

La ecuación Seno-Gordon perturbada en la dinámica no lineal del ADN

A.H. Salas^{a,b} and J.E. Castillo^c.

^aUniversidad Nacional de Colombia, Manizales*.

^bUniversidad de Caldas, Manizales*.

^cUniversidad Distrital Francisco José de Caldas*.

Recibido el 1 de junio de 2011; aceptado el 21 de agosto de 2012

Mediante un conjunto de cadenas lineales de osciladores acoplados se construye el Lagrangiano para una primera aproximación de un modelo dinámico no lineal de la molécula del ADN mediante la ecuación Sino-Gordon perturbada. Se encuentran las soluciones en forma de onda solitaria de la ecuación diferencial no lineal que describe el comportamiento del sistema, las cuales tienen serias implicaciones en los estados abiertos del ADN. Algunas de las soluciones encontradas son nuevas en la literatura y pueden ser de gran aporte en el estudio de los estados abiertos del ADN.

Descriptor: Dinámica no lineal; ADN; kink; antikink.

We make use of a linear chain of coupled oscillators to construct the Lagrangian in order to give a first approximation for a nonlinear dynamic model of the DNA molecule through the perturbed sine-Gordon equation. By using semi analytic methods, we give exact solutions to perturbed sine-Gordon equation in a travelling wave form. These solutions have some relevant implications in the study of DNA open states. Some of these solutions are new in the open literature.

Keywords: Nonlinear dynamics; DNA; kink; antikink.

PACS: 87.10.+e; 87.15.He; 66.90.+r; 63.20.Ry

1. Introducción

El ADN es una de las moléculas biológicas más interesantes y misteriosas. Perteneció a una clase de biopolímeros y tiene una muy importante función biológica que consiste en la capacidad de conservar y transferir información genética.

En este trabajo se estudia la molécula desde el punto de vista físico, es decir, consideramos la molécula como un sistema dinámico que consiste en muchos átomos y que tiene una estructura casi unidimensional con simetría inusual, muchos grados de libertad, muchos tipos de movimientos internos y distribución de fuerzas internas específicas. El problema que nos interesa es estudiar la dinámica no lineal de los estados abiertos del ADN, es decir, los estados cuando están rotos los enlaces del puente de hidrógeno entre las bases de las cadenas del ADN, más específicamente las soluciones en forma de onda solitaria de la ecuación diferencial no lineal que describe el comportamiento del sistema.

Existe una gran variedad de trabajos en los cuales este problema se ha estudiado [4,2,3]. En la Ref. 4 por ejemplo L. Yakushevich introduce un potencial efectivo entre las cadenas del ADN obteniendo de esta forma un par de ecuaciones acopladas cuya solución analítica de onda solitaria (kink y antikink) fue estudiada en la Ref. 10. De igual forma, Yomosa y otros [9] proponen diferentes tipos de potenciales efectivos que conllevan a soluciones analíticas de onda solitaria. Sin embargo en los trabajos anteriormente citados y en la mayoría de los trabajos que tratan la dinámica no lineal del ADN no se tienen en cuenta los efectos y las implicaciones de la viscosidad que están íntimamente relacionados con los procesos energéticos de disipación.

Nuestro objetivo consiste en mostrar la potencialidad de los métodos Lagrangianos teniendo en cuenta las fuerzas di-

sipativas de Raleigh para abordar el problema de la dinámica no lineal del ADN por medio de un sencillo sistema mecánico. La existencia de las fuerzas disipativas consideradas en nuestro modelo condiciona las propiedades eléctricas de la molécula del ADN, que a su vez se determinan por las propiedades químicas y por las condiciones, en particular de la temperatura. Un estudio profundo de las implicaciones biológicas de las fuerzas disipativas y la viscosidad no se trata en este trabajo.

Finalmente, mediante nuevos métodos que llamaremos semianalíticos [7,8] se obtienen nuevas soluciones exactas de las ecuaciones dinámicas no lineales para los estados abiertos cuyas soluciones suelen llamarse kink y antikink, las cuales son consideradas ondas viajeras (solitones) con una importante propiedad: su energía está localizada alrededor del centro kink (antikink) y corresponden a la propagación de los estados abiertos del ADN.

2. Modelo físico

Supongamos que tenemos una cadena simple del ADN. Un modelo sencillo consiste en cambiar las bases por discos y suponer que la interacción de los mismos es una interacción armónica. Esta aproximación ha sido desarrollada en el trabajo de Englander [11], donde la analogía entre los movimientos rotacionales de las bases del ADN y los movimientos rotacionales del péndulo en el modelo mecánico de Scott [12] fue usada.

