

УДК 534.2; 519.62

АНАЛИЗ БЕГУЩИХ И СТОЯЧИХ ВОЛН В МОДЕЛИ ДНК ПЕЙРАРА-БИШОПА-ДОКСУА

Голоскубова Н. С., Михлин Ю. В.

*Национальный технический университет «ХПИ»,
ул. Кирпичева, 21, г. Харьков, 61002, Украина*

muv@kpi.kharkov.ua

Рассматривается модель Пейрара-Бишопа-Доксуа (модель ПБД), описывающая динамику молекулы ДНК. Исследованы два предельных случая: первый случай – бегущие волны в длинноволновом приближении (сверхнизкие частоты), второй – наиболее высокочастотные формы колебаний, а именно, антифазные формы колебаний. Для обоих случаев получены нелинейные системы обыкновенных дифференциальных уравнений с нелинейными членами степени не выше третьей. Решение системы уравнений движения, которое получено в аналитическом виде методом малого параметра, сравнивается с численными результатами, полученными методом Рунге-Кутты четвертого порядка.

Ключевые слова: модель ПБД, длинноволновое приближение, антифазные формы колебаний.

АНАЛІЗ БІГУЧИХ ТА СТОЯЧИХ ХВИЛЬ У МОДЕЛІ ДНК ПЕЙРАРА-БІШОПА-ДОКСУА

Голоскубова Н. С., Міхлін Ю. В.

*Національний технічний університет «ХПІ»,
вул. Кирпичова, 21, м. Харків, 61002, Україна*

muv@kpi.kharkov.ua

Розглянуто модель Пейрара-Бішопа-Доксуа (модель ПБД), що описує динаміку молекули ДНК. Досліджено два граничних випадки: перший випадок – бігучі хвилі у довгохвильовому наближенні (наднизькі частоти), другий – найбільш високочастотна форма коливань, а саме, антифазні форми коливань. Для обох випадків отримані нелінійні системи звичайних диференціальних рівнянь з нелінійними членами степеня не вище третього. Розв'язок системи рівнянь руху в аналітичному вигляді, що був отриманий за допомогою метода малого параметру, порівнюється з результатами, що були отримані методом Рунге-Кутта четвертого порядку.

Ключові слова: модель ПБД, довгохвильове наближення, антифазні форми коливань.

ANALYSIS OF TRAVELLING AND STANDING WAVES IN THE DNA MODEL BY PEYRARD-BISHOP-DAUXOIS

Goloskubova N. S., Mikhlin Yu. V.

*National Technical University «KhPI»,
21 Kirpichev str., Kharkiv, 61002, Ukraine*

muv@kpi.kharkov.ua

The model by Peyrard-Bishop-Dauxois (the PBD model) which describes the DNA molecule nonlinear dynamics, is considered. This model represents two chains of rigid disks connected by nonlinear springs. An interaction between opposite disks of different chains is modeled by the Morse potential. Solutions of equations of motion are obtained analytically in two approximations of the small parameter method for two limit cases. The first one is the long-wavelength limit of traveling waves, when frequencies of vibrations are small. Dispersion relations are obtained also for the long-wavelength limit by the small parameter method. The second case is a limit of high frequency standing waves in the form of out-of-phase vibration modes. Two such out-of-phase modes are obtained; it is selected one of them, which has the larger frequency. In both cases systems of nonlinear ODEs are obtained. Nonlinear terms are presented in the Taylor series expansion, where terms up to third degree by displacement are saved. The analytical solutions are compared with checking numerical simulation obtained by the Runge-Kutta method of the four order. The comparison shows a good exactness of these approximate analytical solutions.

Key words: PBD model, long-wavelength approximation, out-of-phase vibration modes.

ВВЕДЕНИЕ

Развитие современной нанороботехники является важным направлением современной прикладной науки. В частности, речь идет об использовании нанороботов в медицине. Одно из перспективных направлений проектирования нанороботов связано с их проектированием на основе молекул ДНК. Решение этой проблемы требует как экспериментальных, так и теоретических исследований свойств молекулы ДНК. Важной задачей является исследование распространения волн в этой молекуле.

