

О МОДЕЛИРОВАНИИ ДВИЖЕНИЯ ТРАНСКРИПЦИОННОГО ПУЗЫРЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОСТОЯННОГО ТОРСИОННОГО МОМЕНТА

© 2016 г. А.А. Гриневич, Л.В. Якушевич

Институт биофизики клетки РАН, 142290, Пущино Московской области, ул. Институтская, 3

E-mail: grin_aa@mail.ru

Поступила в редакцию 12.05.16 г.

Представлены результаты исследования движения транскрипционного пузыря под действием постоянного торсионного момента. Движение пузыря промоделировано модифицированным уравнением синус-Гордона. Найдены численные решения этого уравнения – кинки. Рассчитаны траектории движения в однородной и неоднородной последовательностях для разных модельных значений торсионного момента M_τ и разных значений начальной скорости v_0 . Показано, что изменение торсионного момента M_τ оказывает существенное влияние на характер траекторий движения кинки. В то же время, изменение начальной скорости кинки в достаточно широком интервале значений начальных скоростей не влияет на характер траектории движения кинки.

Ключевые слова: моделирование динамики ДНК, транскрипционный пузырь, торсионный момент, кинки.

Согласно современным представлениям о динамических механизмах процесса транскрипции, торсионный момент ДНК может играть ключевую регуляторную роль на начальных стадиях этого процесса [1]. Торсионный или вращательный момент направлен вдоль оси молекулы ДНК и характеризует дополнительные вращательные напряжения, формируемые связывающимися с ДНК белками во время процесса транскрипции, или формируемые состояниями суперскрученности (суперспирализации), определяемые параметром плотности витков суперспирали. Предполагается, что торсионный момент может оказывать существенное влияние на скорость, направление и характер движения транскрипционного пузыря (transcription bubble). Такой пузырь образуется на начальной стадии процесса транскрипции и продолжает движение вдоль двойной цепи ДНК от промоторной до терминаторной области (рис. 1). Он представляет собой небольшую, размером в несколько пар оснований, область, внутри которой водородные связи между комплементарными основаниями разорваны. В научной литературе его называют также открытым состоянием или локально расплетенной областью ДНК.

Новые технологии проведения экспериментальных исследований с одиночными ДНК, например, методы оптического динамометрического ключа или угловой оптической ловушки

(angular optical trap – AOT) [2,3], а также метод магнитного пинцета [4–6] позволяют напрямую исследовать действие постоянного торсионного момента на динамические свойства молекулы ДНК. Однако пока эти технологии применимы только для небольших фрагментов ДНК и, следовательно, непригодны для изучения движения транскрипционного пузыря.

Тем не менее теоретическое исследование закономерностей движения транскрипционного пузыря под действием постоянного торсионного момента возможно с помощью методов математического моделирования. Первые шаги в этом направлении сделаны довольно давно и связаны были с развитием нелинейных математических моделей ДНК [7]. Все началось с достаточно простой модели Инглэндера [8], основанной на уравнении синус-Гордона:

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

Здесь $\varphi(z, t)$ – угловое отклонение азотистого основания от положения равновесия, I – момент инерции основания, K' – крутильная жесткость сахаро-фосфатного остова, a – расстояние между ближайшими вдоль главной оси молекулы парами комплементарных оснований, V – коэффициент, характеризующий взаимодействие между основаниями внутри этих пар. Ось z

направлена вдоль главной оси молекулы. В случае однородной синтетической ДНК, когда все коэффициенты уравнения синус-Гордона являются константами, уравнение (1) обладает точными аналитическими решениями в виде кинков:

$$\varphi = 4\arctan\left[\exp\left(\frac{\eta}{d}(z - vt - z_0)\right)\right], \quad (2)$$

которые многие исследователи интерпретируют как открытые состояния ДНК [8–18]. В формуле (2) v – скорость кинка, z_0 – произвольная константа, $d = a(K'/V)^{1/2}$, $\eta = (1 - v^2/C_0^2)^{-1/2}$, $C_0 = a(K'/I)^{1/2}$ – скорость звука в ДНК.

В дальнейшем модель (1) претерпела многочисленные модификации. Наиболее существенные из них связаны с учетом эффектов диссипации и внешних воздействий. Для этой цели в правую часть уравнения (1) добавили слагаемое $-\lambda\varphi$, моделирующее эффекты диссипации, и слагаемое $M(t)$, моделирующее внешнее воздействие [19]:

$$I\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} - K'a^2\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} + V\sin\varphi = -\lambda\frac{\partial\varphi}{\partial t} + M(t). \quad (3)$$

Еще одна важная модификация уравнения связана с учетом неоднородности ДНК. В работах [20,21] было показано, что корректный учет этого свойства ДНК приводит к следующему уравнению:

$$I(z)\frac{\partial^2\varphi(z,t)}{\partial t^2} - KR(z)a^2\frac{\partial^2(R(z)\varphi(z,t))}{\partial z^2} + V(z)\sin\varphi(z,t) = -\lambda(z)\frac{\partial\varphi(z,t)}{\partial t} + M(t). \quad (4)$$

Здесь K – жесткость (на растяжение) сахара-фосфатного остова, $R(z)$ – расстояние от центра тяжести азотистого основания до сахара-фосфатной цепочки, $K' = KR^2(z)$.

