

УСТОЙЧИВОСТЬ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СТОЯЧИХ ВОЛН В МОДЕЛИ ДНК ПЕЙРАРА–БИШОПА–ДОКСУА

Голоскубова Н. С., Михлин Ю. В.

*Національний технічний університет «ХПІ»,
вул. Кирпичева, 2, г. Харків, Україна*

nataligoloskubova1992@ukr.net, muv@kpi.kharkov.ua

Рассматривается модель Пейрара–Бишопа–Доксуса (модель ПБД), которая описывает динамику молекулы ДНК. Устойчивость локализованных стоячих волн исследована с использованием численно-аналитического критерия устойчивости для случая девяти узлов. Получены границы областей устойчивости/неустойчивости в пространстве параметров системы.

Ключевые слова: модель Пейрара–Бишопа–Доксуса, устойчивость локализованных стоячих волн.

СТІЙКІСТЬ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТОЯЧИХ ХВИЛЬ У МОДЕЛІ ДНК ПЕЙРАРА–БІШОПА–ДОКСУА

Голоскубова Н. С., Міхлін Ю. В.

*Національний технічний університет «ХПІ»,
вул. Кирпичова, 2, м. Харків, Україна*

nataligoloskubova1992@ukr.net, muv@kpi.kharkov.ua

Розглядається модель Пейрара–Бишопа–Доксуса (модель ПБД), яка описує динаміку молекули ДНК. Стійкість локалізованих стоячих хвиль досліджена з використанням чисельно-аналітичного критерію стійкості для випадку дев'яти вузлів. Отримано граници областей стійкості/нестійкості в просторі параметрів системи.

Багато робіт останнім часом присвячено вивченю хвильових процесів у молекулі ДНК, що зумовлено як інтересом до важливих біологічних проблем, так і розвитком сучасних нанотехнологій.

Одна з найбільш удалих моделей динаміки молекули ДНК була запропонована Пейраром, Бішопом та Доксуса. Це так звана модель ПБД, що розглядається в цій роботі. У заданій моделі дві низки ДНК представлено двома зв'язаними ланцюгами твердих дисків, де взаємодія між дисками однієї основи описується потенціалом Морзе, а взаємодія між протилежними дисками описується ангармонічним потенціалом. У цієї моделі переміщення дуплекса ДНК у просторі, як цілого, не розглядається, але вивчається тільки розходження різних ланцюгів.

Стійкість локалізованих сталих хвиль у моделі ПБД досліджена з використанням чисельно-аналітичної процедури, що базується на відомому критерії стійкості за Ляпуновим. Локалізовані стали хвилі збуджуються або початковим зміщенням, що описує розходження двох протилежних дисків двох ланцюгів, або відповідно початковою швидкістю. Далі ми використовуємо порівняння поточних значень кінетичних енергій близьких елементів з початковою кінетичною енергією збудженого елементу. Нестійкість локалізованих сталих хвиль фіксується, якщо десять процентів початкової кінетичної енергії переходить у сусідні диски. Обчислення реалізуються у вузлах деякої сітки у вибраній області параметрів системи. Ці обчислення зупиняються, якщо граници областей стійкості/нестійкості стабілізуються у цій сітці. Це є принциповим критерієм вибору часу обчислень.

У результаті ми отримали граници областей стійкості/нестійкості на деяких площинах параметрів системи для випадку двох зв'язаних ланцюгів, кожен з яких містить дев'ять дисків. Як ілюстрація, локалізовані стали хвилі в таких дисках представлено для значень параметрів системи, що взяті як з області стійкості, так і з області нестійкості хвиль. Зокрема, ми бачимо, що зменшення параметру взаємодії між парами основ уздовж ланцюга призводить до підвищення стійкості локалізованих сталих хвиль.

Ключові слова: модель Пейрара–Бишопа–Доксуса, стійкість локалізованих стоячих хвиль.

STABILITY OF LOCALIZED STANDING WAVES IN THE PEYRARD–BISHOP–DOKSUA DNA MODEL

Goloskubova N. S., Mikhlin Yu. V.

*National Technical University “KhPI”,
Kyrpychev str., 21, Kharkiv, Ukraine*

nataligoloskubova1992@ukr.net, muv@kpi.kharkov.ua

Many recent works are devoted to study of wave processes in the DNA molecule, which are determined both by interest in the important biological problems, and the development of modern nanotechnologies.

