



Soluciones solitón y aplicación a las proteínas.

Trabajo Fin de Grado
Grado en Matemáticas

Esther Oyaga Iriarte

Trabajo dirigido por
Virginia Muto

Leioa, 20 de Junio de 2014

Índice general

Introducción	v
1. Soluciones Solitón	1
1.1. Ondas lineales	1
1.2. La ecuación de Korteweg-de Vries o KdV	3
1.3. Ecuación cúbica de Schrödinger o Non linear Scrödinger (NLS)	9
1.4. Otras ecuaciones con soluciones solitón	10
2. Aplicación a la biología	13
2.1. Modelo de Davydov	15
A. Soluciones numéricas para EDO y EDP	23
A.1. Métodos Runge-Kutta	23
A.2. Transformada Rápida de Fourier	24
B. Resolución numérica de la KdV mediante Mathematica	27
C. Resolución numérica de la ecuación NLS mediante Mathematica	31
Bibliografía	35

Introducción

Podemos encontrar en la naturaleza dos tipos de ondas. Por una lado están las ondas lineales y por otro lado las ondas no lineales.

Tradicionalmente, hablamos de las ondas lineales, que son las más familiares, las que estamos más acostumbrados a encontrarnos en el día a día, y las que llevamos estudiando desde hace mucho tiempo. Entre ellas encontramos las ondas de la luz y las del sonido, por ejemplo. Estas ondas tienen, sea cual sea su forma, velocidad, amplitud y longitud de onda constantes. Asimismo, obedecen al principio de superposición.

Por otro lado, en este trabajo, destacaremos las ondas no lineales, que son menos familiares que las anteriores comentadas, pero no por ello menos importantes. Este tipo de ondas son muy diferentes a las lineales, ya que en ellas la amplitud, la longitud de onda y la velocidad no son constantes. Entre los ejemplos donde las encontramos, destacamos una ola en el mar aproximándose a la orilla. Vemos que la distancia entre las crestas va decreciendo, la velocidad cambia y la altura de la ola va creciendo conforme va percibiendo el fondo; llegando a un punto en el que la ola se rompe ya que la parte superior se ha adelantado demasiado a la inferior.

Con respecto a esta parte de la ciencia, la Matemática y Física No Lineal, cabe destacar sus grandes avances en la segunda mitad del siglo XX con la Teoría de Solitones, punto en el que centraremos el tema de este trabajo. En primer lugar daremos una definición sencilla de solitón: los solitones son ondas no lineales que exhiben un comportamiento extremadamente inesperado e interesante, son ondas solitarias que se propagan sin deformarse. De ahí que su nombre derive de onda solitaria.

Para terminar con esta introducción haremos un pequeño repaso histórico sobre el tema.

Transcurría el año 1834, cuando el ingeniero escocés John Scott-Russell, durante un paseo a caballo por los alrededores de Edimburgo, observó cómo una barcaza era remolcada a lo largo de un estrecho canal por dos caballos que tiraban desde tierra. Mientras Russell contemplaba el espectáculo, la barcaza se detuvo repentinamente, ocasionando un movimiento violento del agua. Ante el asombro de Russell, se levantó una ola en la proa de la nave y “fué deslizándose a gran velocidad hacia delante, formando una única ondulación de gran altura; una montaña de agua, redondeada y bien diferenciada,

que continuó su recorrido por el canal, sin variar aparentemente su forma o reducir la velocidad”. Russell subió a su caballo y se lanzó en persecución del enigmático fenómeno. Durante más de dos kilómetros persiguió la ola, sin perderla de vista, hasta que ésta desapareció entre las curvas del canal.