В данной работе для исследования закономерностей движения транскрипционного пузыря под действием постоянного торсионного момента мы воспользуемся модельным уравнением (4), в котором внешнее воздействие будет моделироваться константой M_τ . Будут найдены численные решения этого уравнения. Будут построены траектории движения кинка в однородных и неоднородных последовательностях, исследовано влияние торсионного момента для разных модельных значений торсионного момента и начальных скоростей кинка на характер этих траекторий.

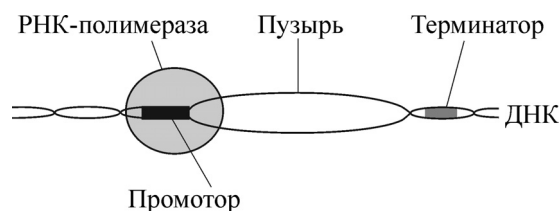


Рис. 1. Схематическое изображение транскрипционного пузыря.

МОДЕЛЬ И МЕТОД

Математическую задачу о движении транскрипционного пузыря под действием постоянного торсионного момента сформулируем следующим образом: решить уравнение

$$I(z)\frac{\partial^2\varphi(z,t)}{\partial t^2} - KR(z)a^2\frac{\partial^2(R(z)\varphi(z,t))}{\partial z^2} + V(z)\sin\varphi(z,t) = -\lambda(z)\frac{\partial\varphi(z,t)}{\partial t} + M \quad (5)$$

с начальными

$$\begin{aligned} \varphi(0,z) &= 4\arctan\left(\exp\left(\frac{\eta}{d}[z - z_0]\right)\right) \\ \frac{\partial\varphi}{\partial t}(0,z) &= -2v_0\frac{\eta/d}{\cosh\left(\frac{\eta}{d}[z - z_0]\right)} \end{aligned} \quad (6)$$

и краевыми условиями:

$$\varphi(t,Z_L) = 0, \quad \varphi(t,Z_R) = 2\pi, \quad (7)$$

где Z_L и Z_R – координаты левого и правого концов рассматриваемой последовательности соответственно. Уравнение (5) будем решать численно. Значения коэффициентов, которые будут использованы при проведении численных расчетов, показаны в таблице.

Для наиболее удобного представления результатов мы применим метод траекторий, разработанный в работе [21]. В этом методе для анализа результатов расчетов используется не само решение $\varphi(z,t)$, а его производная $\frac{\partial\varphi}{\partial z}$ и проекция этой производной на плоскость (z,t) , т. е. траектория кинка.

ТРАЕКТОРИИ, РАССЧИТАННЫЕ В ОДНОРОДНОМ СЛУЧАЕ

Рассмотрим однородную последовательность polyA длиной 300 пар оснований (п.о.). Сначала исследуем влияние торсионного мо-

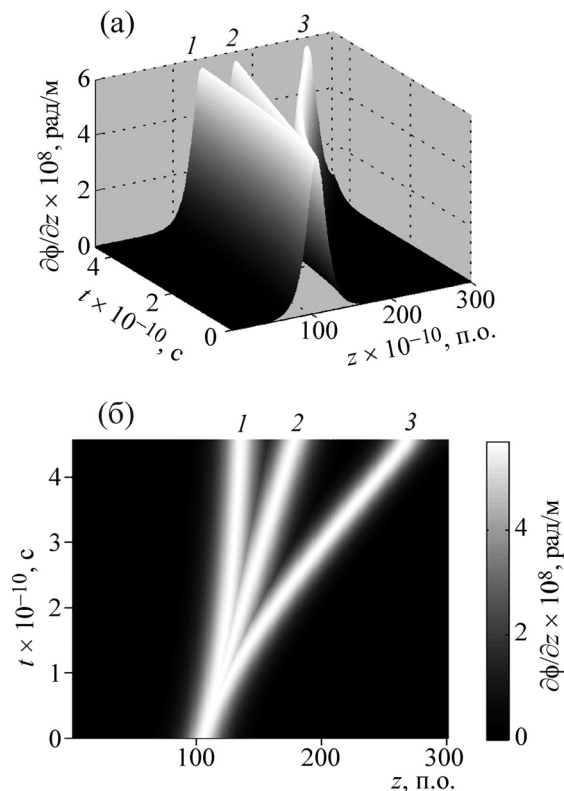


Рис. 2. Траектории кинка в последовательности polyA: (а) – трехмерное представление, (б) – проекция на плоскость (z, t) (вид сверху). Траектории получены при одинаковой начальной скорости $v_0 = 50$ м/с, но для разных значений внешних торсионных моментов: $M_\tau = 1 \cdot 10^{-24}$ Дж ($< M_\tau^{\text{crit}}$) (1), $M_\tau = M_\tau^{\text{crit}} = 7,64 \cdot 10^{-24}$ Дж (2), $M_\tau = 2,5 \cdot 10^{-23}$ Дж ($> M_\tau^{\text{crit}}$) (3).

мента на характер траекторий. На рис. 2а представлены производные $d\phi(z, t)/dz$ решений уравнения (5), полученные нами для одного фиксированного значения начальной скорости $v_0 = 50$ м/с и трех разных значений торсионного момента: $M_\tau = 1 \cdot 10^{-24}$ Дж, $M_\tau = M_\tau^{\text{crit}} = 8,6 \cdot 10^{-24}$ Дж, $M_\tau = 2,5 \cdot 10^{-23}$ Дж. Здесь величина критического значения торсионного момента M_τ^{crit} определяется как такое значение, при котором скорость кинка сохраняется постоянной и рав-

ной начальной скорости кинка, а его траектория на плоскости (z, t) (линия 2 на рис. 2б) представляет собой прямую линию.