Детальный обзор моделей нелинейной динамики ДНК дан в монографии [1] и обзорах [2, 3]. Одной из наиболее удачных для анализа моделей молекулы ДНК является модель ПБ, разработанная Пейраром и Бишопом [4]. Две цепочки ДНК в данной модели представлены связанными цепочками твердых дисков, причем связи внутри пар оснований описываются потенциалом Морзе. При этом стэкинг-взаимодействия учтены через обычный гармонический потенциал. Рассматривалась так называемая денатурация молекулы ДНК. Авторы модели ПБ в первую очередь интересовались лишь расхождением цепей, поэтому фактически рассматривалась одномерная динамика молекулярной цепочки. В связи с несовершенством модели и расхождениями с экспериментом в модель ПБ был феноменологически введен ангармонический потенциал, более адекватно описывающий стэкинг-взаимодействия. Эта модель получила название модели ПБД (модель Пейрара-Бишопа-Доксуа) [5]. Волновые процессы в моделях ПБ и ПБД анализировались в некоторых последующих работах, что отражено в публикациях [1-3]. В некоторых публикациях последних лет были рассмотрены и уединенные волны – так называемые дискретные бризеры в моделях ПБ и ПБД [6, 7].

В данной работе приведены результаты исследования некоторых типов волн в ПБД-модели молекулы ДНК. А именно, методом малого параметра построены низкочастотные бегущие волны в длинноволновом приближении. Аналитическое решение сравнивается с результатами, полученными методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Получены дисперсионные соотношения длинноволнового приближения. Построены также наиболее высокочастотные стоячие волны в виде антифазных форм колебаний.

1. МОДЕЛЬ ПЕЙРАРА-БИШОПА-ДОКСУА

Как было указано выше, ПБД-модель представляет собой две цепочки дисков, связанных между собой продольными и поперечными пружинами (рис. 1).

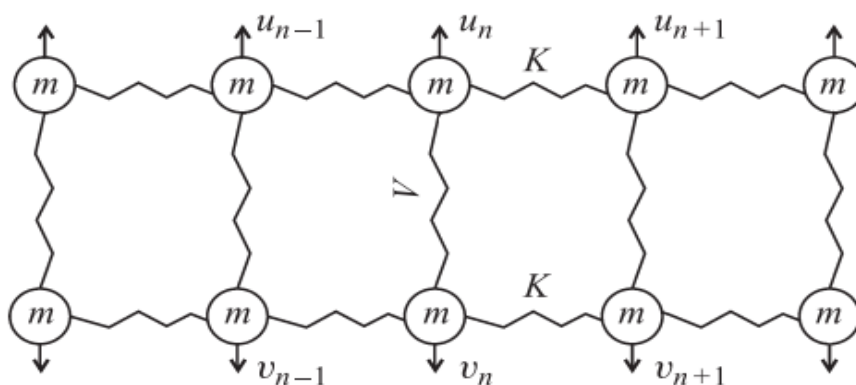


Рис. 1. Модель ДНК Пейрара-Бишопа-Доксуа

Взаимодействие между узлами разных цепочек моделируется так называемым потенциалом Морзе, $V = D(\exp(-a(u_n - v_n)) - 1)^2$, который имитирует водородные связи, соединяющие основания комплементарных пар. Здесь D – энергия диссоциации полинуклеотидных цепочек, a – параметр, обратный длине (пространственный масштаб потенциала). Используя

замену $z_n = \frac{u_n + v_n}{\sqrt{2}}$, $y_n = \frac{u_n - v_n}{\sqrt{2}}$, получим уравнения движения рассматриваемой модели ПБД в следующей форме [5]:

$$\begin{cases} \frac{d^2 z_n}{dt^2} = S(z_{n+1} - 2z_n + z_{n-1}) + S\rho \left\{ e^{-\gamma(z_{n+1} + z_n)} (z_{n+1} - z_n) \left[\frac{1}{2} \gamma (z_{n+1} - z_n) + 1 \right] + \right. \\ \left. + e^{-\gamma(z_n + z_{n+1})} (z_n - z_{n-1}) \left[\frac{1}{2} \gamma (z_n - z_{n-1}) - 1 \right] \right\}, \\ \frac{d^2 y_n}{dt^2} = S(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + S\rho \left\{ e^{-\gamma(y_{n+1} + y_n)} (y_{n+1} - y_n) \left[\frac{1}{2} \gamma (y_{n+1} - y_n) + 1 \right] + \right. \\ \left. + e^{-\gamma(y_n + y_{n-1})} (y_n - y_{n-1}) \left[\frac{1}{2} \gamma (y_n - y_{n-1}) - 1 \right] \right\} - 2\sqrt{2}e^{-\sqrt{2}y_n} [1 - e^{-\sqrt{2}y_n}], \end{cases} \quad (1)$$

где $S = \frac{K}{da^2}$, $\gamma = \frac{\alpha}{a}$ – безразмерные параметры; K – константа, характеризующая взаимодействие между парами оснований вдоль цепочки; ρ – параметр ангармонизма, характеризующий величину нелинейности в системе; α – параметр, который учитывает уменьшение стекинг-взаимодействия; d – энергия диссоциации полинуклеотидных цепочек.

2. ДЛИННОВОЛНОВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Рассматривая случай длинноволнового приближения (случай сверхнизких частот), предполагаем, что значения $1/a$ достаточно малы по отношению к длине волны. Переход к распределенной системе сделаем с использованием следующих приближений относительно расстояний между частицами цепочки:

$$\begin{aligned} z_{i+1} - z_i &\approx a \frac{dz}{dx}, & y_{i+1} - y_i &\approx a \frac{dy}{dx}; \\ y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} &\approx a^2 \frac{d^2 y}{dx^2}, & z_{i+1} - 2z_i + z_{i-1} &\approx a^2 \frac{d^2 z}{dx^2}. \end{aligned} \quad (2)$$

Кроме того, используются следующие приближения: $y_i \sim y(x)$; $y_{i+1} \sim y(x)$; $z_i \sim z(x)$; $z_{i+1} \sim z(x)$. Учитывая все приведенные приближения, получим из системы (1) следующую систему уравнений длинноволнового приближения:

$$\begin{cases} \frac{d^2 z}{dt^2} = \beta \frac{d^2 z}{dx^2} + \sigma e^{-2\gamma z} \left(\frac{dz}{dx} \right)^2, \\ \frac{d^2 y}{dt^2} = \beta \frac{d^2 y}{dx^2} - 2\sqrt{2}e^{-\sqrt{2}y} [1 - e^{-\sqrt{2}y}] + \sigma e^{-2\gamma y} \left(\frac{dy}{dx} \right)^2, \end{cases} \quad (3)$$

где $\beta = a^2 S$, $\sigma = \gamma \beta \rho$ – безразмерные параметры.

Рассмотрим бегущие волны в следующем виде: $z = \Phi_1(\varphi)$; $y = \Phi_2(\varphi)$, где фаза волны $\varphi = kx - \omega t$. Для этих решений из уравнений (3) получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Кроме того, предполагая, что значения величин Φ_1 и Φ_2 не слишком велики, разложим экспоненты в ряды Тейлора. Сохраняя нелинейные члены не выше третьей степени по Φ_1 , $\frac{d\Phi_1}{d\varphi}$ и Φ_2 , $\frac{d\Phi_2}{d\varphi}$, получим:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \Phi_1}{d\varphi^2} (\omega^2 - \beta k^2) - \sigma k^2 \left(\frac{d\Phi_1}{d\varphi} \right)^2 (1 - 2\gamma \Phi_1) = 0, \\ \frac{d^2 \Phi_2}{d\varphi^2} (\omega^2 - \beta k^2) + 4\Phi_2 - 6\sqrt{2}\Phi_2^2 + \frac{28}{3}\Phi_2^3 - \sigma k^2 \left(\frac{d\Phi_2}{d\varphi} \right)^2 (1 - 2\gamma \Phi_2) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Анализ первого уравнения системы (4), который здесь не приводится, показывает, что эти движения неограничены. Это связано с тем, что координата Φ_1 , в соответствие со сделанной ранее заменой, определяется суммой исходных координат. Таким образом, эта координата описывает фактически движения центра масс исходной модели, для которых не введены

ограничения. Поэтому далее мы рассматриваем лишь второе уравнение системы. Поскольку в этом уравнении есть только одно положение равновесия, $\Phi_2 = 0$, уединенные волны в данном длинноволновом приближении отсутствуют. Теперь во второе уравнение системы (4) вводим безразмерный малый параметр ε , который будет характеризовать малость нелинейных членов в рассматриваемой системе. Для анализа полученных уравнений использован метод малого параметра. Вводится также новая независимая переменная τ при помощи преобразования:

$$\varphi = \mu\tau. \tag{5}$$

Здесь μ – некоторая постоянная величина. Она определяется при построении решения, которое должно быть периодическим по τ с периодом 2π . Переходя от аргумента φ к новой независимой переменной τ , получим из второго уравнения системы (4) следующее уравнение (здесь штрих означает дифференцирование по новой независимой переменной τ):

$$\Phi_{2\tau}''(\omega^2 - \beta k^2) + 4\mu^2\Phi_2 + \varepsilon \left[-6\sqrt{2}\Phi_2^2\mu^2 + \frac{28}{3}\mu^2\Phi_2^3 - \sigma k^2\Phi_{2\tau}'^2(1 - 2\gamma\Phi_2) \right] = 0. \tag{6}$$

В соответствии с процедурой метода малого параметра решение уравнения (6) ищем в виде разложений по степеням малого параметра ε :

$$\Phi_2 = \Phi_{20} + \varepsilon\Phi_{21} + \dots; \quad \mu = \mu_0 + \varepsilon\mu_1 + \dots. \tag{7}$$

