

**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. Вологжин<sup>1</sup>, Л.А. Краснобаева<sup>1,2</sup>, А.В. Шаповалов<sup>1,3</sup><sup>1</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия*<sup>2</sup> *Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия*<sup>3</sup> *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.).

## 1. Модель Муто

Исследуемая модель является классической плоской моделью молекулы ДНК. Гамильтониан модели Муто имеет вид

$$H = \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{2} M_n (\dot{x}_n^2 + \dot{u}_n^2) + \frac{1}{2} M_n (\dot{y}_n^2 + \dot{v}_n^2) \right) + V_{LJ}(\tau_n - d_t + d_h) + V_{T,I}(l_n^I - d_1) + V_{T,II}(l_n^{II} - d_1), \quad (1)$$

где  $N$  – количество пар оснований в исследуемой цепочке;  $M_n$  – масса соответствующего азотистого основания ДНК; пары  $(x_n, u_n)$  и  $(y_n, v_n)$  – координаты  $n$ -х оснований в 1-й и 2-й полинуклеотидной цепочке молекулы ДНК, а точки над ними обозначают производные по времени;  $V_{LJ}(r)$  – потенциал Леннарда-Джонса;  $V_T(r)$  – потенциал Тоды для 1-й и 2-й полинуклеотидной цепочки молекулы ДНК соответственно, которые определены следующим образом:

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad (2)$$

$$V_T(r) = \frac{a}{b} e^{-br} + ar. \quad (3)$$

Здесь для потенциала Леннарда-Джонса (2)  $r$  – расстояние между центрами частиц, а параметры имеют следующий смысл:  $\epsilon$  – минимальная энергия системы,  $\sigma$  – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю, для потенциала Тоды (3)  $a$  и  $b$  – эмпирические параметры. Графическое представление модели Муто представлено на рис. 1.

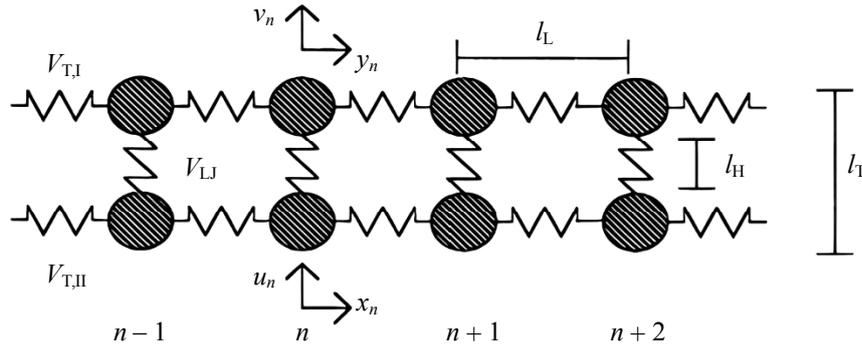


Рис. 1. Графическое представление модели Муто

Потенциалы (2), (3) в гамильтониане (1) содержат следующие константы:  $d_1$  – среднее продольное расстояние между основаниями в одной цепочке,  $d_t$  – среднее поперечное расстояние между основаниями в паре молекулы ДНК,  $d_h$  – размер водородной связи между полинуклеотидными цепочками молекулы ДНК. Зависимые переменные  $\tau_n$ ,  $l_n^I$ ,  $l_n^{II}$  определены следующим образом:

$$\tau_n = \sqrt{(d_t + v_n + u_n)^2 + (y_n - x_n)^2}, \quad (4)$$

$$l_n^I = \sqrt{(d_1 + x_{n+1} - x_n)^2 + (u_{n+1} - u_n)^2}, \quad (5)$$

$$l_n^{II} = \sqrt{(d_1 + y_{n+1} - y_n)^2 + (v_{n+1} - v_n)^2}. \quad (6)$$

Данные переменные определяют поперечное (4) и продольное смещение (5), (6)  $n$ -го основания относительно своего положения равновесия в 1-й и 2-й цепи ДНК соответственно.