Величину критического значения M_τ^{crit} мы определили с помощью метода МакЛафлина–Скотта [23]. Этот метод позволяет представить решение задачи (5) в форме кинка

$$\phi_k(z, t) = 4 \arctan \{ \exp [(\eta / d) (z - v(t)t)] \}, \quad (8)$$

у которого скорость $v(t)$ полностью определяется из решения обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка [19]:

$$\frac{dv'(t)}{dt} = -\frac{\lambda}{I} v'(t) (1 - v'^2(t)) + \frac{M_\tau \pi}{4\sqrt{IV}} (1 - v'^2(t))^{3/2}, \quad (9)$$

где $v'(t) = v(t)/C_0$. Чтобы скорость кинка оставалась постоянной, необходимо обеспечить выполнение условия: $\frac{dv'(t)}{dt} = 0 \rightarrow v = \text{const} = v_0$ – начальная скорость кинка, $v' = v_0/C_0$. Тогда из уравнения (9) следует:

$$\frac{\lambda}{I} v'(1 - v'^2) = \frac{M_\tau^{\text{crit}} \pi}{4\sqrt{IV}} (1 - v'^2)^{3/2}. \quad (10)$$

Отсюда легко получить искомое соотношение:

$$M_\tau^{\text{crit}} = \frac{4\lambda\gamma_0}{\pi C_0} \sqrt{\frac{V}{I}} v_0, \quad \gamma_0 = \frac{1}{\left(1 - \frac{v_0^2}{C_0^2}\right)^{1/2}}. \quad (11)$$

Подставляя в формулу (11) значения параметров из таблицы, мы получили оценку критического значения торсионного момента: $M_\tau^{\text{crit}} = 7,64 \cdot 10^{-24}$ Дж.

Из рис. 2б видно, что при $M_\tau < M_\tau^{\text{crit}}$ скорость кинка, которая определяется углом наклона траектории к вертикальной оси, сначала уменьшается, а затем выходит на стационарное значение $v_{1, \text{st}}$. При $M_\tau = M_\tau^{\text{crit}}$ скорость кинка постоянна и равна $v_0 = 50$ м/с. При $M_\tau >$

Коэффициенты уравнения (5) [19,22]

Вид последовательности	$I \times 10^{-44}$, кг·м ²	$K' \times 10^{-18}$, Дж	$R \times 10^{-10}$, м	$V \times 10^{-20}$, Дж	$a \times 10^{-10}$, м	$\lambda \times 10^{-34}$, Дж·с
poly(A)	7,61	2,27	5,8	2,09	3,4	4,25
poly(T)	4,86	1,56	4,8	1,43	3,4	3,52
poly(G)	8,22	2,20	5,7	3,12	3,4	4,18
poly(C)	4,11	1,50	4,7	2,12	3,4	3,45

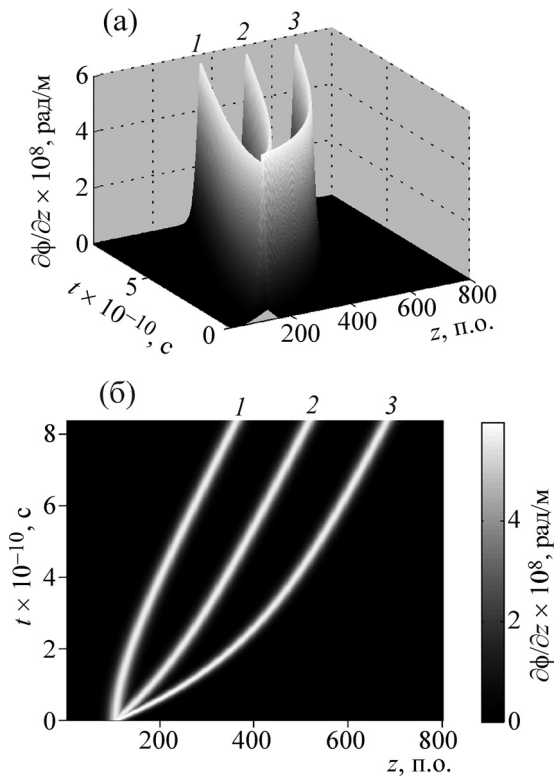


Рис. 3. Траектории кинка в последовательности polyA: (а) – трехмерное представление, (б) – проекция на плоскость (z, t) (вид сверху). Траектории получены для одного и того же внешнего торсионного момента $M_\tau = 2 \cdot 10^{-23}$ Дж, но для разных значений начальных скоростей: $v_0 = 5$ м/с (1), $v_0 = 300$ м/с (2), $v_0 = 600$ м/с (3).

M_τ^{crit} скорость кинка увеличивается и выходит на стационарное значение $v_{2, \text{st}}$.

Время установления стационарного значения скорости можно грубо оценить из графика на рис. 2б. Оно приблизительно равно $T_1 \cong 2,31 \cdot 10^{-10}$ с для первой траектории и $T_2 \cong 2,28 \cdot 10^{-10}$ с для второй. Значения установившихся (стационарных) скоростей $v_{1, \text{st}}$ и $v_{2, \text{st}}$, также определяемые из графика на рис. 2б, равны 12,5 и 141,2 м/с соответственно. Таким образом, меняя величину торсионного момента, можно заставить транскрипционный пузырь (кинк) двигаться с заданной скоростью.