Como se sabe, la molécula del ADN está formada por dos cadenas de doble hélice cuya estructura es bastante regular y contiene cuatro bases colocadas con gran precisión. Modelamos el esqueleto del ADN azúcar-fosfato por una cadena

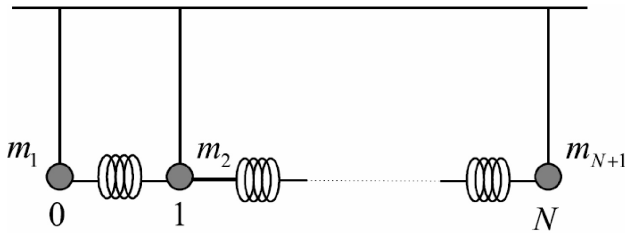


FIGURA 1. Una cadena lineal simple de osciladores acoplados.

de osciladores y las bases por péndulos. Por simplicidad, las masas, los momentos de inercia y las constantes de torsión son las mismas, es decir, se tiene una cadena homogénea de péndulos acoplados. Vamos a suponer que la aportación de la segunda cadena consiste en crear un potencial efectivo sobre la primera. En nuestro modelo como una primera aproximación consideraremos un potencial efectivo gravitacional y además tendremos en cuenta los efectos de la viscosidad por medio de las fuerzas disipativas de Raleigh [1]. Es de anotar que Yakushevich propone un modelo similar no lineal que consiste en dos cuerpos largos elásticos y que interaccionan débilmente al enrollarse por medio de un potencial efectivo [4]. Sin embargo, en este trabajo y otros similares no se tienen en cuenta los efectos de la viscosidad en la dinámica del sistema

3. Lagrangiano del sistema físico

La función de Lagrange que describe el comportamiento del sistema de N péndulos acoplados se da por la siguiente expresión:

$$L = \frac{ml^2}{2} \sum_{n=1}^N \dot{\varphi}_n^2 - mgl \sum_{n=1}^N (1 - \cos \varphi_n) - \frac{\chi l^2}{2} \sum_{n=1}^{N+1} (\varphi_n - \varphi_{n-1})^2, \quad (1)$$

donde el primer término representa la energía cinética rotacional del sistema de péndulos acoplados, el segundo corresponde a la energía potencial gravitacional y el último a la energía potencial de deformación elástica. En esta expresión, φ_n representa la posición angular del n -ésimo péndulo de masa m y longitud l y χ es la constante de deformación elástica. Ver Fig. 1.

Teniendo en cuenta las fuerzas disipativas de Raleigh [1],

$$R = \frac{kl^2}{2} \sum_{n=1}^N \dot{\varphi}_n^2. \quad (2)$$

De la ecuación de Euler-Lagrange [1] obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$ml^2 \ddot{\varphi}_n + mgl \sin \varphi_n - \chi l^2 (2\varphi_n - \varphi_{n-1} - \varphi_{n+1}) + kl^2 \dot{\varphi}_n = 0, \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N). \quad (3)$$

Ahora consideremos un sistema continuo de péndulos acoplados cuya distancia entre ellos es a , donde $a \rightarrow 0$.

En el caso de un sistema continuo de péndulos acoplados la posición angular φ_n es reemplazada por la función $u(x, t)$ la cual representa el desplazamiento en un sistema continuo.

Alrededor del punto x tenemos:

$$\begin{aligned} \varphi_{n+1} &\rightarrow u(x + a, t) = u(x, t) \\ &+ a \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \dots \\ \varphi_{n-1} &\rightarrow u(x - a, t) = u(x, t) \\ &- a \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \dots \\ \ddot{\varphi}_n &\rightarrow \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \quad \dot{\varphi}_n \rightarrow \frac{\partial u(x, t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (4)$$

Ahora multiplicamos (3) por $1/(as)$, donde s es la sección transversal de los muelles. Teniendo en cuenta que la relación m/as corresponde a la densidad de masa ρ donde $a \rightarrow 0$ y que la cantidad $\chi a/s$ en el límite cuando $a \rightarrow 0$ corresponde al módulo de Young, resulta

$$E = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\chi a}{s}. \quad (5)$$

La cantidad k/sa se interpreta como un coeficiente de viscosidad r del medio cuando $a \rightarrow 0$.