После задания гамильтониана можно получить решение для исследуемой многочастичной системы, решив дифференциальное уравнение:

$$M_k \ddot{d}_k^{(i)} = - \frac{\partial H}{\partial d_k^{(i)}} - M_k \Gamma \dot{d}_k^{(i)} + \eta_k^{(i)}(t), \quad (7)$$

где  $d_k^{(i)} \in \{x_k, u_k, y_k, v_k\}$  – обобщенный вид функций координат;  $\Gamma$  – демпфирующий коэффициент;  $M_k$  – масса  $k$ -го азотистого основания (далее полагаем систему однородной, т.е.  $M_k \equiv M$  для  $\forall k = \overline{1, N}$ ), а  $\eta_n^{(i)}(t)$  – функция гауссовского шума, моделирующая действие случайных сил;  $\langle \eta_n(t) \eta_n(t') \rangle = 2M\Gamma kT \delta_{nn'} \delta(t-t')$  – корреляционные функции. Значения коэффициентов модели приведены в табл. 1 [10, 11].

Таблица 1

Коэффициенты модели

|   |                                 |
|---|---------------------------------|
| $\sigma = 2.7 \cdot 10^{-10}$ м           | $M = 6.41 \cdot 10^{-25}$ кг    |
| $d_t = 20$ Å                              | $\Gamma = 10$ с <sup>-1</sup>   |
| $d_l = 3.4$ Å                             | $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/Кл |
| $a = 5.13 \cdot 10^{-10}$ Н               | $T = 310$ К                     |
| $b = 6.18 \cdot 10^{-10}$ м <sup>-1</sup> |                                 |

Аналитическое решение заданной системы  $N$  частиц не было найдено, поэтому дальнейшие расчеты производятся с помощью математического программного пакета Maple.

## 2. Вейвлет-анализ

Для исследования уравнения (7) в работе применяется вейвлет-анализ, под которым по аналогии с фурье-анализом подразумевают совокупность непрерывных и дискретных вейвлет-преобразований (НВП и ДВП, соответственно) [13, 14]. При этом фурье-анализ не выбирается в качестве инструмента исследования по той причине, что фурье-преобразование имеет нулевое временное разрешение (в отличие от вейвлет-преобразования). Существует визуальное сходство динамики одной из модельных цепочек ДНК с некоторым сигналом (в этой работе исследовалась верхняя цепочка). Поэтому в дальнейшем динамику одной из цепочек будем называть сигналом.

Область применения ДВП – обработка и кодирование сигнала. В рамках настоящей работы ДВП используется с целью уменьшения шумов в исследуемом сигнале. Это необходимо, чтобы упростить численный поиск «пиков». Пример действия ДВП на сигнал со значением  $N = 24$  приведен на рис. 2.