Далее мы исследовали влияние начальной скорости на характер траекторий. На рис. 3а представлены производные $d\phi(z, t)/dz$ решений уравнения (5) для одного фиксированного значения торсионного момента $M_\tau = 2 \cdot 10^{-23}$ Дж и трех значений начальной скорости: $v_0 = 5$, 300 и 600 м/с. Траектории кинка на плоскости (z, t) представлены на рис. 3б.

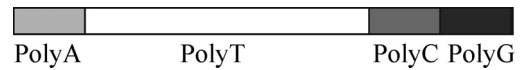


Рис. 4. Схематическое изображение неоднородной последовательности, состоящей из четырех однородных участков.

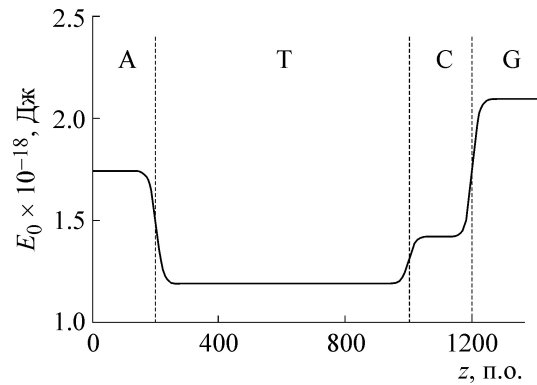


Рис. 5. Энергетический профиль последовательности polyA–polyT–polyC–polyG. Прямые вертикальные линии обозначают границы между участками.

Из рис. 2б видно, что все три траектории выходят на одинаковую стационарную скорость, равную $v_{\text{st}} = 129,6$ м/с. Установление этого значения происходит приблизительно за период времени, равный $T \cong 7,10 \cdot 10^{-10}$ с. Таким образом, торсионный момент играет важную роль в динамике транскрипционного пузыря. Не столько важно, какова начальная скорость, важнее, каков торсионный момент. Именно он определяет стационарную скорость, т.е. скорость, с которой будет двигаться транскрипционный пузырь после переходного периода.

ТРАЕКТОРИИ, РАССЧИТАННЫЕ В НЕОДНОРОДНОМ СЛУЧАЕ

Рассмотрим искусственную неоднородную последовательность, состоящую из четырех однородных участков. При этом первый (polyA), третий (polyC) и четвертый (polyG) участки имеют длину 200 п.о., а второй (polyT) – 800 п.о.

На каждом из участков энергия покоя кинка определяется простой формулой: $E_0 = \sqrt{K'a^2/I}$. Это значение мы интерпретируем как минимальную энергию, необходимую для активации транскрипционного пузыря (кинка) на этом участке. Рассчитав минимальные значения энергии для каждого из четырех участков и соединив их на границах участков плавной линией, получаем энергетический профиль нашей последовательности [21] (рис. 5).

