

GABRIEL GOUVÊA SLADE

Formação e Estabilidade de Breathers no
Modelo de Peyrard-Bishop para o DNA

São José do Rio Preto
2009

GABRIEL GOUVÊA SLADE

Formação e Estabilidade de Breathers no
Modelo do Peyrard-Bishop para o DNA

Dissertação apresentada para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, área de Biofísica Molecular junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto.

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Ruggiero

São José do Rio Preto
2009

Slade, Gabriel Gouvêa.

Formação e estabilidade de Breathers no modelo de Peyrard-Bishop para o DNA/ Gabriel Gouvêa Slade. São José do Rio Preto: [s.n.], 2009

46 f. : il. ; 30 cm.

Orientador: José Roberto Ruggiero

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista, Instituto de

Biociências, Letras e Ciências Exatas

1. Ácido desoxirribonucleico - Modelos. 2. Peyrard-Bishop, Modelo de. 3. Potencial de Morse. 4. Estabilidade linear. 5. Breathers. 6. Limite anti-contínuo. I. Ruggiero, José Roberto. II. Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas . III. Título.

CDU – 531.14

GABRIEL GOUVÊA SLADE

Formação e Estabilidade de Breathers no
Modelo de Peyrard-Bishop para o DNA

Dissertação apresentada para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, área de Biofísica Molecular junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. José Roberto Ruggiero
Professor Livre Docente
UNESP – São José do Rio Preto
Orientador

Prof. Dr. Edson Denis Leonel
Professor Assistente Doutor
UNESP – Rio Claro

Prof. Dr. Masayoshi Tsuchida
Professor Assistente Doutor
UNESP – São José do Rio Preto

São José do Rio Preto, 29 de abril de 2008.

Aos meus pais,
Sandra e Stefano.

Agradecimentos

Aos meus amigos que sempre estiveram presentes durante esses anos, em especial à Natália pelo carinho e apoio.

Aos professores do departamento pelas discussões e ensinamentos.

Ao meu orientador e amigo, Prof. Dr. José Roberto Ruggiero, por toda sua dedicação e empenho sempre buscando o meu melhor aprendizado.

Aos meus pais e avós que não mediram esforços para me auxiliar nessa caminhada.

Ao meu irmão Gustavo pela confiança e companheirismo.

À CAPES pelo suporte financeiro.

À Deus pelas graças concedidas em todos os dias até aqui.

Slade, G. G. Formação e estabilidade de breathers no modelo de Peyrard-Bishop para o DNA [dissertação]. São José do Rio Preto: Instituto de Biociências Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista; 2009

RESUMO

A dinâmica do DNA apresenta movimentos de grande amplitude e localizados ao longo da cadeia que, mesmo na sua temperatura biológica, são capazes de abrir um único par de bases. Com o objetivo de compreender essa dinâmica, discutimos a formação e a estabilidade de soluções espacialmente localizadas e periódicas no tempo, breathers, no modelo de Peyrard-Bishop. O limite anticontínuo é utilizado para gerar o breather, então no início o acoplamento entre os osciladores é nulo. Depois de construir o breather, nós utilizamos a teoria de Floquet para estudar sua estabilidade. Os resultados foram analisados pelos multiplicadores de Floquet e a dinâmica energética do sistema. Teste com diferentes frequências do breather e intervalos de acoplamento foram feitos; esses parâmetros estão intimamente relacionados com a energia do sistema.

PALAVRAS-CHAVE: Breather, limite anticontínuo, estabilidade, modelo de Peyrard-Bishop, dinâmica do DNA.

Slade, G. G. Formation and stability of breathers in the Peyrard-Bishop model for [dissertation]. São José do Rio Preto: Instituto de Biociências Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista; 2009

ABSTRACT

The DNA dynamic shows movements of great amplitude and localized by the chain that, even on its biological temperature, it is capable to open a single base pair. Aiming to understand this we discuss the formation and the stability of spatial localized solutions and periodic in time, breathers, in the Peyrard-Bishop model. The anti-continuous limit was used to generate the breather, so in the beginning the couple between the oscillators was zero. After the breather building, we used the Floquet theory to study its stability. The results were analyzed by the Floquet multipliers and the energetic dynamics of the system. Tests for different breather's frequency and coupling range were done; these parameters are intrinsic related to the system energy.

KEYWORDS: Breather, anti-continuous limit, stability, Peyrad-Bishop model, DNA dynamic.

Sumário

1)	Introdução	1
2)	O Modelo de Peyrard-Bishop (PB)	4
	2.1) Potencial de Morse	6
	2.2) Potencial “Corcunda”	8
3)	Método para gerar o breather	11
4)	Estabilidade do breather	15
5)	Resultados	19
	5.1) Potencial de Morse	19
	5.2) Potencial “Corcunda”	29
	5.3) Comparação com o DNA	34
6)	Conclusão	36
	Referências Bibliográficas	38

Capítulo 1

Introdução

O DNA é a molécula que contém a informação genética e é responsável pela transmissão da hereditariedade [1]. A determinação da estrutura em dupla hélice [2] é considerada um marco para o desenvolvimento da biologia molecular. Contudo estudos das últimas quatro décadas têm revelado que a dinâmica do DNA é rica e essencial para suas funções. A informação genética está armazenada na sequência de bases que, na estrutura de dupla hélice, ficam “escondidas” no interior da hélice. As sequências que codificam as proteínas têm que ser lidas, o que exige a exposição das bases à solução. Isso implica movimentos de grande amplitude e, portanto, uma dinâmica não linear.

A estrutura em dupla hélice é, em parte, mantida pelas pontes de hidrogênio entre as bases nitrogenadas, os pares de Watson-Crick A – T e C – G. A absorção na região do UV de uma solução de DNA é fortemente dependente da quantidade de pares de base formados. Isso proporciona uma forma simples de monitorar a separação das duplas fitas, ou a desnaturação do DNA, que pode ocorrer por um ou pela combinação de fatores como a temperatura, pH, concentração salina ou de outros desnaturantes, como a uréia, por exemplo [3]. O modelo de Ising, com dois estados – o par de bases está fechado, ou seja, as pontes de hidrogênio formadas, ou está aberto, com as pontes quebradas – foi proposto a quase meio século [4] e continua sendo implementado e estudado até hoje para explicar a desnaturação do DNA [5]. A desnaturação térmica do DNA representa um problema interessante para os físicos, pois é uma transição de fase em uma cadeia unidimensional em termos mesoscópicos [6,7].

A formação das chamadas “bolhas de transcrição” envolvem o rompimento das pontes de hidrogênio em regiões localizadas do DNA. Experimentos de troca de prótons [8,9] têm revelado que as flutuações podem ser altamente localizadas, com a possibilidade de abertura de um único par de bases, e muito dinâmico, pois o tempo de vida de um par de bases (tempo médio que o par de bases permanece fechado) é estimado em milissegundos. Estas informações indicam que a dinâmica do DNA, em particular o estudo de modos de vibração localizados em poucos pares de base é importante para a compreensão destes aspectos.

O modelo de Ising é um modelo estatístico e não fornece informações sobre a dinâmica do DNA. Peyrard e Bishop [10] propuseram um modelo em que cada nucleotídeo é representado por um grau de liberdade, com movimentos nos planos das bases e na direção das pontes de hidrogênio. Uma característica fundamental do modelo é a não linearidade da função potencial utilizada para descrever as pontes de hidrogênio. Esse modelo simples tem sido usado com sucesso para explicar a desnaturação térmica e outros aspectos dinâmicos do DNA [11,12].

Em sistemas não lineares, breathers são soluções espacialmente localizadas e periódicas no tempo [13,14]. Esse tipo de soluções é gerado pela combinação da discretização e da não linearidade do sistema [15]. A discretização faz com que a banda de dispersão (modos lineares de vibração) seja finita e descontínua, enquanto a não linearidade faz com que a frequência passe a ser dependente da amplitude. A existência dessas estruturas localizadas foi demonstrada por Mackay e Aubry [16] e é válida para redes Hamiltonianas de osciladores não harmônicos com acoplamento fraco. Essa prova é baseada no limite do anticontínuo, onde inicialmente a interação entre osciladores vizinhos é nula. Mostra-se que a solução encontrada persiste em um espaço de soluções periódicas com o tempo de período fixo, além de decaírem exponencialmente no espaço.

Em suma, as condições necessárias para a existência de um breather é que nenhum múltiplo inteiro de frequência da solução coincida com algum modo linear de vibração.

O objetivo desse trabalho é re-estudarmos a questão da formação, da estabilidade e da dinâmica de breathers no modelo de Peyrard-Bishop (PB) para cadeias homogêneas. Para isso 1-site breathers serão gerados utilizando a aproximação do limite anticontínuo. Dois tipos de potencial serão utilizados para as interações em cada sítio (“on site”): o potencial de Morse e o potencial “Corcunda”. A estabilidade das soluções encontradas é estudada aplicando a teoria de Floquet [17,18]. Testes com diferentes frequências do breather e intervalos da constante de acoplamento elástico foram realizados e os resultados são analisados com base nos multiplicadores de Floquet e na dinâmica energética do sistema.

Capítulo 2

O modelo de Peyrard-Bishop (PB)

Existem inúmeros modelos para descrever a molécula do DNA, cada um considerando as suas principais características para simular o aspecto específico a ser estudado [19]. Como estamos interessados na formação de estruturas com energia localizada provenientes de movimentos de grande amplitude precisamos de um modelo capaz de descrever o afastamento entre os nucleotídeos de um mesmo par de bases. O modelo PB preenche de forma minimalista estas condições como discutiremos abaixo. Nele, cada fita do DNA é mimetizada por uma cadeia de osciladores acoplados harmonicamente. As fitas interagem uma com a outra por meio de um potencial não linear. Assim, cada nucleotídeo de uma fita é representado por uma massa m . Cada massa está ligada a duas vizinhas, adjacentes, por uma mola de constante k , que representa um potencial efetivo que contém as interações de empilhamento entre pares da mesma fita, efeitos estéricos da distribuição atômica e efeitos do ambiente. As duas fitas são mantidas “paralelas” por um potencial não linear que mimetiza as pontes de hidrogênio entre as bases nitrogenadas A – T e C – G. Aspectos tridimensionais da estrutura helicoidal não são considerados e o movimento analisado é perpendicular ao eixo principal da dupla fita. As posições dos nucleotídeos das fitas são rotuladas u_j e v_j , respectivamente; com $j = 1, \dots, N$. Por simplicidade, estudaremos somente cadeias homogêneas (homopolímero), ou seja, as massas e as constantes de acoplamento elástico de cada fita são iguais. Da mesma forma, o potencial que une as duas fitas é o mesmo para todos os pares de base. O modelo está esquematizado na Figura 1.

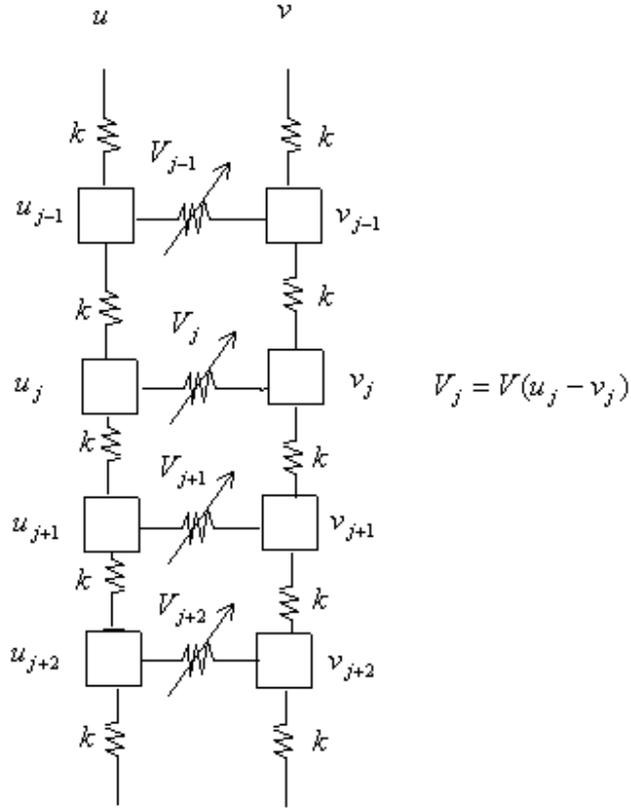


Figura 1 – Representação do modelo de Peyrard-Bishop.