De acuerdo a lo anterior, de (3) y (4) en el límite cuando $a \rightarrow 0$ obtenemos

$$\alpha u_{tt} + \beta u_{xx} + \gamma u_t + \delta \sin(u) = 0, \quad (6)$$

en donde $\alpha = \rho l^2$, $\beta = -El^2$, $\gamma = rl^2$, $\delta = \rho gl$.

La Ec. (6) es una ecuación seno-Gordon perturbada. El término γu_t corresponde a esta perturbación. Un hecho particularmente interesante es que el coeficiente γ representa las pérdidas del medio.

4. Solución Matemática

Para resolver la Ec. (6), introducimos la función v por medio de una transformación de onda como sigue:

$$u = u(x, t) = 2 \tan^{-1} v(\mu(x + \lambda t + \xi_0)). \quad (7)$$

En la expresión (7) μ y λ son ciertas constantes reales o complejas no nulas, mientras que ξ_0 es una constante arbitraria (real o compleja). Sustituyendo (7) en Eq. (6), obtenemos la siguiente ecuación diferencial no lineal:

$$\begin{aligned} \mu^2 (\alpha \lambda^2 + \beta) (v(\xi)^2 + 1) v''(\xi) \\ + [-2\mu^2 (\alpha \lambda^2 + \beta) [v'(\xi)]^2 + \gamma \lambda \mu v(\xi) v'(\xi) \\ + \delta v^2(\xi) + \delta] v(\xi) + \gamma \lambda \mu v'(\xi) = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

en donde $\xi = \mu(x + \lambda t + \xi_0)$. Esta es una ecuación de tipo elíptico.

Resolviendo esta ecuación obtenemos las soluciones de la Eq. (6).

5. Soluciones exactas del modelo propuesto

Algunas soluciones exactas de la Eq. (6) se muestran a continuación:

Primer Caso: $\gamma \neq 0$.

Para resolver la ecuación (8) hacemos

$$v = v(\xi) = p \exp(\xi), p \neq 0. \tag{9}$$

Reemplazando la expresión (9) en la Ec. (8) y simplificando, obtenemos la siguiente ecuación polinomial con respecto a la variable $z = \exp(\xi)$:

$$p^2 (-\alpha\lambda^2\mu^2 - \beta\mu^2 + \gamma\lambda\mu + \delta) z^2 + \alpha\lambda^2\mu^2 + \beta\mu^2 + \gamma\lambda\mu + \delta = 0.$$

Igualando a cero el coeficiente de z y el término independiente resulta

$$\begin{cases} -\alpha\lambda^2\mu^2 - \beta\mu^2 + \gamma\lambda\mu + \delta = 0. \\ \alpha\lambda^2\mu^2 + \beta\mu^2 + \gamma\lambda\mu + \delta = 0. \end{cases} \tag{10}$$

Resolviendo el sistema (10) llegamos a las siguientes soluciones de la Ec. (6) a partir de (7) y (9):

- $u_1(x, t) = 2 \tan^{-1} \left(p \exp \left(\frac{\delta}{\beta\gamma} (\sqrt{-\alpha\beta} x - \beta t + \xi_0) \right) \right).$
- $u_2(x, t) = -2 \tan^{-1} \left(p \exp \left(\frac{\delta}{\beta\gamma} (\sqrt{-\alpha\beta} x - \beta t + \xi_0) \right) \right).$
- $u_3(x, t) = 2 \tan^{-1} \left(p \exp \left(-\frac{\delta}{\beta\gamma} (\sqrt{-\alpha\beta} x + \beta t + \xi_0) \right) \right).$
- $u_4(x, t) = -2 \tan^{-1} \left(p \exp \left(-\frac{\delta}{\beta\gamma} (\sqrt{-\alpha\beta} x + \beta t + \xi_0) \right) \right).$