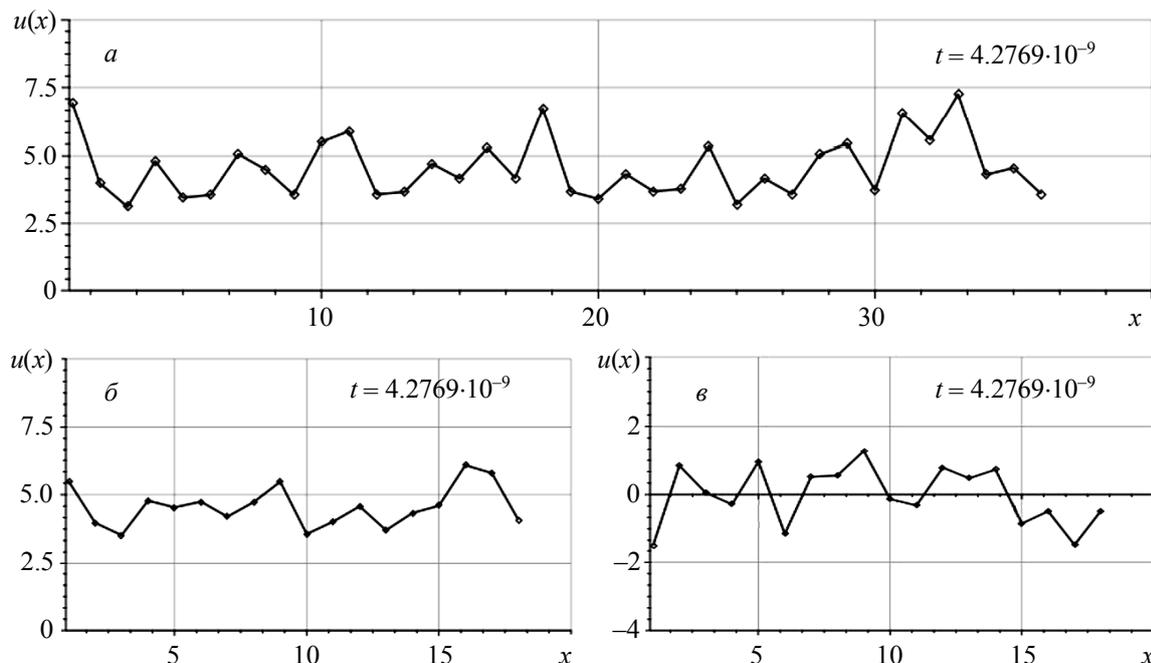


Рис. 2. Действие ДВП на сигнал (по оси абсцисс – продольное направление молекулы ДНК, а по оси ординат – поперечное направление молекулы ДНК) в произвольный момент времени: а – исходный сигнал; б – отфильтрованный сигнал; в – шум

Результаты действия ДВП, изображенные на рис. 2, получены с помощью метода Maple – DWT. Обработка исходного сигнала позволила уменьшить в 2 раза количество точек, что уменьшает длительность расчета действия НВП, а также упрощает вид результата действия НВП.

В основном НВП используют при обработке изображений и анализе сигналов в медицине, геологии, а также в некоторых задачах теории поля [15].

Действие материнского вейвлета  $\psi(t)$  на исходный сигнал  $x(t)$  определено следующим образом:

$$W(a,b) = \frac{1}{|a|^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ x(t) \bar{\psi} \left( \frac{t-b}{a} \right) \right], \quad (8)$$

где черта над материнским вейвлетом  $\psi(t)$  обозначает комплексное сопряжение, а параметры  $a$  и  $b$  – масштабирующий и сдвигающий параметр соответственно. Функция (8), которая называется скалограммой, не нормирована и может менять знак, поэтому будем рассматривать квадрат ее модуля,  $E(a,b) = |W(a,b)|^2$ . Далее функцию  $E(a,b)$  будем называть модифицированной скалограммой.

В теории вейвлет-преобразований скалограмму также определяют как абсолютное значение НВП-сигнала, построенное как функция времени и частоты.

Существует семейство материнских вейвлетов  $\psi(t)$ , которые должны удовлетворять условиям: ограниченность, локализованность [16]. Наиболее известными вейвлетами являются: вейвлет «мексиканская шляпа» (МНАТ), вейвлет Литтлвуда – Пейли, вейвлеты Хаара, вейвлеты Морле, вейвлеты Добеши [17].

Таким образом, если понимать динамику модельной цепочки ДНК как некоторый сигнал, то, согласно вейвлет-анализу, применение ДВП должно уменьшить количество шумов в исходном сигнале, а применение НВП должно помочь определить наличие солитонов, что будет свидетельствовать о существовании конформационных возмущений в модели Муто.

### Частный случай модели Муто

Начальные и краевые условия для модели представлены в табл. 2 и 3 соответственно.

Таблица 2

#### Начальные условия

|                        |                    |
|------------------------|--------------------|
| $x_k(0) = k \cdot d_1$ | $\dot{x}_k(0) = 0$ |
| $u_k(0) = 0$           | $\dot{u}_k(0) = 0$ |
| $y_k(0) = k \cdot d_1$ | $\dot{y}_k(0) = 0$ |
| $v_k(0) = 0$           | $\dot{v}_k(0) = 0$ |

Таблица 3

#### Краевые условия

|   |   |
|---|---|
| $\frac{d}{dt} z_1(t) = \frac{d}{dt} z_{N+1}(t)$ | $\frac{d}{dt} z_N(t) = \frac{d}{dt} z_0(t)$ |
| $x_0(0) = -d_1$                                 | $x_{N+1}(0) = (N+1)d_1$                     |
| $u_0(0) = 0$                                    | $u_{N+1}(0) = 0$                            |
| $y_0(0) = -d_1$                                 | $y_{N+1}(0) = (N+1)d_1$                     |
| $v_0(0) = d_1$                                  | $v_{N+1}(0) = d_1$                          |

Условия табл. 2 определяют динамику с тривиальными начальными условиями, т.е. основания располагаются равномерно в узлах решетки  $(2, N)$  с нулевыми скоростями при  $k = \overline{1, N}$ . Условия табл. 3 определяют замыкание цепочек, т.е. крайние основания в модели могут взаимодействовать друг с другом, в котором также было введено обозначение  $z_k(t) \in \{x_k(t), u_k(t), y_k(t), v_k(t)\}$ .