O lagrangiano do modelo PB para uma cadeia homogênea é expresso da forma:

$$L_{PB} = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2} (\dot{u}_j^2 + \dot{v}_j^2) - \frac{k}{2} (u_{j+1} - u_j)^2 - \frac{k}{2} (v_{j+1} - v_j)^2 - V(u_j - v_j) \right\}. \quad (1)$$

Pode-se desacoplar as variáveis u_j e v_j e reescrever o lagrangiano em termos dos modos normais de vibração definidos por $x_j = \frac{(u_j + v_j)}{\sqrt{2}}$, que representa o movimento em fase, e $y_j = \frac{(u_j - v_j)}{\sqrt{2}}$, que representa o movimento fora de fase. Assim, o lagrangiano (1) pode ser expresso como $L_{PB} = L_x + L_y$, onde $L_x = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}_j^2 - \frac{k}{2} (x_{j+1} - x_j)^2 \right\}$ e $L_y = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \dot{y}_j^2 - \frac{k}{2} (y_{j+1} - y_j)^2 - V(\sqrt{2}y_j) \right\}$.

O lagrangiano L_x representa uma cadeia homogênea de osciladores harmônicos e não permite nenhum modo de vibração localizado. Por isso concentraremos nossa atenção no lagrangiano L_y , que é equivalente a uma rede de osciladores harmônicos unidimensionais sujeitos a um potencial adicional, local, sobre cada massa, o chamado potencial “on site”.

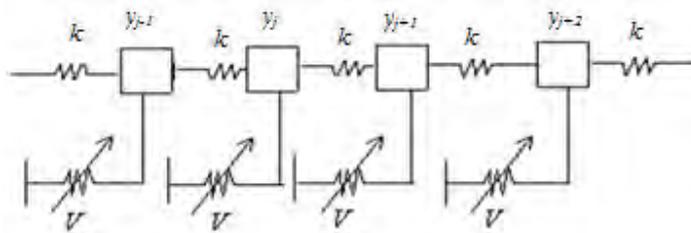


Figura 2 – Representação do sistema formado por L_y .

As equações de movimento são:

$$m\ddot{y}_j + k(2y_j - y_{j+1} - y_{j-1}) + V'(\sqrt{2}y_j) = 0, \text{ com } j = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

Devido à presença dos termos $y_{j\pm 1}$ devemos introduzir condições de contorno para tratar os efeitos de borda. Aqui vamos restringir às situações descritas pelas condições periódicas de contorno, ou seja, $y_0 = y_N$ e $y_{N+1} = y_1$.

2.1 Potencial de Morse

Originalmente o potencial utilizado para descrever as pontes de hidrogênio no modelo PB foi o potencial de Morse, que é dado pela função

$$V(y) = D(e^{-ay} - 1)^2, \quad (3)$$

onde D é a profundidade do poço do potencial e representa a energia de dissociação (energia para a quebra da ligação), a possui dimensão do inverso do comprimento e está relacionado à largura do poço e y representa o deslocamento do par de base em relação à posição de equilíbrio ($u_j - v_j$).

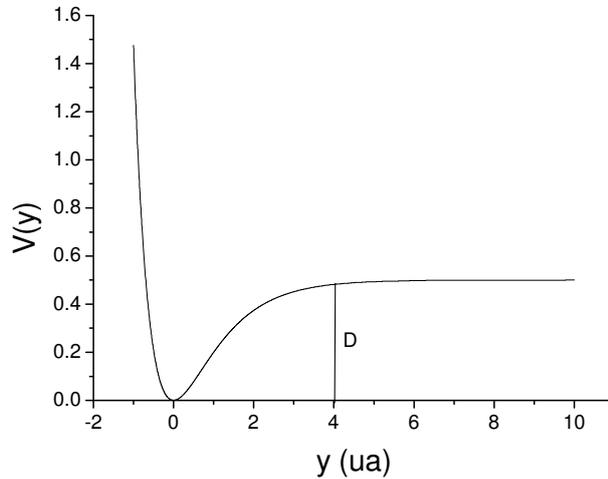


Figura 3 – Representação do potencial de Morse. Valor assintótico da energia, ou seja, $D = 0,5$ u.a.

O potencial de Morse é não confinante e, por isso, simula de maneira satisfatória as pontes de hidrogênio existentes entre as bases nitrogenadas. Na situação de equilíbrio, $y = 0$, a ponte de hidrogênio está em configuração ótima, para $y < 0$ a aproximação das cadeias gera uma repulsão devido aos impedimentos estéricos existente e para $y > 0$ primeiramente o afastamento das fitas faz com que haja uma atração entre elas, entretanto a partir de um determinado valor de y as pontes de hidrogênio podem ser consideradas rompidas e ocorre a desnaturação local da estrutura em dupla hélice do DNA.

Substituindo o potencial de Morse no lagrangiano L_y temos:

$$L_y = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \dot{y}_j^2 - \frac{k}{2} (y_{j+1} - y_j)^2 - D [e^{-\sqrt{2}ay_j} - 1]^2 \right\}. \quad (4)$$

Para dar idéia da ordem de grandeza dos parâmetros envolvidos para o DNA, encontramos na literatura [12,20]: $m = 300 \text{ u. m.}$ $a = 5.10^{-25} \text{ kg}$, $D = 0,05254 \text{ eV}$, $a = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ e, para a constante elástica, $k = 0,01 - 10 \text{ eV/\AA}^2$ [18].

É conveniente para o desenvolvimento tanto analítico quanto computacional deixar as equações dependentes do menor número de parâmetros possíveis. Pode-se reduzir o modelo a dependência de um único parâmetro utilizando variáveis adimensionais, definidas por: $\xi_j = a\sqrt{2}y_j$ e $\tau = 2\sqrt{\frac{Da^2}{m}}t$, e assim, reescrever o lagrangiano como função de um único parâmetro, C .

$$L = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \dot{\xi}_j^2 - \frac{1}{2} C (\xi_{j+1} - \xi_j)^2 - \frac{1}{2} (e^{-\xi_j} - 1)^2 \right\}, \quad (5)$$

onde $\dot{\xi} = \frac{d\xi}{d\tau}$, $C = \frac{k}{4Da^2}$ e $L_y \equiv 2DL$.

2.2 Potencial “Corcunda”

O potencial “Corcunda”, mostrado pela figura 4 e descrito pelas equações (6), foi introduzido por Peyrard e colaboradores [6,12] com o objetivo de obter tempos de vida para os estados aberto e fechado mais compatíveis com observações experimentais. Essencialmente foi introduzida uma barreira de potencial para valores de y em torno da distância em que as pontes de hidrogênio podem ser consideradas quebradas e isso alonga o tempo em que as mesmas, uma vez abertas, permanecem abertas. O potencial foi obtido pela junção do potencial de Morse ($y < 0$), de um potencial quártico (em torno da origem) e de um termo que decai exponencialmente ($y > 1$).

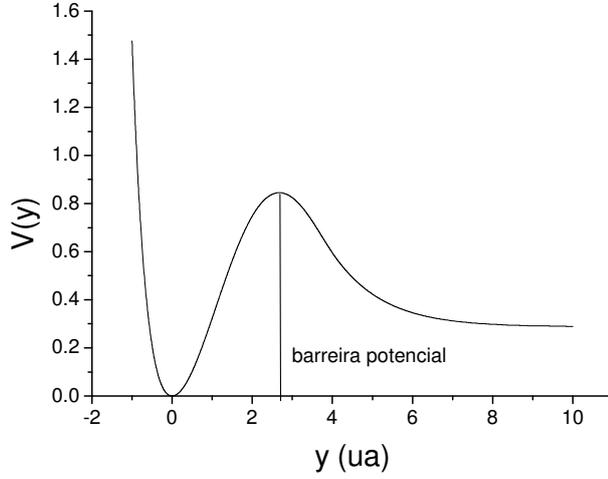


Figura 4 – Representação do Potencial Corcunda. O valor de energia necessário para transpor a barreira potencial é 0,845 u.a.

Esse tipo de potencial é expresso por:

$$V_h(y) = \begin{cases} A[e^{-\alpha y} - 1]^2 & y < 0 \\ ay^2 + by^3 + cy^4 & 0 \leq y \leq 1 \\ D + Fe^{-\beta y} \left(y + \frac{1}{\beta} \right) & y > 1 \end{cases} \quad (6)$$

Substituindo no lagrangiano L_y e realizando a seguinte mudança de variável, $\xi_j = \alpha\sqrt{2}y_j$

e $\tau = 2\sqrt{\frac{A\alpha^2}{m}}t$, encontramos uma forma similar à (5) expressa por:

$$L = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \dot{\xi}_j^2 - \frac{1}{2} C (\xi_{j+1} - \xi_j)^2 - \frac{1}{2} V_{hm} \left(\frac{\xi_j}{\alpha} \right) \right\}, \quad (7)$$

$$\text{onde } \dot{\xi} = \frac{d\xi}{d\tau}, C = \frac{k}{4A\alpha^2}, L_y \equiv 2AL \text{ e } V_{hm} \left(\frac{\xi_j}{\alpha} \right) = \begin{cases} [e^{-\xi_j} - 1]^2 & \frac{\xi_j}{\alpha} < 0 \\ \frac{a\xi_j^2}{A\alpha^2} + \frac{b\xi_j^3}{A\alpha^3} + \frac{c\xi_j^4}{A\alpha^4} & 0 \leq \frac{\xi_j}{\alpha} \leq 1. \\ \frac{D}{A} + \frac{F}{A} e^{-\beta \frac{\xi_j}{\alpha}} \left(\frac{\xi_j}{\alpha} + \frac{1}{\beta} \right) & \frac{\xi_j}{\alpha} > 1 \end{cases}$$

Como o potencial deve ser contínuo, assim como a primeira e segunda derivadas, o número de parâmetros é reduzido para quatro: α , β , D e F . Os demais parâmetros são dados pelas

expressões: $A = \frac{a}{\alpha^2}$, $a = 6D + \frac{1}{2}Fe^{-\beta} \left(\beta^2 + 5\beta + \frac{12}{\beta} + 12 \right)$, $b = -8D - Fe^{-\beta} \left(\beta^2 + 4\beta + \frac{8}{\beta} + 8 \right)$ e $c = 3D + \frac{1}{2}Fe^{-\beta} \left(\beta^2 + 3\beta + \frac{6}{\beta} + 6 \right)$.

Capítulo 3

Método para gerar o breather

Apresentaremos neste capítulo o método para obtenção de breathers em cadeias harmônicas com potencial de interação on-site, seguindo a aproximação do limite do anticontínuo de MacKay e Aubry [16] e implementadas por Marin e Aubry [21] e Cuevas [18].

O Hamiltoniano do sistema é dado por:

$$H = \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{2} p_j^2 + \frac{1}{2} C (u_j - u_{j+1})^2 + V(u_j) \right), \quad (8)$$

onde C é o parâmetro de interação harmônico e $V(u_j)$ o potencial on-site não linear.

As equações de movimento correspondentes são:

$$F_j \equiv \ddot{u}_j + C(2u_j - u_{j+1} - u_{j-1}) + V'(u_j) = 0. \quad (9)$$

Como procuramos por soluções periódicas, podemos tratar o problema no espaço de Fourier e escrever a solução do sistema em termos de uma série de Fourier cosseno:

$$u_j(t) = z_j^0 + 2 \sum_{k=1}^{km} z_j^k \cos(k\omega_b t), \quad (10)$$

onde ω_b é a frequência do breather.