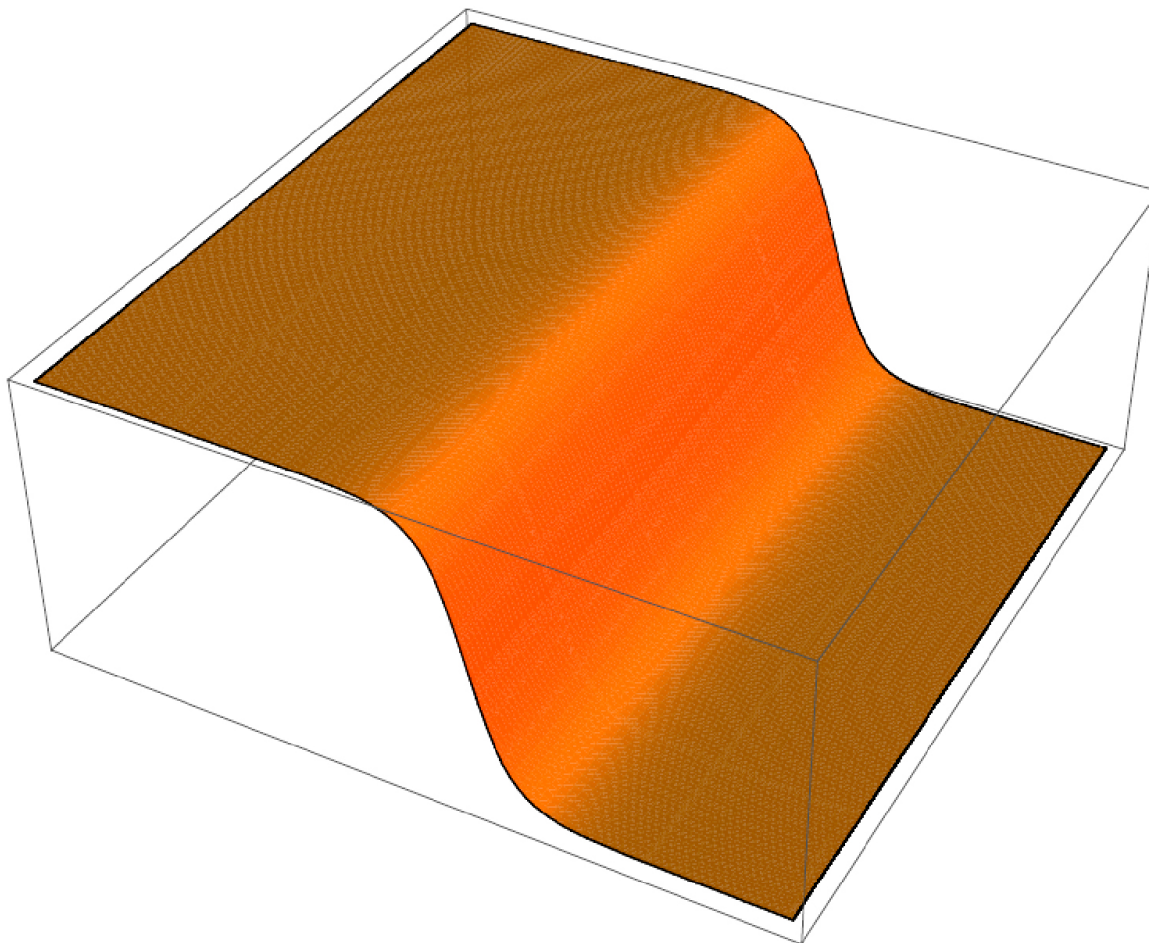


FIGURA 2. La función $u_1(x, t) = 2 \tan^{-1} \left(p e^{\frac{\delta}{\beta\gamma} (\sqrt{-\alpha\beta} x - \beta t)} \right).$