Условие замыкания цепочек определяет кольцевую молекулу ДНК, которая встречается у прокариот [4]. Поэтому в дальнейшем будет происходить сравнение полученных теоретических значений с экспериментальными данными, полученными при исследовании прокариот.

Параметры модели принимают значения:

$$\begin{aligned} N &= 16, & \text{Seed} &= 1, \\ T &= 310 \text{ К}, & \text{points} &= 500. \end{aligned}$$

Здесь  $N$  – число пар оснований, оно выбрано эмпирически, судя по длительности расчетов в используемом программном пакете, а значение температуры окружающей среды  $T$  выбрано из работы Мута [12]. Фиксированное значение параметра  $\text{Seed}$  сохраняет действие случайных сил  $\eta_n^{(i)}(t)$  при повторном запуске программы. Значение параметра  $\text{points}$  определяет количество моментов времени, в которые будет находиться максимальное значение на модифицированной скалограмме  $E(a, b)$ , полученное после применения к сигналу НВП (рис. 3).

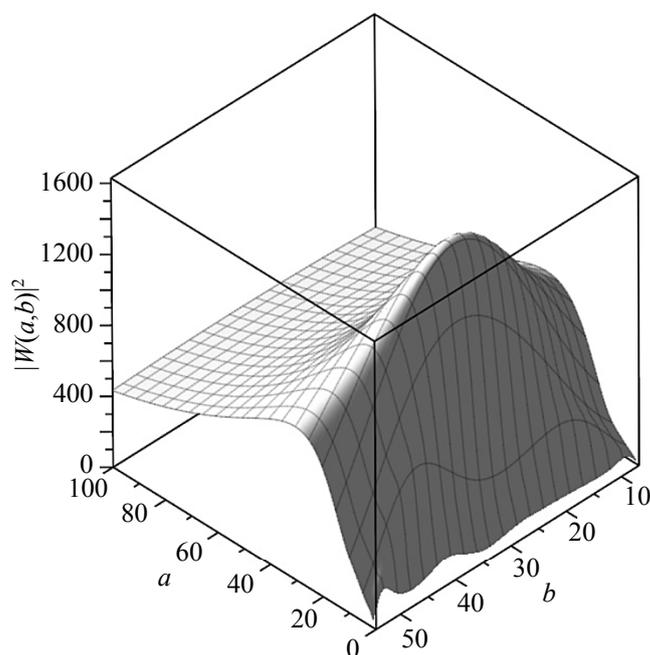


Рис. 3. Действие НВП на отфильтрованный с помощью ДВП сигнал при  $N = 16$  в произвольный момент времени (ось  $b$  – параметр смещения вдоль цепочки, ось  $a$  – масштабирующий параметр)

Пик, представленный на рис. 3, имеет солитоноподобную форму. Точка максимума этого пика перемещается вдоль оси  $b$  в процессе эволюции системы. Будем отслеживать положение точки максимума с помощью встроенного метода Maple: *Optimization:-Maximize*.

В результате использования вышеназванного метода получаем следующий график (рис. 4).

На рис. 4 сплошной линией описывается осциллирующий график зависимости, характеризующий проекцию точки максимума солитоноподобного графика на ось  $b$ . С помощью штриховой линии описывается линейная аппроксимация локальных максимумов и минимумов. Предположим, что конформационное возмущение распространяется с постоянной скоростью, а осциллирующий характер графика, описанного сплошной линией, обусловлен или ошибкой используемого метода *Optimization:-Maximize*, или особенностью применения НВП.