Substituindo a expressão (10) na equação de movimento (9) e colecionando os termos correspondentes ao k -ésimo elemento, encontramos $N(km + 1)$ equações algébricas do tipo:

$$F_j^k \equiv -k^2 \omega_b^2 z_j^k + C(2z_j^k - z_{j+1}^k - z_{j-1}^k) + V_j'^k = 0, \quad (11)$$

onde $V_j'^k$ é o k -ésimo coeficiente de Fourier de $V'(u_j)$.

O cálculo de $V_j'^k$ é realizado através da Transformada Discreta de Fourier (DFT). A partir de z_j^k se calcula $u_j(t)$ como sequência de $km + 1$ termos usando DFT-cosseno inversa:

$$u_j(t_i) = z_j^0 + 2 \sum_{k=1}^{km} z_j^k \cos(k\omega_b t_i), \quad (12)$$

onde $t_i = \frac{2\pi i}{\omega_b(2km+1)}$, para $i = 0, 1, \dots, km$.

Assim,

$$V_j^{*k} = \frac{1}{2km+1} [V'(u_j(0)) + 2 \sum_{i=1}^{km} V'(u_j(t_i)) \cos(k\omega_b t_i)]. \quad (13)$$

Uma aproximação linear da equação (11) nos leva à:

$$\begin{aligned} F_j^k(Z) = & F_j^k(X) + \frac{\partial F_j^k(X)}{\partial z_1^0} (z_1^0 - x_1^0) + \dots + \frac{\partial F_j^k(X)}{\partial z_1^{km}} (z_1^{km} - x_1^{km}) + \frac{\partial F_j^k(X)}{\partial z_2^0} (z_2^0 - x_2^0) + \\ & \dots + \frac{\partial F_j^k(X)}{\partial z_2^{km}} (z_2^{km} - x_2^{km}) + \dots + \frac{\partial F_j^k(X)}{\partial z_N^0} (z_N^0 - x_N^0) + \dots + \frac{\partial F_j^k(X)}{\partial z_N^{km}} (z_N^{km} - x_N^{km}), \end{aligned} \quad (14)$$

onde $Z = [z_1^0 \dots z_1^{km} z_2^0 \dots z_2^{km} \dots z_N^0 \dots z_N^{km}]^T$ é o vetor dos coeficientes de Fourier das N oscilações e $X = [x_1^0 \dots x_1^{km} x_2^0 \dots x_2^{km} \dots x_N^0 \dots x_N^{km}]^T$ representa um ponto na vizinhança de Z .

Considerando F_j^k como $F = [F_1^0 \dots F_1^{km} F_2^0 \dots F_2^{km} \dots F_N^0 \dots F_N^{km}]^T$ e considerando o sistema de equações (14), temos:

$$0 = F(Z) = F(X) + [JF](X)(Z - X), \quad (15)$$

onde $[JF](X)$ é o Jacobiano da função F determinado no vetor X .

Assim podemos encontrar a solução X dos coeficientes Z do sistema através de:

$$Z = X - ([JF](X))^{-1} F(X), \quad (16)$$

que representa uma generalização do método de Newton para sistemas de equações. Os coeficientes Z são considerados satisfatórios quando a norma de $F(Z)$ dividido pela norma de Z é menor que ε , onde $\varepsilon \ll 1$.

O procedimento numérico para gerar o breather é, num certo sentido, perturbativo. Inicialmente cria-se o perfil do breather considerando a cadeia no limite em que $C = 0$, ou seja, os osciladores estão desacoplados. Esse é o limite do anticontínuo. Nas situações que abordaremos serão criados 1-site breathers, o que significa que somente um oscilador tem

elongação diferente de zero nesse estágio do procedimento. O perfil obtido será utilizado como semente para a resolução do sistema de equações (16) quando o acoplamento “é ligado”. Para que possa ser tratado como uma perturbação do perfil inicial, trabalha-se com alicotas de incremento de C pequenas δC . A solução obtida para δC serve como semente para o próximo valor de C , ou seja, $C = 2\delta C$. O procedimento é repetido até que o valor desejado de C seja obtido.

Exemplos de breathers criados podem ser vistos na Figura 5, onde mostramos o perfil do breather em $t = 0$ para duas situações: (a) $C = 0$ e (b) $C = 0,1$; utilizando o potencial de Morse. A semente inicial foi $Z = [0,3 \ 0,4 \ 0 \ \dots \ 0]^T$ e a frequência de oscilação do breather $\omega_b = 0,8$. A partir dessa configuração inicial é realizado tanto a análise de Floquet, como as simulações dinâmicas apresentadas.

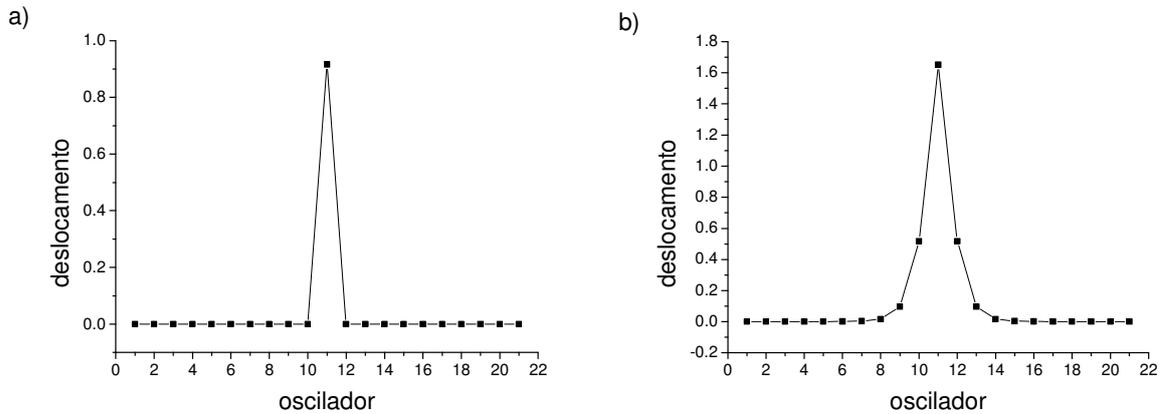


Figura 5 – Deslocamento da posição de equilíbrio de cada oscilador no instante $t = 0$. Frequência $\omega_b = 0,8$ e acoplamento igual à: a) $C = 0$ e b) $C = 0,1$.

Quando utilizamos o potencial de Morse, podemos relacionar a energia inicial para a criação de um breather ($C = 0$) com sua frequência de vibração ω_b . A energia do 1-site breather é dada por:

$$E = \frac{1}{2}\xi^2 + \frac{1}{2}(e^{-\xi} - 1)^2. \quad (17)$$

Como inicialmente a velocidade do oscilador é nula podemos determinar os pontos de retorno de ξ , que são equivalentes à $\xi_1 = -\ln(1 + \sqrt{2E})$ e $\xi_2 = -\ln(1 - \sqrt{2E})$. Considerando a solução $\xi(0) = \xi_1$, $t(\xi)$ é dado por $t(\xi) = \int_{\xi_1}^{\xi} \frac{dx}{\sqrt{2(E - \frac{(e^{-x}-1)^2}{2})}}$, que implica:

$$t(\xi) = \frac{1}{\sqrt{1-2E}} \left\{ \frac{\pi}{2} - \arcsen \left[\frac{1}{\sqrt{2E}} \left(1 + \frac{2E-1}{e^{-\xi}} \right) \right] \right\}. \quad (18)$$

Fazendo $t = \frac{T}{2} = \frac{\pi}{\omega_b}$ e $\xi = \xi_2$ obtemos a seguinte relação entre a frequência do breather e a energia:

$$\omega_b = \sqrt{1 - 2E}. \quad (19)$$

Capítulo 4

Estabilidade do breather

Além da formação, é necessário estudar a estabilidade do breather. Sendo $u_j(t)$ uma solução periódica de (9), introduzimos uma perturbação por meio de $\psi_j(t) = u_j(t) + \zeta_j(t)$ para analisar o comportamento próximo a essa solução. Exigimos que $\psi_j(t)$ também seja solução do sistema e expandimos a equação em torno da solução $u_j(t)$:

$$\ddot{\zeta}_j(t) + C \left(2\zeta_j(t) - \zeta_{j+1}(t) - \zeta_{j-1}(t) \right) + V''(u_j)\zeta_j(t) = 0, \quad (20)$$

que é a equação linearizada do sistema (Equação de Hill).

A equação (20) pode ser reescrita como o seguinte sistema de equações:

$$\dot{\zeta}_j(t) = \pi_j(t) \quad (21)$$

$$\dot{\pi}_j(t) = -C \left(2\zeta_j(t) - \zeta_{j+1}(t) - \zeta_{j-1}(t) \right) - V''(u_j)\zeta_j(t), \quad (22)$$

ou ainda, escrevendo $\Omega(t) = [\zeta(t) \pi(t)]^T$, onde $\zeta(t) \equiv \{\zeta_j(t)\}$ e $\pi(t) \equiv \{\pi_j(t)\}$, ou seja, $\Omega(t)$ é um vetor coluna com dimensão $2N$, sendo N o número de graus de liberdade do sistema, temos:

$$\dot{\Omega}(t) = A(t)\Omega(t), \quad (23)$$

onde $A(t) = \begin{bmatrix} 0 & I \\ J & 0 \end{bmatrix}$. Cada elemento de $A(t)$ são matrizes $N \times N$ e a matriz J tem elementos

$J_{i,j} = -(2C + V''(u_j))\delta_{i,j} + C(\delta_{i+1,j} + \delta_{i-1,j})$ com $\delta_{i,j}$ sendo o delta de Kronecker e para $i = 1$ temos $\delta_{i-1,j} = \delta_{N,j}$ e para $i = N$ temos $\delta_{i+1,j} = \delta_{1,j}$ (condição de contorno periódica).

Como tratamos de equações periódicas podemos analisar a estabilidade do sistema através da teoria de Floquet [17]. Seja $\phi(t)$ uma matriz $2N \times 2N$ em que cada coluna representa uma solução linearmente independente do sistema (23), correspondente as diferentes condições

iniciais e definidas em $t = 0$ como um vetor com $2N - 1$ zeros e 1 na i -ésima posição ($i = 1, 2, \dots, 2N$). Essa matriz é conhecida como matriz fundamental e satisfaz:

$$\dot{\phi}(t) = A(t)\phi(t). \quad (24)$$

Como $A(t)$ é periódica de período T , $\phi(t + T)$ também será solução de (24) e consequentemente cada coluna de $\phi(t + T)$ será uma combinação linear de $\phi(t)$, ou seja:

$$\phi(t + T) = \phi(t)M, \quad (25)$$

onde M é uma matriz constante. Como $\phi(0) = I$, temos que $\phi(T) = M$ e M é a matriz monodromia ou matriz (operador) de Floquet F .

O operador de Floquet F determina a evolução do sistema em um período T e é expresso da seguinte forma:

$$\Omega(T) = F\Omega(0). \quad (26)$$

Para sistemas periódicos regidos por um potencial que apresente segunda derivada contínua, o teorema de Bloch garante autofunções da forma $\zeta(t) = e^{i\theta\frac{t}{T}}v(t)$, com $v(t)$ periódica com período T . Essas autofunções correspondem a autovalores de F na forma $\lambda = e^{i\theta}$, ($\theta \in \mathbb{C}$). Esses autovalores são conhecidos como multiplicadores de Floquet, enquanto que θ é chamado de argumento de Floquet. O operador de Floquet é real e simplético, ou seja, suas propriedades físicas são invariantes no tempo. Isso implica que se λ é autovalor, também serão autovalores λ^* , $\frac{1}{\lambda}$ e $\frac{1}{\lambda^*}$.

