

DOI: 10.20098/j.cnki.1001-5132.2023.0718

α -螺旋蛋白中三分量高阶非线性薛定谔方程的怪波解

王梦雅, 陈婷婷, 王立洪*

(宁波大学 数学与统计学院, 浙江 宁波 315211)

摘要: 以三分量高阶非线性薛定谔方程为 α -螺旋蛋白中生物能量沿蛋白质分子链传输的控制方程, 研究三个相互耦合的波函数在极限状态下激发的怪波. 基于控制模型的 Lax 对表示, 利用规范变换得到了达布变换的行列式形式. 通过 Lax 对的变量分离和平移参数的引入, 给出了怪波激发的代数条件. 进一步利用幂级数的多项分裂构造怪波解的基础特征函数, 并由此导出退化的达布变换. 最后通过退化的达布变换获得怪波解, 并在不同参数下, 用三维图形示例怪波的波形演化及其极值轨迹.

关键词: 三分量高阶非线性薛定谔方程; Lax 对; 达布变换; 怪波

中图分类号: O175.29

文献标志码: A

文章编号: 1001-5132 (2024) 01-0020-11

1973 年, 乌克兰生物学家 Davydov^[1-2]提出生物能量和生物信息传递的孤子理论, 用数学模型研究 α -螺旋蛋白分子中激发产生的激子和分子链位移变换的运动规律. α -螺旋是蛋白质二级结构的主要类型之一^[3-5], 由肽基团(H-N-C=O)组成, 均匀地分布在三个氢键上, 形成螺旋结构^[6-7]. 一般来说, 在 Davydov 模型的低阶连续近似下, α -螺旋蛋白中沿着氢键连接的分子动力学可推导出非线性薛定谔方程, 如文献[8]中的公式(2.17)、[9]中的公式(3.1). 过去对 α -螺旋蛋白的动力学行为进行了大量研究, 特别是使用简化为单一分子链的单分量模型^[10]. 单一分子链沿着氢键的动力学是在连续极限下考虑的, 但忽略了与相邻氢键之间的耦合. 实际上, 在 α -螺旋蛋白模型中, 相邻氢键之间的耦合起着重要作用, 因此, 需要考虑三个螺旋氢键对生物能量传递机制的影响. 为更贴切地描述 α -螺旋蛋白由三个螺旋氢键组成分子链的形式, 文献[11]分析了 α -螺旋蛋白分子三个肽通道组成的结构, 通过改进的 Davydov 哈密顿函数来描述蛋白质分子中的孤子传输机制; 文献[12-13]确定了可积分的三分量耦合模型; 文献[7,14]考虑了可积耦

合的三分量非线性薛定谔方程来描述生物能量沿蛋白质分子链以孤子和呼吸子方式传输的模式; 文献[15]利用 Hirota 双线性法讨论了三分量非线性薛定谔方程的怪波(rogue wave)传播模式. 此外, 研究者还在 Davydov 模型中引入连续近似中的高阶项^[8]. 文献[16-17]在 Davydov-Scott 模型中研究了 α -螺旋蛋白中含高阶项的孤子动力学, 阐明了 Davydov 孤子的稳定性和动态特性. 本文将运用三分量高阶非线性薛定谔模型(也称三耦合 Hirota 方程)^[16-17]研究 α -螺旋蛋白中能量运输的怪波模式. 考虑 α -螺旋蛋白分子动力学高阶项和相互耦合动力学特性后, 文献[16-17]给出的方程为

$$\begin{cases} iq_{1,t} + q_{1,xx} / 2 + q_1 \sum_{j=1}^3 |q_j|^2 - i\gamma(q_{1,xxx} + 3q_{1,x} \sum_{j=1}^3 |q_j|^2 + 3q_1 \sum_{j=1}^3 q_{j,x} q_j^*) = 0, \\ iq_{2,t} + q_{2,xx} / 2 + q_2 \sum_{j=1}^3 |q_j|^2 - i\gamma(q_{2,xxx} + 3q_{2,x} \sum_{j=1}^3 |q_j|^2 + 3q_2 \sum_{j=1}^3 q_{j,x} q_j^*) = 0, \\ iq_{3,t} + q_{3,xx} / 2 + q_3 \sum_{j=1}^3 |q_j|^2 - i\gamma(q_{3,xxx} + 3q_{3,x} \sum_{j=1}^3 |q_j|^2 + 3q_3 \sum_{j=1}^3 q_{j,x} q_j^*) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

收稿日期: 2023-07-25.

宁波大学学报(理工版)网址: <http://journal.g.nbu.edu.cn/>

基金项目: 国家自然科学基金(12071304); 浙江省大学生科技创新活动计划(新苗人才计划)(2021R405089).

第一作者: 王梦雅, 硕士研究生, 主要研究方向: 孤子与可积方程. E-mail: wangmengya1998s@163.com

*通信作者: 王立洪, 副教授, 主要研究方向: 孤子与可积方程. E-mail: wanglihong@nbu.edu.cn

式中: i 为虚数单位; $q_j = q_j(x, t)$, $j=1, 2, 3$ 为第 j 个氢键中分子激发的振幅; 参数 γ 是实数; 波函数 q_j 加下标 t 和 x 分别表示其对时间变量 t 和空间变量 x 的偏导数; 上标 $*$ 表示复数共轭.

显然, 函数 q_j ($j=1, 2, 3$) 都为 0, 即生物能量不发生输运时, 是动力学方程(1)的解. 生物能量以孤波方式输运时的解由文献[16]给出; 文献[17]讨论了动力学方程(1)孤波的弹性碰撞和非弹性碰撞. 本文将考虑周期孤波输运能量的极限状态, 采用退化达布(Darboux)变换导出动力学方程(1)的怪波解, 讨论极限状态下能量输运的波形演化及其高峰和低谷的极值轨迹.

1 Lax 对表示与达布变换

根据文献[7, 16], 动力学方程(1)可转换为谱问题^[18], 其 Lax 对(Lax pair)为

$$\begin{cases} \phi_x = U\phi = (\lambda U_1 + U_0)\phi, \\ \phi_t = V\phi = (\lambda^3 V_3 + \lambda^2 V_2 + \lambda V_1 + V_0)\phi, \end{cases} \quad (2)$$

式中: λ 是复的谱参数; 列向量 $\phi = (\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4)^T$ 是由势函数 ϕ_j ($j=1, 2, 3, 4$) 组成的特征函数, 这里, 上标 T 表示转置.

取 Lax 对的 x 部分如下:

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{i}{2} \sigma_3, \sigma_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & I_3 \end{pmatrix}, \\ U_0 &= \begin{pmatrix} 0 & q \\ -q^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3)$$

其中, 0 和 I_3 分别表示零矩阵和三阶单位矩阵, $q = (q_1, q_2, q_3)$, 上标 $\dagger$ 表示 Hermitian 转置.

取 Lax 对的 t 部分如下:

$$\begin{aligned} V_3 &= \gamma U_1, \\ V_2 &= \gamma U_0 - \frac{1}{2} U_1, \\ V_1 &= -2\gamma U_1 (U_{0,x} - U_0^2) - \frac{1}{2} U_0, \\ V_0 &= -U_1 U_0^2 - \gamma [U_0, U_{0,x}] + U_1 U_{0,x} + \\ &\quad \gamma (2qq^\dagger U_0 - U_{0,xx}), \end{aligned} \quad (4)$$

则由零曲率方程 $U_t - V_x + [U, V] = 0$ 或协调性条件 $\phi_{xt} = \phi_{tx}$ 可导出动力学方程(1). 这里, 矩阵交换子 $[M, N] \equiv MN - NM$.

因此, 函数 q 是动力学方程(1)的解, 等价于零曲率方程成立, 也等价于 Lax 对(2)的特征函数 ϕ

满足协调性条件.