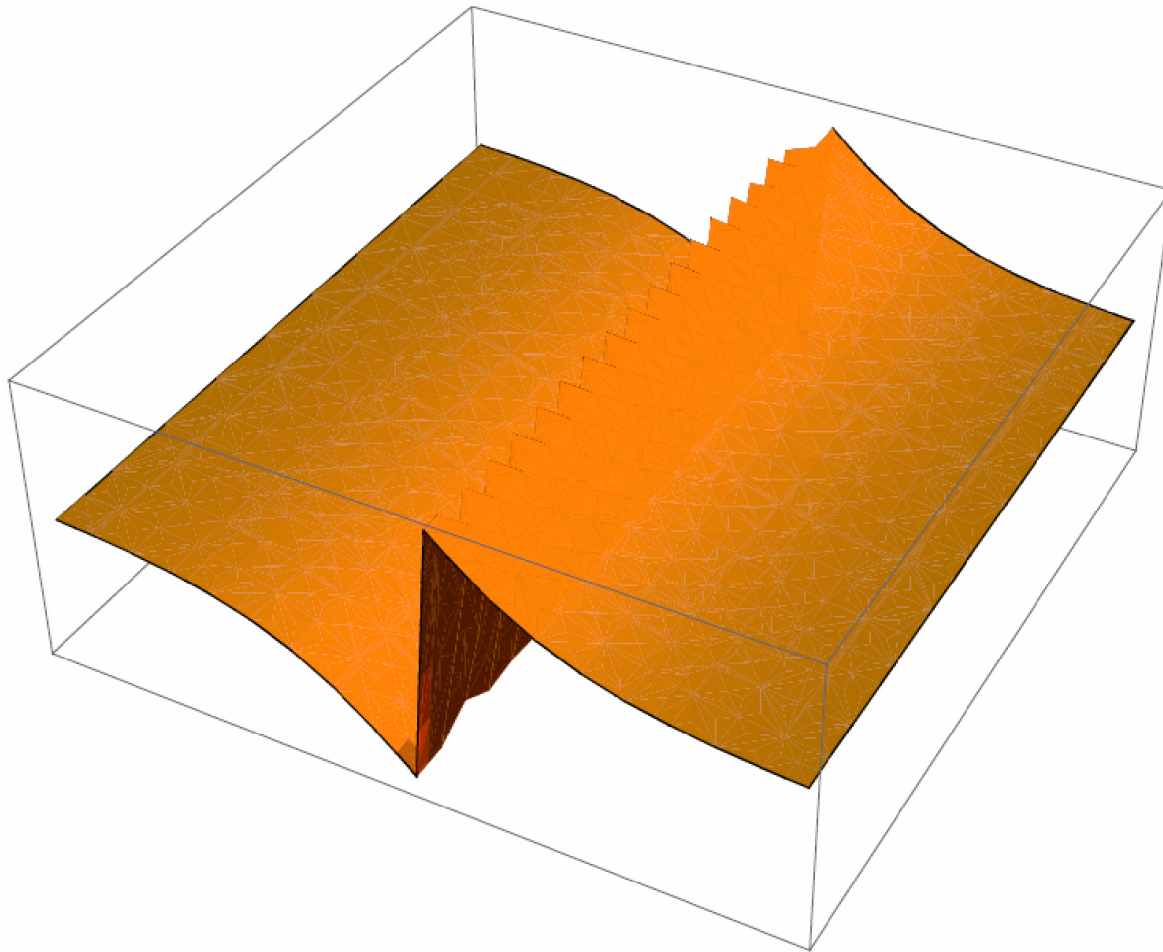


FIGURA 3. La función $u_5(x, t) = 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{csch} \left(\frac{1}{\alpha} (\alpha \mu x - \sqrt{-\alpha (\beta \mu^2 + \delta)} t) \right) \right)$.

Aquí p es un parámetro real arbitrario. La Fig. 2 muestra la gráfica de $u_1(x, t)$ para $p = 10$, $\alpha = 2$, $\beta = -10^{-2}$, $\gamma = \delta = 10^{-2}$, $\xi_0 = 0$, $-1 \leq x \leq 1$ y $0 \leq t \leq 1$.

Segundo Caso: $\gamma = 0$.

La Ec. (6) toma la forma

$$\alpha u_{tt} + \beta u_{xx} + \delta \operatorname{sen}(u) = 0, \tag{11}$$

la cual es precisamente la ecuación seno-Gordon. Para resolver la ecuación (11) basta con hallar soluciones de la Ec. (11) con $\gamma = 0$, es decir

$$\begin{aligned} &\mu^2 (\alpha \lambda^2 + \beta) (v(\xi)^2 + 1) v''(\xi) + [-2\mu^2 \\ &\times (\alpha \lambda^2 + \beta) (v'(\xi))^2 + \delta v^2(\xi) + \delta] v(\xi) = 0. \end{aligned} \tag{12}$$

Hagamos

$$v = v(\xi) = p \operatorname{csch}(\xi), \quad p \neq 0. \tag{13}$$

Reemplazando la expresión (13) en la Ec. (11) y simplificando, obtenemos la siguiente ecuación polinomial con respecto a la variable $z = \exp(\xi)$:

$$\begin{aligned} &(\mu^2 ((\alpha \lambda^2 + \beta) + \delta) z^4 \\ &- 2((2p^2 - 3)\mu^2 (\alpha \lambda^2 + \beta) \\ &- 2p^2 \delta + \delta) z^2 + (\mu^2 (\alpha \lambda^2 + \beta) + \delta) = 0. \end{aligned} \tag{14}$$

Igualando a cero el coeficiente de z^2 y el término independiente resulta

$$\begin{cases} (2p^2 - 3) \mu^2 (\alpha \lambda^2 + \beta) - 2p^2 \delta + \delta = 0. \\ \mu^2 (\alpha \lambda^2 + \beta) + \delta = 0. \end{cases} \tag{15}$$

Resolviendo el sistema (15) llegamos a las siguientes soluciones de la Ec. (11) a partir de (7) y (13):