Pela teoria de Floquet a órbita de $u(t)$ será linearmente estável se nenhum dos multiplicadores de Floquet tiver módulo maior do que 1, assim uma condição necessária para a estabilidade linear é que todos os multiplicadores de Floquet estejam sobre o círculo unitário, ou seja, que θ seja real.

Para que ocorra a instabilidade do sistema, um par ou mais de autovalores deve colidir e sair do círculo unitário gerando assim uma bifurcação, responsável pela troca de estabilidade. Se os autovalores saem em $\theta = 0$ temos uma bifurcação harmônica, se saem em $\theta = \pi$ bifurcação sub-harmônica e em $\theta \neq 0, \pi$ bifurcação oscilatória.

Uma ferramenta útil para o estudo da estabilidade é a assinatura de Krein (κ) definida inicialmente como o sinal do produto simplético da parte real com a parte imaginária do vetor posição-velocidade. Pelo critério de Krein [22] para que uma colisão entre autovalores gere uma instabilidade, as respectivas assinaturas de Krein deverão ser distintas.

$$\kappa(\theta) = \text{sgn}([\text{Re}\{\Omega(t)\}, \text{Im}\{\Omega(t)\}]) = \text{sgn}[i \sum_j (\zeta_j(t) \dot{\zeta}_j^*(t) - \zeta_j^*(t) \dot{\zeta}_j(t))]. \quad (27)$$

No limite do anticontínuo, Cuevas mostra em sua tese [18] que a assinatura de Krein passa a ser:

$$\kappa(\theta) = \text{sgn}(\text{sen}\theta). \quad (28)$$

Quando $C = 0$, o oscilador inicialmente excitado (n) obedece à seguinte equação:

$$\ddot{\zeta}_n(t) + V''(u_j)\zeta_n(t) = 0, \quad (29)$$

enquanto que os osciladores em repouso perturbados são ditos como osciladores lineares e descritos por:

$$\ddot{\zeta}_j(t) + \zeta_j(t) = 0. \quad (30)$$

As soluções da equação (29) são $\zeta_n(t) = \dot{u}_n(t)$ e $\zeta_n(t) = u_\omega(t) \equiv \frac{\partial u}{\partial \omega_b}$ e são denominadas modo de fase e modo de crescimento, respectivamente. Isso pode ser verificado derivando a equação de movimento (2) com relação tanto ao tempo como à frequência. Esses modos correspondem a autovetores do tipo $\Omega_f(t) = \begin{bmatrix} \dot{u}(t) \\ \ddot{u}(t) \end{bmatrix}$ e $\Omega_c(t) = \begin{bmatrix} u_\omega(t) \\ \dot{u}_\omega(t) \end{bmatrix}$, e estão relacionados com a evolução de um período da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\Omega_f(T) &= \Omega_f(0) \\ \Omega_c(T) &= \Omega_c(0) + \frac{T}{\omega_b} \Omega_f(0)\end{aligned}\tag{31}$$

Tanto $\{\Omega_f(0), \Omega_c(0)\}$, como $\{\Omega_f(T), \Omega_c(T)\}$ são bases do espaço formado pelas soluções de (29). Então $\Omega(T) = a(T)\Omega_f(0) + b(T)\Omega_c(0)$ ou $\Omega(T) = a(0)\Omega_f(T) + b(0)\Omega_c(T)$.

Utilizando a equação (31), podemos escrever $\Omega(T) = (a(0) + \frac{T}{\omega_b} b(0))\Omega_f(0) + b(0)\Omega_c(0)$,

assim:

$$\begin{bmatrix} a(T) \\ b(T) \end{bmatrix} = F \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix},\tag{32}$$

onde $F = \begin{bmatrix} 1 & \frac{T}{\omega_b} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ é o operador de Floquet com autovalor duplamente degenerado e igual a 1.

No caso da equação (30), temos como solução o autovetor $\zeta_j(t) = e^{\pm it} \zeta_j(0)$ que está $N-1$ vezes degenerado e corresponde a argumentos de Floquet $\theta = \pm T$. Estes modos correspondem a oscilações lineares.

Os autovalores em 1 tem assinatura de Krein nula, enquanto que os autovalores em $\theta = \pm T$ tem assinatura de $\kappa = 1$ se $\theta \in (0, \pi)$ e $\kappa = -1$ se $\theta \in (\pi, 2\pi)$. Para os autovalores dos osciladores lineares não coincidirem com o autovalor do oscilador inicialmente excitado é necessário cumprir a seguinte condição de não ressonância:

$$\frac{n}{2} \omega_b \neq 1,\tag{33}$$

com $n=0,1,2,\dots$.

Capítulo 5

Resultados

5.1 Potencial de Morse

Na maior parte dos estudos realizados, as cadeias continham 21 osciladores ($N = 21$). O número de termos considerados na série de Fourier foi $km = 17$ e o incremento no parâmetro C , δC , utilizado para se obter o valor desejado do acoplamento, aplicando o método de Newton para resolução das equações algébricas foi da ordem de 10^{-3} . A convergência foi considerada satisfatória para $\varepsilon = 10^{-14}$.

Os resultados foram analisados com relação aos multiplicadores de Floquet e à evolução temporal da distribuição de energia pelos osciladores da cadeia, com relação ao parâmetro de acoplamento C e à frequência do breather ω_b . Estes dois fatores determinam a energia do sistema, calculada por meio da expressão $E = \sum_{j=1}^N E_j$, onde

$$E_j = \frac{1}{2} \dot{\xi}_j^2 + \frac{1}{4} C (\xi_{j+1} - \xi_j)^2 + \frac{1}{4} C (\xi_j - \xi_{j-1})^2 + \frac{1}{2} (e^{-\xi_j} - 1)^2 \quad (34)$$

é a energia de cada oscilador e a interação elástica de cada mola é atribuída em partes iguais (50%) para os osciladores aos quais ela está ligada.

Na figura 6 mostramos a distribuição dos diferentes autovalores $\lambda = e^{i\theta}$ da matriz de Floquet com suas respectivas assinaturas de Krein considerando $\omega_b = 0,8$ e para quatro valores do parâmetro de acoplamento C : (a) $C = 0$; (b) $C = 0,1$; (c) $C = 0,1297$ e (d) $C = 0,13$. Nota-se, para a situação (a), que os autovalores são $\theta = 0$ (referente ao autovalor do oscilador excitado) e $\theta = \pm \frac{\pi}{2}$ (equivalente aos osciladores em repouso). Acoplar os osciladores faz com que os autovalores caminhem sobre o círculo unitário. Quando dois autovalores com assinaturas

de Krein distintas colidem eles podem sair do círculo e causar instabilidade no sistema (Figura 1d).

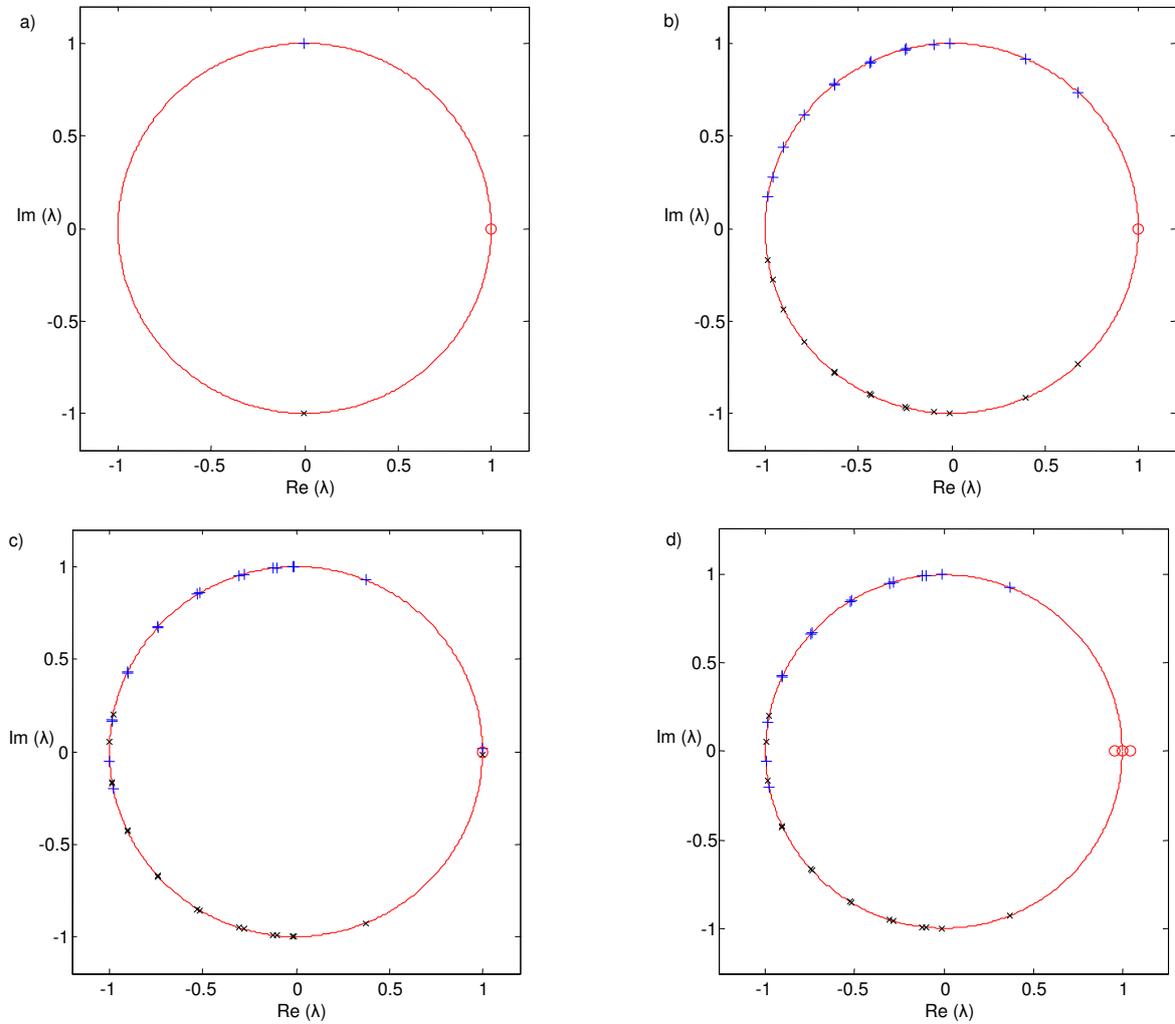


Figura 6 – Representação dos multiplicadores de Floquet, com as respectivas assinaturas de Krein (+ \rightarrow $\kappa = +1$, X \rightarrow $\kappa = -1$ e O \rightarrow $\kappa = 0$), para os diferentes valores de acoplamento e frequência $\omega_b = 0,8$. a) $C = 0$, b) $C = 0,1$, c) $C = 0,1297$ (casos estáveis) e d) $C = 0,13$ (caso instável).

Com o intuito de comprovar os resultados obtidos através da análise de Floquet, integramos as equações de movimento do sistema utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem [23], utilizando como condição inicial o perfil do breather obtido com o método demonstrado no capítulo 3 para cada valor de C e com velocidades iniciais iguais a zero, por um

tempo da ordem de 10^4 unidades arbitrárias de tempo (u.a.), que correspondem a um tempo de aproximadamente 0,096 picosegundos. Para visualizar os resultados, construímos gráficos da energia de cada oscilador como função do tempo.