В интерпретации Инглэндера солитон трактуется как конформационное возмущение, следовательно, из графика зависимости на рис. 4 может быть получена скорость репликации/транскрипции. Полученные значения представлены ниже:

$$\begin{cases} v_b \approx 3.530 \cdot 10^{13} \text{ \AA}/\text{с} = 3530 \text{ м/с} \approx 10.4 \text{ Тб/с}, \\ v_b \approx 3.667 \cdot 10^{13} \text{ \AA}/\text{с} = 3667 \text{ м/с} \approx 10.8 \text{ Тб/с}. \end{cases}$$

Здесь обозначение Тб/с – терабаза в секунду, т.е. количество оснований, умноженное на  $10^{12}$ , деленное на секунду.

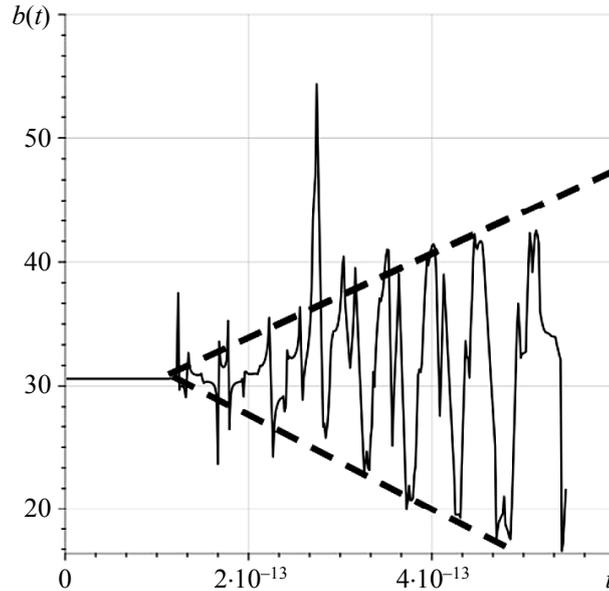


Рис. 4. График зависимости положения максимума на модифицированной скалограмме  $E(a,b)$  вдоль оси  $x$ , характеризующей положение оснований, от времени  $t$  (сплошная линия). Штриховые линии – линейные аппроксимации локальных максимумов и минимумов на сплошной линии

Полученные значения скорости распространения конформационного возмущения существенно отличаются от тех, которые указаны в работе [18], а именно экспериментальная скорость репликации  $v_{\text{эксп}}$  дается выражением

$$\left[ \begin{array}{l} v_{\text{эксп}} \approx 100000 \text{ б/мин} \approx 1.7 \text{ кб/с}, \\ \frac{\max\{v_{\text{в}}, v_{\text{н}}\}}{v_{\text{эксп}}} \approx 6.5 \cdot 10^9. \end{array} \right. \quad (9)$$

Различие между теоретическим и экспериментальным значением скорости репликации в (9) может быть обусловлено рядом факторов:

1. Наличие краевых эффектов при применении непрерывного вейвлет-преобразования: данные на краях скалограммы искажены и не могут использоваться для дальнейшего изучения.
2. Сравнительно малое количество пар оснований в исследуемой модели: реальные кольцевые молекулы ДНК имеют размеры, начиная от нескольких тысяч пар оснований (килобазы) до миллиона пар оснований (мегабазы).
3. Параметры, взятые из работ [11, 12], не являются адекватными для исследования модели вейвлет-анализом.

Идентификация модели, при которой теоретическое значение скорости распространения открытого состояния будет соответствовать экспериментальному значению, позволит использовать модель Муто для моделирования процессов репликации/транскрипции.

### 3. Оценка алгоритмической сложности программы по поиску точек максимума

Для применения модели Муто к реальным кольцевым молекулам ДНК, которые имеют размеры от нескольких тысяч до миллиона пар оснований, необходимо оценить алгоритмическую сложность в зависимости от числа пар азотистых оснований. С этой целью были проведены расчеты для количества пар оснований  $N = 6, 8, 10, 12, 16$ . Полученный график зависимости представлен на рис. 5.