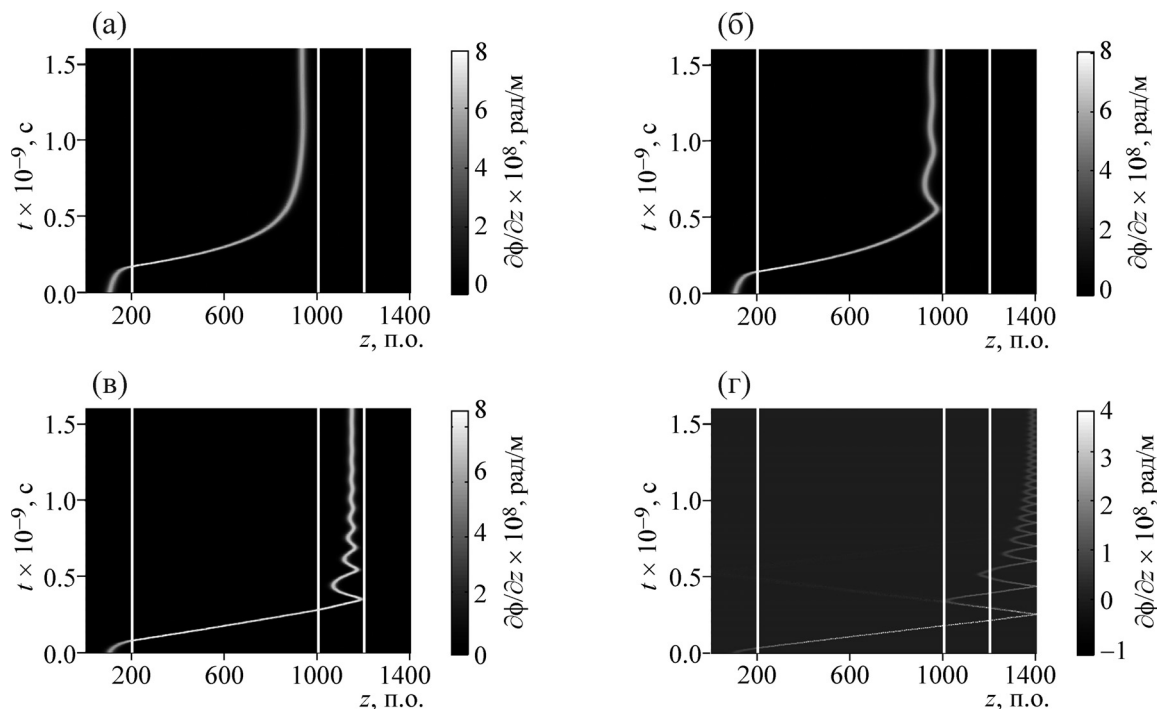


Рис. 6. Траектории кинка в неоднородной последовательности, полученные при одинаковой начальной скорости $v_0 = 50$ м/с, но при разных значениях внешних торсионных моментов: $M_\tau = 2 \cdot 10^{-24}$ Дж (а), $M_\tau = 2 \cdot 10^{-23}$ Дж (б), $M_\tau = 2 \cdot 10^{-22}$ Дж (в), $M_\tau = 2 \cdot 10^{-21}$ Дж (г). Прямые вертикальные линии обозначают границы между областями.

Теперь задачу о движении транскрипционного пузыря кинка в неоднородной последовательности polyA–polyT–polyC–polyG можно сформулировать как физическую задачу о движении «квазичастицы» в потенциале с энергетическим профилем, изображенном на рис. 5.

Так же как и в предыдущем разделе, исследуем сначала влияние торсионного момента на характер траекторий. Для этого мы построили траектории кинка для одного значения начальной скорости и нескольких значений торсионного момента. На рис. 6а представлена траектория кинка в случае, когда $v_0 = 50$ м/с, $M_\tau = 2 \cdot 10^{-24}$ Дж. Видно, что в этом случае кинк проходит первый участок (polyA) и останавливается во втором (polyT) вследствие эффектов диссипации.

При большем значении торсионного момента ($M_\tau = 2 \cdot 10^{-23}$ Дж) кинк пересекает первую границу (рис. 6б), отражается от второй границы и останавливается во второй области, предварительно совершив несколько зигзагообразных движений. Эти необычные движения являются результатом двух воздействий – торсионного момента и момента диссипативных сил, которые складываются при движении влево и вычитаются при движении вправо. Траектория движения кинка в этом случае напоминает траекторию движения мяча, который, падая на

землю, несколько раз подпрыгивает, прежде чем остановиться.

При еще большем значении торсионного момента ($M_\tau = 2 \cdot 10^{-22}$ Дж) кинк пересекает первую и вторую границу (рис. 6в), отражается от третьей границы и останавливается в третьей области, предварительно совершив несколько зигзагообразных движений.

При дальнейшем повышении значения торсионного момента ($M_\tau = 2 \cdot 10^{-21}$ Дж, рис. 6г) кинк пересекает все три границы и достигает четвертого участка. Вследствие жестких краевых условий (7) кинк отскакивает от правого края последовательности и останавливается в четвертой области, предварительно совершив несколько зигзагообразных движений.

Можно предположить, что, меняя значение торсионного момента, можно «заставить» кинк пересекать ту или иную границу. В качестве аргумента, подтверждающего это предположение, мы приводим пример, представленный на рис. 7. На нем показаны результаты подбора минимального значения торсионного момента, необходимого для пересечения третьей границы. Видно, что это значение лежит в интервале ($M_\tau = 3,2225 \cdot 10^{-22}$, $3,225 \cdot 10^{-22}$ Дж).

Далее мы исследовали влияние начальной скорости на характер траекторий. Для этого

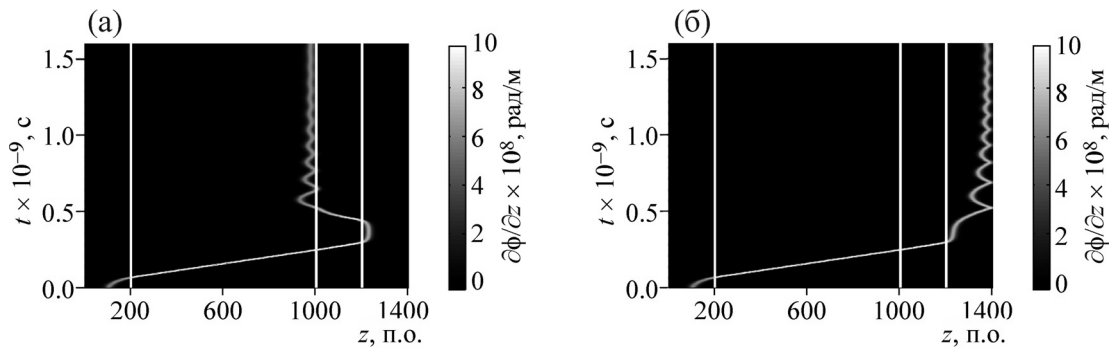


Рис. 7. Траектории кинка в неоднородной последовательности, полученные при одинаковой начальной скорости $v_0 = 50$ м/с и двух разных значениях внешних торсионных моментов $M_\tau = 3,2225 \cdot 10^{-22}$ Дж (а), $M_\tau = 3,225 \cdot 10^{-22}$ Дж (б). Прямые вертикальные линии обозначают границы между областями.

мы построили траектории для одного фиксированного значения торсионного момента $M_\tau =$

$2 \cdot 10^{-23}$ Дж и разных значений начальной скорости кинка v_0 (рис. 8).