Подставляя ряды (7) в уравнение (6), получаем:

$$\begin{aligned} & (\Phi_{20}'' + \varepsilon\Phi_{21}'' + \dots)(\omega^2 - \beta k^2) + 2(\mu_0 + \varepsilon\mu_1 + \dots)^2(\Phi_{20} + \varepsilon\Phi_{21} + \dots) + \\ & + \varepsilon \left[(-6\sqrt{2}(\Phi_{20} + \varepsilon\Phi_{21} + \dots)^2 + \frac{28}{3}(\Phi_{20} + \varepsilon\Phi_{21} + \dots)^3)(\mu_0 + \varepsilon\mu_1 + \dots)^2 - \right. \\ & \left. - \sigma k^2(\Phi_{20}' + \varepsilon\Phi_{21}' + \dots)^2(1 - 2\gamma(\Phi_{20} + \varepsilon\Phi_{21} + \dots)) \right] = 0. \end{aligned} \tag{8}$$

Далее выделяем слагаемые в двух первых приближениях по малому параметру. В каждом приближении значения μ_0 и μ_1 подбираются так, чтобы исключить появление секулярных членов. Кроме того, в силу консервативности системы при решении может быть использовано дополнительное условие: $\Phi_2'(0) = 0$. Не приводя здесь, для краткости, детали стандартных преобразований, выпишем решение уравнения (8), возвращаясь к аргументу φ . Это решение с точностью до членов порядка ε^2 имеет такой вид:

$$\begin{aligned} \Phi_2 = \alpha_0 \cos\left(\frac{\varphi}{\mu}\right) - \frac{\varepsilon}{(\omega^2 - \beta k^2)} \left[\frac{\alpha_0^2}{\theta} \left(3\sqrt{2}\mu_0^2 + \frac{\sigma k^2}{2} \right) + \frac{\alpha_0^2 \left(3\sqrt{2}\mu_0^2 - \frac{\sigma k^2}{2} \right)}{(\theta - 4)} \cos\left(2\frac{\varphi}{\mu}\right) - \right. \\ \left. - \frac{\alpha_0^3}{(\theta - 9)} \cos\left(3\frac{\varphi}{\mu}\right) \left[\frac{\gamma\sigma k^2}{2} - \frac{7}{3}\mu_0^2 \right] \right] + O(\varepsilon^2), \end{aligned} \tag{9}$$

где $\mu = \mu_0 + \varepsilon \frac{\alpha_0^2(7\mu_0^2 + \frac{1}{2}\gamma\sigma k^2)}{4\mu_0}$, $\theta = \frac{2\mu_0^2}{\omega^2 - \beta k^2}$, $\mu_0 = \frac{\sqrt{\omega^2 - \beta k^2}}{\sqrt{2}}$.

Разложение (9) является равномерным разложением, поскольку секулярные члены в нем отсутствуют, а поправка первого порядка по ε , при условии относительной малости амплитуды α_0 , оказывается малой по сравнению с главным членом разложения.

Для оценки точности полученного аналитического решения (9) оно сравнивается с численным решением второго дифференциального уравнения системы (4), которое получено методом Рунге-Кутты 4 порядка [8]. Для числового расчета используются начальные условия, которые совпадают с начальными условиями для аналитического решения. Эти начальные условия выбраны таким образом: $\Phi_2(0) = 0.049$, $\Phi_2'(0) = 0$. Числовые параметры здесь

выбраны следующими: $a = 4 A^{-1}$, $K = 0.01 eV/A^2$, $\rho = 3$, $\alpha = 0.8 A^{-1}$ [4]. Кроме того, зададим безразмерный параметр связи $S = 0.0118957$ и параметры $\gamma = 0.2$, $\sigma = 0.14$. Пусть также $\omega = 1.12$, $F = 0.05$, $\varepsilon = 1$. Решение было получено на отрезке $[0, 10]$ с шагом $h = 0.002$. Сравнение аналитического и численного решений, представленное на рис. 2, демонстрирует хорошее совпадение этих решений.