- $u_5(x, t) = 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{csch} \left(\mu \left(x - \frac{1}{\alpha \mu} \sqrt{-\alpha (\beta \mu^2 + \delta)} t + \xi_0 \right) \right) \right)$. (16)

- $u_6(x, t) = -2 \tan^{-1} \left(\operatorname{csch} \left(\mu \left(x - \frac{1}{\alpha \mu} \sqrt{-\alpha (\beta \mu^2 + \delta)} t + \xi_0 \right) \right) \right)$. (17)

- $u_7(x, t) = 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{csch} \left(\mu \left(x + \frac{1}{\alpha \mu} \sqrt{-\alpha(\beta \mu^2 + \delta)} t + \xi_0 \right) \right) \right)$. (18)

- $u_8(x, t) = -2 \tan^{-1} \left(\operatorname{csch} \left(\mu \left(x + \frac{1}{\alpha \mu} \sqrt{-\alpha(\beta \mu^2 + \delta)} t + \xi_0 \right) \right) \right)$. (19)

En estas ecuaciones μ es una constante arbitraria (real o compleja). La Fig. 3 muestra la gráfica de $u_5(x, t)$ para $p = 10, \alpha = 2, \beta = -10^{-2}, \delta = 10^{-2}, \mu = 3, -1 \leq x \leq 1$ y $0 \leq t \leq 1$.

Las funciones $u_5 - u_8$ son soluciones de (11) y representan ondas viajeras con una importante particularidad: su energía se localiza alrededor del centro kink(antikink) y corresponden a los estados abiertos del ADN. También es posible encontrar soluciones en términos de la función elíptica sn de Jacobi. En efecto, sea

$$v = v(\xi) = p \operatorname{sn}(\xi, m) \tag{20}$$

Sustituyendo (20) en (12) llegamos a la siguiente ecuación polinomial con respecto a la variable $z = \operatorname{sn}(\xi, m)$:

$$\begin{aligned} & (p^2((m^2 + 1)\mu^2(\alpha\lambda^2 + \beta) + \delta) + 2m^2\mu^2(\alpha\lambda^2 + \beta))z^2 \\ & + \delta - \mu^2(m^2 + 2p^2 + 1)(\alpha\lambda^2 + \beta) \end{aligned} \tag{21}$$

Igualando a cero el término independiente y el coeficiente de z^2 se llega al siguiente sistema de ecuaciones :

$$\begin{cases} p^2((m^2 + 1)\mu^2(\alpha\lambda^2 + \beta) + \delta) + 2m^2\mu^2(\alpha\lambda^2 + \beta) = 0. \\ \delta - \mu^2(m^2 + 2p^2 + 1)(\alpha\lambda^2 + \beta) = 0. \end{cases} \tag{22}$$

Al resolver este sistema con respecto a p y λ obtenemos las siguientes soluciones :

$$\begin{aligned} p &= \pm\sqrt{-1} = \pm i \quad \text{y} \\ \lambda &= \pm \frac{1}{\mu} \sqrt{\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 - \delta}{\alpha(1 - m^2)}} \end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned} p &= \pm\sqrt{-1}m = \pm im \quad \text{y} \\ \lambda &= \pm \frac{1}{\mu} \sqrt{\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 + \delta}{\alpha(1 - m^2)}} \end{aligned} \tag{24}$$

De esta manera, hemos obtenido nuevas soluciones. Estas resultan de (7) y (20), teniendo en cuenta que $\xi = \mu(x + \lambda t + \xi_0)$:

$$u_9(x, t) = \pm 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{isn} \left(\mu \left(x \pm \frac{1}{\mu} \sqrt{\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 - \delta}{\alpha(1 - m^2)}} t + \xi_0 \right), m \right) \right) \tag{25}$$

$$u_{10}(x, t) = \pm 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{imsn} \left(\mu \left(x \pm \frac{1}{\mu} \sqrt{\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 + \delta}{\alpha(1 - m^2)}} t + \xi_0 \right), m \right) \right) \tag{26}$$

Anotemos que tanto en (25) como en (26) la constante μ debe ser imaginaria pura, es decir, $\mu = \sqrt{-1}\rho$ con ρ real y diferente de cero. La solución dada por (25) es real siempre y cuando

$$\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 - \delta}{\alpha(1 - m^2)} < 0 \tag{27}$$

Bajo estas condiciones (25) se convierte en

$$u_{11}(x, t) = \pm 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{isn} \left(i\rho \left(x \pm \frac{1}{\rho} \sqrt{-\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 - \delta}{\alpha(1 - m^2)}} t + \xi_0 \right), m \right) \right) \tag{28}$$