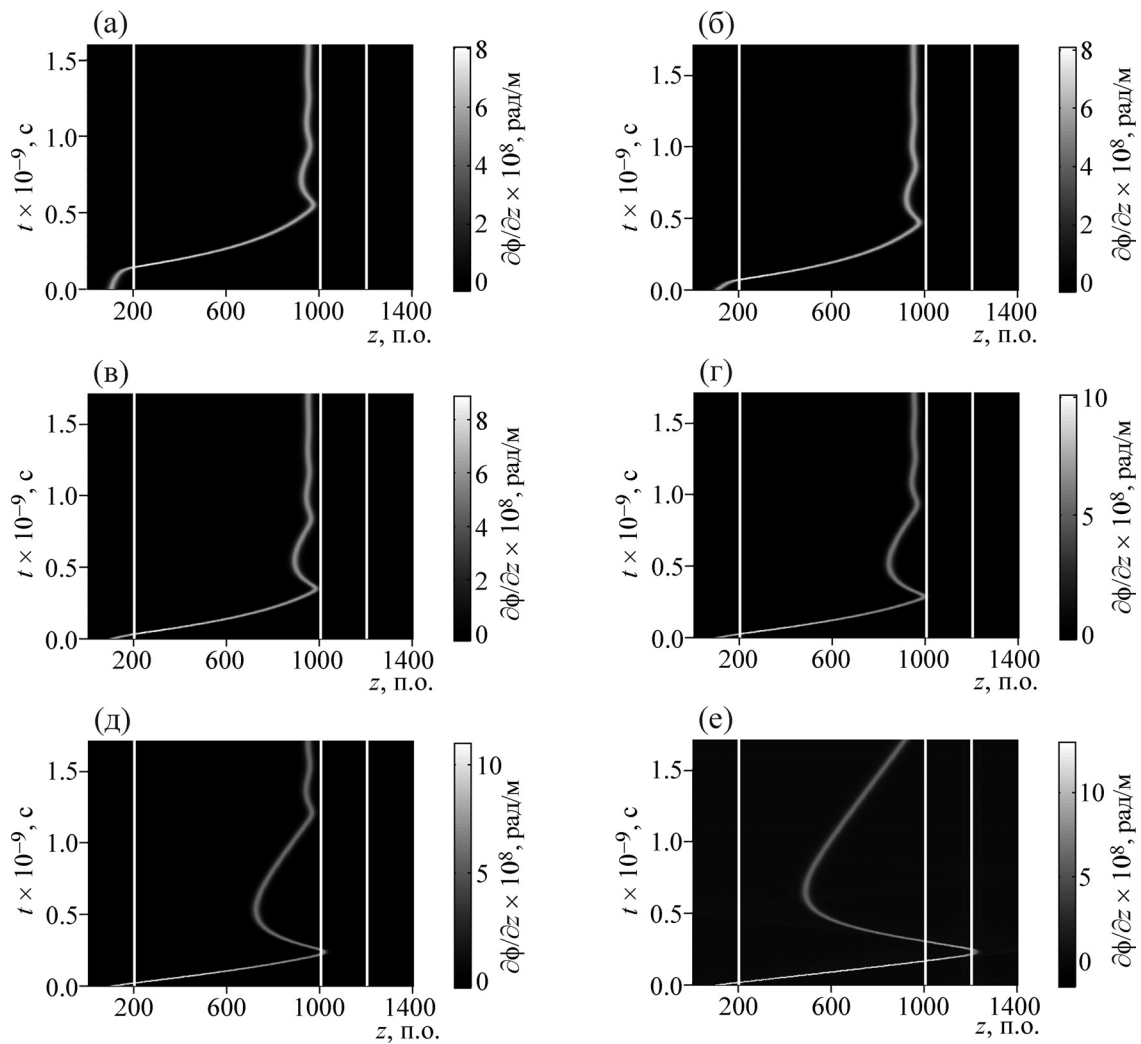


Рис. 8. Траектории кинка в последовательности polyA–polyT–polyC–polyG. Траектории получены для одного фиксированного значения внешнего торсионного момента $M_\tau = 2 \cdot 10^{-23}$ Дж, но для разных значений начальной скорости v_0 : $v_0 = 50$ м/с (а), $v_0 = 300$ м/с (б), $v_0 = 900$ м/с (в), $v_0 = 1200$ м/с (г), $v_0 = 1500$ м/с (д), $v_0 = 1800$ м/с (е). Прямые вертикальные линии обозначают границы между областями.