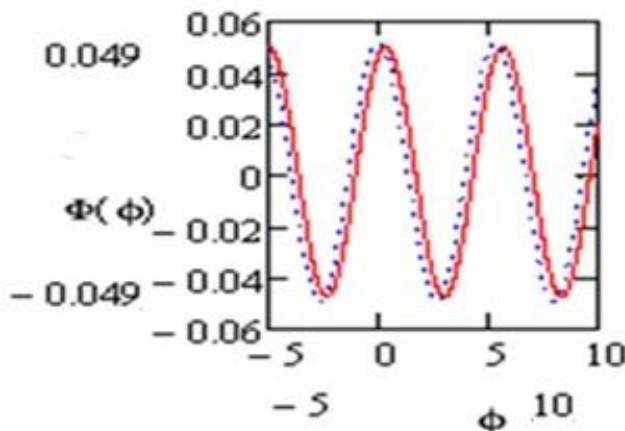


Рис. 2. Сравнение аналитического и численного решений для длинноволнового приближения. Сплошная кривая отвечает численному решению, точки – аналитическому

3. ДИСПЕРСИОННОЕ СООТНОШЕНИЕ ДЛЯ ДЛИННОВОЛНОВОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Дисперсионное соотношение для длинноволнового приближения в модели ПБД будет получено методом малого параметра. Рассмотрим второе уравнение системы (4):

$$\frac{d^2 \Phi_2}{d\varphi^2} (\omega^2 - \beta k^2) + 4\Phi_2 - 6\sqrt{2}\Phi_2^2 + \frac{28}{3}\Phi_2^3 - \sigma k^2 \left(\frac{d\Phi_2}{d\varphi}\right)^2 (1 - 2\gamma\Phi_2) = 0. \quad (10)$$

Используем следующие ряды по степеням ε_x :

$$\Phi_2 = \Phi_{20} + \varepsilon\Phi_{21} + \dots; \quad \omega^2 = \omega^2(k) = \omega_0^2 + \varepsilon\omega_1^2 + \dots \quad (11)$$

Подставляя разложения (11) в уравнение (10) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях ε , получим:

при ε^0 :

$$\Phi_{20}'' (\omega_0^2 - \beta k^2) + 4\Phi_{20} = 0; \quad (12)$$

при ε^1 :

$$\begin{aligned} \Phi_{21}'' (\omega_0^2 - \beta k^2) + 4\Phi_{21} = & -\omega_1^2 \Phi_{20}'' + 6\sqrt{2}\Phi_{20}^2 - \\ & - \frac{28}{3}\Phi_{20}^3 + \sigma k^2 \Phi_{20}'^2 (1 - 2\gamma\Phi_{20}) = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

2π – периодическое решение уравнения (13), $\Phi_{20} = B \cos(\varphi)$, может быть получено, если

$$\omega_0^2 = 4 + \beta k^2. \quad (14)$$

При этом уравнение (13) перепишется как:

$$\begin{aligned} \Phi_{21}'' (\omega_0^2 - \beta k^2) + 4\Phi_{21} = & -\omega_1^2 B \cos(\varphi) + 6\sqrt{2}B^2 \cos^2(\varphi) - \\ & - \frac{28}{3}B^3 \cos^3(\varphi) + \sigma k^2 B^2 \sin^2(\varphi) (1 - 2\gamma B \cos(\varphi)) = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Правая часть уравнения (15) содержит секулярный член, содержащий $\cos(\varphi)$. Это слагаемое может быть устранено подбором параметра ω_1 . В результате получим следующее равенство:

$$\omega_1^2 B - 7B^3 - \frac{1}{2} \sigma k^2 \gamma B^3 = 0. \quad (16)$$

Подставляя теперь значение ω_1^2 из (16) и ω_0^2 из (14) в разложение (11), получаем закон дисперсии рассматриваемой системы, который описывает зависимость частоты системы ω от волнового числа a , в следующем виде:

$$\omega^2 = 4 + \beta k^2 + \varepsilon \left[7B^2 + \frac{1}{2} \sigma k^2 \gamma B^2 \right]. \quad (17)$$

4. АНТИФАЗНЫЕ ФОРМЫ КОЛЕБАНИЙ

Рассмотрим другой предельный случай, а именно, наиболее высокочастотные антифазные формы колебаний, которые представляют собой **стоячие волны**.

1) Одна из антифазных форм определяется однонаправленными движениями верхнего и нижнего дисков модели молекулы ДНК, которые одновременно являются антифазными по отношению к движениям соседних частиц цепочки; таким образом, имеем: $u_i = v_i$, что отвечает следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} z_i &= z_i(t); \quad y_i = 0, \\ -z_{i-1} &= z_i; \quad -z_{i+1} = z_i. \end{aligned} \quad (18)$$

2) Вторая антифазная форма определяется противоположно-направленными движениями верхнего и нижнего дисков модели молекулы ДНК, то есть, $u_i = -v_i$, что отвечает соотношениям:

$$y_i = y_i(t); \quad z_i = 0; \quad -y_{i-1} = y_i; \quad -y_{i+1} = y_i. \quad (19)$$