La Fig. 4 muestra la gráfica de la solución (28). De otro lado, la solución dada en (26) es real siempre y cuando se cumpla la condición

$$\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 + \delta}{\alpha(1 - m^2)} < 0, \tag{29}$$

de modo que una solución real es

$$u_{12}(x, t) = \pm 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{imsn} \left(i\rho \left(x \pm \frac{1}{\rho} \sqrt{-\frac{(m^2 - 1)\beta\mu^2 + \delta}{\alpha(1 - m^2)}} t + \xi_0 \right), m \right) \right) \tag{30}$$

La Fig. 5 muestra la gráfica de la solución (30).

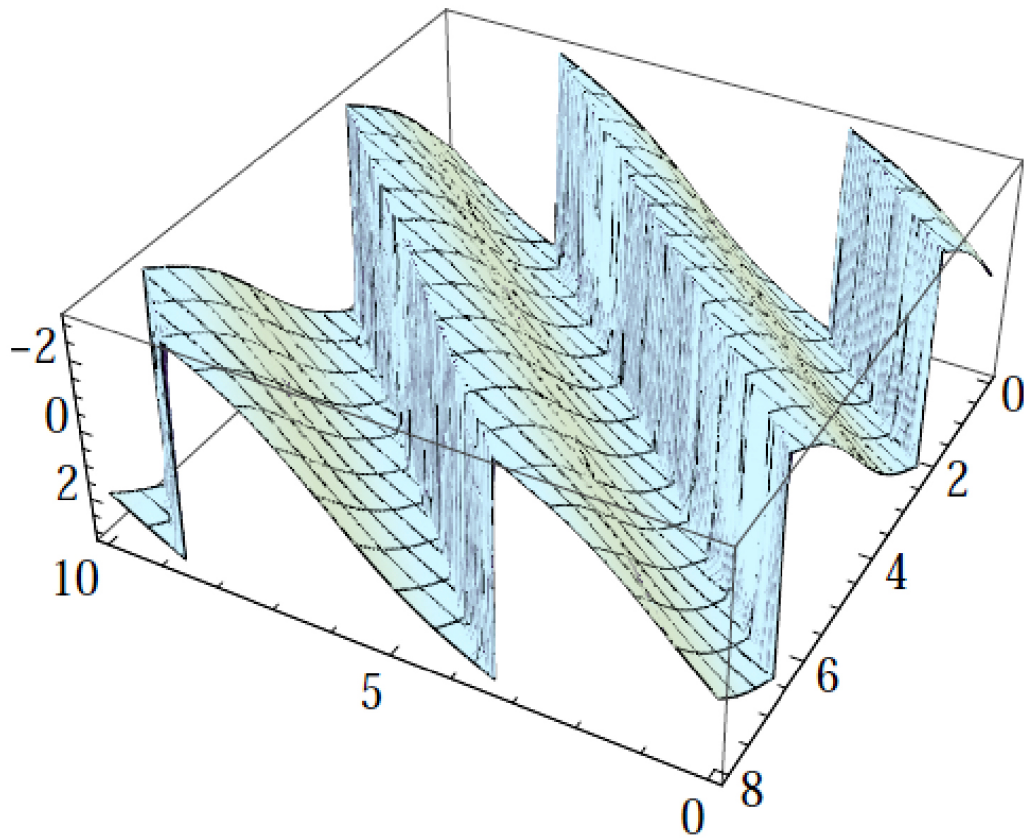


FIGURA 4. La función $u_{11}(x, t) = \pm 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{isn} \left(i\rho \left(x \pm \frac{1}{\rho} \sqrt{-\frac{(m^2-1)\beta\mu^2-\delta}{\alpha(1-m^2)}} t + \xi_0 \right), m \right) \right)$.