一方面, 引入新函数 $q^{[1]} = (q_1^{[1]}, q_2^{[1]}, q_3^{[1]})$, 在保持 Lax 对形式不变的情况下, 令

$$\begin{aligned} U^{[1]} &= \lambda U_1^{[1]} + U_0^{[1]}, U_1^{[1]} = U_1, \\ U_0^{[1]} &= \begin{pmatrix} 0 & q^{[1]} \\ -q^{[1]\dagger} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5)$$

即用 $q^{[1]}$ 替换 U_0 中的 q . 同时, V_j ($j=0, 1, 2, 3$) 中的 U_0 和 q 也做相同的替换获得 $V_j^{[1]}$, 从而获得 $V^{[1]}$. 此时, 若 $U^{[1]}$ 和 $V^{[1]}$ 满足零曲率方程 $U_t^{[1]} - V_x^{[1]} + [U^{[1]}, V^{[1]}] = 0$, 或等价地, Lax 对

$$\phi_x^{[1]} = U^{[1]} \phi^{[1]}, \phi_t^{[1]} = V^{[1]} \phi^{[1]}, \quad (6)$$

满足协调性条件 $\phi_{xt}^{[1]} = \phi_{tx}^{[1]}$, 可得出由 $q^{[1]}$ 分量构成的与动力学方程(1)形式上一样的方程组. 于是, $q^{[1]}$ 也是动力学方程(1)的解.

另一方面, 考虑作用于 Lax 对(2)的规范变换^[19]

$$T = \lambda I_4 - S,$$

其中, I_4 是四阶单位矩阵, $S = (s_{ij})_{4 \times 4}$, 则

$$\begin{aligned} \phi^{[1]} &= T\phi, \\ U^{[1]} &= T_x T^{-1} + T U T^{-1}, \\ V^{[1]} &= T_t T^{-1} + T V T^{-1} \end{aligned} \quad (7)$$

满足谱问题

$$\phi_x^{[1]} = U^{[1]} \phi^{[1]}, \phi_t^{[1]} = V^{[1]} \phi^{[1]} \quad (8)$$

和零曲率方程

$$\begin{aligned} U_t^{[1]} - V_x^{[1]} + [U^{[1]}, V^{[1]}] = \\ T(U_t - V_x + [U, V])T^{-1} = 0. \end{aligned}$$

于是, 引入达布变换 T , 使得 $U^{[1]}$ 和 $V^{[1]}$ 同时满足零曲率方程和 Lax 对形式不变, 即

$$T_x T^{-1} + T U T^{-1} = \lambda U_1 + U_0^{[1]}, \quad (9)$$

$$T_t T^{-1} + T V T^{-1} = \lambda^3 V_3 + \lambda^2 V_2^{[1]} + \lambda V_1^{[1]} + V_0^{[1]}, \quad (10)$$

从而, 由式(9)和(10)关于谱参数 λ 的各阶系数恒等可得方程组:

$$\lambda^1: U_0^{[1]} - U_0 + S U_1 - U_1^{[1]} S = 0, \quad (11a)$$

$$\lambda^0: S_x + S U_0 - U_0^{[1]} S = 0, \quad (11b)$$

$$\lambda^3: V_2^{[1]} - V_2 + S V_3 - V_3^{[1]} S = 0, \quad (11c)$$

$$\lambda^2: V_1^{[1]} - V_1 + S V_2 - V_2^{[1]} S = 0, \quad (11d)$$

$$\lambda^1: V_0^{[1]} - V_0 + S V_1 - V_1^{[1]} S = 0, \quad (11e)$$

$$\lambda^0: S_t + S V_0 - V_0^{[1]} S = 0. \quad (11f)$$

由式(11a)可得 $U_0^{[1]} = U_0 + [U_1, S]$, 即

$$q_1^{[1]} = q_1 - i s_{12}, q_2^{[1]} = q_2 - i s_{13}, q_3^{[1]} = q_3 - i s_{14}, \quad (12)$$

这里, 式(12)给出了由动力学方程(1)的一组解 $\mathbf{q}$ 通过一次达布变换得到一组新解 $\mathbf{q}^{[1]}$ 的计算公式. 接下来将利用某个已知的解 $\mathbf{q} = \mathbf{q}^{[0]}$ 和 λ 及其关联的特征函数 $\boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\varphi}^{[0]}$ 来构造达布变换中的 $\mathbf{S}$ 矩阵, 特别是元素 s_{12}, s_{13}, s_{14} 的表达式.

当 $\mathbf{q} = \mathbf{q}^{[0]}$ 时, 记特征函数 $\boldsymbol{\varphi}_j = (\varphi_{1j}, \varphi_{2j}, \varphi_{3j}, \varphi_{4j})^T$ 是动力学方程(1)在谱参数 $\lambda = \lambda_j$ 下的解. 由 λ_j 及其关联的 $\boldsymbol{\varphi}_j$ 构造矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_j$ 和 $\mathbf{H}_j$,

$$\boldsymbol{\Sigma}_j = \boldsymbol{\Sigma}(\lambda_j) = \begin{pmatrix} \lambda_j & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_j^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_j^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_j^* \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_j = \mathbf{H}(\boldsymbol{\varphi}_j) = \begin{pmatrix} \varphi_{1j} & -\varphi_{2j}^* & -\varphi_{3j}^* & -\varphi_{4j}^* \\ \varphi_{2j} & \varphi_{1j}^* & 0 & 0 \\ \varphi_{3j} & 0 & \varphi_{1j}^* & 0 \\ \varphi_{4j} & 0 & 0 & \varphi_{1j}^* \end{pmatrix}, \quad (13)$$

则对于任意谱参数 $\lambda_1 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, 取

$$\mathbf{S}_1 = \mathbf{H}_1 \boldsymbol{\Sigma}_1 \mathbf{H}_1^{-1}, \quad (14)$$

直接计算可以验证, 当 $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1$ 时, 方程(11a)~(11f)均成立. 需要特别指出的是, $\mathbf{H}_1$ 矩阵中的第一列是 $\mathbf{q} = \mathbf{q}^{[0]}$ 时动力学方程(1)在 $\lambda = \lambda_1$ 时的特征函数, 其他几列通常都不是特征函数, 而是与第一列复正交的向量.

由式(14)可得 $\mathbf{S}_1 \mathbf{H}_1 = \mathbf{H}_1 \boldsymbol{\Sigma}_1$, 或

$$\mathbf{H}_1^T \mathbf{S}_1^T = \boldsymbol{\Sigma}_1^T \mathbf{H}_1^T. \quad (15)$$

于是, 达布变换中的 $\mathbf{S}_1$ 矩阵可以通过方程(15)完全确定. 这里, 特别地考察待定参数 s_{12}, s_{13}, s_{14} 所在的 $\mathbf{S}_1^T$ 的第一列, 于是可得线性方程组

$$\begin{pmatrix} \varphi_{11} & \varphi_{21} & \varphi_{31} & \varphi_{41} \\ -\varphi_{21}^* & \varphi_{11}^* & 0 & 0 \\ -\varphi_{31}^* & 0 & \varphi_{11}^* & 0 \\ -\varphi_{41}^* & 0 & 0 & \varphi_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{11} \\ s_{12} \\ s_{13} \\ s_{14} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \varphi_{11} \\ -\lambda_1^* \varphi_{21}^* \\ -\lambda_1^* \varphi_{31}^* \\ -\lambda_1^* \varphi_{41}^* \end{pmatrix}. \quad (16)$$

简记线性方程组(16)的常数项为

$$\boldsymbol{\beta}^{[1]} = \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\varphi}_1) = (\boldsymbol{\Sigma}_1 \mathbf{H}_1^T) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \varphi_{11} \\ -\lambda_1^* \varphi_{21}^* \\ -\lambda_1^* \varphi_{31}^* \\ -\lambda_1^* \varphi_{41}^* \end{pmatrix}, \quad (17)$$

则利用克莱姆法则, 由式(12)和(16)可得定理 1.