One of the most successful models of the DNA molecule dynamics is the model developed by Peyrard, Bishop and Dauxois (the PBD model) which is considered in this paper. In the PBD model two strands of the DNA are represented by linked chains of hard disks, where the bonds within base pairs are described by the Morse potential and the interaction between opposite discs of different chains is represented by the anharmonic potential. In this model, the transfer of the DNA duplex in space as a whole is not considered, and only a divergence of different chains is studied.

The stability of localized standing waves in the PBD model is investigated here by using the numerical-analytical procedure which is based on the well-known Lyapunov stability criterion. Localized standing waves are excited by either the initial displacement describing the divergence of the chosen opposite discs of two chains, or the corresponding initial velocity. Then we use a comparison of the current values of the kinetic energies of neighboring elements with initial kinetic energy of the excited node. Instability of localized standing wave is fixed if more than ten percent of the initial kinetic energy is transferred to neighboring discs. Calculations are realized in nodes of some mesh in chosen domain of the system parameters. These calculations are stopped when boundaries of the stability/instability regions are stabilized in the chosen mesh. This is a principal criterion of the choice of the calculation time.

As a result, boundaries of stability/instability regions in some places of the system parameters are obtained for a case of two connected chains consisting of nine discs each. As an illustration, the calculations of the localized standing waves in such chains are given for the values of parameters taken in regions of the wave stability or instability. We can see, in particular, that a decrease of the parameter of interaction between pairs of bases along chain leads to increase of the localized standing wave stability.

Key words: *Peyrard–Bishop–Dauxois model, stability of localized standing waves.*

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию волновых процессов в молекуле ДНК посвящены многие работы последнего времени, что определяется как интересом к важнейшим проблемам биологии, так и развитием современных нанотехнологий.

Детальный обзор моделей нелинейной динамики молекулы ДНК можно найти в книге [1] и обзорах [2, 3]. Среди различных моделей динамики молекулы ДНК одной из наиболее известных является модель, разработанная Пейраром и Бишопом [4] (модель ПБ). Две цепочки ДНК в данной модели представлены связанными цепочками твердых дисков, причем связи внутри пар оснований описываются потенциалом Морзе. При этом стэкинг-взаимодействия учтены посредством введения обычного гармонического потенциала. В связи с расхождениями с экспериментом в модель ПБ был феноменологически введен ангармонический потенциал, более адекватно описывающий стэкинг-взаимодействия. Таким образом, была получена модель Пейрара–Бишопа–Доксуса [5] (названная моделью ПБД). Волновые процессы в указанных моделях анализировались во многих работах, в частности, в публикациях [1-7]. В гораздо меньшей степени освещаются вопросы устойчивости нелинейных волн, как бегущих, так и стоячих.

В данной работе с использованием описанной далее численно-аналитической процедуры, которая базируется на хорошо известном критерии устойчивости Ляпунова, рассмотрена устойчивость локализованных стоячих волн в модели ПБД. Получены границы областей устойчивости/неустойчивости таких волн в пространстве параметров системы. В качестве иллюстрации приведены расчеты локализованных стоячих волн в цепочке, состоящей из

девяти узлов, при значениях параметров, взятых в областях устойчивости или неустойчивости.

МОДЕЛЬ ПЕЙРАРА–БИШОПА–ДОКСУА

Как было указано выше, стандартная модель ДНК в модели ПБД представляет собой две цепочки дисков, связанных между собой продольными и поперечными пружинами (рис. 1), так называемый «дуплекс ДНК». В данной модели не рассматривается перенос дуплекса в пространстве как целого, а изучается только расхождение его цепей [1-3]. Масса нуклеотидов принимается как $m = 1$. 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. Вводя новые координаты в виде $z_n = \frac{u_n + v_n}{\sqrt{2}}$, $y_n = \frac{u_n - v_n}{\sqrt{2}}$, опишем так называемое стэкинг-взаимодействие между узлами одной цепочки с использованием ангармонического потенциала $W(y_n, y_{n+1}) = \frac{k}{a^2}(1 + \rho e^{-\gamma(y_{n+1} + y_n)}(y_{n+1} - y_n)^2)$. Здесь γ – коэффициент затухания для стэкинг-взаимодействий, ρ – параметр ангармонизма, характеризующий нелинейность в системе; d – энергия диссоциации полинуклеотидных цепочек, a – параметр, обратный длине, то есть пространственный масштаб потенциала; k – константа, характеризующая взаимодействие между парами оснований вдоль цепочки.