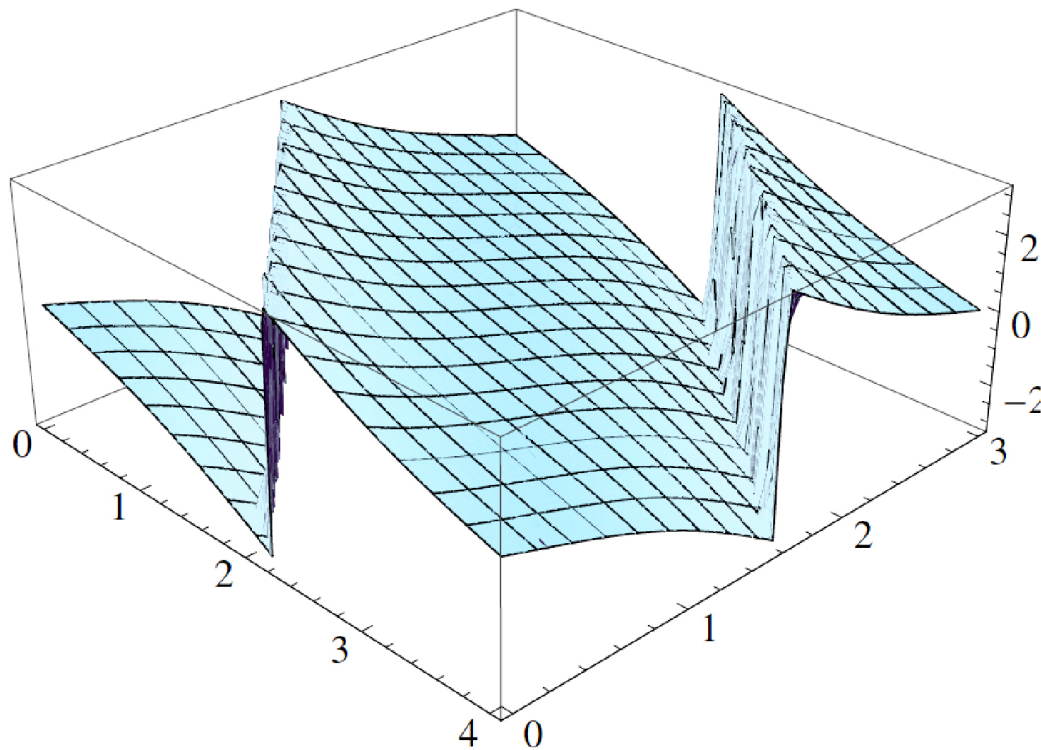


FIGURA 5. La función $u_{12}(x, t) = \pm 2 \tan^{-1} \left(\operatorname{imsn} \left(i\rho \left(x \pm \frac{1}{\rho} \sqrt{-\frac{(m^2-1)\beta\mu^2+\delta}{\alpha(1-m^2)}} t + \xi_0 \right), m \right) \right)$.

6. Conclusiones

Hemos mostrado cómo por medio de un sencillo sistema mecánico de péndulos acoplados el formalismo de Lagrange permite obtener la ecuación seno-Gordon perturbada, la cual hace posible estudiar la dinámica no lineal del ADN teniendo en cuenta las fuerzas disipativas de Raleigh que considera

los efectos de viscosidad en los estados abiertos del ADN de gran importancia en la biología molecular. La ecuación diferencial no lineal que describe el estado del sistema mecánico se resolvió empleando nuevos métodos analíticos desarrollados en los trabajos [7,8]. Consideramos que algunas soluciones encontradas son nuevas en la literatura y pueden ser de gran ayuda en el estudio de la dinámica no lineal del ADN.

*. FIZMAKO Research Group

1. J.W. Leech, *Classical Mechanics*, (Methuen, London; Wiley, New York, 1958).
2. V. Vasumathi and M. Daniel, *Physics Letters A* **373** (2008) 76-82.
3. M. Daniel, V. Vasumathi, *Physica D* **231** (2007) 10-29.
4. L.V. Yakushevich, *Phys. Letters A* **136** (1989) 413-417.
5. A. Fabian, Russell Kohl & A. Biswas, *Communication in Non-linear Science and Numerical Simulation* **14** (2009) 1227-1244.
6. Wazwaz Abdul-Majid *Chaos. Solitons & Fractals* **33** (2007) 703-710.
7. A. H. Salas, J. E. Castillo, *New exact solutions to sinh-cosh-Gordon equation by using techniques based on projective Riccati equations. Computers & Mathematics with Applications* **61** (2011) 470-481.
8. J. E. Castillo and A. H. Salas, *Exact solutions for a nonlinear model. Applied Mathematics and Computation* **217** (2010) 1646-1651.
9. S. Yomosa, *Phys. Rev. A* **27** (1983) 2120-2125.
10. H. A. Salas, *Exact solutions to coupled sine-Gordon equations* vol. 11 (Nonlinear Analysis: Real World Applications 2010) p. 3930-3935.
11. S. Englander *Proc. Natl. Acad* **77** (1989) 7122-722.
12. A.C. Scott, *A nonlinear Klein-Gordon equation, Am. J. Phys.* **37** (1969) 52-61.