定理 1 设 $\mathbf{q}^{[0]} = (q_1^{[0]}, q_2^{[0]}, q_3^{[0]})^T$ 是动力学方程(1)的解, 当 $\mathbf{q} = \mathbf{q}^{[0]}$ 时, $\boldsymbol{\varphi}_1$ 是 Lax 对(2)中谱参数

$\lambda = \lambda_1 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ 关联的特征函数, 则一次达布变换的表达式

$$\begin{aligned} q_1^{[1]} &= q_1^{[0]} - i \frac{|\mathbf{W}_1^{[1]}|}{|\mathbf{W}_0^{[1]}|}, \\ q_2^{[1]} &= q_2^{[0]} - i \frac{|\mathbf{W}_2^{[1]}|}{|\mathbf{W}_0^{[1]}|}, \\ q_3^{[1]} &= q_3^{[0]} - i \frac{|\mathbf{W}_3^{[1]}|}{|\mathbf{W}_0^{[1]}|}, \end{aligned} \quad (18)$$

也是动力学方程(1)的解. 其中, $\mathbf{W}_0^{[1]} = \mathbf{W}_0(\boldsymbol{\varphi}_1)$ 是 $\mathbf{H}_1$ 的转置, $\mathbf{W}_1^{[1]}, \mathbf{W}_2^{[1]}, \mathbf{W}_3^{[1]}$ 是 $\boldsymbol{\beta}^{[1]}$ 依次替换 $\mathbf{W}_0^{[1]}$ 最右侧三列中的一列, 即

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_0^{[0]} &= \begin{pmatrix} \varphi_{11} & \varphi_{21} & \varphi_{31} & \varphi_{41} \\ -\varphi_{21}^* & \varphi_{11}^* & 0 & 0 \\ -\varphi_{31}^* & 0 & \varphi_{11}^* & 0 \\ -\varphi_{41}^* & 0 & 0 & \varphi_{11}^* \end{pmatrix}, \\ \mathbf{W}_1^{[0]} &= \begin{pmatrix} \varphi_{11} & \lambda_1 \varphi_{11} & \varphi_{31} & \varphi_{41} \\ -\varphi_{21}^* & -\lambda_1^* \varphi_{21}^* & 0 & 0 \\ -\varphi_{31}^* & -\lambda_1^* \varphi_{31}^* & \varphi_{11}^* & 0 \\ -\varphi_{41}^* & -\lambda_1^* \varphi_{41}^* & 0 & \varphi_{11}^* \end{pmatrix}, \\ \mathbf{W}_2^{[0]} &= \begin{pmatrix} \varphi_{11} & \varphi_{21} & \lambda_1 \varphi_{11} & \varphi_{41} \\ -\varphi_{21}^* & \varphi_{11}^* & -\lambda_1^* \varphi_{21}^* & 0 \\ -\varphi_{31}^* & 0 & -\lambda_1^* \varphi_{31}^* & 0 \\ -\varphi_{41}^* & 0 & -\lambda_1^* \varphi_{41}^* & \varphi_{11}^* \end{pmatrix}, \\ \mathbf{W}_3^{[0]} &= \begin{pmatrix} \varphi_{11} & \varphi_{21} & \varphi_{31} & \lambda_1 \varphi_{11} \\ -\varphi_{21}^* & \varphi_{11}^* & 0 & -\lambda_1^* \varphi_{21}^* \\ -\varphi_{31}^* & 0 & \varphi_{11}^* & -\lambda_1^* \varphi_{31}^* \\ -\varphi_{41}^* & 0 & 0 & -\lambda_1^* \varphi_{41}^* \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

定理 1 给出了从种子解 $\mathbf{q}^{[0]}$ 出发, 利用给定谱参数 λ_1 所关联的特征函数 $\boldsymbol{\varphi}_1$ 构造一次达布变换获得新解 $\mathbf{q}^{[1]}$ 的公式. 因此, 有了 Lax 对的表示形式, 动力学方程(1)可以从一组解对 $(\boldsymbol{\varphi}^{[0]}, \mathbf{q}^{[0]}; \lambda)$, 通过一次达布变换构造另一组解对 $(\boldsymbol{\varphi}^{[1]}, \mathbf{q}^{[1]}; \lambda, \lambda_1)$. 接着, 若以 $(\boldsymbol{\varphi}^{[1]}, \mathbf{q}^{[1]}; \lambda, \lambda_1)$ 为种子, 用新的谱参数 $\lambda_2 (\neq \lambda_1)$, 第二次使用达布变换可以构造出另一新解对 $(\boldsymbol{\varphi}^{[2]}, \mathbf{q}^{[2]}; \lambda, \lambda_1, \lambda_2)$. 将第一次达布变换和第二次达布变换复合, 称之为二重达布变换. 以此类推, 不妨记 n 重达布变换后的解对为 $(\boldsymbol{\varphi}^{[n]}, \mathbf{q}^{[n]}; \lambda, \lambda_1, \dots, \lambda_n)$, 其中 $\lambda_j (j=1, 2, \dots, n)$ 互不相等.

利用定理 1, 可以从种子解 $\mathbf{0}$ 解出发, 生成动

力学方程(1)的孤子解(soliton)和退化孤子解(positon)^[20], 也可以从平面波解出发, 生成呼吸子解^[21]和退化呼吸子解. 本文将以平面波解作为种子解, 借助退化的达布变换构造动力学方程(1)的怪波解.

2 怪波的激发条件

在下文中, 将取定种子解 $q^{[0]}$ 为平面波解, 即

$$q_j^{[0]} = c_j \exp(ip_j), \quad j=1,2,3, \quad (19)$$

其中 $p_j = a_j x + b_j t$, $a_j, b_j, c_j \in \mathbb{R}$, b_j 满足色散关系:

$$b_j = \left(3a_j c^2 + 3(c_1^2 a_1 + c_2^2 a_2 + c_3^2 a_3) - a_j^3 \right) \gamma - \frac{1}{2} a_j^2 + c^2, \quad c^2 = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2. \quad (20)$$

此时, 利用规范变换可将 Lax 对(2)变量分离, 并进一步给出与种子解关联的特征函数及怪波激发的条件.

首先, 引入参数 $d_0 = e^{-i(u_0 x + v_0 t)}$ 和对角矩阵 $R_0 = \text{diag}(1, e^{-i\rho_1}, e^{-i\rho_2}, e^{-i\rho_3})$, 构造可逆矩阵 R ,

$$R = d_0 R_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i(a_1 x + b_1 t)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i(a_2 x + b_2 t)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i(a_3 x + b_3 t)} \end{pmatrix} \times e^{-i(u_0 x + v_0 t)}, \quad (21)$$

则由规范变换 $\varphi = R\psi$, 可得变量已分离的 Lax 对

$$\psi_x = \Omega \psi, \psi_t = A \psi, \quad (22)$$

其中,

$$\Omega = \begin{pmatrix} i\left(-\frac{\lambda}{2} + u_0\right) & c_1 & & \\ -c_1 & i\left(\frac{\lambda}{2} + a_1 + u_0\right) & & \\ -c_2 & 0 & & \\ -c_3 & 0 & & \\ & c_2 & c_3 & \\ & 0 & 0 & \\ \leftarrow i\left(\frac{\lambda}{2} + a_2 + u_0\right) & & 0 & \\ & 0 & i\left(\frac{\lambda}{2} + a_3 + u_0\right) & \end{pmatrix}. \quad (23)$$

简记 $\bar{\Omega} = \Omega - iu_0 = \Omega_{u_0=0}$, 容易验证

$$A = p(\Omega) = \gamma \bar{\Omega}^3 + p_2 \bar{\Omega}^2 + p_1 \bar{\Omega} + p_0, \quad (24)$$

其中多项式系数分别为

$$\begin{aligned} p_2 &= \frac{1}{2} i(1 - 3\lambda\gamma), \\ p_1 &= \frac{1}{2} \lambda + 3 \left(c^2 - \frac{1}{4} \lambda^2 \right) \gamma, \\ p_0 &= i \left(-\frac{3}{8} \lambda^3 - \frac{3}{2} \lambda c^2 + 3(a_1 c_1^2 + a_2 c_2^2 + a_3 c_3^2) \right) \gamma + \\ &\quad i \left(\frac{1}{8} \lambda^2 + c^2 + v_0 \right). \end{aligned}$$

由式(24)容易验证, $[A, \Omega] = 0$, 即矩阵 A, Ω 可交换.