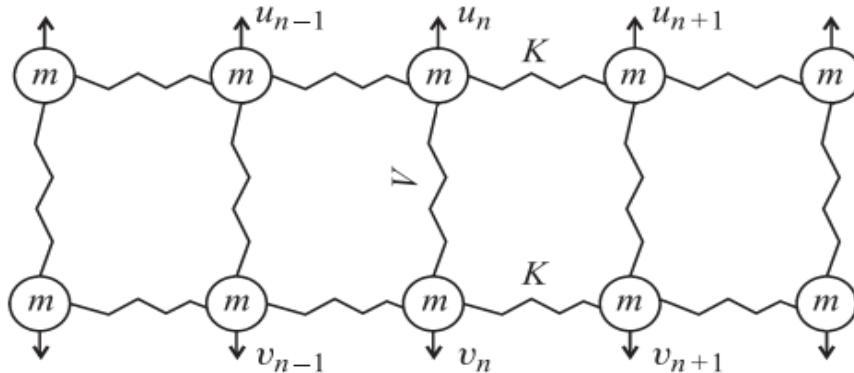


Рис. 1. Модель ДНК Пейрара–Бишопа–Доксуса

Поскольку для движения центра масс дуплекса не введены ограничения, будем рассматривать только динамику расхождения цепей, которая описывается переменными y_n .

Переходя к безразмерным времени, смещению и энергии, $\tau = t\sqrt{\frac{da^2}{m}}$, $H^* = \frac{H}{d}$, $u = ay_n$, и возвращаясь к первоначальным обозначениям переменных, $\tau \rightarrow t$, $u \rightarrow y$, $H^* \rightarrow H$, запишем систему уравнений, описывающих расхождение цепей в ПБД-модели в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d^2y_n}{dt^2} &= \frac{k}{a^2}(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + \frac{k}{a^2}\rho\left\{e^{-\gamma(y_{n+1} + y_n)}(y_{n+1} - y_n)\left[\frac{1}{2}\gamma(y_{n+1} - y_n) + 1\right] + \right. \\ &\quad \left.+ e^{-\gamma(y_n + y_{n+1})}(y_n - y_{n-1})\left[\frac{1}{2}\gamma(y_n - y_{n-1}) - 1\right]\right\} - 2\sqrt{2}De^{-\sqrt{2}y_n}\left[1 - e^{-\sqrt{2}y_n}\right]. \end{aligned} \quad (1)$$

Таким образом, задача сводится к анализу волн в одной цепочке нелинейно связанных элементов, каждый из которых описывается переменной y_n .

УСТОЙЧИВОСТЬ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СТОЯЧИХ ВОЛН

Локализованные стоячие волны возбуждаются или начальным смещением y_n , описывающим расхождение противолежащих узлов цепочки, или начальной скоростью $\frac{dy_n}{dt}$. Устойчивость решения анализируется при помощи численно-аналитической процедуры, которая является

следствием известного определения Ляпунова об устойчивости. Эта процедура, которая представлена в статьях [8, 9], может быть кратко описана следующим образом.

Пусть задача устойчивости сведена к исследованию вариаций $w(t)$ рассматриваемого решения. Неустойчивость решения фиксируется, если

$$|w(t)| \geq \rho |w(0)| \quad (0 \leq t \leq T). \quad (2)$$

В условии (2), в отличие от классического определения устойчивости, введено ограниченное время расчета на устойчивость T . Обсудим теперь выбор до сих пор не определенных величин ρ и T . Здесь значение ρ^{-1} – это мера малости начальных вариаций по отношению к максимально допустимым вариациям для любых $t \geq 0$. Имеется существенный произвол в выборе величины ρ , и это не случайно, так как в области неустойчивости при возрастании t вариации выйдут за пределы заданной ε – окрестности исходного решения при любом выборе ρ . В инженерных науках принято говорить, что некоторая величина α «на порядок» больше, чем величина β , если $\alpha/\beta \approx 10$. Для конкретных расчетов можно выбрать, например, $\rho = 10$.

Обсудим теперь выбор величины T . Анализ устойчивости с использованием критерия (2) производится с использованием расчета на основе стандартной программы Рунге–Кутта. Расчет производится в узлах некоторой сетки в избранной области плоскости (или пространства) параметров системы. Вычисления продолжаются до тех пор, пока в выбранном масштабе сетки не стабилизируются границы областей устойчивости и неустойчивости. Это и есть принципиальный критерий для выбора времени вычислений T . Ясно, что если шаг сетки неограниченно убывает, то время расчета T стремится к бесконечности. В статье [8] обсуждается также связь величин ρ и T с константами Ляпунова, которые часто используются в задачах устойчивости.

