АЛГОРИТМ ПОИСКА СОЛИТОННЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ТИПА НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Волков Ю. С.

(Россия, Москва)

В настоящее время имеются разнообразные модификации нелинейного уравнения Шредингера (НШ), соответствующие различным физическим ситуациям, так что помимо классического уравнения, описывающего непрерывные уединенные волны, имеются также уравнения НШ на дискретной решетке, а также нелокальные уравнения. Последний тип появляется, в частности, при исследовании процессов туннелирования протонов в водородных связях между парами оснований в молекуле ДНК. Соответствующие возбуждения описываются нелокальным нелинейным уравнением Шредингера на решетке, которое получается с помощью известного метода гамильтониана Давыдова. Методы получения солитонных решений, разработанные для исследования обычного нелинейного уравнения Шредингера, годятся только в случае длинноволнового приближения, и таким образом не пригодны для исследований коротковолновых возмущений на пространственном масштабе порядка характерного расстояния между парами оснований, что очень существенно в случае ДНК.

В настоящей работе используется следующее наблюдение: решение, близкое к солитону, состоит из центрального пика и сопутствующего излучения малой амплитуды. В случае точного солитона это излучение отсутствует; оно позволяет измерить отклонение от чисто солитонного решения, поэтому солитонное решение можно получить, если уничтожить излучение с помощью специального фильтра.

Разработанный метод численного моделирования солитоноподобных решений, по-видимому, имеет значительно более широкое применение, чем для нелокального нелинейного уравнения Шредингера, введенного для нужд ДНК.

В настоящее время существуют разнообразные модификации нелинейного уравнения Шредингера (НШ), соответствующие различным физическим ситуациям. Возможные вариации затрагивают пространство координат, которое может быть 1,2,3-мерным, а также дискретным или непрерывным, и наличие различных дополнительных нелинейных (а часто и нелокальных) членов уравнения. Аналитические решения НШ возможны лишь в простых случаях – если уравнение является непрерывным и дополнительные члены имеют простой вид. Поэтому непрерывные уравнения могут использоваться для получения простых приближений к существующим сложным дискретным уравнениям. Но уже для дискретных уравнений нахождение аналитических решений является невозможным. Остаются компьютерные вычисления — а значит, встает вопрос о подходящих алгоритмах поиска решений.

Начнем с представления задачи, [1], во время решения которой и возник наш алгоритм. Это уравнение, разработанное для следующей физической ситуации – для исследования процессов туннелирования протонов в водородных связях между парами оснований в молекуле ДНК, [2]. В уравнении учитывается наличие взаимодействия между туннелированием и эластичными свойствами двойной спирали ДНК. Для каждой пары оснований рассматриваются два уровня — до перехода и первый возбужденный. В энергии эластичности учитывается также и относительная закрутка пар оснований, что отражает структуру двойной спирали. Соответствующая динамика описываются нелокальным нелинейным уравнением Шредингера на решетке, которое получается с помощью известного метода гамильтониана Давыдова, [3],[4], (уравнение приведено к безразмерному виду):

$$i\frac{d}{d\tau}B_n = -(B_{n+1}+B_{n-1}) - W|B_n|^2 B_n - W(\sum_{m=0}^{N}|B_m|^4)B_n + \tag{1}$$
$$+W\Lambda(\sum_{m=0}^{N}\sum_{k=0}^{N}\cos^{|m-k|}(\varphi)|B_m|^2|B_k|^2)B_n + W\Lambda(\sum_{m=0}^{N}\cos^{|m-n|}(\varphi)|B_m|^2)B_n$$

В получившемся уравнении Λ, W — сгруппированные параметры системы. Λ отражает структуру двойной спирали, включая закрутку и отношение величин энергии закрутки к энергии деформации. Как видно из уравнения, этот параметр определяет величину нелокальных членов уравнения. W учитывает отношение энергии взаимодействия туннелирования и эластичных свойств ДНК к энергии закрутки и энергии влияния одного туннельного перехода на другой. B_n определяет амплитуду вероятности туннелирования протона в n-той паре.

Важным классом решений являются солитонные решения — уединенные волны (решения с финитным носителем), обладающие способностью сохранять свою форму. Их важность заключается в том, что они представляют механизм направленного переноса возбуждения на большие расстояния. Это может быть, например, перенос деформации кристаллической решетки в соответствующих задачах. В рассматриваемой постановке (1) это соответствует переносу амплитуды вероятности туннелирования протона в одной из пар оснований в ДНК. К классу решений с ограниченным носителем можно отнести и так называемые "breathers", [5]. В отличие от солитонов, бризерные решения меняют свою форму с течением времени, как бы "дышат", не изменяя, тем не менее, свой носитель. И, в отличие от солитонов, эти решения локализованы в определенной точке пространства. К сожалению, эффективных и практически применимых методов доказательства существования солитонов и breathers не существует. На практике доказательство существования решения сводится к его поиску с помощью одного из вычислительных алгоритмов. Так что даже определение существования таких решений напрямую зависит от применяющихся численных алгоритмов.