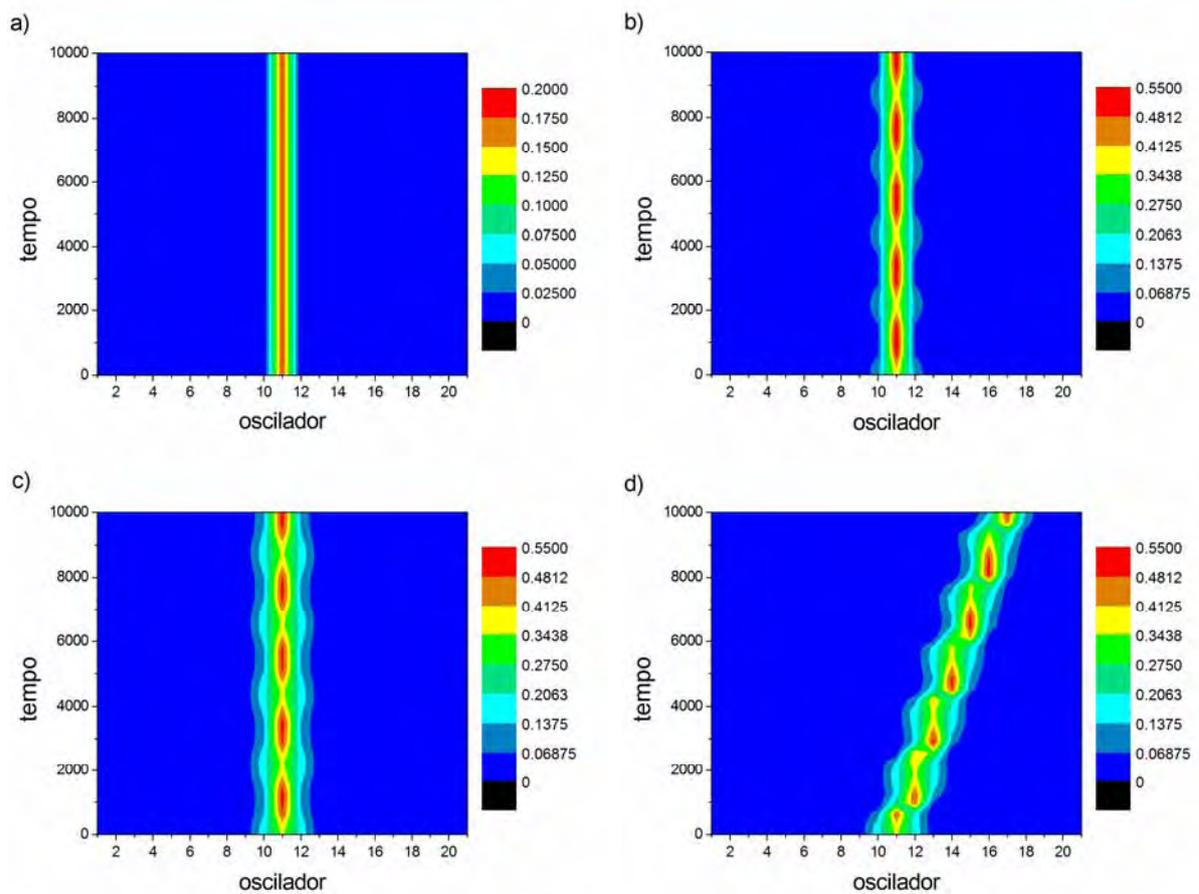


Figura 7 – Energia de cada oscilador em função do tempo para os diferentes valores de acoplamento e frequência $\omega_b = 0,8$. a) $C = 0$ e $E = 0,18$; b) $C = 0,1$ e $E = 0,646$; c) $C = 0,1297$ e $E = 0,787$; d) $C = 0,13$ e $E = 0,788$.

Na figura 7 mostramos a evolução temporal da energia de cada oscilador utilizando padrões de cores com oito níveis. A cor vermelha representa as maiores energias e a azul escuro energia praticamente nula. A figura 7a mostra que toda a energia está concentrada no oscilador central como esperado, porque representa a condição de $C = 0$. Observa-se que, para os casos em

que a estabilidade linear é garantida pela análise de Floquet existe uma estrutura espacialmente localizada e bem definida (Figura 7b e 7c). Nesses casos, a energia fica concentrada em no máximo 3 osciladores sendo que, no primeiro caso, o oscilador central tem em qualquer instante mais da metade da energia total da cadeia, nesse caso $E = 0,646$, enquanto que, no segundo, a energia está mais distribuída entre os vizinhos. Da Figura 7d observa-se que a energia permanece concentrada em 3 osciladores mas o breather caminha pela rede. Isto corresponde a uma instabilidade.

O estudo dinâmico dessa situação foi estendido por mais uma ordem de grandeza no tempo, com o intuito de entender se essa instabilidade poderia conduzir à equipartição de energia na cadeia e, conseqüentemente à perda de localização de energia. Os resultados estão dispostos na Figura 8. Da parte a) observa-se o mesmo comportamento citado anteriormente, e na parte b) apresentamos o deslocamento do oscilador com maior energia em função do tempo. Ele não só se desloca pela rede com velocidade $6 \cdot 10^{-4}$ osciladores/unidade de tempo, como ele retorna ao mesmo oscilador após aproximadamente 35000 unidades de tempo. Calcula-se a localização do

centro de energia na cadeia usando a expressão $N_{central} = \frac{\sum_{j=1}^N jE_j}{E}$.

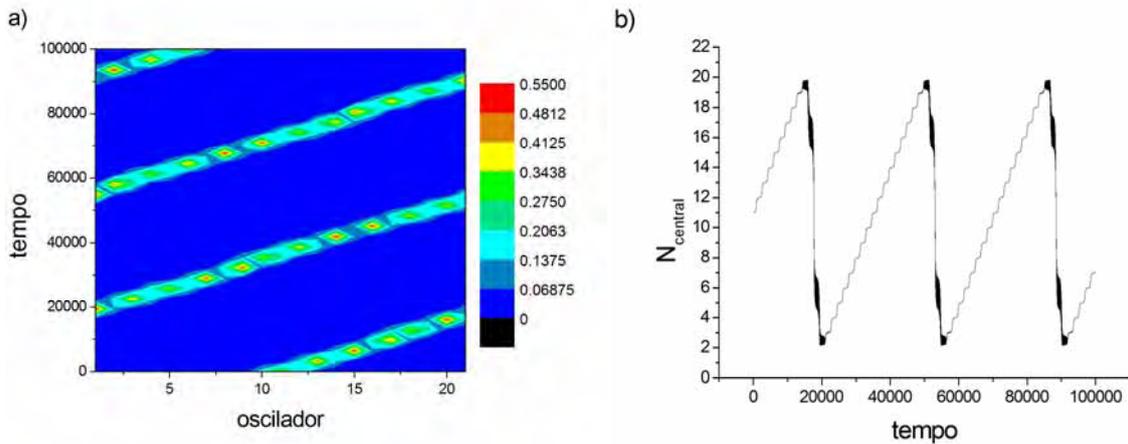


Figura 8 – Acoplamento $C = 0,13$ e frequência $\omega_b = 0,8$. a) Energia de cada oscilador e b) Centro de energia em função do tempo.

Essa análise evidenciou uma mudança no comportamento dos multiplicadores de Floquet e na dinâmica ao passar de $C = 0,1297$ para $C = 0,13$. Essa troca de estabilidade foi gerada por uma bifurcação harmônica. Isto pode ser explicitado através de um gráfico do módulo dos multiplicadores de Floquet como função do parâmetro de acoplamento C , como, por exemplo, mostrado na Figura 9 para $\omega_b = 0,8$.

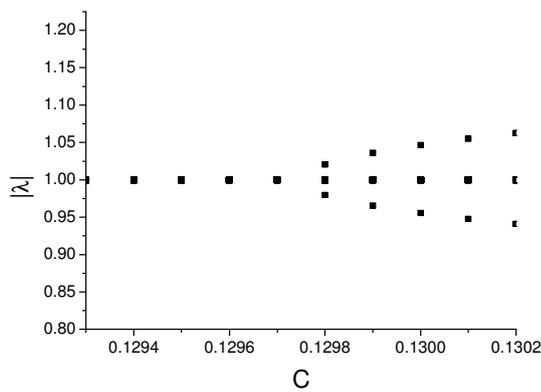


Figura 9 – Gráfico do módulo dos multiplicadores de Floquet em função do acoplamento C . $\delta C = 10^{-4}$ e $\omega_b = 0,8$.

O estudo da estabilidade linear em função de ω_b foi realizado com o tipo de gráfico apresentado na figura 9. Nas Figuras 10a a 10d mostramos os casos para ω_b igual à: 0,6; 0,7; 0,8

e 0,9; respectivamente. A variação de ω_b 's fornece diferentes padrões de bifurcação. Percebe-se que, com o aumento de ω_b (ou diminuição da energia do breather de partida, $C = 0$) a estabilidade linear fica garantida para um intervalo maior do parâmetro de acoplamento C . Isso pode ser observado com mais clareza na Figura 11 na qual mostramos o valor limiar do parâmetro de acoplamento para que ocorra a primeira bifurcação como função de ω_b . Outro aspecto interessante deste tipo de gráfico é que as regiões em que mais de um par de autovalores tem módulo maior que 1. Qualitativamente, o valor crítico do parâmetro C para essa segunda bifurcação, apresenta o mesmo comportamento da Figura 11. As figuras 10 revelam também que para $\omega_b = 0,6$ o sistema só é linearmente estável em um único intervalo $[0, \sim 0,07]$. Para $\omega_b = 0,7$ esse quadro essencialmente se repete, entretanto há uma micro região, em torno de $C = 0,25$ em que o sistema volta a ter a característica de estabilidade linear. Para $\omega_b = 0,8$ e $\omega_b = 0,9$ a dinâmica volta a apresentar estabilidade em diversos outros trechos. Vamos observar a dinâmica do sistema em duas regiões: $C \sim 0,23$ e $C \sim 0,33$ do gráfico dos multiplicadores de Floquet correspondentes a $\omega_b = 0,8$. Na Figura 12a mostramos a distribuição dos autovalores no círculo unitário. Nota-se que dois pares de autovalores saem do círculo unitário em $\theta = 0$ e $\theta = \pi$ e um quarteto de autovalores sai para um θ qualquer, causando bifurcações harmônica, sub-harmônica e oscilatória, respectivamente. O comportamento da energia dos osciladores em função do tempo está mostrado na Figura 12b. Ao contrário da instabilidade apresentada anteriormente ($C = 0,13$), na qual uma estrutura espacialmente localizada se movia pela cadeia, nesse caso o movimento é totalmente desordenado e a vibração inicialmente localizada se perde rapidamente com o tempo.

