

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 530.182

DOI: 10.17223/00213411/68/4/1

Исследование динамики конформационного возмущения
в молекуле ДНК в модели Муто*М.А. Вологжин¹, Л.А. Краснобаева^{1,2}, А.В. Шаповалов^{1,3}¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*² *Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия*³ *Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, Россия*

Динамика локальных конформационных возмущений (ЛКВ) в молекуле ДНК исследуется с помощью модели Муто с потенциалом Тоды и потенциалом Леннарда-Джонса методами вейвлет-преобразований. Анализ решений уравнений однородной модели Муто, проведенный с помощью численных реализаций дискретного и непрерывного вейвлет-преобразований, приводит к выводу о возникновении и распространении вдоль цепочки атомов молекулы ДНК локальных конформационных возмущений, которые можно рассматривать как аналоги солитонов в модели Инглэндера, построенной на основе уравнения синус-Гордона. Получены оценки скорости распространения ЛКВ, проведена оценка алгоритмической сложности численных реализаций.

Ключевые слова: ДНК, репликация, транскрипция, модель Муто, открытое состояние, конформационное возмущение, солитон, вейвлет-анализ.

Введение

В исследованиях механизмов биологического функционирования молекул ДНК локализованные волновые возмущения, распространяющиеся вдоль основной и комплементарной полинуклеотидных цепочек ДНК, являются ответственными за конформационные изменения в молекуле ДНК, включая такие фундаментальные явления, как транскрипция, трансляция, денатурация [1–3]. Для локального волнового возмущения в молекуле ДНК часто используется термин «открытое состояние», или локальное конформационное возмущение (ЛКВ) [4].

Моделирование динамики ЛКВ в молекуле ДНК на основе теории солитонов началось с работ [5, 6], в которых солитонные решения уравнения синус-Гордона рассматриваются как математическое представление ЛКВ. В последующих работах, например [7–9], учитывалось воздействие эффектов диссипации и внешнего поля на динамику распространения ЛКВ вдоль последовательности молекулы ДНК.

Модель Муто является классической плоской моделью молекулы ДНК. Выбор этой модели в качестве объекта исследования обусловлен сравнительно более простой геометрией по сравнению с известной моделью Инглэндера, являющейся объемной моделью. При подтверждении существования солитонов в динамике модели последующая ее континуализация может предоставить модель, требующую сравнительно меньше вычислительных мощностей, чем в модели Инглэндера.

Исследуемая в данной работе модель является дискретной, и уравнения модели точно не интегрируются методом обратной задачи рассеяния, в отличие от моделей на основе уравнения синус-Гордона [10]. Поэтому для анализа уравнений модели Муто [11, 12] в настоящей работе применяются методы вейвлет-анализа [13], с помощью которых изучается наличие конформационных возмущений. Динамика плоских моделей является сравнительно проще динамики объемных моделей, а подтверждение существования солитонов в рамках изучаемой модели позволит расширить ее границы применения.

* Исследования выполнены при поддержке гранта Правительства Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2025-009 от 28.02.2025 г.).