В данной работе вместо сравнения начальных и текущих значений вариаций используется сравнение значений начальной кинетической энергии возбужденного узла y_n и текущих значений кинетических энергий соседних элементов цепочки. Неустойчивость фиксируется, если более чем 10 процентов от начальной кинетической энергии переходит в соседние узлы. Рассматривалась цепочка, состоящая из 9 узлов. Расчеты были проведены в точках некоторой сетки в выделенной области пространства (плоскости) параметров системы с шагом сетки $h = 0.1$. Как было указано выше, расчеты проводятся вплоть до стабилизации границ областей устойчивости/неустойчивости. Результаты расчетов для системы (1) представлены на рис. 2, где показаны границы областей устойчивости/неустойчивости в плоскостях некоторых выбранных параметров системы. В расчетах принято, что $\alpha = 0.65$, $\gamma = 0.577$. Кроме того, на рис. 2a энергия диссоциации полинуклеотидных цепочек $d = 0.9 \text{ (eV)}$; параметр взаимодействия между парами оснований вдоль цепи $k(\text{eV}/\text{\AA}^2)$ изменяется в интервале $[0; 0.025]$; безразмерный параметр ангармонизма ρ – в интервале $[0; 6]$. Для рис. 2b параметр $d = 0.33 \text{ (eV)}$; k изменяется на интервале $[0; 0.023]$; параметр ρ – на интервале $[0; 6]$. Для рис. 2c параметр $\rho = 0.5$; k принадлежит интервалу $[0.011; 0.051]$; d – интервалу $[1.25; 3.1]$. Для рис. 2d параметр $\rho = 1$; k изменяется на интервале $[0.01; 0.1]$; d – на интервале $[0.1; 1.75]$.

Везде области устойчивости расположены с левой стороны от полученных границ.

Для иллюстрации полученных результатов был проведен расчет динамики рассматриваемой цепочки (девять узлов) методом Рунге–Кутта четвертого порядка. Здесь $\alpha = 0.65$, $\gamma = 0.577$. Области неустойчивости соответствуют следующие параметры: $k = 0.9 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 1$ (рис. 3) и $k = 0.1 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 0.1$ (рис. 4) при $d = 0.9 \text{ (eV)}$ для двух рисунков. Области

устойчивости соответствуют следующие параметры: $k = 0.004 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 0.037$ (рис. 5) и $k = 0.001 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 0.01$ (рис. 6) при $d = 0.9 \text{ eV}$ для обоих рисунков.