设 u_j ($j=1,2,3,4$) 是矩阵 Ω 的特征值, 则由式(24)可得, 矩阵 A 的特征值 v_j 满足

$$v_j = p(u_j) = \gamma(u_j - iu_0)^3 + p_2(u_j - iu_0)^2 + p_1(u_j - iu_0) + p_0, \quad (25)$$

且 u_j 和 v_j 具有相同的特征向量 η_j ,

$$\eta_j = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c_1}{i\left(a_1 + u_0 + \frac{1}{2}\lambda\right) - u_j} \\ \frac{c_2}{i\left(a_2 + u_0 + \frac{1}{2}\lambda\right) - u_j} \\ \frac{c_3}{i\left(a_3 + u_0 + \frac{1}{2}\lambda\right) - u_j} \end{pmatrix}.$$

令

$$\Psi = (\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4),$$

其中 $\theta_j = \exp(u_j x + v_j t) \eta_j$, $j=1,2,3,4$, 则 Ψ 与 $\exp(\Omega x) \exp(Ax)$ 等价, 都是式(22)的基解矩阵. 因此,

$$\varphi = R\psi = R\Psi\xi \quad (26)$$

是谱参数 λ 和种子解 $q_j^{[0]}$ ($j=1,2,3$) 关联的特征函数, 其中, ξ 是四维的常数列向量.

两组 Lax 对(2)和(22), 它们的特征函数通过可逆变换 R 建立了联系, 而它们各自达布变换待求的矩阵 S 的元素也可以通过可逆变换 R 建立联系. 由于 $R_0^{-1} = R_0^*$, 可得定理 2.

定理 2 若 $X = S$ 满足线性方程组

$$H(\psi)^T \cdot X = \beta(\psi),$$

则 $X' = R_0^{-1} S$ 满足线性方程组

$$H(R\psi)^T \cdot X' = \beta(R\psi),$$

其中, 函数 $H(\cdot)$ 和 $\beta(\cdot)$ 分别由式(13)和(17)定义.

证明 考察线性方程组

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 & f_3 & f_4 \\ -f_2^* & f_1^* & 0 & 0 \\ -f_3^* & 0 & f_1^* & 0 \\ -f_4^* & 0 & 0 & f_1^* \end{pmatrix} \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \lambda f_1 \\ -\lambda^* f_2^* \\ -\lambda^* f_3^* \\ -\lambda^* f_4^* \end{pmatrix},$$

若 $\mathbf{X} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^T$ 满足上述方程, 则直接计算可得 $\mathbf{X}' = \mathbf{R}_0^{-1} \mathbf{X} = (x_1, x_2 e^{i\rho_1}, x_3 e^{i\rho_2}, x_4 e^{i\rho_3})^T$ 满足下列方程:

$$\begin{pmatrix} f_1 d_0 & f_2 d_0 e^{-i\rho_1} & f_3 d_0 e^{-i\rho_2} & f_4 d_0 e^{-i\rho_3} \\ -f_2^* d_0^* e^{i\rho_1} & f_1^* d_0^* & 0 & 0 \\ -f_3^* d_0^* e^{i\rho_2} & 0 & f_1^* d_0^* & 0 \\ -f_4^* d_0^* e^{i\rho_3} & 0 & 0 & f_1^* d_0^* \end{pmatrix} \mathbf{X}' = \begin{pmatrix} \lambda f_1 d_0 \\ -\lambda^* f_2^* d_0^* e^{i\rho_1} \\ -\lambda^* f_3^* d_0^* e^{i\rho_2} \\ -\lambda^* f_4^* d_0^* e^{i\rho_3} \end{pmatrix},$$

用 $\mathbf{H}$ 、 $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\mathbf{R}$ 来表示这两个线性方程组, 可知定理 2 成立. 证毕. $\square$

由于 $\mathbf{R}$ 矩阵的性质和 $\mathbf{H}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 函数构造的矩阵的特点, 定理 2 给出了 Lax 对(22)在其达布变换中求解的 s_{lj} 与 Lax 对(2)在其达布变换中求解的 s'_{lj} 之间的比例关系, 即 $s'_{lj} = s_{lj} e^{i\rho_{j-1}}$, $j = 2, 3, 4$. 因此, 接下来将集中讨论 Lax 对(22)中特征函数 $\boldsymbol{\psi}$ 的构造及其 s_{lj} 的表示.

为了获得呼吸波传播的极限波形态, 即怪波解, 也称为 Peregrine 孤子^[22-23]或(准)有理解, 本文考虑共振条件, 即特征值 u_j ($j = 1, 2, 3, 4$) 趋向同一值而形成四重根的条件. 并且利用在规范变换(21)中引入的平移参数 u_0 , 将矩阵 $\boldsymbol{\Omega}$ 的特征多项式

$$|u\mathbf{I}_4 - \boldsymbol{\Omega}| = u^4 + \delta_3 u^3 + \delta_2 u^2 + \delta_1 u + \delta_0$$

的四重根平移到零点. 于是, 可获得 x 部分关于怪波激发的条件:

$$\delta_3 = \delta_2 = \delta_1 = \delta_0 = 0.$$

同时, 利用平移参数 v_0 将矩阵 $\mathbf{A}$ 的特征值平移至零点. 于是, 可得其中一组怪波激发的条件:

$$\begin{cases} a_2 = a_1 + c_1, a_3 = a_1 - c_1, \\ c_2 = c_3 = \sqrt{2}c_1, u_0 = -\frac{1}{2}a_1 - ic_1, \\ v_0 = \left(\frac{1}{2}a_1(a_1^2 - 18c_1^2)\gamma - \frac{3}{2}c_1^2 + \frac{1}{4}a_1^2\right) + \\ \quad i(c_1(3a_1^2 - 16c_1^2)\gamma + a_1c_1) \end{cases} \quad (27)$$

和谱参数 λ 激发怪波的临界值:

$$\lambda_0 = -a_1 + 4ic_1. \quad (28)$$

当激发条件式(27)和(28)同时成立时, 色散关系式(20)可整理为

$$\begin{cases} b_1 = a_1(-a_1^2 + 30c_1^2)\gamma - \frac{1}{2}a_1^2 + 5c_1^2, \\ b_2 = (-a_1^3 + 27a_1c_1^2 - 3a_1^2c_1 + 14c_1^3)\gamma + \\ \quad \frac{9}{2}c_1^2 - \frac{1}{2}a_1^2 - a_1c_1, \\ b_3 = (-a_1^3 + 27a_1c_1^2 + 3a_1^2c_1 - 14c_1^3)\gamma + \\ \quad \frac{9}{2}c_1^2 - \frac{1}{2}a_1^2 + a_1c_1. \end{cases} \quad (29)$$

3 基础特征函数与退化达布变换

在满足激发条件式(27)的情况下, 当 $\lambda = \lambda_0$ 时, 矩阵 $\boldsymbol{\Omega}$, $\mathbf{A}$ 相似于退化的若当块. 现考虑 λ_0 引入微扰量, 取

$$\lambda_1 = \lambda_0 + c_1\epsilon^4 = -a_1 + 4ic_1 + c_1\epsilon^4, \quad (30)$$

考察 λ_1 关联的特征函数. 此时, 由式(25), 对 Lax 对(22)的特征函数 $\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\xi}$ 关于 ϵ 泰勒展开可得

$$\boldsymbol{\psi} = (\boldsymbol{\Psi}_0 + \boldsymbol{\Psi}_1\epsilon + \boldsymbol{\Psi}_2\epsilon^2 + \cdots + \boldsymbol{\Psi}_j\epsilon^j + \cdots)\boldsymbol{\xi},$$

令常数向量 $\boldsymbol{\xi}$ 分别为

$$\boldsymbol{\xi}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\xi}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ i \\ 1 \\ -i \end{pmatrix}, \boldsymbol{\xi}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\xi}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad (31)$$

计算可得一组幂级数的多项分裂(multisection)构成的特征函数:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\psi}_0 = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\xi}_0 = \boldsymbol{\phi}_0\epsilon^0 + \boldsymbol{\phi}_4\epsilon^4 + \boldsymbol{\phi}_8\epsilon^8 + \cdots + \\ \quad \boldsymbol{\phi}_{4j}\epsilon^{4j} + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} \boldsymbol{\phi}_{4j}\epsilon^{4j}, \\ \boldsymbol{\psi}_1 = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\phi}_1\epsilon^1 + \boldsymbol{\phi}_5\epsilon^5 + \boldsymbol{\phi}_9\epsilon^9 + \cdots + \\ \quad \boldsymbol{\phi}_{4j+1}\epsilon^{4j+1} + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} \boldsymbol{\phi}_{4j+1}\epsilon^{4j+1}, \\ \boldsymbol{\psi}_2 = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\xi}_2 = \boldsymbol{\phi}_2\epsilon^2 + \boldsymbol{\phi}_6\epsilon^6 + \boldsymbol{\phi}_{10}\epsilon^{10} + \cdots + \\ \quad \boldsymbol{\phi}_{4j+2}\epsilon^{4j+2} + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} \boldsymbol{\phi}_{4j+2}\epsilon^{4j+2}, \\ \boldsymbol{\psi}_3 = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\xi}_3 = \boldsymbol{\phi}_3\epsilon^3 + \boldsymbol{\phi}_7\epsilon^7 + \boldsymbol{\phi}_{11}\epsilon^{11} + \cdots + \\ \quad \boldsymbol{\phi}_{4j+3}\epsilon^{4j+3} + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} \boldsymbol{\phi}_{4j+3}\epsilon^{4j+3}, \end{cases} \quad (32)$$

其中, $\phi_{j+k} = \Psi_{4j+k} \xi_k$ ($k=0,1,2,3; j=0,1,2,\dots$) 是由关于 x, t 的多项式组成的向量.

