно выделить общие характерные стадии эволюции сигналов для обоих случаев: 1) образование локальных ударных фронтов у каждого из составляющих импульсов; 2) уменьшение крутизны фронтов и рассасывание более слабых составляющих импульсов, т. е. слияние их с сильным центральным импульсом; 3) образование из волнового пакета одного биполярного автомодельного импульса N - или S -типа в зависимости от начального профиля сигнала. В дальнейшем представляет интерес провести дополнительное изучение трансформации частотных спектров волновых пакетов и изменения с расстоянием их энергии, рассмотреть поведение волновых пакетов с несимметричными профилями, состоящих из биполярных импульсов как N -, так и S -типов, исследовать поведение сигналов с другими начальными профилями, например $V_0 = \exp(-\theta^2) \sin(\Omega\theta)$ и $V_0 = \exp(-\theta^2) \cos(\Omega\theta)$.

Автор выражает глубокую благодарность проф. О. В. Руденко за плодотворное обсуждение постановки задачи и полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Руденко О. В., Солюян С. И. Теоретические основы нелинейной акустики. М., 1975. [2] Уизем Д. Линеиные и нелинейные волны. М., 1977. [3] На-

угольных К. А., Островский Л. А. Нелинейные волновые процессы в акустике. М. 1990. [4] Виноградова М. Б., Руденко О. В., Сухоруков А. П. Теория волн. М., 1990. [5] Hopf E.//Comm. Pure and Appl. Math. 1951. 9. P. 201. [6] Cole J. D.//Quart. Appl. Math. 1951. 9. P. 225. [7] Кампе де Ферье Ж., Кемпбелл Р., Петью Г., Фогель Т. Функции математической физики. М., 1963.

Поступила в редакцию
20.01.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 3

УДК 532.782; 532:541.64; 532:577.11

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В РАСТВОРАХ БИОПОЛИМЕРОВ ПО ДАННЫМ РЭЛЕЕВСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Г. П. Петрова, Ю. М. Петрусевич

(кафедра молекулярной физики и физических измерений)

С помощью методов статического и динамического рассеяния света определялись статические (масса, коэффициент деполаризации, второй вириальный коэффициент) и динамические (коэффициенты молекулярной диффузии) параметры белковых макромолекул в разбавленных водных растворах при изменении ионной силы и pH раствора. Обнаружено, что при изменении суммарного заряда белковых макромолекул и при частичной экранировке отдельных заряженных групп на поверхности белковой глобулы указанные параметры изменяются нелинейным образом и имеют экстремум в изоэлектрических точках. Для некоторых белков проведено сравнение зависимости коэффициента трансляционной диффузии от заряда на белке с поведением коэффициента вращательной диффузии, определяемого методом ЯМР.

Поверхность макромолекул белков в растворе всегда является заряженной, что определяет очень сильное электростатическое взаимодействие между молекулами полярного растворителя и заряженными поверхностными группами биополимера и, следовательно, влияет на характер броуновской динамики молекул.

В растворе возможны три типа взаимодействий: белок—белок, белок—противоион, белок—растворитель. Все эти типы взаимодействий могут изменять как статические параметры раствора макромолекул, такие как коэффициент межмолекулярного взаимодействия B , диэлектрическую проницаемость ϵ , вязкость η , так и молекулярно-динамические параметры, например коэффициенты трансляционной D_t и вращательной D_r диффузии.

Для определения статических и динамических параметров белковых макромолекул в растворах могут быть использованы различные физические методы, среди которых весьма эффективными являются методы статического и динамического рассеяния света.

Известно [1, 2], что для идеального раствора макромолекул в низкомолекулярном растворителе, каким является вода, коэффициент рассеяния под углом θ к падающему лучу, равный

$$R_\theta = I_\theta r^2 / I_0 \Omega, \quad (1)$$

где I_0 — интенсивность падающего света, I_θ — интенсивность рассеянного света на расстоянии r от рассеивающего объема Ω , определяется соотношением

$$R_\theta = cHMK \text{ см}^{-1}. \quad (2)$$

Здесь c , M — массовая концентрация и молекулярная масса растворенного вещества, $H = 2\pi^2 n_0^2 (dn/dc)^2 / (\lambda^4 N_A)$ — постоянная Дебая (n_0 — показатель преломления воды, dn/dc — инкремент показателя