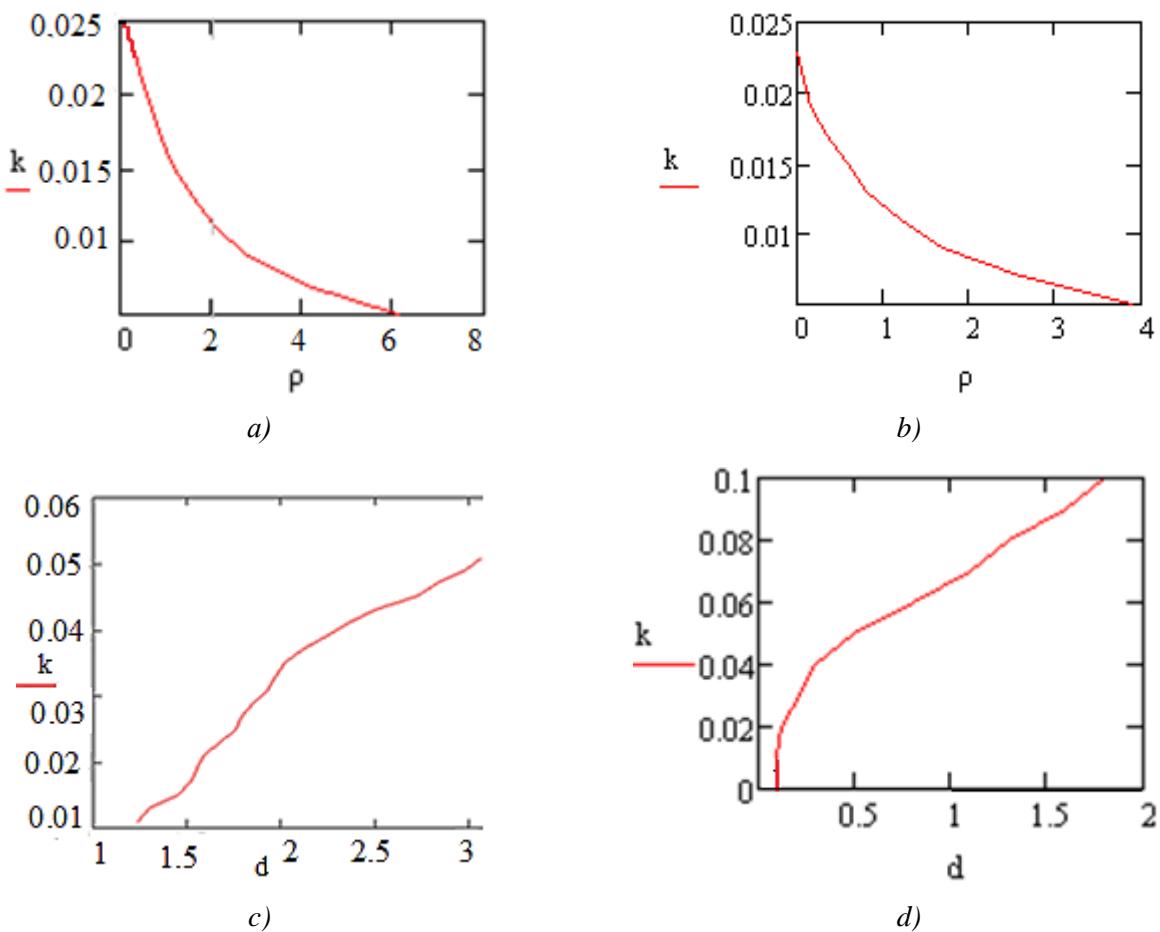


Рис. 2. Границы областей устойчивости /неустойчивости в пространстве параметров системы (1):
 a, b – границы в плоскости (k, ρ) при $d = 0.9 \text{ eV}$ (a) и $d = 0.33 \text{ eV}$ (b);
 c, d – границы в плоскости (k, d) при $\rho = 0.5$ (c) и $\rho = 1$ (d)

Использовались также следующие начальные условия:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt}_1(0) = \dots = \frac{dy}{dt}_9(0) = 0, \\ y_1(0) = \dots = y_4(0) = 0, \\ y_5(0) = 0.782, \\ y_6(0) = \dots = y_9(0) = 0. \end{cases}$$

Эти начальные условия соответствуют возбуждению только одной частицы в рассматриваемой модели, то есть возбуждению уединенной стоячей волны. На графике зависимости смещений каждого из девяти узлов двухмерной модели ДНК Пейрара–Бишопа–Доксуса от времени (рис. 3) представлено решение данной модели в виде устойчивых или неустойчивых стоячих волн.

Полученные зависимости дают представление о характере колебаний стоячих волн как в центральном, так и в близлежащих к нему узлах. Из графиков, показанных на рис. 3, 4, видно, что амплитуды колебаний соседних узлов сравнимы с амплитудами колебаний центрального возбужденного узла, что говорит о неустойчивости локализованного решения, хотя амплитуды колебаний узлов и уменьшаются по мере удаления от центрального узла. В то же время с уменьшением параметра взаимодействия между парами оснований вдоль цепи k колебания соседних узлов оказываются малы, что говорит об устойчивости уединенной стоячей волны. Так, на рис. 5, 6 при относительно малых значениях параметра k показаны

подобные устойчивые решения, когда амплитуды колебаний всех узлов, кроме возмущенного центрального узла, малы.