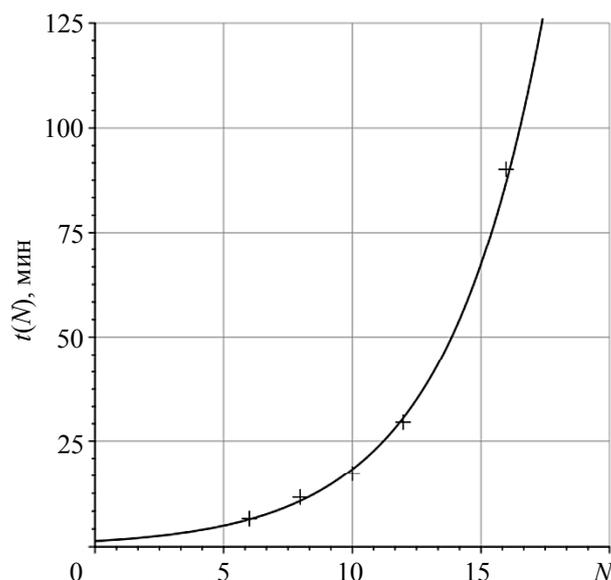


Рис. 5. Аппроксимированный график зависимости времени работы программы (в минутах) от заданного числа пар азотистых оснований. Крестики – измеренное время работы программы

Зависимость, представленная на рис. 5, была получена с помощью показательной аппроксимации, аналитический вид которой запишется как

$$t_{\text{approx}}(N) = 1.3365 \cdot 1.2986^N. \quad (10)$$

Таким образом, при количестве пар оснований  $N = 139$  время выполнения программы будет сопоставимо с возрастом Вселенной, что для моделирования кольцевых молекул ДНК, имеющих длину порядка тысячи пар оснований (килобазы), недопустимо.

### Заключение

В настоящей работе было показано существование солитоноподобного поведения одной из модельных цепей ДНК при значениях параметров модели, соответствующих значениям параметров из работ [11, 12], а также при наложении условия замыкания модельной цепочки.

Получен график зависимости положения максимума модифицированной скалограммы  $E(a, b)$  вдоль оси  $x$ , характеризующей положение оснований, от времени  $t$ . Также отмечены прямые, являющиеся линейными аппроксимациями, которые характеризуют распространение конформационного возмущения с постоянной скоростью (рис. 4).

Проведена оценка алгоритмической сложности программы по поиску точек максимума на солитоноподобном графике в зависимости от числа пар оснований, аппроксимированный вид которой представлен в (10), а графически – на рис. 5.

Таким образом, для дальнейших исследований конформационных возмущений в рамках модели Мута необходимо выполнение следующих условий:

а) Необходимо идентифицировать модель так, чтобы экспериментальная и теоретическая скорости репликации совпадали.

б) Необходимо перейти к непрерывному аналогу модели подобно тому, как континуализируется модель Инглэндера [6].

Требование б) является необходимым по причине высокой алгоритмической сложности программы по вычислению точек максимума на скалограмме, полученной при действии НВП на одну из модельных цепочек ДНК.