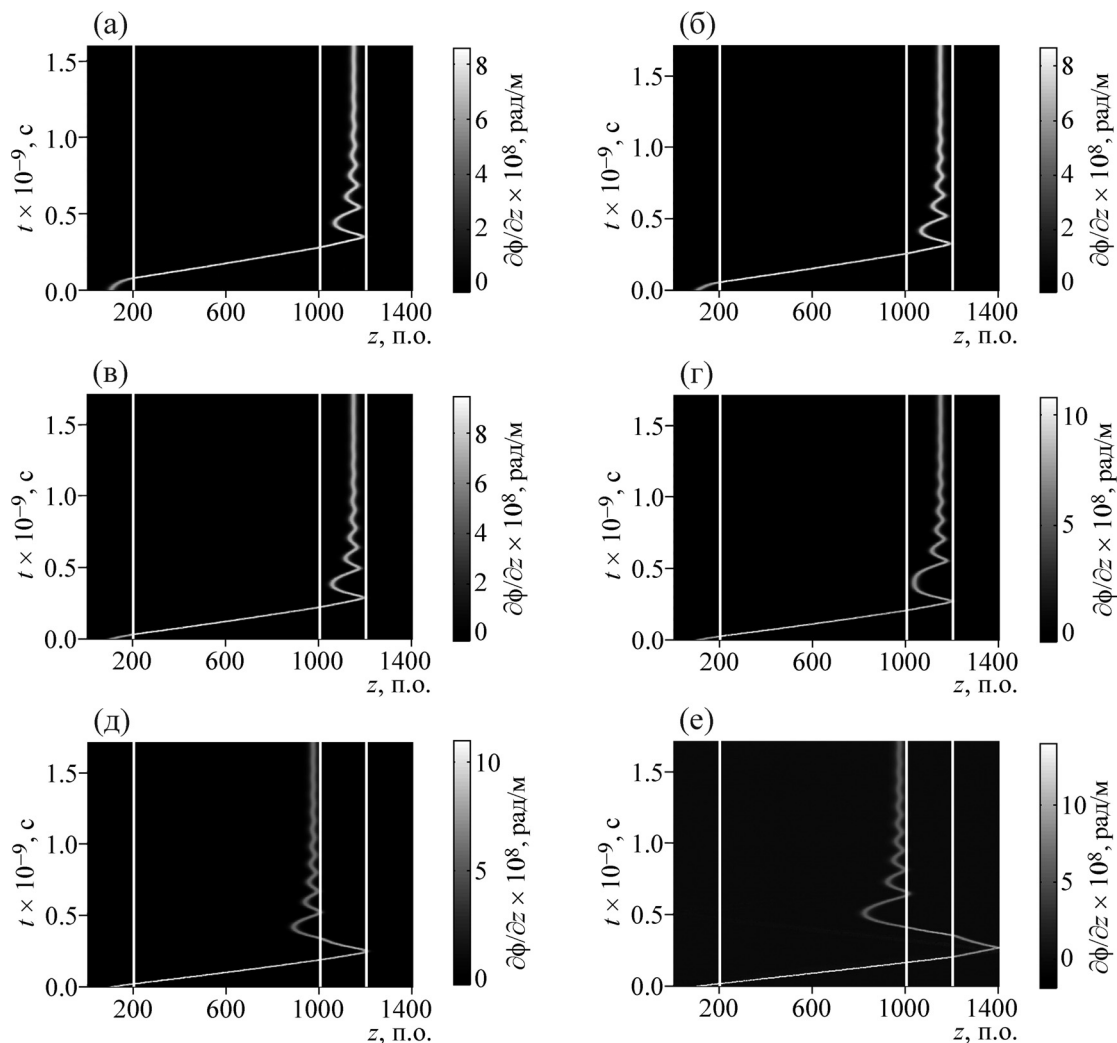


Рис. 9. Траектории кинка в последовательности polyA–polyT–polyC–polyG. Траектории получены для одного фиксированного значения внешнего торсионного момента $M_\tau = 2 \cdot 10^{-22}$ Дж и для разных значений начальной скорости v_0 : $v_0 = 50$ м/с (а), $v_0 = 300$ м/с (б), $v_0 = 900$ м/с (в), $v_0 = 1200$ м/с (г), $v_0 = 1500$ м/с (д), $v_0 = 1800$ м/с (е). Прямые вертикальные линии обозначают границы между областями.

Из рис. 8а–г видно, что траектория движения кинка практически не зависит от величины начальной скорости кинка v_0 . И только при высоких скоростях (порядка 1500 и 1800 м/с) такая зависимость начинает проявляться (рис. 8д,е).

Для подтверждения надежности полученных результатов мы рассчитали траектории движения кинков еще для одного фиксированного значения торсионного момента $M_\tau = 2 \cdot 10^{-22}$ Дж и разных значений начальной скорости кинка v_0 . Результаты расчета представлены на рис. 9. Оказалось, что, как и в предыдущем случае, траектории движения кинка практически не зависят от величины начальной скорости кинка v_0 (см. рис. 9а–г). Такая зависимость появляется

только при высоких скоростях (порядка 1500 и 1800 м/с) (см. рис. 9д,е).

ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В данной работе исследованы закономерности движения транскрипционного пузыря под действием постоянного торсионного момента M_τ . Найдены численные решения модельного уравнения, имитирующие это движение. Рассчитаны траектории движения в однородной и неоднородной последовательностях для разных значений торсионного момента M_τ и начальной скорости v_0 .

Показано, что изменение торсионного момента оказывает существенное влияние на характер траекторий движения транскрипционно-

го пузыря. Изменяя величину торсионного момента, можно заставить торсионный пузырь двигаться с заданной скоростью (вывод из рис. 2).

В то же время мы показали, что изменение начальной скорости транскрипционного пузыря в достаточно широком интервале значений начальных скоростей не влияет на характер его траектории (выводы из рис. 3, 8 и 9).

Полученные нами результаты коррелируют с результатами аналитических расчетов, выполненных с помощью приближенного метода МакЛафлина–Скотта [23]. Например, в рамках этого метода стационарная скорость кинка в однородной последовательности определяется приближенной формулой

$$v_{st} = \frac{C_0}{\sqrt{1 + \left(\frac{4\lambda}{M_0\pi}\right)^2 \frac{V}{I}}}. \quad (12)$$

Возьмем модельное значение торсионного момента $M_\tau = 2 \cdot 10^{-23}$ Дж и рассчитаем стационарную скорость кинка по формуле (12). Полученное значение равно: $v_{st} = 130,6$ м/с. В то же время значение, полученное нами из графика на рис. 3, равно 129,6 м/с. Видно, что полученные значения довольно близки.