本文称

$$R\psi_0, R\psi_1, R\psi_2, R\psi_3 \quad (33)$$

为 Lax 对(2)构造怪波解的基础特征函数组. 分别将基础特征函数 $R\psi_j$ 作为 ϕ , 用于达布变换生成动力学方程(1)的新解. 对于新解, 考虑 $\lambda_1 \rightarrow \lambda_0$ 时的极限, 即 $\epsilon \rightarrow 0$ 时动力学方程(1)的极限状态. 此时根据定理 2 和罗必塔法则, 原定理 1 可退化为定理 3.

定理 3 设 $\phi_k = R\psi_k$ ($k=1,2,3$) 由式(21)和(32)定义, 是动力学方程(1)对应谱参数 $\lambda_1 = \lambda_0 + c_1 \epsilon^4$ 和种子解 $q^{[0]}$ 关联的基础特征函数, 则下列用行列式形式表出的函数 $q_k^{[1]} = (q_{1,k}^{[1]}, q_{2,k}^{[1]}, q_{3,k}^{[1]})$ 是动力学方程(1)的一阶怪波解:

$$q_{j,k}^{[1]} = \left(c_j - i \frac{W_{j,k}^{[1]}}{W_{0,k}^{[1]}} \right) \exp(i(a_j x + b_j t)), \quad j=1,2,3, \quad (34)$$

其中,

$$W_{j,k}^{[1]} = W_{j,k}^{[1]}(\psi_k) = \frac{\partial^k}{\partial \epsilon^k} W_j^{[1]}(\psi_k) \Big|_{\epsilon=0}.$$

证明 当极限 $\epsilon \rightarrow 0$ 时, 由罗必塔法则可得, 或等价地直接提取分子分母矩阵中每个元素关于 ϵ 最低次幂的系数可得.

定理 3 考虑了极限情况下的解. 在此(准)有理解(34)的表达式中, ψ_k 关联的 $s_{1,j+1} = |W_{j,k}^{[1]}| / |W_{0,k}^{[1]}|$ 为有理函数, 而因子 $\exp(i\rho_j)$ 来源于定理 2 指出的 R_0 . 需要说明的是, 当 $k=0$ 时, 也可以根据定理 3 计算一次达布变换, 获得的解 $q_0^{[1]}$ 依旧为平面波解.

4 怪波的波形演化与极值轨迹

怪波也称为极端波、异常波. 为了展示在极限状态下, α -螺旋蛋白的生物能量和生物信息传递动力学性质, 本节利用定理 3 给出 $k=1, 2, 3$ 时一阶怪波解的表达式, 讨论参数在不同数值下, 尤其是 a_1 为零和不为零时, 怪波解各个分量的波形演化和波峰波谷轨迹.

4.1 参数 $k=1$ 时的怪波

当 $k=1$ 时, 三分量高阶非线性薛定谔方程的一阶怪波解为

$$\begin{cases} q_{1,1}^{[1]} = \left(1 + 2(2 - 2c_1 G_1) \times \frac{2c_1 F_1}{H_1} \right) \times q_1^{[0]}, \\ q_{2,1}^{[1]} = \left(1 + (1-i)(1-i-2c_1 G_1) \times \frac{2c_1 F_1}{H_1} \right) \times q_2^{[0]}, \\ q_{3,1}^{[1]} = \left(1 + (1+i)(1+i-2c_1 G_1) \times \frac{2c_1 F_1}{H_1} \right) \times q_3^{[0]}, \end{cases} \quad (35)$$

其中,

$$F_1 = P_2 + ic_1 P_1, \quad G_1 = P_2 - ic_1 P_1,$$

$$H_1 = 4c_1^4 P_1^2 + (2c_1 P_2 - 1)^2 + 1.$$

这里,

$$P_1 = (6a_1 \gamma + 1)t, \quad P_2 = x - (3\gamma a_1^2 - 18\gamma c_1^2 + a_1)t.$$

固定某个时刻 t , 考察各个分量关于空间变量 x 的驻点, 可得各个分量关于时刻 t 的极值轨迹.

计算可得, 波函数 $q_{1,1}^{[1]}$ 的峰值轨迹为

$$x = (3a_1^2 \gamma - 18c_1^2 \gamma + a_1)t + \frac{1}{2c_1}, \quad (36)$$

谷值轨迹为

$$x = (3a_1^2 \gamma - 18c_1^2 \gamma + a_1)t + \frac{1}{2c_1} \pm \frac{\sqrt{3}}{2c_1} \sqrt{1 + 4c_1^4 (6a_1 \gamma + 1)^2 t^2}. \quad (37)$$

将式(36)和(37)代入 $|q_{1,1}^{[1]}|$, 可得峰值和谷值关于时间变量 t 的轨迹分别为

$$\begin{aligned} |c_1| \sqrt{1 + \frac{8}{1 + 4c_1^4 (6a_1 \gamma + 1)^2 t^2}}, \\ |c_1| \sqrt{1 - \frac{1}{1 + 4c_1^4 (6a_1 \gamma + 1)^2 t^2}}. \end{aligned} \quad (38)$$

显然, 在 $t=0$ 时, 波形分别在 $x = (2c_1)^{-1}$ 和 $x = (1 \pm \sqrt{3})(2c_1)^{-1}$ 处达到无量纲化的最大值 $3|c_1|$ 和最小值 0. 即当 $t=0$ 时, 有一个三倍于平均振幅的波峰极值出现, 且两侧会出现对称的波谷极值. 这种剧烈的生物能量传递信号对 α -螺旋蛋白的三个氢键的动力学影响有待实验观测和研究. 当 $t \rightarrow \pm\infty$ 时, 波形趋向为一峰二谷形状的孤波, 且峰值和谷值都趋向于渐近平面高度 $|c_1|$.

同时, 波函数 $q_{2,1}^{[1]}$ 和 $q_{3,1}^{[1]}$ 的极值轨迹都为

$$x = (3a_1^2 \gamma - 18c_1^2 \gamma + a_1)t + \frac{1}{2c_1} \pm \frac{1}{2c_1 \sqrt{3}} \sqrt{1 + 4c_1^4 (6a_1 \gamma + 1)^2 t^2}. \quad (39)$$

将式(39)代入 $|q_{2,1}^{[1]}|$ 或 $|q_{3,1}^{[1]}|$, 可得极值关于时间变量 t 的轨迹为

$$\sqrt{2}|c_1| \sqrt{1 \pm \frac{3\sqrt{3}c_1^2(6a_1\gamma+1)t}{(1+4c_1^4(6a_1\gamma+1)^2t^2)^{\frac{3}{2}}}}. \quad (40)$$

当 $t = \pm\sqrt{2}(4c_1^2(6a_1\gamma+1))^{-1}$ 时, 极值轨迹分别达到最大值 $2|c_1|$ 和最小值0. 当 $t \rightarrow \pm\infty$ 时, 波形趋向为一峰一谷形状的孤波, 且峰值和谷值都趋向于渐近平面高度 $|c_1|$.