Не исключается возможность нахождения применения и для дискретной модели Мута. Например, в последние годы возрос интерес к исследованию микроРНК [19, 20]. МикроРНК имеют размер порядка 18–25 нуклеотидов, что с учетом полученной оценки алгоритмической сложности используемой программы является допустимым для расчета динамики этой модели.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Watson J.D., Crick F.H.C. // *Nature*. – 1953. – V. 171. – No. 9. – P. 737–738. – DOI: 10.1038/171737a0.
2. Peyrard M., Bishop A.R. // *Phys. Rev. Lett.* – 1989. – V. 62. – P. 2755–2758. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.62.2755.
3. Peyrard M. *Nonlinear Excitations in Biomolecules*. – Berlin: Springer, 2009. – 207 p.
4. Yakushevich L.V. *Nonlinear Physics of DNA*. – Weinheim: Wiley, 2004. – 190 p.
5. Давыдов А.С. *Солитоны в молекулярных системах*. – Киев: Наукова думка, 1984. – 288 с.
6. Englander S.W., Kallenbach N.R., Heeger A.J., et al. // *Proc. Natl. Acad. Sci.* – 1980. – V. 77. – P. 7222–7226.
7. Shapovalov A.V., Obukhov V.V. // *Symmetry*. – 2018. – V. 10. – No. 3. – P. 53. – DOI: 10.3390/sym10030053.
8. Краснобаева Л.А., Шаповалов А.В. // *Изв. вузов. Физика*. – 2008. – Т. 51. – № 1. – С. 77–84.
9. Краснобаева Л.А., Шаповалов А.В. // *Изв. вузов. Физика*. – 2008. – Т. 51. – № 2. – С. 41–51.
10. Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. *Теория солитонов. Метод обратной задачи*. – М.: Наука, 1980. – 319 с.
11. Muto V., Lomdahl P.S., Christiansen P.L. // *Phys. Rev. A*. – 1990. – No. 42. – P. 7452–7458.
12. Muto V. // *Acta Appl. Math.* – 2011. – No. 11. – P. 5–15. – DOI: 10.1007/s10440-010-9564-8.
13. Павлов А.Н. // *Изв. вузов. ПНД*. – 2009. – Т. 17. – Вып. 5. – С. 99–111.
14. Витязев В.В. *Вейвлет-анализ временных рядов*. – СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского университета, 2001. – 61 с.
15. Altaisky M.V., Kaputkina N.E. // *Phys. Rev. D*. – 2013. – No. 88. – P. 1–15. – DOI: 10.1103/PhysRevD.88.025015.
16. Vidakovic B., Mueller P. *Wavelets for Kids*. – Durham: Duke University, 1991. – 28 p.
17. Чуи К. *Введение в вейвлеты*. – М.: Мир, 2001. – 412 с.
18. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. // *Math. Biol. Bioinform.* – 2018. – No. 13. – P. 162–267. – DOI: 10.17537/2015.10.88.
19. Sell M.C., Ramlogan-Steel Ch.A., Steel J.C., Dhungel B.P. // *Expert Rev. Mol. Med.* – 2023. – No. 25. – P. 1–14. – DOI: 10.1017/erm.2023.7.
20. Lu Th.X., Rothenberg M.E. // *J. Allergy Clinical Immunol.* – 2018. – No. 141. – P. 1202–1207. – DOI: 10.1016/j.jaci.2017.08.034.

Поступила в редакцию 19.11.2024,  
принята в печать 03.12.2024.

**Вологжин** Матвей Алексеевич, студент НИ ТГУ, лаборант лаборатории анализа данных физики высокой энергии НИ ТГУ, e-mail: matvey.vologzhin@mail.ru;

**Краснобаева** Лариса Александровна, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей и экспериментальной физики НИ ТГУ, профессор кафедры биофизики и функциональной диагностики СибГМУ, e-mail: kla1983@mail.ru;

**Шаповалов** Александр Васильевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой теоретической физики НИ ТГУ, гл. науч. сотр. Международной лаборатории теоретической космологии ТУСУРа, e-mail: shpv@mail.tsu.ru.

## ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS AND FIELD THEORY

UDC 530.182

DOI: 10.17223/00213411/68/4/1

### Study of the dynamics of conformational perturbation in the DNA molecule of the Muto model

M.A. Vologzhin<sup>1</sup>, L.A. Krasnoabaeva<sup>1,2</sup>, A.V. Shapovalov<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Tomsk State University, Tomsk, Russia

<sup>2</sup> Siberian State Medical University, Tomsk, Russia

<sup>3</sup> Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russia

**Abstract:** The dynamics of local conformational perturbations (LCP) in the DNA molecule is studied using the Muto model with the Toda potential and the Lennard-Jones potential using wavelet transform methods. The analysis of solutions to the equations of the homogeneous Muto model, carried out using numerical implementations of discrete and continuous wavelet transforms, leads to the conclusion about the emergence and propagation of local conformational perturbations along the chain of atoms of the DNA molecule, which can be considered as analogs of solitons in the Englander model, constructed on the basis of the sine-Gordon equation. Estimates of the propagation rate of LCP are obtained and an assessment of the algorithmic complexity of numerical implementations is carried out.

**Keywords:** DNA, replication, transcription, the Muto model, open state, conformational perturbation, soliton, wavelet analysis.

**Acknowledgments:** The research was carried out with the support of a grant from the Government of the Russian Federation (Agreement No. 075-15-2025-009 of 28 February 2025).