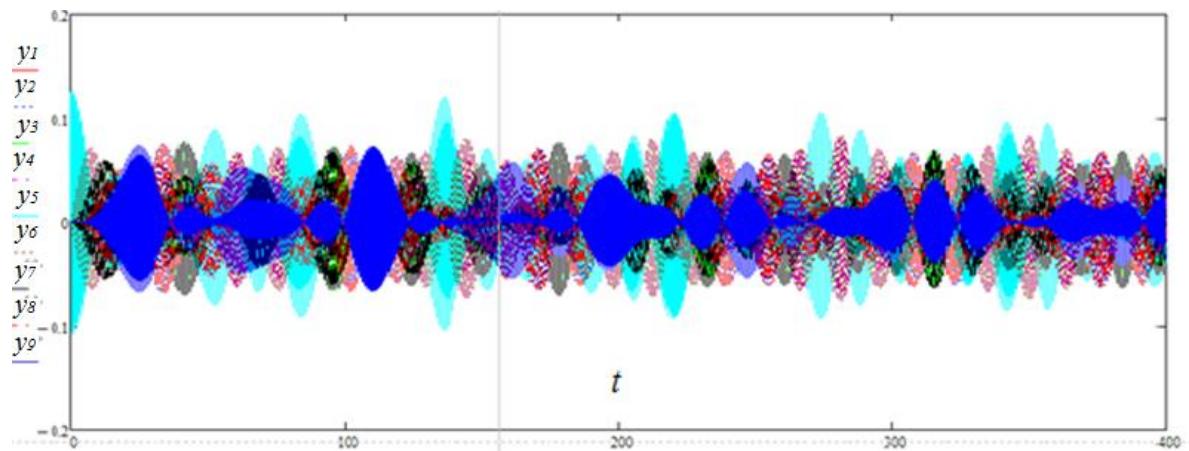


Рис. 3. Неустойчивость уединенной стоячей волны при $k = 0.9 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 1$; $d = 0.9 \text{ eV}$

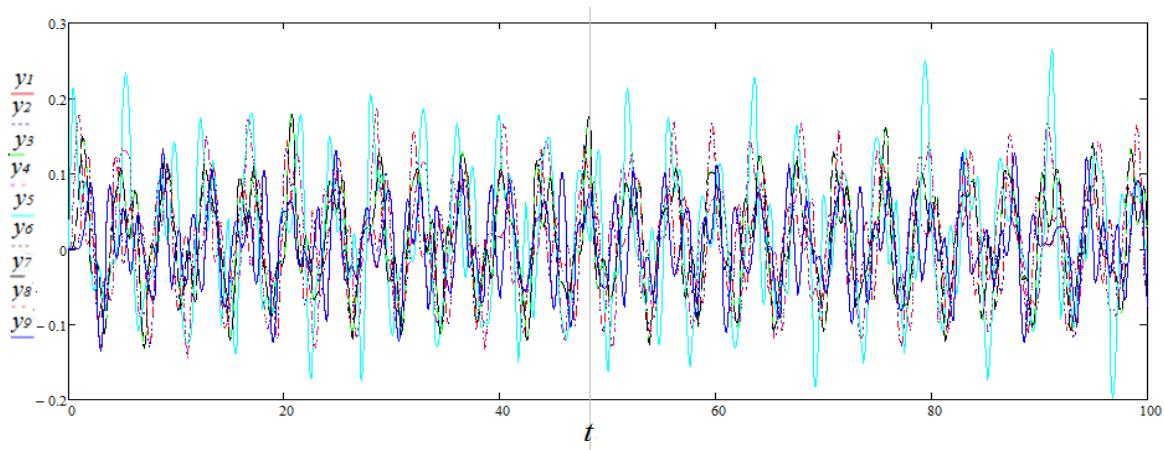


Рис. 4. Неустойчивость уединенной стоячей волны при $k = 0.1 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 0.1$; $d = 0.9 \text{ eV}$

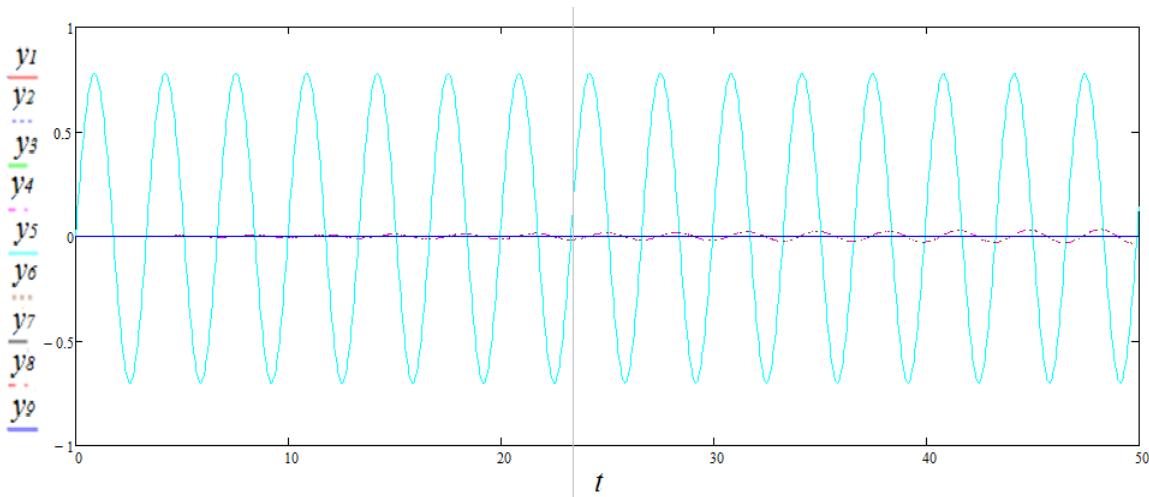


Рис. 5. Устойчивая уединенная стоячая волна при $k = 0.004 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 0.037$; $d=0.9 \text{ eV}$
и начальной амплитуде колебаний, равной 0.782