Для антифазной формы вида 1) из уравнений движения (1) получаем следующее обыкновенное дифференциальное уравнение:

$$\frac{d^2 z}{dt^2} + z[4S(1 + \rho)] - z^2 4S\rho\gamma = 0. \quad (20)$$

Для определения решений уравнения (20) вблизи тривиального положения равновесия используется метод малого параметра. Вводя новую независимую переменную ψ , будем разыскивать решение, которое будет периодическим по ψ с периодом 2π . Для этого используем следующее преобразование:

$$t = v_1 \psi, \quad (21)$$

где v_1 – некоторая постоянная, которая будет определена при построении периодического решения. Переходя от аргумента t к новой независимой переменной ψ , получим вместо уравнения (20) следующее уравнение:

$$\frac{d^2 z}{d\psi^2} + z v_1^2 [4S(1 + \rho)] - 4\varepsilon v_1^2 S\rho\gamma z^2 = 0. \quad (22)$$

Формальный малый параметр ε подчеркивает малость нелинейных членов по сравнению с линейными. Решение уравнения (22), в соответствии с процедурой метода малого параметра, разыскиваем в виде разложений по степеням ε , а именно,

$$z = z_0 + \varepsilon z_1 + \dots; \quad v_1 = v_{10} + \varepsilon v_{11} + \dots. \quad (23)$$

Не приводя здесь детали вычислений, выпишем решение уравнения (22), возвращаясь к аргументу t . Решение имеет такой вид:

$$z = G \cos\left(\frac{t}{v_{10}}\right) + \varepsilon \left[\frac{2S\rho\gamma v_{10}^2 G^2}{\Omega_1} + \frac{2S\rho\gamma v_{10}^2}{(\Omega_1 - 4)} G^2 \cos\left(\frac{2t}{v_{10}}\right) \right] + O(\varepsilon^2), \quad (24)$$

где $v_{10} = \frac{1}{\sqrt{[4S(1+\rho)]}}$, $\Omega_1 = [4S(1+\rho)]v_{10}^2$.

Разложение (24) является равномерным разложением, поскольку секулярные члены в нем отсутствуют, а поправка порядка ε мала по сравнению с главным членом разложения, при условии относительной малости амплитуды G .

Для антифазной формы вида 2) из модели (1) получим такое обыкновенное дифференциальное уравнение:

$$\frac{d^2y}{dt^2} = 4Sy[-1 + \rho(\gamma y - 1)] + 2\sqrt{2}e^{-\sqrt{2}y}(e^{-\sqrt{2}y} - 1). \quad (25)$$

Раскладывая экспоненту в ряд и сохраняя члены со степенями не выше третьей по y и $\frac{dy}{dt}$, получаем

$$\frac{d^2y}{dt^2} + y(4[S(1+\rho) + 1]) - y^2(6\sqrt{2} + 4S\rho\gamma) + \frac{28}{3}y^3 = 0. \quad (26)$$

Это уравнение также не допускает решений в виде уединенных волн, поскольку здесь существует только тривиальное положение равновесия, $y = 0$. Для анализа полученного уравнения (26) используется метод малого параметра. Вводя новую независимую переменную κ при помощи замены:

$$t = v_2\kappa, \quad (27)$$

где v_2 – некоторая постоянная величина, ищем решение, которое является периодическим по κ с периодом 2π .

Далее, переходя от аргумента t к новой независимой переменной κ , перепишем уравнение (26) в такой форме:

$$y''_{\psi} + yv_2^2(4S(1+\rho) + 4]) - \varepsilon v_2^2 \left[y^2(6\sqrt{2} + 4S\rho\gamma) + \frac{28}{3}y^3 \right] = 0. \quad (28)$$

Решение уравнения (3) вблизи тривиального положения равновесия разыскиваем с использованием таких разложений по степеням малого параметра ε :

$$y = y_0 + \varepsilon y_1 + \dots; \quad v_2 = v_{20} + \varepsilon v_{21} + \dots. \quad (29)$$

Не приводя детали преобразований, выпишем решение, возвращаясь к переменной t :

$$y = F \cos\left(\frac{t}{v_2}\right) + \varepsilon \left[\frac{F^2 v_{20}^2 (3\sqrt{2} + 2S\rho\gamma)}{\Omega_2} + \cos\left(\frac{2t}{v_2}\right) \frac{F^2 (3\sqrt{2} + 2S\rho\gamma) v_{20}^2}{(\Omega_2 - 4)} - \frac{7v_{20}^2 F^3}{3(\Omega_2 - 9)} \cos\left(\frac{3t}{v_2}\right) \right] + O(\varepsilon^2), \quad (30)$$

где $v_2 = v_{20} - \varepsilon \frac{7v_{20}F^2}{2[4+4S(1+\rho)]}$, $v_{20} = \frac{1}{\sqrt{[4+4S(1+\rho)]}}$, $\Omega_2 = [4 + 4S(1+\rho)]v_{20}^2$.