Одним из наиболее распространенных методов нахождения решений с ограниченным носителем для непрерывных НШ является их поиск в определенной форме, как правило, в виде ряда Фурье:

$$B(x,\tau) = A(x - vt)e^{ikx - i\omega t} \quad (2)$$

$$B(x,\tau)=\sum_{k=-M}^{M}A_k(x)e^{ik\omega t} \qquad (3)$$

Эти подстановки применяются для поиска солитонов (подстановка 2) и breathers (подстановка 3) соответственно. Но такой метод поиска решения является неточным, хотя и быстрым — и потому пригоден лишь для нахождения приближенных решений.

Применение подстановки (3) к уравнению (1), после разложения $A(x\text{-}vt)$ в ряд Тейлора до членов второго порядка, позволяет разбить уравнение на два независимых уравнения, и найти решение в искомом виде. Разложение в ряд Тейлора до членов второго порядка ограничивает применимость полученных решений только случаем длинных волн — когда носитель волны достаточно большой, чтобы решение можно было эффективно приближать первыми тремя членами ряда.

Нами был предложен метод численного исследования солитонов, [1], описываемым (1), для описания динамики туннелирования протонов в водородных связях пар оснований ДНК. Вкратце метод фильтрации излучения основан на следующем: стабильная локализованная волна остается локализованной в течение неограниченного промежутка времени, в то время как нестабильная волна расплывается, удаляясь все дальше и дальше. Теперь представим, что у нас есть решение, который является почти стабильным. Его можно представить в виде суммы стабильной волны и волны возмущений. Конечно, уравнение наше не обязано быть аддитивным, но это не влияет на рассуждения. Волна возмущений за большое время расплывется и как бы исчезнет, а стабильная волна останется. Происходит процесс излучения, когда стабильный волновой профиль излучает от себя в разные стороны маленькие быстрые волны возмущений. Последние уносят с собой энергию возмущения. Через некоторый промежуток времени мы получим чисто солитоннное решение.

Здесь используется характеристическое свойство стабильной волны — она не излучает.

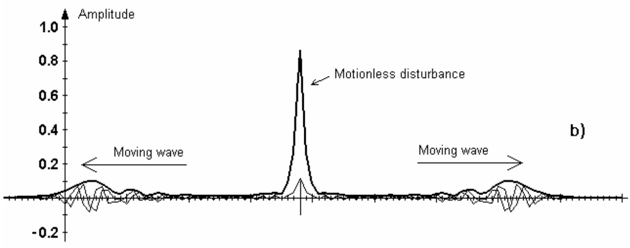

Рис.1

На приведенном рисунке 1 видно, как стабильный центральный пик-breather излучает возмущения своего начального профиля в виде волн. Точно так же стабилизируются и движущиеся волны.

Но, кроме того, волны возмущений тоже излучают в разные стороны, поэтому их излучение, возвращаясь, снова воздействует на основную волну. Поэтому важным шагом является удаление излученных волн.

Также ставится задача найти стабильную волну с заданной энергией (площадью, объемом, который она ограничивает). Поэтому, после того, как часть энергии излучится, необходимо провести ренормализацию. Но операция ренормализации сама вносит возмущения, которые потом тоже будут излучаться.

Этот процесс, если он сходится, то сходится к стабильному решению, которое может оказаться как движущейся волной, так и breather'ом, а может оказаться новым стабильным видом — например, смесью breather и движущейся волны. И снова структура метода позволяет говорить об его универсальности — ищется стабильное решение, вне зависимости от его природы.

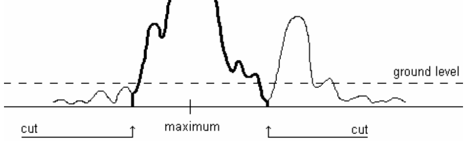

Рис. 2

Алгоритм заключается в следующем:
Выбирается уровень нуля (ground level) – Π, и уровень ошибок – $\tilde{\varepsilon}$

0)Берется начальное приближение волны – функция $B_0(x,\tau)$.

1)Расчитывается эволюция начального возмущения в течении некоторого времени $d\tau$, получается $B(x,\tau+d\tau)$

2)Выделяется главная волна — в $B(x,\tau+d\tau)$ находится точка максимума $x_{\max}$, т.е. $|B(x_{\max},\tau+d\tau)|$ — максимум.