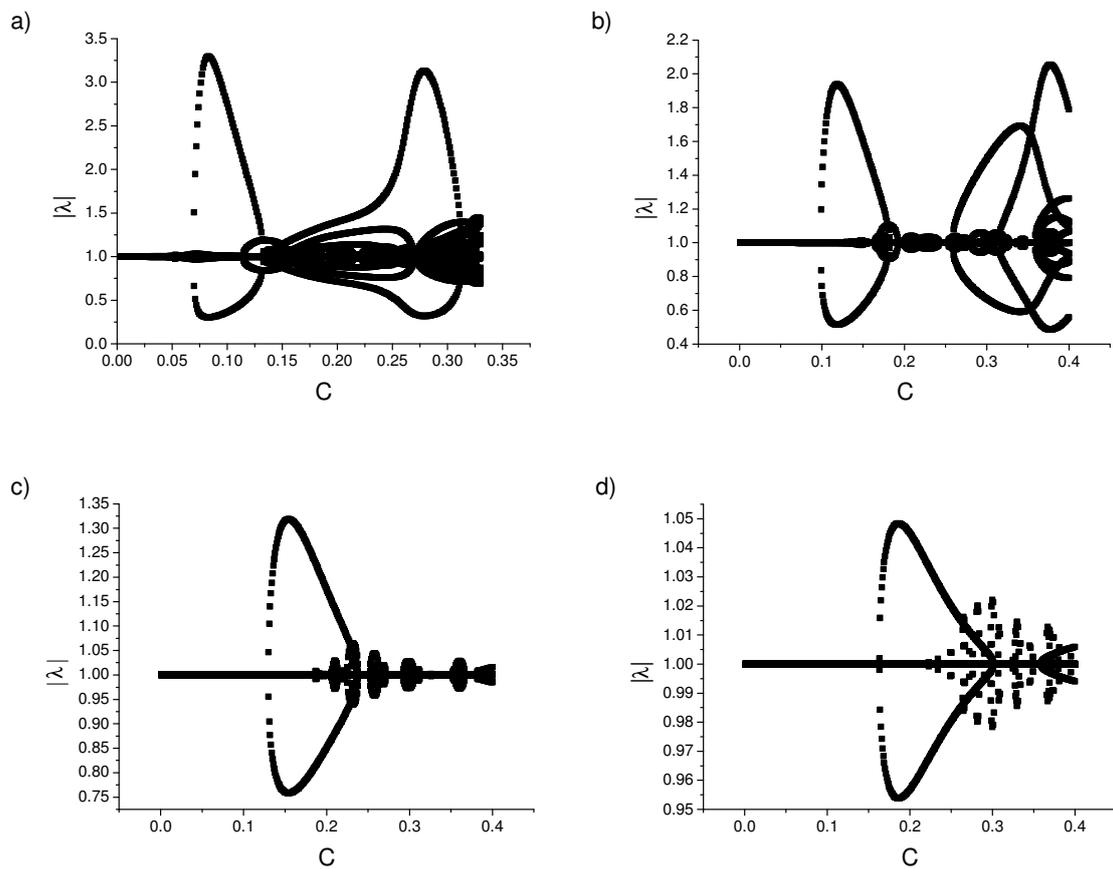


Figura 10 – Gráfico do módulo dos multiplicadores de Floquet em função do acoplamento C para diferentes frequências dos breathers. a) $\omega_b=0,6$, b) $\omega_b=0,7$, c) $\omega_b=0,8$ e d) $\omega_b=0,9$.

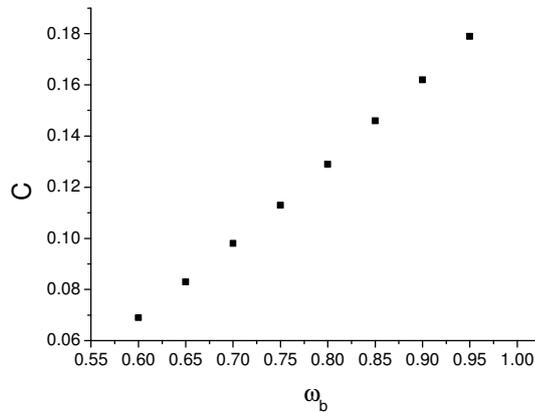


Figura 11 – Limiar do acoplamento para que ocorra a primeira bifurcação em função de ω_b .

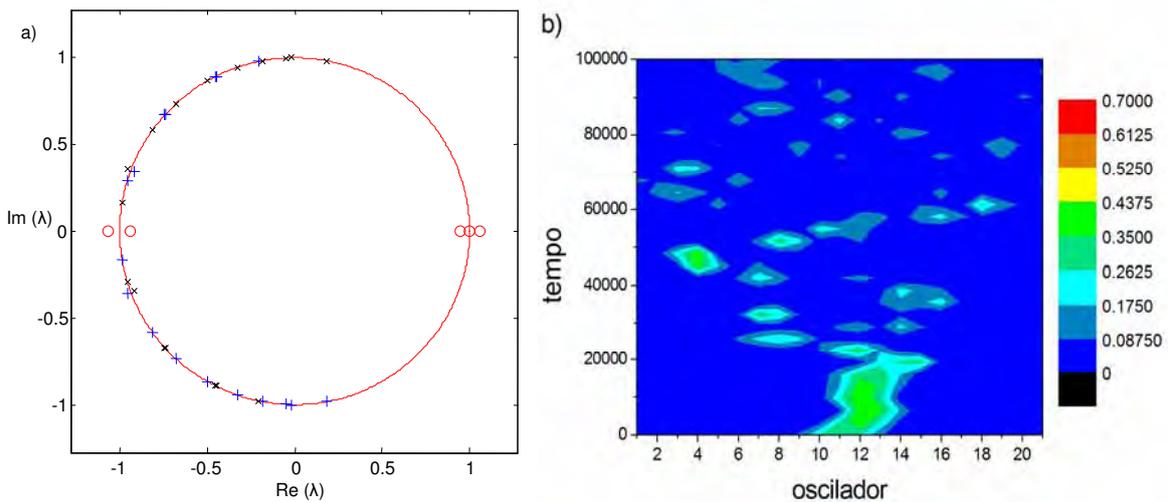


Figura 12 – Acoplamento $C = 0,23$, $E = 1,081$ $\omega_b = 0,8$. a) Multiplicadores de Floquet com as respectivas assinaturas de Krein e b) Energia de cada oscilador em função do tempo.

Em torno à $C \sim 0,33$, o gráfico de autovalores para a frequência $\omega_b = 0,8$ (Figura 10c) apresenta uma região de acoplamento entre $C = 0,313$ e $C = 0,351$ em que o sistema volta a apresentar estabilidade linear. Na Figura 13a mostramos os multiplicadores de Floquet para esse caso e verificamos que todos estão em cima do círculo unitário, explicitando a estabilidade do breather. Na Figura 13b, apresentamos a dinâmica do sistema através da energia de cada

oscilador com o tempo. Nota-se a presença de uma estrutura localizada e bem definida no tempo, entretanto, diferentemente dos casos linearmente estáveis apresentados anteriormente, a energia passa a ficar concentrada no máximo em 6 osciladores.

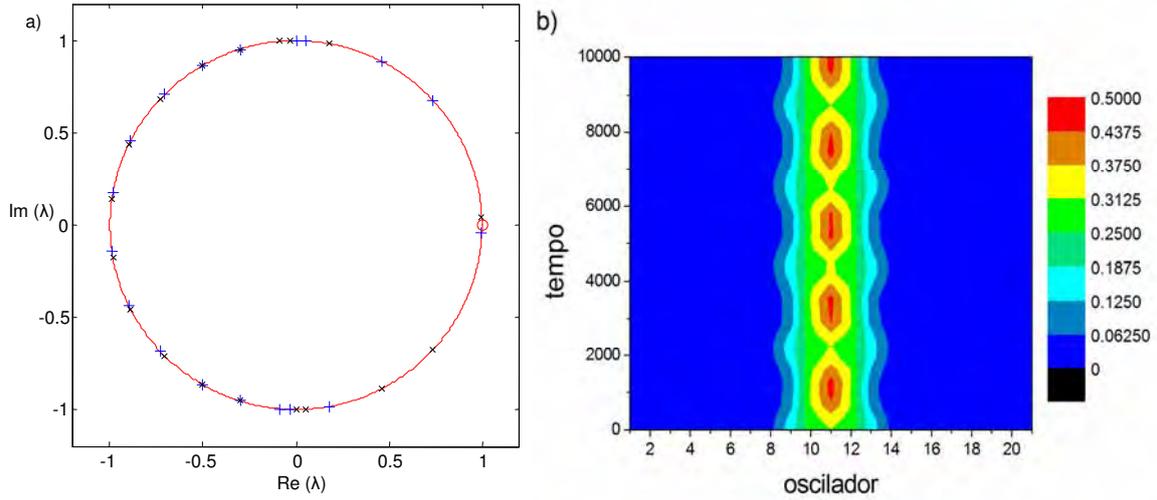


Figura 13 – Acoplamento $C = 0,33$, $E = 1,313$ e $\omega_b = 0,8$. a) Multiplicadores de Floquet com as respectivas assinaturas de Krein e b) Energia de cada oscilador em função do tempo.

O efeito do tamanho da cadeia na estabilidade do breather foi testado reproduzindo-se a análise anterior considerando cadeias com 200 osciladores. Verificou-se que os pontos de instabilidade ocorrem para os mesmos valores de acoplamento mostrados acima ($N = 21$) e que, o comportamento próximo a região instável é o mesmo. Assim é razoável afirmar que os breathers em cadeias homogêneas gerados com esse procedimento, assim como sua estabilidade linear, não sofrem a influência do tamanho da rede.

Em trabalho anterior, de De Luca et al [20] usaram o conceito de entropia informacional para caracterizar a localização de energia em cadeias do tipo Peyrard-Bishop.

A entropia informacional é definida como:

$$S = - \sum_{j=1}^N e_j \ln(e_j),$$

onde $e_j = \frac{E_j}{E}$ e representa uma probabilidade de energia. Supondo que a energia esteja distribuída uniformemente (equipartida) entre r osciladores e $r < N$, cada um desses r osciladores tem energia $e_j = \frac{1}{r}$, e a energia dos demais pode ser desprezada. Nessa situação S pode ser escrita como $S \cong \ln(r)$. Invertendo essa relação se obtém $r \cong e^S$. Vê-se então, que a entropia informacional é uma medida do número de osciladores que tem uma quantidade de energia significativa, ou seja, $N_{osc} \equiv e^S$.

Se todos os osciladores tivessem a mesma energia, obviamente $N_{osc} = N$. Como a energia apresenta flutuações em torno de um valor médio, pode-se mostrar [24] que quando $N_{osc} \sim 0,6N$ a energia pode ser considerada equipartida.

Na Tabela I apresentamos os valores médios de N_{osc} e os respectivos desvios padrões obtidos da dinâmica do sistema para diferentes valores de C . Na região estável, para $C < 0,13$, a energia do breather formado está distribuída, em média, por 2 osciladores com energia significativa. Para $C = 0,13$, que está no limiar da instabilidade, o número de osciladores com energia significativa passa a ser em média 3, o que significa que a energia permanece restrita a um número pequeno de osciladores e, portanto, nesse sentido, localizada. Entretanto como visto anteriormente a estrutura começa a se movimentar dentro da cadeia o que caracteriza a instabilidade pela perda da periodicidade da estrutura formada. Em $C = 0,23$ a instabilidade faz com que a energia se espalhe por mais de 60% dos osciladores da cadeia, caracterizando uma equipartição da energia pela rede. Quando $C = 0,33$ ocorre o retorno da estabilidade, entretanto a estrutura formada apresenta um número maior de osciladores com energia significativa.

Tabela I – valores médios do número de osciladores com energia significativa, N_{osc} , e respectivos desvios padrões para diferentes valores do parâmetro de acoplamento e $\omega_b = 0,8$.

C	Valor de N_{osc} médio	Desvio padrão
0,1	2,15	0,39
0,13	2,98	0,39
0,23	13,48	2,97
0,33	5,29	0,56

5.2 Potencial “Corcunda”

Para obter os resultados utilizando o potencial Corcunda algumas alterações nos procedimentos numéricos tiveram que ser realizadas. Para obter o perfil do breather o número de termos considerados na série de Fourier foi aumentado para $km = 21$ e para o estudo da dinâmica energética do sistema utilizamos o método de Runge-Kutta Nystron de décima ordem [25]. Os valores dos parâmetros do potencial foram os mesmos utilizados por Peyrard et al [6,12] e são equivalentes a: $\alpha = \beta = F = 4,0\text{\AA}^{-1}$ e $D = 0,0857\text{eV}$. Nesse caso as unidades arbitrárias de tempo utilizadas na dinâmica do sistema são aproximadamente 0,057 picosegundos.