Разложение (30) также является равномерным разложением, поскольку секулярные члены в нем отсутствуют, а поправка порядка ε мала по сравнению с главным членом разложения, при условии относительной малости амплитуды F .

Сравнивая две построенные антифазные формы колебаний, находим, что при значениях параметров: $S = 0.0118957$, $\rho = 3$, $F = 0.05$, наиболее высокочастотной является антифазная форма вида 2), которая имеет частоту $\nu = 2.292$, в отличие от антифазной формы вида 1) с частотой $\nu = 0.488$.

Аналитические решения (24) и (30) сравнивались с численными решениями уравнений (20) и (26), полученными методом Рунге-Кутты 4-го порядка. Для числовых расчетов использовались те же начальные условия, что и для аналитических решений. Они имеют такой вид: $z(0) = 0.049$, $z'(0) = 0$; те же условия приняты для переменной y . Числовые

параметры при расчете взяты такими же, как и ранее при расчете решений длинноволнового приближения. Графики, отвечающие сравниваемым решениям, показаны на рис. 3.

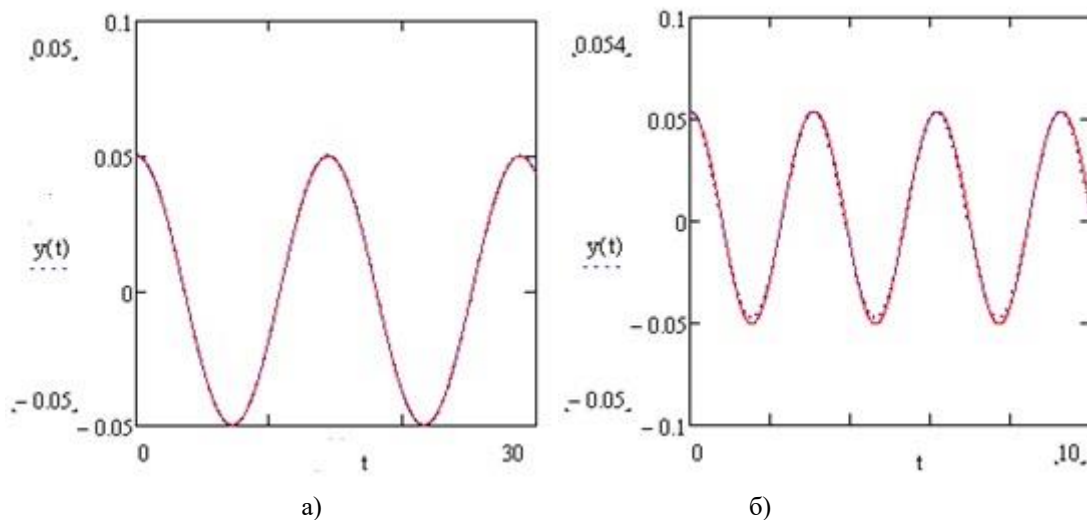


Рис. 3. Графики численных и аналитических решений для антифазных форм колебаний.

Сплошная кривая отвечает численному расчету, пунктирная кривая – аналитическому.

Кривые на рис. 2,а) получены для первой антифазной формы колебаний, а на рис. 2,б) – для второй формы

Очевидно, что графики, построенные с использованием метода Рунге-Кутты, хорошо совпадают с графиками аналитических решений, что указывает на адекватность приближенных аналитических решений.

