

МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ КОНФОРМАЦИОННЫХ ВОЛН В ДНК С УЧЕТОМ ДИССИПАЦИИ

Гриневич А.А., Рясик А.А., Якушевич Л.В

Институт биофизики клетки РАН, Россия, 142290, Пущино, ул. Институтская, д.3,
(4967)739404, arc7an@gmail.com

Моделирование конформационных волн в ДНК представляет интерес для понимания таких биологических процессов как транскрипция, а так же для поиска и оценки промоторов по силе. При этом на практике исследователи сталкиваются с проблемой моделирования неоднородных последовательностей, из которых состоят реальные молекулы ДНК.

Конформационные волны можно описывать с помощью кинков - односолитонных решений уравнения синус-Гордона:

$$I \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - K' a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V \sin \phi = 0, \quad (1)$$

где $\phi(z, t)$ - угловое отклонение основания, имеющего координату z в момент времени t , I - момент инерции этого основания, K' - жесткость сахаро-фосфатной цепочки, a - расстояние между парами оснований, V - коэффициент, характеризующий энергию взаимодействия между основаниями внутри пар. Такая модель позволяет описывать однородные цепочки, состоящие только из одного вида азотистых оснований.

Для того, чтобы рассматривать реальные (неоднородные) последовательности необходимо учесть зависимость коэффициентов уравнения (1) от координаты z . Также в уравнение (1) необходимо добавить дииссипативный член, пропорциональный $\partial\phi/\partial t$:

$$I \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - K' a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \alpha \frac{\partial \phi}{\partial t} + V \sin \phi = 0, \quad (2)$$

где α - коэффициент диссипации.

В данной работе рассматривается задача о движении кинка с учетом диссипации в 1) однородной последовательности и 2) неоднородной последовательности, состоящей из двух однородных участков, разделенных границей. Первая задача решалась аналитически, вторая - численно. Начальные и граничные условия были заданы таким образом, чтобы кинк начинал свое движение в первой однородной области и по ходу движения проходил через границу, преодолевая потенциальный барьер/яму.

В результате было показано, что эффекты диссипации приводят к уменьшению скорости кинка, а при прохождении кинка через границу возможны три варианта поведения: отражение от границы, прохождение границы с увеличением и с уменьшением скорости.