**For citation:** Vologzhin M.A., Krasnobaeva L.A., Shapovalov A.V. (2025) Study of the dynamics of conformational perturbation in the DNA molecule of the Muto model. *Izvestiya vuzov. Fizika.* 68(4). pp. 5–13. DOI: 10.17223/00213411/68/4/1

## REFERENCES

1. Watson J.D., Crick F.H.C. (1953) *Nature*. 171(9). pp. 737–738. DOI: 10.1038/171737a0
2. Peyrard M., Bishop A.R. (1989) *Physical Review Letters*. 62. pp. 2755–2758. DOI: 10.1103/PhysRevLett.62.2755
3. Peyrard M. (2009) *Nonlinear Excitations in Biomolecules*. Berlin: Springer.
4. Yakushevich L.V. (2004) *Nonlinear Physics of DNA*. Weinheim: Wiley.
5. Davydov A.S. (1984) *Solitony v molekulyarnykh sistemakh* [Solitons in molecular systems]. Kiev: Naukova Dumka.
6. Englander S.W., Kallenbach N.R., Heeger A.J., et al. (1980) *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 77. pp. 7222–7226.
7. Shapovalov A.V., Obukhov V.V. (2018) *Symmetry*. 10(3). p. 53. DOI: 10.3390/sym10030053
8. Krasnobaeva L.A., Shapovalov A.V. (2008) *Izvestiya vuzov. Fizika*. 51(1). pp. 77–84. (In Russian.)
9. Krasnobaeva L.A., Shapovalov A.V. (2008) *Izvestiya vuzov. Fizika*. 51(2). pp. 41–51. (In Russian.)
10. Zakharov V.E., Manakov S.V., Novikov S.P., Pitaevskiy L.P. (1980) *Teoriya solitonov. Metod obratnoy zadachi* [Theory of solitons. Inverse problem method]. Moscow: Nauka. (In Russian.)
11. Muto V., Lomdahl P.S., Christiansen P.L. (1990) *Physical Review A*. 42. pp. 7452–7458.
12. Muto V. (2011) *Acta Applicandae Mathematicae*. 11. pp. 5–15. DOI: 10.1007/s10440-010-9564-8
13. Pavlov A.N. (2009) *Izvestiya vuzov. Prikladnaya nelineynaya dinamika*. 17(5). pp. 99–111. (In Russian.)
14. Vityazev V.V. (2001) *Veyvlet-analiz vremennykh ryadov* [Wavelet analysis of time series]. Saint Petersburg State University. (In Russian.)
15. Altaisky M.V., Kaputkina N.E. (2013) *Physical Review D*. 88. pp. 1–15. DOI: 10.1103/PhysRevD.88.025015
16. Vidakovic B., Mueller P. (1991) *Wavelets for Kids*. Durham: Duke University.
17. Chui K. (2001) *Vvedenie v veyvlety* [Introduction to Wavelets]. Moscow: Mir. (In Russian.)
18. Shigaev A.S., Ponomarev O.A., Lakhno V.D. (2018) *Mathematical Biology & Bioinformatics*. 13. pp. 162–267. DOI: 10.17537/2015.10.88
19. Sell M.C., Ramlogan-Steel Ch.A., Steel J.C., Dhungel B.P. (2023) *Expert Reviews in Molecular Medicine*. 25. pp. 1–14. DOI: 10.1017/erm.2023.7
20. Lu Th.X., Rothenberg M.E. (2018) *Journal of Allergy and Clinical Immunology*. 141. pp. 1202–1207. DOI: 10.1016/j.jaci.2017.08.034

The article was submitted 19.11.2024,  
accepted for publication 03.12.2024.

**Vologzhin** Matvey A., Student of TSU, Assistant of the Laboratory of High Energy Physics Data Analysis of TSU, e-mail: matvey.vologzhin@mail.ru;

**Krasnobaeva** Larisa A., Dr.Sc., Professor of the Department of General and Experimental Physics of TSU, Professor of the Department of Biophysics and Functional Diagnostics of SSMU, e-mail: kla1983@mail.ru;

**Shapovalov** Alexander V., Dr.Sc., Professor, Head of the Department of Theoretical Physics of TSU, Chief Researcher of the International Laboratory of Theoretical Cosmology of TUSUR, e-mail: shpv@phys.tsu.ru.