3)Теперь необходимо отсечь боковые волны возмущения – предполагается, что стабильная волна монотонна на краях и экспоненциально затухает. Поэтому мы находим ближайшие локальные экстремумы ниже заданного уровня Π. Это будут точки x_{left} и x_{right}, такие, что выполняются условия:

4) x_{left} и x_{right} — точки локального минимума

5) $|B(x_{left},\tau+d\tau)|<\Pi$ и $|B(x_{right},\tau+d\tau)|<\Pi$

6) $x_{left}<x_{\max}<x_{right}$

7) x_{left} и x_{right} находятся ближе всего к $x_{\max}$.

8)Обрезаем «хвосты» – обнуляем все, что левее x_{left} и правее x_{right}.

9)Теперь надо ренормализовать получившееся решение. Рассчитываем коэффициент $A=\int B(x,\tau+d\tau)dx$ и строим новое приближение $B'(x,\tau+d\tau)=A\cdot B(x,\tau+d\tau)$.

10) Получено новое приближение, осталось только проверить, насколько оно хорошее. Лучше всего сравнивать по коэффициенту A — чем ближе он к единице, тем меньше энергии было излучено:

11) Если $|1-A|<\varepsilon$, то решение с заданной точностью найдено.

12) Иначе снова переходим к пункту (2).

Для повышения точности нужно уменьшить заданные в (0) П и $\tilde{\varepsilon}$

В пункте (7) можно сравнивать отклонения профилей начальной и конечной волн. В случае breathers это будет нахождение breathers с периодом $d\tau$. Условие будет выглядеть теперь так:

$$\int \left| B_0(x + x_{0\max}, \tau + d\tau) - B'(x + x_{\max}, \tau + d\tau) \right| dx < \varepsilon \cdot$$

Сдвиги координат используются для совмещения профилей волн по точкам максимума, чтобы в случае солитонов вернуть солитон на место.

В качестве начального приближения для поиска солитонов можно брать подстановку (3), а для поиска breathers можно взять узкий вертикальный пик. Схема применения этого метода в общем случае должна быть следующей – сначала используется неточный метод для нахождения первого приближения, а позже решение уточняется с помощью метода фильтрации излучения.

При использовании этого метода может возникнуть следующая трудность — если мы находимся вблизи границы существования решений, то процесс стабилизации решения может быть очень долгим. Проблема состоит также в том, что, как указано в алгоритме, сами этапы алгоритма вносят возмущения в решение, и вблизи границы существования решения сходимость существенно замедляется. Правда, применение неточных методов в этом случае является принципиально невозможным.

Итак, полученный метод фильтрации излучения позволяет искать стабильные решения в самом общем виде, не привязываясь к конкретной их форме, что особенно важно в случае произвольного уравнения Шрёдингера. Этот метод может работать при достаточно общих предположениях относительно природы решения и относительно типа уравнения, т.е. обладает универсальностью — он не накладывает явных ограничений на решаемое уравнение. Новый метод, как уже было сказано, уже с успехом был применен к анализу сложного уравнения Шрёдингера (1) и дал хорошие результаты.

Список литературы:

1. Golo V.L. and Volkov Yu.S., Int.J. of Modern Phys. C 14 (2003)
2. Watson J.D. and Crick F.H.C., Nature 171, 737 (1953)
3. Davydov A.S., Sov.Phys.Usp. 251, 898 (1982)
4. Scott A.C., Phys.Rep. 217, 1 (1992)
5. Flach S. and Willis C.R., Phys. Reports 295, 181 (1998).

ALGORITHM FOR FINDING SOLITON SOLUTIONS OF THE EQUATIONS LIKE NONLINEAR SHROEDINGER EQUATION

Volkov Yu. S.

(Moscow, Russia)

There can be various modifications of nonlinear Shroedinger equation corresponding to different physical systems. Besides the ordinary Shroedinger equation there can equations on a discrete lattice or nonlocal equations. The latter appears, for example, in the problem of proton tunneling in the hydrogen bonds if the DNA molecule. The resulting discrete nonlocal equation is obtained with the help of Davydov theory. The usual methods for finding soliton solutions can be used in the case of long waves only, and therefore cannot be utilized for the scale of the distance between the base pairs.

In this paper the following idea is used: the solution close enough to soliton consists of the central peak and the additional radiation of low amplitude. For the exact soliton solution this radiation is absent, thus giving us the measure of the solution purity. The exact solution can be obtained if the radiation is damped with the special filter. This method for finding soliton solutions appears to have wide applications.