ВЫВОДЫ

В работе рассмотрены волновые процессы в модели Пейрара-Бишопа-Доксуа (модель ПБД), которая описывает нелинейную динамику молекулы ДНК. С использованием метода малого параметра построены периодические бегущие волны в длинноволновом приближении модели ПБД; здесь малый параметр характеризует малость нелинейных членов в рассматриваемой модели. Также методом малого параметра построены наиболее высокочастотные – антифазные формы колебаний модели ПБД. Проверочные численные расчеты, которые проводились методом Рунге-Кутты 4 порядка, при начальных условиях, совпадающих с начальными условиями аналитических решений, демонстрируют адекватность приближенных аналитических решений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Yakushevich L. V. *Nonlinear Physics of DNA* / L. V. Yakushevich. – New York : Wiley, 2nd Edition, 2004. – 207 p.
2. Peyrard M. *Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA* / M. Peyrard // *Nonlinearity*. – 2004. – No. 17. – P. R1-R40.
3. Шигаев А. С. Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК / А. С. Шигаев, О. А. Пономарёв, В. Д. Лахно // *Математическая биология и биоинформатика*. – 2013. – Т. 8, № 2. – С. 553-664.
4. Peyrard M. *Statistical Mechanics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation* / M. Peyrard, A. R. Bishop // *Physical Review Letters*. – 1989. – V. 62. – P. 2755-2758.
5. Dauxois T. *Entropy-driven DNA denaturation* / T. Dauxois, M. Peyrard, A. R. Bishop // *Physical Review E*. – 1993. – V. 47. – P. R44-R47.
6. Фахретдинов М. И. Дискретные бризеры в модели ДНК Пейрара-Бишопа / М. И. Фахретдинов, Ф. К. Закирьянов // *Журнал технической физики*. – 2013. – Т. 83, вып. 7. – С. 1-5.
7. Фахретдинов М. И. Дискретные бризеры и мультибризеры в модели ДНК Пейрара-Бишопа / М. И. Фахретдинов, Ф. К. Закирьянов, Е. Г. Екомасов // *Нелинейная динамика*. – 2015. – Т. 11, № 1. – С. 77-87.

8. Поршнев С. В. Численные методы на базе Mathcad / С. В. Поршнев, И. В. Беленкова. – СПб. : БХВ-Петербург, 2005. – 464 с.

REFERENCES

1. Yakushevich, L.V. (2004), [Nonlinear Physics of DNA] Wiley, New York.
2. Peyrard, M. (2004), Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA, *Nonlinearity*, no. 17, pp. R1-R40.
3. Shygayev, A.S., Ponomarev, O.A. and Lakhno, V.D. (2013), “Theoretical and experimental studies of the open state of DNA”, *Matematicheskaya biologiya i bioinformatika*, vol. 8, no. 2, pp. 553-664.
4. Peyrard, M. and Bishop, A.R. (1989), “Statistical Mechanics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation”, *Physical Review Letters*, vol. 62, pp. 2755-2758.
5. Dauxois, T., Peyrard, M. and Bishop, A.R. (1993), “Entropy-driven DNA denaturation”, *Physical Review E*, vol. 47, pp. R44-R47.
6. Fakhretdinov, M.I. and Zakirianov, F.K. (2013), “Discrete breathers in the model of DNA Peyrara-Bishop”, *Zhurnal Tekhnicheskoi Phisiki*, vol. 83, no. 7, pp. 1-5.
7. Fakhretdinov, M.I., Zakirianov, F.K. and Ekomasov, E.G. (2015), “Discrete breathers and multibrizery model DNA Peyrara-Bishop”, *Nelineinaya Dynamika*, vol. 11, no. 1, pp. 77-87.
8. Porshnev, S.V. and Belenkova, I.V. (2005), *Chislennye metody na baze Mathcad* [Numerical methods based Mathcad], BKhV-Peterburg, St. Petersburg.

удк 531/534:001.8

МЕТОДИ АПРОКСИМАЦІІ ФУНКЦІЙ ТА ІНТЕГРУВАННЯ У БЕЗСІТКОВИХ ПІДХОДАХ ЗАДАЧ МЕХАНІКИ

Гоменюк С. І., д. т. н., професор, Козлова О. С., аспірант

*Запорізький національний університет,
вул. Жуковського, 66, м. Запоріжжя, 69600, Україна*

oskozlova@gmail.com, serega78@gmail.com

Запропонований короткий огляд публікацій, у яких розглядається та досліджується застосування безсіткового підходу до розв'язання задач механіки деформівного твердого тіла. Особлива увага приділяється таким ключовим етапам безсіткового підходу, як апроксимація функцій форми та метод дискретизації диференційного рівняння.

Ключові слова: безсітковий метод, функція форми, слабе формулювання, сильне формулювання, задачі механіки.

МЕТОДЫ АППРОКСИМАЦИИ ФУНКЦИЙ И ИНТЕГРИРОВАНИЯ В БЕССЕТОЧНЫХ ПОДХОДАХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ

Гоменюк С. И., д. т. н., профессор, Козлова О. С., аспирант

*Запорожский национальный университет,
ул. Жуковского, 66, м. Запорожье, 69600, Украина*

oskozlova@gmail.com, serega78@gmail.com

Представлен краткий обзор публикаций, в которых рассматривается и исследуется применение бессеточного подхода к решению задач механики деформированного твердого тела. Особое внимание уделяется таким ключевым этапам бессеточного подхода, а именно аппроксимации функции формы и методу дискретизации дифференциального уравнения.

Ключевые слова: бессеточный метод, функция формы, слабая формулировка, сильная формулировка, задачи механики.