种子解中参数 a_1 是 x 的系数, a_1 是否为常数0对波形有显著影响. 当 $a_1 = 0$ 时, 方程(28)可获得孤波解. 例如, 取 $a_1 = 0, c_1 = \gamma = 1$, $q_{1,1}^{[1]}, q_{2,1}^{[1]}, q_{3,1}^{[1]}$ 的波形演化如图1所示, 区域 $[-2, 2] \times [-40, 40]$ 是波形的主体部分, 其他区域已衰减到渐近平面的邻域.

由式(38)可得, 波函数 $q_{1,1}^{[1]}$ 的峰值轨迹和两个谷值轨迹分别为

$$\sqrt{1 + \frac{8}{4t^2 + 1}}, \sqrt{1 - \frac{1}{4t^2 + 1}}, \sqrt{1 - \frac{1}{4t^2 + 1}}, \quad (41)$$

其极值轨迹如图1(a)中虚线所示, 其中红色虚线是波峰轨迹线, 蓝色虚线是波谷轨迹线. 观察峰值和谷值的表达式可知, 当 $t = 0$ 时, 波形达到了最大值和最小值, 分别为3, 0, 0.

同时, 波函数 $q_{2,1}^{[1]}$ 和 $q_{3,1}^{[1]}$ 的极值轨迹为

$$x = \sqrt{2}\sqrt{1 \pm 3\sqrt{3}t(4t^2 + 1)^{-3/2}}. \quad (42)$$

当 $t = \pm\sqrt{2}/4$ 时, 极值轨迹分别达到极值0和2.

当 $a_1 \neq 0$ 时, 方程(35)可获得时间-空间双局域的怪波解. 例如, 取 $a_1 = 1, c_1 = \gamma = 1$ 时, 波函数 $q_{1,1}^{[1]}, q_{2,1}^{[1]}, q_{3,1}^{[1]}$ 的波形演化如图2所示, 其中虚线是 t 时刻极值的轨迹线. 两条极值轨迹的表达式是

$$x = \sqrt{2}\sqrt{1 \pm 21\sqrt{3}t(196t^2 + 1)^{-3/2}}. \quad (43)$$

当 $t = \pm\sqrt{2}/28$ 时, 极值轨迹分别达到最大值2和最小值0.

4.2 参数 $k = 2$ 时的怪波

当 $k = 2$ 时, 三分量高阶非线性薛定谔方程的一阶怪波解为

$$\begin{cases} q_{1,2}^{[1]} = \left(1 + 4(c_1^2 G_2 + c_1 G_1 - 1) \times \frac{2c_1 F_2}{H_2}\right) \times q_1^{[0]}, \\ q_{2,2}^{[1]} = \left(1 + (1-i)((2c_1^2 G_2 + 1) - i(2c_1 G_1 - 1)) \times \frac{2c_1 F_2}{H_2}\right) \times q_2^{[0]}, \\ q_{3,2}^{[1]} = \left(1 + (1+i)((2c_1^2 G_2 + 1) + i(2c_1 G_1 - 1)) \times \frac{2c_1 F_2}{H_2}\right) \times q_3^{[0]}, \end{cases} \quad (44)$$

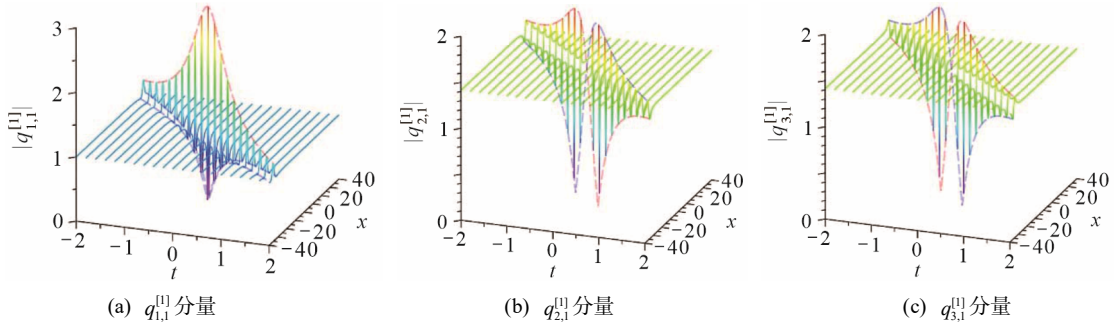


图1 一阶怪波解 $q_1^{[1]}$ 各个分量的波形演化($a_1 = 0, c_1 = \gamma = 1$)

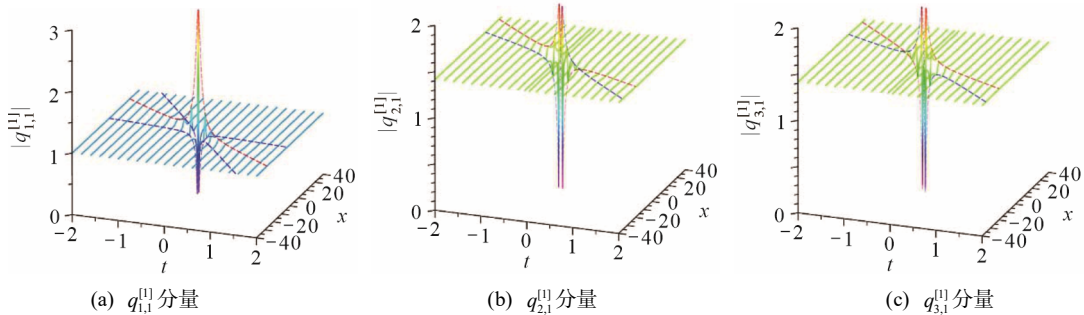


图2 一阶怪波解 $q_1^{[1]}$ 各个分量的波形演化($a_1 = 1, c_1 = \gamma = 1$)

其中,

$$F_2 = (i(2c_1P_2 + 1)P_1 + P_3)c_1 + (P_2 + ic_1P_1),$$

$$G_2 = i(2c_1P_2 + 1)P_1 - P_3,$$

$$H_2 = 4c_1^4P_1^2(2c_1P_2 + 1)^2 + (2c_1P_2 - 1)^2 + 4c_1^4P_1^2 + 4c_1^4P_3^2 + 1,$$

这里,

$$P_3 = x^2 + (6(6c_1^2 - a_1^2)\gamma - 2a_1)xt + (9(a_1^4 - 16a_1^2c_1^2 + 36c_1^4)\gamma^2 + 6a_1(a_1^2 - 8c_1^2)\gamma + a_1^2 - c_1^2)t^2 + 6c_1t\gamma.$$

鉴于 $k=2$ 的时候波函数的极值轨迹线是四次多项式的根, 在一般情况下, 极值轨迹的显式表达式过于繁长, 为免赘述, 仅在示例中用三维虚线表出.

当 $a_1=0, c_1=\gamma=1$ 时, 波函数 $q_{1,2}^{[1]}, q_{2,2}^{[1]}, q_{3,2}^{[1]}$ 的波形演化如图3所示, 其中虚线是波峰和波谷所在的极值轨迹线. 图示区域 $[-5, 15] \times [-300, 100]$ 是波形的主体部分, 其余区域的波形已逐渐衰减到渐近平面的邻域.

当 $a_1=1, c_1=\gamma=1$ 时, 波函数 $q_{1,2}^{[1]}, q_{2,2}^{[1]}, q_{3,2}^{[1]}$ 的波形演化如图4所示, 其中虚线是波峰和波谷所在的极值轨迹线. 图示区域 $[-2, 2] \times [-30, 30]$ 是波形的

主体部分, 其余区域的波形已快速衰减到渐近平面的邻域.