Из представленных выше результатов можно сделать вывод о том, что торсионный момент играет важную роль в динамике транскрипционного пузыря. Неважно, какая его начальная скорость. Важно, какой на него действует торсионный момент. Именно он определяет стационарную скорость, т.е. скорость, с которой будет двигаться транскрипционный пузырь после переходного периода. Подбирая величину торсионного момента, можно заставить кинк двигаться с заданной скоростью.

Нужно отметить, однако, что все эти результаты получены в рамках модифицированной модели Инглэндера, которая не учитывает всех особенностей структуры и динамики молекулы ДНК и, в частности, не учитывает спиральный характер ее структуры и взаимодействие угловых смещений азотистых оснований с другими внутренними степенями свободы. Эта модель не рассматривает также вопрос об участии различных транскрипционных факторов, которые могут оказывать влияние на движение транскрипционного пузыря. Кроме того, в рамках этой модели все расчеты были проведены только для двух видов искусственных последовательностей – однородной последовательности и неоднородной последовательности, состоящей из четырех однородных областей. В перспективе необходимо, конечно, усложнить

модель и ввести в нее реальные последовательности ДНК в окрестности стартовой точки транскрипции. Тем не менее описанный выше подход к исследованию движения транскрипционного пузыря через построение и анализ траекторий движения имеет общее значение и может быть распространен и на такие, более точные и сложные модели ДНК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. S. Forth, M. Y. Sheinin, J. Inman, and M. D. Wang, *Annu. Rev. Biophys.* **42**, 583 (2013).
2. A. I. Bishop, T. A. Nieminen, N. R. Heckenberg, and H. Rubinsztein-Dunlop, *Phys. Rev. A* **68**, 033802 (2003).
3. A. La Porta and M. D. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 190801 (2004).
4. D. Klaue and R. Seidel, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 028302 (2009).
5. Y. Harada, O. Ohara, A. Takatsuki, et al., *Nature* **409** (6816), 113 (2001).
6. J. Lipfert, J. W. J. Kerssemakers, T. Jager, and N. H. Dekker, *Nat. Methods* **7** (12), 977 (2010).
7. Л. В. Якушевич, *Нелинейная физика ДНК* (РХД, Москва-Ижевск, 2007).
8. S. W. Englander, N. R. Kallenbach, A. J. Heeger, et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **77** (12), 7222 (1980).
9. S. Cuenda and A. S6nchez, *Phys. Rev. E* **70**, 051903 (2004).
10. B. Barbi, C. Place, V. Popkov, and M. Salerno, *Phys. Rev. E* **70**, 041901 (2004).
11. G. Gaeta, *Phys. Rev. E* **74**, 021921 (2006).
12. J. A. Gonz6lez, S. Cuenda, and A. S6nchez, *Phys. Rev. E* **75**, 036611 (2007).
13. G. Gaeta and L. Venier, *Phys. Rev. E* **78**, 011901 (2008).
14. M. Cadoni, R. De Leo, S. Demelio, and G. Gaeta, *J. Nonlin. Math. Phys.* **17** (4), 557 (2010).
15. N. Theodorakopoulos, *Phys. Rev. E* **82**, 021905 (2010).
16. S. Cuenda, N. R. Quintero, and A. S6nchez, *Discrete and Continuous Dynamical Systems, Ser. S* **4** (5), 1047 (2011).
17. G. Derks and G. Gaeta, *Physica D* **240** (22), 1805 (2011).
18. N. Theodorakopoulos and M. Peyrard, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 078104, (2012).
19. Л. В. Якушевич и Л. А. Краснобаева, *Биофизика* **52** (2), 237 (2007).
20. A. A. Grinevich and L. V. Yakushevich, *Mathematical Biology and Bioinformatics* **10** (1), 164 (2015).
21. A. A. Grinevich, A. A. Ryasik, and L. V. Yakushevich, *Chaos, Solitons & Fractals* **75**, 62 (2015).
22. Л. В. Якушевич, Л. А. Краснобаева, А. В. Шаповалов и Н. Р. Кинтеро, *Биофизика* **50** (3), 450 (2005).
23. D. W. McLaughlin and A. C. Scott, *Phys. Rev. A* **18** (4), 1652 (1978).

On the Modeling of the Movement of Transcription Bubble under Constant Torsion Torque

A.A. Grinevich and L.V. Yakushevich

*Institute of Cell Biophysics, Russian Academy of Sciences,
ul. Institutskaya 3, Pushchino, Moscow Region, 142290 Russia*

This paper presents the results of the study of the transcription bubble movement under constant torsion torque. The movement of the bubble is modeled by a modified sine-Gordon equation. We have found numerical solutions of the equation. Trajectories of the kink movement in homogeneous and inhomogeneous sequences and for different values of the model torsion torque M_τ and different values of the initial velocity v_0 , are calculated. It is shown that the change in the torsion moment M_τ has a significant impact on the character of the kink trajectories. At the same time, the change of the kink initial value v_0 in a rather wide range of the values of initial velocity does not affect the character of the kink trajectory.

Key words: DNA dynamics modeling, transcription bubble, torsion moment, kinks