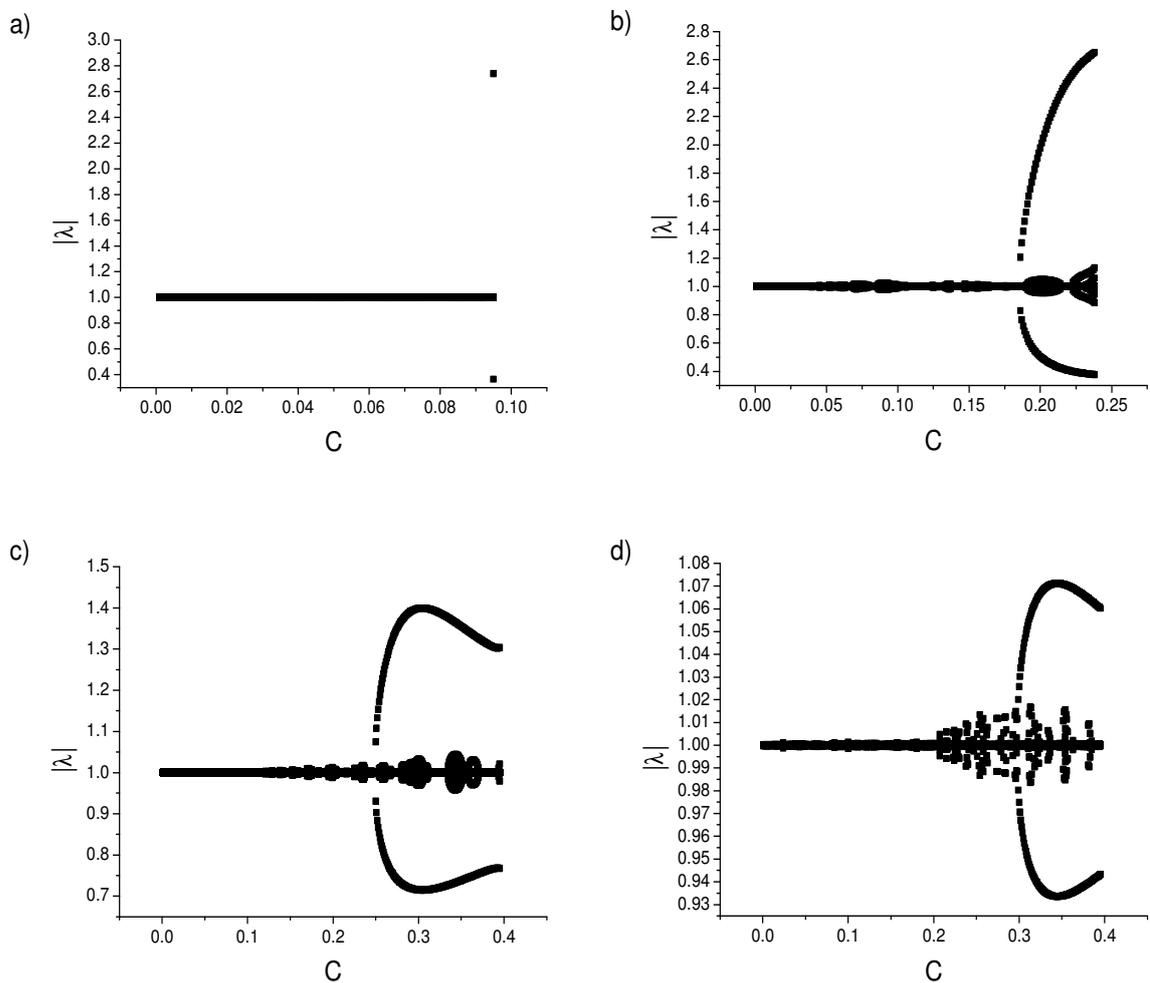


Figura 14 – Gráfico do módulo dos multiplicadores de Floquet em função do acoplamento C para diferentes frequências dos breathers. a) $\omega_b=0,6$, b) $\omega_b=0,7$, c) $\omega_b=0,8$ e d) $\omega_b=0,9$.

Na Figura 14 apresentamos a variação do módulo dos autovalores da matriz de Floquet como função do acoplamento C , para quatro valores da frequência do breather ω_b . Os dados mostrados nas Figuras de (a) a (d) evidenciam que, comparados aos comportamentos obtidos com o potencial de Morse, o gráfico de autovalores apresenta intervalos de valores de C com maior estabilidade quando consideramos como referência o valor de C para o qual ocorre a primeira bifurcação. Entretanto, na região de valores de C que apresenta estabilidade, encontramos regiões

para as quais o módulo dos autovalores diferem de 1 por quantidades muito pequenas, no máximo da ordem de dois centésimos. Na figura 15 mostramos a dinâmica energética do sistema e o número de osciladores com energia significativa em função do tempo para dois casos: $C = 0,09$ e $\omega_b = 0,7$ (15a), e $C = 0,254$ $\omega_b = 0,9$ (15b). Essas pequenas diferenças nos módulos dos autovalores podem ser associadas a pequenas instabilidades e, nos casos considerados, os resultados indicam que as estruturas espacialmente localizadas, do tipo breathers, permanecem, pelo menos no intervalo de tempo considerado (100.000 unidades arbitrárias, ou cerca de 60 ns). No primeiro caso, o número de osciladores que compartilham quantidades significativas da energia cresce de aproximadamente 1,7 (número médio) na parte inicial da dinâmica para um valor da ordem de 3,5 na parte final. No segundo caso, embora existam flutuações curiosamente periódicas nos valores de n_{osc} o seu valor médio permanece em torno de 4,4 em toda a integração considerada.

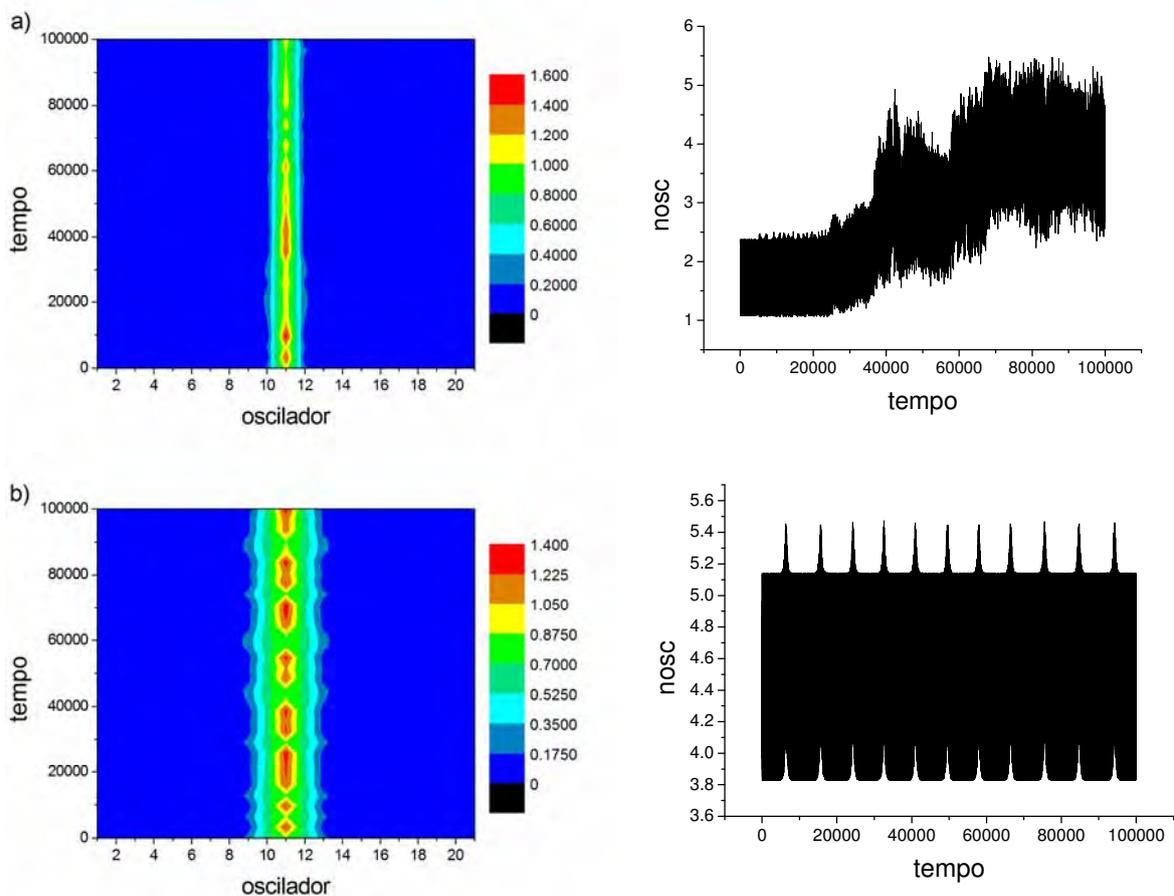


Figura 15 – Energia de cada oscilador e os valores de n_{osc} em função do tempo a) $C = 0,09$; $E = 1,602$ e $\omega_b = 0,7$; b) $C = 0,254$; $E = 2,713$ e $\omega_b = 0,9$.

Comportamento diferente é obtido quando a análise envolve um valor de C de uma região na qual ocorre uma bifurcação. Por exemplo, na Figura 16 apresentamos a distribuição de energia de cada oscilador como função do tempo (a) e a localização do máximo de energia como função do tempo de integração (b). Da mesma forma que para potencial de Morse em situação análoga, observa-se que o breather passa a movimentar-se pela cadeia, caracterizando dessa forma a instabilidade representada pelos autovalores da matriz de Floquet. Esse deslocamento é de aproximadamente $1,05 \cdot 10^{-3}$ osciladores/ unidade de tempo e a energia retorna a um mesmo oscilador após 20000 unidades de tempo.

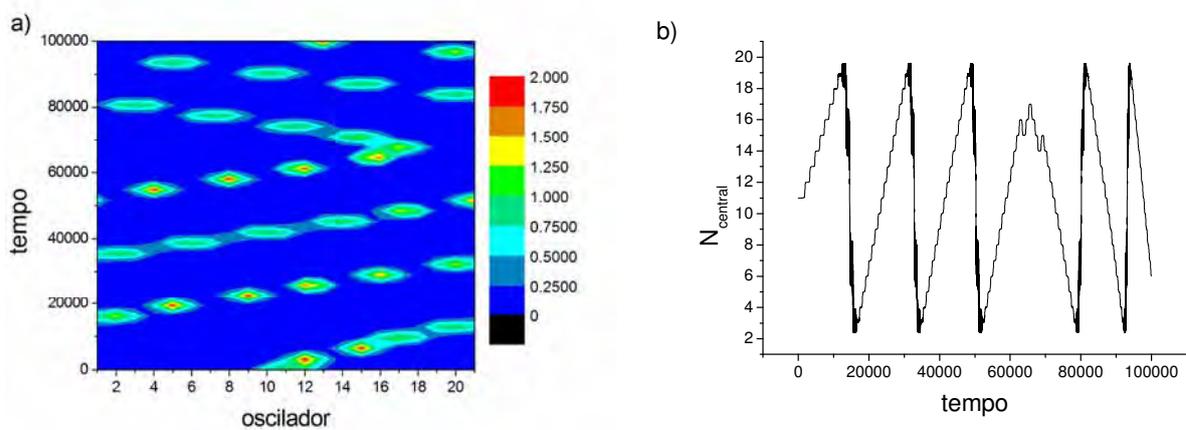


Figura 16 – Acoplamento $C = 0,252$; frequência $\omega_b = 0,8$ e $E = 3,255$. a) Energia de cada oscilador e b) Centro de energia em função do tempo.