4.3 参数 $k=3$ 时的怪波

当 $k=3$ 时, 三分量高阶非线性薛定谔方程的一阶怪波解为

$$\begin{cases} q_{1,3}^{[1]} = \left(1 + 4(2c_1^3G_3 + 3c_1G_1 - 3) \times \frac{2c_1F_3}{H_3}\right) \times q_1^{[0]}, \\ q_{2,3}^{[1]} = \left(1 + (1-i)(2(2c_1^3G_3 - 3c_1^2G_2 - 3c_1G_1) + 3 - 3i(2c_1^2G_2 + 1)) \times \frac{2c_1F_3}{H_3}\right) \times q_2^{[0]}, \\ q_{3,3}^{[1]} = \left(1 + (1+i)(2(2c_1^3G_3 - 3c_1^2G_2 - 3c_1G_1) + 3 + 3i(2c_1^2G_2 + 1)) \times \frac{2c_1F_3}{H_3}\right) \times q_3^{[0]}, \end{cases} \quad (45)$$

其中,

$$G_3 = -i(3c_1P_3 + 3P_2 + 2c_1^3P_1^2)P_1 - P_4,$$

$$F_3 = (-2ic_1^2(3c_1P_3 + 3P_2 + 2c_1^3P_1^2)P_1 + P_4) + 3F_1 - 6F_2,$$

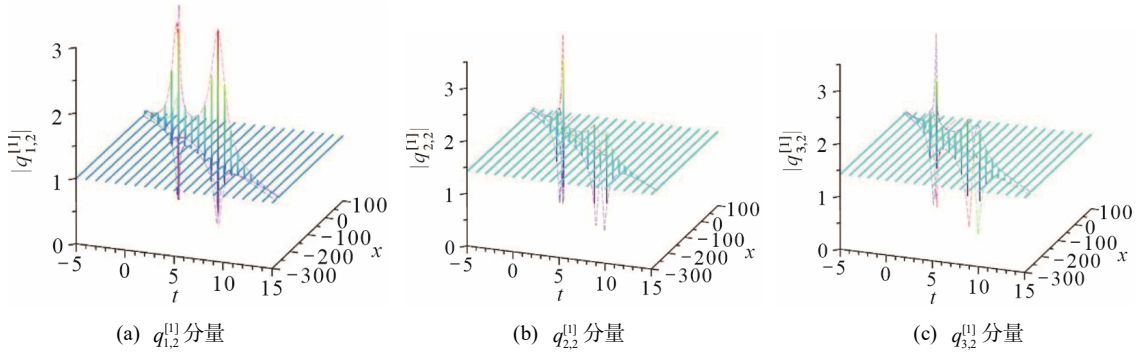


图3 一阶怪波解 $q_2^{[1]}$ 各个分量的波形演化 ($a_1=0, c_1=\gamma=1$)

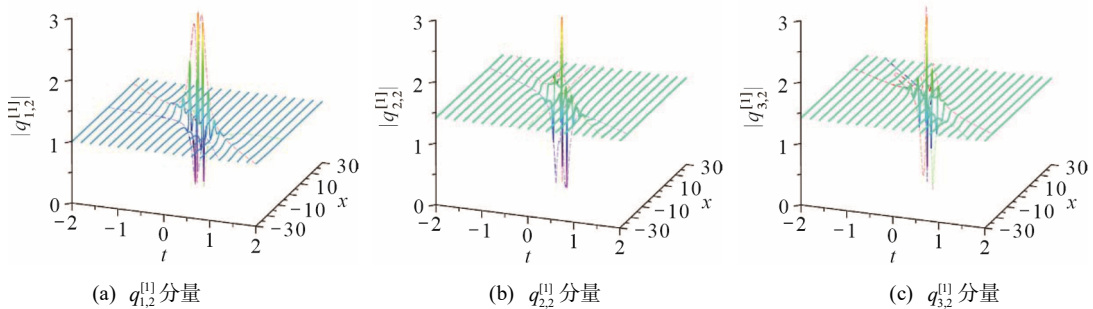


图4 一阶怪波解 $q_2^{[1]}$ 各个分量的波形演化 ($a_1=1, c_1=\gamma=1$)

$$\begin{aligned}
H_3 = & 4c_1^4(2c_1P_4 - 3P_3)^2 + 9(2c_1P_2 - 1)^2 + \\
& 36c_1^4P_1^2(2c_1P_2 + 1)^2 + 4c_1^4P_1^2(6c_1^2P_3 + \\
& 12c_1P_2 + 4c_1^4P_1^2 + 3)^2 + 36c_1^4P_1^2 + \\
& 36c_1^4P_3^2 + 9,
\end{aligned}$$

这里,

$$\begin{aligned}
P_4 = & x^3 + 3(3(6c_1^2 - a_1^2)\gamma - a_1)x^2t + \\
& 3((9(a_1^4 - 16a_1^2c_1^2 + 36c_1^4)\gamma^2 + \\
& 6a_1(a_1^2 - 8c_1^2)\gamma + a_1^2 - c_1^2)t^2 + 6c_1\gamma t)x + \\
& (27(216c_1^6 - 180a_1^2c_1^4 + 30a_1^4c_1^2 - a_1^6)\gamma^3 - \\
& 27a_1(a_1^4 - 20a_1^2c_1^2 + 60c_1^4)\gamma^2 - \\
& 9(a_1^4 - 11a_1^2c_1^2 + 6c_1^4)\gamma + 3a_1c_1^2 - a_1^3)t^3 - \\
& 3c_1((54a_1^2 - 108c_1^2)\gamma^2 + 18a_1\gamma + 1)t^2 + 6\gamma t.
\end{aligned}$$

$k=3$ 时, 波函数的极值轨迹线是六次多项式的根, 在一般情况下, 极值轨迹没有显式的根式表达式, 文中同样地仅在示例中用三维虚线表出.

当 $a_1=0, c_1=\gamma=1$ 时, 波函数 $q_{1,3}^{[1]}, q_{2,3}^{[1]}, q_{3,3}^{[1]}$ 的波形演化如图 5 所示, 其中虚线是波峰和波谷所在的极值轨迹线. 图示区域 $[-5, 25] \times [-500, 100]$ 是波形的主体部分, 其余区域的波形已逐渐衰减到渐近平面的邻域.

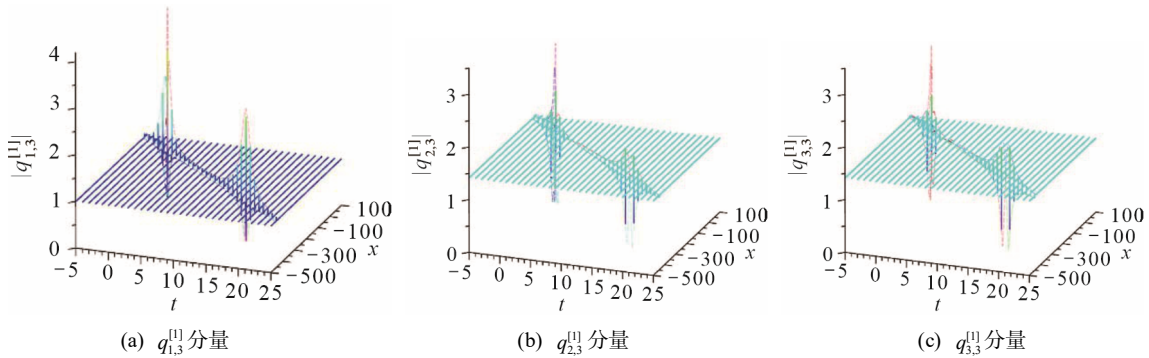


图 5 一阶怪波解 $q_3^{[1]}$ 各个分量的波形演化($a_1=0, c_1=\gamma=1$)

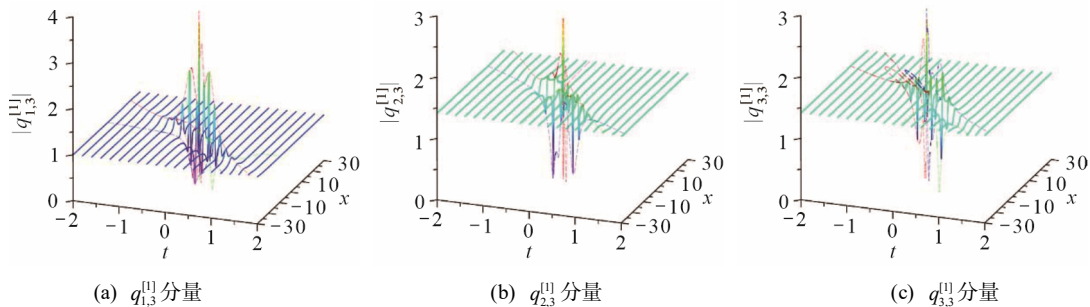


图 6 一阶怪波解 $q_3^{[1]}$ 各个分量的波形演化($a_1=1, c_1=\gamma=1$)

当 $a_1=1, c_1=\gamma=1$ 时, 波函数 $q_{1,3}^{[1]}, q_{2,3}^{[1]}, q_{3,3}^{[1]}$ 的波形演化如图 6 所示, 其中虚线是波峰和波谷所在的极值轨迹线. 图示区域 $[-2, 2] \times [-30, 30]$ 是波形的主体部分, 其余区域的波形已快速衰减到渐近平面的邻域.