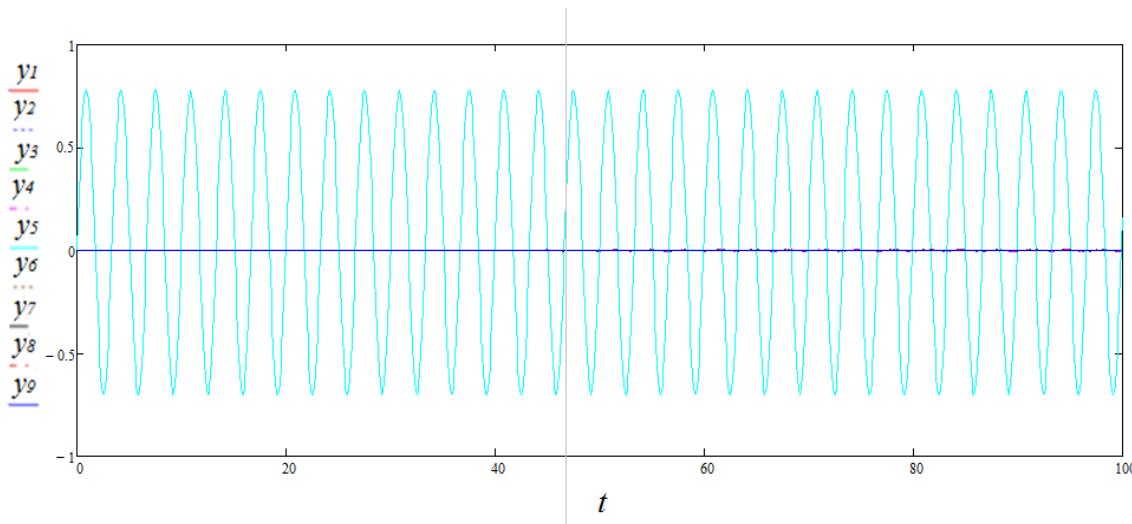


Рис. 6. Устойчивая уединенная стоячая волна при $k = 0.001 \text{ eV}/\text{\AA}^2$; $\rho = 0.01$; $d = 0.9 \text{ eV}$
и начальной амплитуде колебаний, равной 0,782

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе эффективного численно-аналитического критерия было проведено исследование устойчивости стоячих волн в модели ДНК Пейрара–Бишопа–Доксуса. Основным результатом является получение границ областей устойчивости/неустойчивости таких волн в пространстве параметров системы. Приведены также численные расчеты подобных устойчивых или неустойчивых волн при значениях параметров, взятых из областей устойчивости/неустойчивости. Представляется, что подобная методика может быть использована и для исследования устойчивости стоячих волн в различных нелинейных цепочках.

ЛИТЕРАТУРА

1. Yakushevich L. V. Nonlinear Physics of DNA. New York: Wiley, 2nd ed., 2004. 207 p.
2. Peyrard M. Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA. *Nonlinearity*. 2004. No 17. P. R1–R40.
3. Шигаев А. С., Пономарёв О. А., Лахно В. Д. Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК. *Математическая биология и биоинформатика*. 2013. Т. 8, № 2. С. 553–664.
4. Peyrard M., Bishop A. R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation. *Physical Review Letters*. 1989. Vol. 62. P. 2755–2758.
5. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A. R. Entropy-driven DNA denaturation. *Physical Review E*. 1993. Vol. 47. P. R44–R47.
6. Фахретдинов М. И., Закирьянов Ф. К. Дискретные бризеры в модели ДНК Пейрара–Бишопа. *Журнал технической физики*. 2013. Т. 83, Вып. 7. С. 1–5.
7. Фахретдинов М. И., Закирьянов Ф. К., Екомасов Е. Г. Дискретные бризеры и мультибризеры в модели ДНК Пейрара–Бишопа. *Нелинейная динамика*. 2015. Т. 11, № 1. С. 77–87.
8. Mikhlin Yu. V., Shmatko T. V., Manucharyan G. V. Lyapunov definition and stability of regular or chaotic vibration modes in systems with several equilibrium positions. *Computer & Structures*. 2004. No 82. P. 2733–2742.
9. Mikhlin Yu. V., Manucharyan G. V. Determination of the chaos onset in mechanical systems with several equilibrium positions. *Meccanica*. 2006. № 41. P. 253–267.