O método numérico de Marin-Aubry para gerar o breather apresenta limitação quanto à utilização dos potenciais de Morse e “Corcunda”. Não é possível obter solução para qualquer valor do parâmetro de acoplamento C . Esse fato pode ser relacionado a dois fatores: 1) a forma do potencial on-site que, a partir de um determinado valor para o deslocamento, deixa de ser confinante e 2) a energia da cadeia aumenta com o crescimento do parâmetro C . Próximo ao valor limite de C , a dinâmica da energia relacionada ao potencial on-site revela que um único oscilador possui energia suficiente para estar numa região na qual a força de restituição (atrativa) torna-se muito pequena, caso do potencial de Morse, e mesmo repulsiva, caso do potencial “Corcunda”. Nessas condições a solução pode, até mesmo, deixar de ser periódica. Como o método cria soluções localizadas no espaço e periódicas no tempo por meio da série de Fourier, torna-se então inviável para esses valores de C a aplicação do método. Do ponto de vista computacional há uma quebra das condições de convergência. Esse tipo de limitação foi encontrado tanto para obter soluções para valores mais altos do parâmetro de acoplamento C para as energias (ω_b) consideradas acima, como para valores de ω_b menores, para os quais o limite de

energia comentado ocorre para a situação inicial, com um único oscilador e não há como definir uma solução periódica pela ausência de dois pontos de retorno.

5.3 Comparação com o DNA

Qualitativamente, a dinâmica do sistema na vizinhança de uma bifurcação apresenta uma característica interessante para descrever o comportamento do DNA. A energia concentra-se em torno de um oscilador com energia suficiente para romper a ponte de hidrogênio representada pelo potencial on site. Em seguida, como o breather se move pela cadeia, na situação considerada, ele retorna aquele oscilador. Isso pode ser correlacionado com a dinâmica real do DNA, onde a concentração de energia em um único par de base é capaz de separá-lo. Experimentos [6] mostram que o tempo médio de um par de bases aberto é da ordem de dezenas de nanosegundos, enquanto que para estados fechados temos milisegundos.

Na figura 17 apresentamos os deslocamentos das posições de equilíbrio do décimo primeiro oscilador (o oscilador central da cadeia) em função do tempo para duas situações: (a) $C = 0,13$ (potencial de Morse) e (b) $C = 0,252$ (potencial “Corcunda”), ambos com frequência $\omega_b = 0,8$. Estes valores de C representam as situações limite para a ocorrência da primeira bifurcação. Os tempos estimados em que esse oscilador possui energia para estar no estado aberto equivalem a 800 e 1800 (u.a.), para o potencial de Morse e “Corcunda”, respectivamente. Em termos dos tempos reais esses valores representam 0,076 e 0,1 nanosegundos. Estes resultados, embora mostrem que os modelos podem explicar qualitativamente os resultados experimentais, ainda carecem de uma parametrização suficiente para render resultados quantitativos concordantes com dados experimentais. Além disso, a introdução do potencial corcunda não

conduziu a um ganho tão significativo nos tempos de vida das localizações de energia em comparação com o potencial de Morse, pelo menos para as situações estudadas.

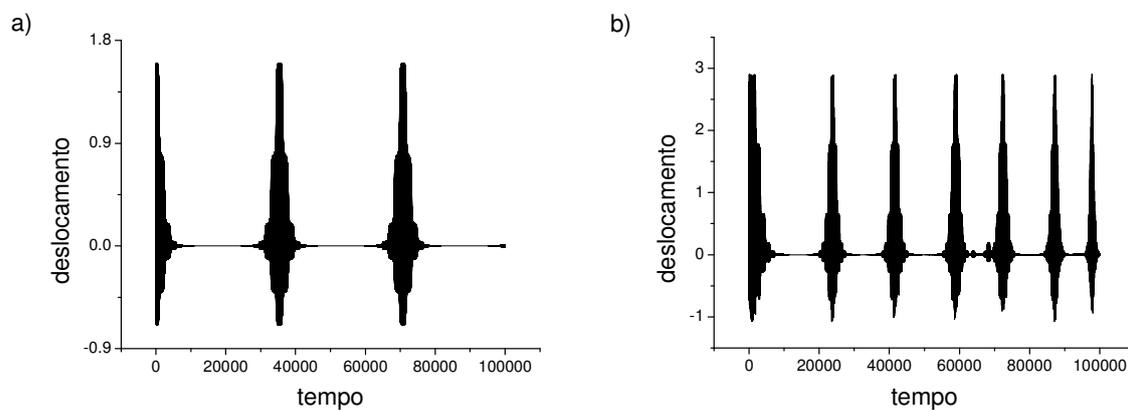


Figura 17 – Deslocamento da posição de equilíbrio do décimo primeiro oscilador em função do tempo. a) Potencial de Morse: $C = 0,13$ e $\omega_b = 0,8$, (b) potencial “Corcunda”: $C = 0,252$ e $\omega_b = 0,8$.

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho estudamos a formação de 1-site breathers em cadeias não lineares homogêneas descritas pelo modelo planar de Peyrard-Bishop, utilizando o procedimento numérico sugerido inicialmente por Marin e Aubry. Dois tipos de potenciais não lineares foram utilizados: o potencial de Morse e o potencial “Corcunda”. A análise da estabilidade dessas estruturas foram feitas através da teoria de Floquet e estão coerentes, no caso do potencial de Morse, com a encontrada na literatura por Cuevas[18].

Regiões de instabilidade apresentam dois tipos de comportamento: próximo de uma bifurcação o breather mantém sua estrutura, entretanto passa a caminhar pela cadeia e recebe o nome de breather móvel. Quando mais de um par de autovalores saem do círculo unitário a estrutura localizada se desfaz e a energia é espalhada por toda a cadeia.

O método numérico de construção do breather baseado na aproximação do limite do anticontínuo e no crescimento lento do parâmetro de acoplamento C , usando o perfil encontrado em cada passo anterior como semente para o método de Newton, possui limitações vinculadas ao fato da energia ser localizada – 1 site breathers – e da energia da cadeia aumentar com o parâmetro C . Quando esse limite é atingido, as amplitudes de oscilação são grandes e expandir as soluções possíveis em torno de múltiplos da frequência do breather ω_b não conduz a soluções que satisfaçam aos critérios de convergência. Determinados valores de ω_b , não existem pontos de retorno e a solução, mesmo para um único oscilador no limite em que $C = 0$, não possui soluções periódicas e, portanto, o procedimento estudado não produz respostas satisfatórias.

Na tentativa de descrever a dinâmica do DNA encontramos um comportamento qualitativo próximo ao real, onde flutuações altamente localizadas são capazes de romper um único par de bases. A energia fica concentrada em um único oscilador com energia suficiente para atingir a região não confinante do potencial “on site” por um determinado tempo e depois caminha pela rede. Como usamos condições periódicas de contorno, após um tempo ela volta a se concentrar nesse mesmo oscilador. Os resultados quantitativos do tempo em que o par de bases permanece aberto carece de uma parametrização para concordar com dados experimentais.

Peyrard e seus colaboradores introduziram o potencial “Corcunda” para obter tempos de vida do par de bases mais próximos do resultado experimental. A idéia da barreira introduzida nesse novo potencial é promover um tempo maior tanto para o estado aberto como para o estado fechado. Para a situação apresentada na última seção dessa dissertação, o tempo do estado aberto obtido para os diferentes potenciais foram bem próximos e não evidenciam a mudança desejada pelo novo potencial. Contudo, esse primeiro resultado ainda é inconclusivo e demanda melhor investigação.

Referências

- [1] ALBERTS, B.; JOHNSON, A.; LEWIS, J. **Biologia Molecular da Célula**, cap. 4,5 e 6, pág.191-374, 4ª edição, Editora ARTMED, 2004.
- [2] WATSON, G. B.; CRICK, F. H. Molecular Structure of Nucleic Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid. **Nature** 171, 737-8 ,1953.
- [3] CANTOR, C.; SCIMMEL, P. **Biophysical Chemistry. Part III: The behavior of biological macromolecules**, cap. 22, pág. 1109-1181, W. H. Freeman and Company, 1980.
- [4] POLAND, D.; SCHERAGA, H. A. Ocurrence of a Phase Transition in Nucleic Acid Models. **Journal of Chemical Physics** 45, 1464-9, 1966.
- [5] DIMITROV, R. A.; ZUKER, M. Prediction of Hybridization and Melting for Double-stranded Nucleic Acids. **Biophysics Journal** 87, 215-26, 2004.
- [6] PEYRARD, M.; CUESTA-LÓPEZ, S.; ANGELOV, D. **Experimental and Theoretical Studies of Sequence Effects on the Fluctuation and Melting of Short DNA Molecules. Journal of Physics: Condensed Matter** 21, 034103, 2009.
- [7] THEODORAKOPOULOS, N.; DAUXOIS, T.; PEYRARD, M. Order of the Phase Transition in Models of DNA Thermal Denaturation. **Physical Review Letters** 85, 6-9, 2000.
- [8] ENGLANDER, S. W.; KALLENBACH, N. R.; HEEGER, A. J.; KRUMHANSL, J. A.; LITWIN, A. Nature of the Open State in Long Polynucleotide Double Helices: Possibility of Soliton Excitations. **Proceedings of the National Academy of Sciences** 77, 7222-7226, 1980.

- [9] LEROY, J. L.; KOCHOYAN, M.; HUYNH-DINH, T.; GUÉRON, M. Characterization of Base-pair Opening in Deoxynucleotide Duplexes Using Catalyzed Exchange of the Imino Proton. **Journal of Molecular Biology** 200, 223-38, 1988.
- [10] PEYRARD, M.; BISHOP, A. R. Statistical Mechanics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation. **Physical Review Letters** 62, 2755-58, 1989.
- [11] PEYRARD, M. Nonlinear Dynamics and Statistical Physics of DNA. **Nonlinearity** 17, R1-40, 2004.
- [12] PEYRARD, M.; CUESTA-LÓPEZ, S.; JAMES, G. Modelling DNA at the Mesoscale: a Challenge for Nonlinear Science? **Nonlinearity** 21, T91, 2008.
- [13] AUBRY, S. Breathers in Nonlinear Lattices: Existence, Linear Stability and Quantization. **Physica D** 103, 201-250, 1997.
- [14] AUBRY, S. Discrete Breathers: Localization and Transfer of Energy in Discrete Hamiltonian Nonlinear Systems. **Physica D** 216, 1-30, 2006.
- [15] FLACH, S.; WILLIS, C. R. Discrete Breathers. **Physics Reports** 295, 181-264, 1998.
- [16] MACKAY, R.; AUBRY, S. Proof of Existence of Breathers for Time-reversible or Hamiltonian Networks of Weakly Coupled Oscillators. **Nonlinearity** 7, 1623-43, 1994.
- [17] HOPPENSTEADT, F. C. **Analysis and Simulation of Chaotic Systems**, cap. 1, pág. 1-24, 2^a edição, Springer, 2000.
- [18] CUEVAS, J. **Localización y Transferencia de Energía em Redes Anarmónicas No Homogéneas**. 2003. Tese (Doutorado em Física) – Facultad de Física, Universidad de Sevilla, Sevilla, 2003.

- [19] YAKUSHEVICH, L. **Nonlinear physics of DNA**, cap. 1, pág 1-19, Wiley series in nonlinear science, 1998.
- [20] DE LUCA, J.; DRIGO FILHO, E.; PONNO, A.; RUGGIERO, J. R. Energy Localization in the Peyrard-Bishop DNA Model. **Physical Review E** 70, 026213, 2004.
- [21] MARIN, J. L.; AUBRY, S. Breathers in Nonlinear Lattices: Numerical Calculation from the Anticontinuous Limit. **Nonlinearity** 9, 1501-1528, 1996.
- [22] ARNOL'D, V. I.; AVEZ, A. **Ergodic Problems of Classical Mechanics**, Ap. 29, Benjamim, 1968.
- [23] PRESS W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLAMMERY, B. P. **Numerical Recipes**, 2a ed., Cambridge University Press, 1992.
- [24] MIRNOV, V. V.; LICHTENBERG, A. J., GUCLU, H. Chaotic Breather Formation, Coalescence, and Evolution to Energy Equipartition in an Oscillatory Chain. **Physica D** 157, 251-82, 2001.
- [25] TSITOURAS, Ch. A Tenth Order Symplectic Runge–Kutta–Nyström Method. **Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy** 74, 223-30, 1999.