在上述分别以 $k=1, 2, 3$ 给出的示例图中, 对比 $a_1=0$ 和 $a_1 \neq 0$ 的两种情况可知, a_1 是否为零对于波形的局域性有显著的影响. 当 $a_1 \neq 0$ 时, 波峰将迅速衰减到渐近水平, 波峰观察的窗口期较短. 当 $a_1=0$ 时, 其波峰衰减速度缓慢, 有较长的观察时间.

文中波形不同于文献[16-17]展现的孤波, 文献[16-17]的 2-孤子在不同参数下展现了两孤波之间的弹性碰撞和非弹性碰撞, 长时间内波高恒定的孤波容易被观察到, 且孤波碰撞的强相互作用区域容易被预测, 本文讨论的怪波的波高不定, 波峰振幅巨大, 是一种极限形态, 这给 α -螺旋蛋白激发孤波传递生物能量和生物信息提供了一种新的理论形态.

5 结论

本文研究了 α -螺旋蛋白中生物能量沿蛋白质

分子链以孤波方式传输的三分量高阶非线性薛定谔方程的控制模型, 讨论了该模型中三个相互耦合的波函数在极限状态下激发极限波的形态, 即怪波解. 基于控制模型 Lax 对表示的谱问题, 文中给出了以下三点发现:

(1) 利用规范变换得到了三分量高阶非线性薛定谔方程的达布变换, 该变换借助谱参数为某个任意给定的值及其所关联的特征函数, 构造线性方程组, 并利用克莱姆法则, 通过行列式形式表出.

(2) 通过 Lax 对的变量分离和平移参数的引入, 给出了怪波激发的一组代数条件, 其中包括谱参数的临界值. 通过对谱参数临界值的微扰, 利用幂级数的多项分裂构造怪波解的基础特征函数, 并由此导出了退化的达布变换.

(3) 平面波解通过退化的达布变换获得三分量高阶非线性薛定谔方程的怪波解. 在不同的参数下, 用三维图形示例怪波解的波形演化及其极值轨迹, 其中包括时间-空间双局域的怪波. 极值轨迹表明了多个耦合分量之间能量分布和传输模式的不同.

本文方法和分析结果为三分量高阶非线性薛定谔方程控制的 α -螺旋蛋白中生物能量传输的怪波激发实验研究提供了理论支持, 促进了对怪波产生机制和形成效果的理解. 特别地, 当参数 γ 等于 0 时, 控制模型退化为光学中重要的 Manakov 系统, 在光通信的研究中也具有重要的实际意义.

参考文献:

- [1] DAVYDOV A S. The theory of contraction of proteins under their excitation[J]. *Journal of Theoretical Biology*, 1973, 38(3):559-569.
- [2] DAVYDOV A S. Solitons in molecular systems[M]. Dordrecht: Springer Netherlands, 1985.
- [3] SOLOVYEV V V, SALAMOV A A. Predicting α -helix and β -strand segments of globular proteins[J]. *Bioinformatics*, 1994, 10(6):661-669.
- [4] CHENG W, YAN C H. Detecting periodicity associated with the alpha-helix structure using Fourier transform[J]. *Computational Molecular Bioscience*, 2012, 2(4):109-114.
- [5] PENG X B, LIU J J, DAI J, et al. Application of topological soliton in modeling protein folding: Recent progress and perspective[J]. *Chinese Physics B*, 2020, 29(10):108705.
- [6] PANG X F. The biological effect and medical functions of the infrared rays[J]. *Chinese Journal of Biomedical Engineering (English Edition)*, 2001, 10(1):27-37.
- [7] DANIEL M, LATHA M M. Soliton in discrete and continuum alpha helical proteins with interspine coupling [J]. *Physics Letters A*, 1999, 252(1/2):92-108.
- [8] DANIEL M, DEEPAMALA K. Davydov soliton in alpha helical proteins: higher order and discreteness effects[J]. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 1995, 221(1/2/3):241-255.
- [9] DANIEL M, LATHA M M. A generalized Davydov soliton model for energy transfer in alpha helical proteins[J]. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2001, 298(3/4):351-370.
- [10] SCOTT A. Davydov's soliton[J]. *Physics Reports*, 1992, 217(1):1-67.
- [11] PANG X F. Improvement of the Davydov theory of bioenergy transport in protein molecular systems[J]. *Physical Review E*, 2000, 62(5):6989-6998.
- [12] BRIZHIK L, EREMKO A, PIETTE B, et al. Solitons in α -helical proteins[J]. *Physical Review E*, 2004, 70(3):031914.
- [13] D'OVIDIO F, BOHR H G, LINDGÅRD P A. Solitons on H-bonds in proteins[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2003, 15(18):S1699-S1707.
- [14] WANG X M, LI P F. Breathers and solitons for the coupled nonlinear Schrödinger system in three-spine α -helical protein[J]. *Chinese Physics B*, 2021, 30(10):100509.
- [15] CHAN H N, CHOW K W. Rogue wave modes for the coupled nonlinear Schrödinger system with three components: a computational study[J]. *Applied Sciences*, 2017, 7(6):559.
- [16] DANIEL M, LATHA M M. Soliton in alpha helical proteins with interspine coupling at higher order[J]. *Physics Letters A*, 2002, 302(2/3):94-104.
- [17] LÜ X, LIN F H. Soliton excitations and shape-changing collisions in alpha helical proteins with interspine coupling at higher order[J]. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2016, 32:241-261.
- [18] WRIGHT O C. The Darboux transformation of some Manakov systems[J]. *Applied Mathematics Letters*, 2003, 16(5):647-652.
- [19] 李翊神. 规范变换, 贝克隆变换与非线性叠加公式[J]. *数学进展*, 1989, 18(3):356-372.

- [20] 贺劲松, 张玲, 程艺, 等. AKNS 系统 Darboux 变换的行列式表示[J]. 中国科学(数学), 2006, 36(9):971-983.
- [21] GUO L J, WANG L H, CHENG Y, et al. Higher-order rogue waves and modulation instability of the two-component derivative nonlinear Schrödinger equation[J]. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2019, 79:104915.
- [22] PEREGRINE D H. Water waves, nonlinear Schrödinger equations and their solutions[J]. Journal of the Australian Mathematical Society Series B, 1983, 25(1):16-43.
- [23] WANG L H, HE J S, XU H, et al. Generation of higher-order rogue waves from multibreathers by double degeneracy in an optical fiber[J]. Physical Review E, 2017, 95(4):042217.

Rogue wave solutions of the three-component high-order nonlinear Schrödinger equation in α -helix protein

WANG Mengya, CHEN Tingting, WANG Lihong

(School of Mathematics and Statistics, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

Abstract: The three-component higher-order nonlinear Schrödinger equation is used as the governing equation for the propagation of biological energy along the molecular chain of alpha helical proteins with interspine coupling at higher order, and the rogue waves excited by three coupled wave functions in the limit state are investigated. Based on the Lax pair representation of the governing model, the determinant form of the Darboux transformation is derived using the gauge transformation. Through the variables separation of Lax pair and the introduction of translation parameters, the algebraic conditions for the excitation of rogue wave are given. Furthermore, the fundamental characteristic functions of the rogue wave solution are constructed with the multisection of power series, with the use of which the degenerated Darboux transformation is derived. Finally, the rogue wave solutions are obtained using degenerated Darboux transformation and the waveform evolution, and extreme value trajectory of rogue waves are illustrated with three-dimensional figures under different parameters.

Key words: three-component higher-order nonlinear Schrödinger equation; Lax pair; Darboux transformation; rogue wave

(责任编辑 韩 超)