REFERENCES

1. Yakushevich, L. V. (2004). Nonlinear Physics of DNA. New York: Wiley, 2nd Edition.
2. Peyrard, M. (2004). Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA. *Nonlinearity*, No. 17, pp. R1–R40.

3. Shygayev, A. S., Ponomarev, O. A. & Lakhno, V. D. (2013). Theoretical and experimental researches of the open states of DNA. Matematicheskaya biologiya i bioinformatika. 2013. T. 8, No. 2, pp. 553–664.
4. Peyrard, M. & 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. & Bishop, A. R. (1993). Entropy-driven DNA denaturation. Physical Review E, Vol. 47, pp. R44–R47.
6. Fakhretdinov, M. I. & Zakirianov, F. K. (2013). Diskretnye brizeri v modeli DNK Peirara-Bishipa. Zhurnal Tekhnicheskoi Phisiki, Vol. 83, No. 7, pp. 1–5.
7. Fakhretdinov, M. I., Zakirianov, F. K. & Ekomasov, E. G. (2015). Diskretnye brizeri i multibrizeri v modeli DNK Peirara-Bishipa. Nelineinaya Dynamika, Vol. 11, No. 1, pp. 77–87.
8. Mikhlin, Yu. V., Shmatko, T. V. & Manucharyan, G. V. (2004). Lyapunov definition and stability of regular or chaotic vibration modes in systems with several equilibrium positions. Computer & Structures, No. 82, pp. 2733–2742.
9. Mikhlin, Yu. V. & Manucharyan, G. V. (2006). Determination of the chaos onset in mechanical systems with several equilibrium positions. Meccanica, No. 41, pp. 253–267.

УДК 534

DOI: 10.26661/2413-6549-2018-2-02

БІФУРКАЦІЙНИЙ СТАН ОБЕРТОВОГО МАЯТНИКОВОГО ОСЦИЛЯТОРА З ПАРАМЕТРАМИ ДОВЖИНИ І МАСИ, ЗАЛЕЖНИМИ ВІД ЧАСУ

¹Грищак Д. В., к. т. н., ²Грищак Д. Д., к. ф.-м., н., м. н. с., ³Кадет Н. П.

¹Інститут служби зовнішньої розвідки України,
вул. Бульварно-Кудрявська, 11, м. Київ, 04053, Україна

²Центральний науково-дослідний інститут озброєння і військової техніки
Збройних Сил України,
Повітрово-флотський просп., 28, м. Київ, 03049, Україна

³Національний авіаційний університет,
просп. Космонавта Комарова, 1, м. Київ, 03058, Україна

gristchak@gmail.com

У роботі на основі дослідження динаміки маятникового осцилятора, що обертається із швидкістю, залежною від часу, дається аналіз процесу галуження або біфуркаційних станів складної динамічної «ієрархічної» системи за умови залежності її параметрів від часу. Показано, зокрема, що розташування точки біфуркації досліджуваної системи на діаграмі рівноважних станів істотно залежить від закону зміни швидкості обертання маятникового осцилятора від часу, і власна частота коливань досліджуваного лінійного маятника сповільнюється в системі відліку, що обертається, порівняно зі своїм значенням в інерціальній системі згідно із законом, обумовленим залежностями кутової швидкості обертання і довжини осцилятора від часу. Залежність довжини і маси осцилятора від часу, а також величина параметра управління впливають на характер демпфування динамічного процесу. Потенційна функція досліджуваної системи, як і системи з незалежними від часу параметрами, є періодичною функцією від кутової координати, а її залежність від часу відповідає функціям довжини і швидкості обертання за часом. Представлені залежності потенційної функції при різних значеннях параметра управління і функціях зміни довжини і швидкості обертання маятника від часу. Демпфування нелінійного динамічного процесу залежить від характеру зміни довжини і маси осцилятора від часу, величини і знака параметра управління, а також характеру зовнішнього навантаження, діючого на досліджувану систему.

Ключові слова: обертовий маятниковий осцилятор, залежні від часу параметри, діаграма біфуркацій.