

РАЗМЕРНАЯ И ОБЕЗРАЗМЕРЕННАЯ МОДЕЛИ ОДНОРОДНОЙ ДНК

Якушевич Л.В.¹, Краснобаева Л.А.^{2,3}

¹Институт биофизики клетки Российской академии наук – обособленное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный
исследовательский центр «Пушкинский научный центр биологических исследований
Российской академии наук», Московская обл., г. Пущино, Россия
142290, Институтская ул. 3

Тел.: (466)7739252, e-mail: kind-@mail.ru

²Сибирский государственный медицинский университет (СибГМУ), Томск,
Россия 634050, Московский тракт, 2

Тел.: (3822)901101,

³Томский государственный университет, Томск, Россия
634050, пр. Ленина 36,

Тел.: (3822)529021, e-mail: kla1983@mail.ru

Математические модели, имитирующие внутреннюю подвижность молекулы ДНК, содержат множество динамических параметров, таких как моменты инерции азотистых оснований, расстояния между парами оснований, расстояния от центров масс оснований до сахаро-фосфатных цепочек, жесткость сахаро-фосфатного остова. Оценки значений этих параметров часто затруднены, а гарантировать их точность весьма проблематично.

С другой стороны, для проведения глубокого анализа модельных уравнений математики предпочитают использовать обезразмеренные уравнения. В них меньше параметров, их более удобно программировать, они легче поддаются анализу. Кроме того, обезразмеренные уравнения представляют интерес в связи с тем, что они не «привязаны» к конкретному объекту и могут иметь более широкое применение. Так они могут описывать нелинейную динамику не только молекулы ДНК, но и механических, электронных и других нелинейных систем.

В настоящей работе мы получили обезразмеренные уравнения, моделирующие нелинейную динамику молекулы ДНК, и, в частности, движение нелинейных конформационных возмущений – кинков. Расчеты выполнялись для случая однородной молекулы ДНК. Получено уравнение МакЛафлина-Скотта для обезразмеренной скорости кинка и его решения, построены графики, отражающие временные зависимости обезразмеренных скорости и координаты кинков.