La gigantesca ola que vio Russell en el canal era una elevación única sobre la superficie en calma del agua, que mantenía su forma intacta mientras avanzaba. Sorprendido por aquella visión, Russell tenía que averiguar si había sido víctima, quizás, de alguna ilusión óptica; motivo por el cual el ingeniero volvió una y otra vez al canal para hacer nuevas observaciones, y en cada ocasión tenía la oportunidad de contemplar atónito olas semejantes. Russell las llamó “great waves of translation” y se dedicó a perfeccionar diferentes técnicas para reproducirlas en su laboratorio (el jardín trasero de su casa). Entre sus resultados empíricos obtenidos destacan: la amplitud es proporcional a la velocidad de la onda y el volumen de agua en la onda es igual al del agua desplazada. Fue capaz de obtener una fórmula que expresaba la velocidad de la onda en términos de la amplitud y profundidad del canal. Así, en 1844 en su “Report on Waves” informó que:

I believe I shall best introduce the phenomenon by describing the circumstances of my own first acquaintance with it. I was observing the motion of a boat which was rapidly drawn back along a narrow channel by a pair of horses, when the boat suddenly stopped- not so the mass of water in the channel which it had put in motion; it accumulated round the prow of the vessel in a state of violent agitation, then suddenly leaving it behind, rolled forward with great velocity, assuming the form of a large solitary elevation, a rounded, smooth and well-defined heap of water, which continued its course along the channel apparently without change of form or diminution of speed. I followed it on horseback, and overtook it still rolling on at a rate of some eight or nine miles per hour, preserving its original figure some thirty feet long and a foot to a foot and a half in height. Its height gradually diminished, and after a chase of one or two miles I lost it in the windings of the channel. Such, in the month of August 1834, was my first chance interview with that rare and beautiful phenomenon which I have called Wave of Translation.

Finalmente pudo recopilar los datos suficientes como para redactar un informe coherente, que envió a la Royal Society de Edimburgo. Su publicación impresionó tanto a los investigadores de la naturaleza de todo el mundo, que éstos también intentaron observar las misteriosas olas en charcas, estanques, lagos y canales, para desvelar los mecanismos de su formación. Así, este hecho tuvo como consecuencia el despertar de un nuevo y enorme interés por esta parte de la ciencia hasta entonces oculta.

Pero no fue hasta 1895, cuando Diederick Johannes Korteweg y su estudiante Gustav de Vries presentaron la ecuación en derivadas parciales no

lineal que captura la esencia de este fenómeno, la ecuación KdV:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (1)$$

donde la aparición del segundo y tercer término, el no lineal y el dispersivo respectivamente, explican este curioso fenómeno.

Así, en el primer capítulo del trabajo, mediante el estudio de dicha ecuación, KdV, y entre otras, la ecuación de Schrödinger, presentaremos las soluciones de tipo solitón.

Asimismo, se verá su aparición en la naturaleza, centrandó el segundo capítulo en el estudio del transporte de energía y movimiento de las proteínas en su estructura α -hélice. Por último, cabe mencionar que los objetivos de nuestro trabajo se alcanzarán mediante un estudio numérico y no analítico. Por lo tanto, en el Apéndice A se presentan brevemente los dos métodos numéricos necesarios para resolver las ecuaciones diferenciales consideradas en este trabajo. Y en los apéndices B y C se explican los detalles de los algoritmos usados para la resolución numérica de la ecuación de KdV y de Schrödinger respectivamente, mediante el software *Mathematica* de Wolfram.

Capítulo 1

Soluciones Solitón

En este primer capítulo vamos a describir la ecuación KdV, la ecuación de Schrödinger y otras en las que van a aparecer soluciones solitón, para entender así mejor de donde surgen estas soluciones y cuales son sus propiedades y características fundamentales. Veremos también ejemplos visuales, de la resolución de dichas ecuaciones mediante *Mathematica* [1] para así entender los comportamientos donde se apreciarán sus cualidades.

1.1. Ondas lineales

Una onda en una propagación de alguna propiedad del medio, como la presión, el campo eléctrico, el campo magnético o la densidad, entre otras, a través del propio medio, implicando con ello un transporte de energía sin transporte de materia [2].

Así definimos la función de ondas general como

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = v^2 \cdot \nabla^2 u(x, t) \quad (1.1)$$

donde $u(x, t)$ es la función que expresa la magnitud física cuya perturbación se propaga en el medio y depende de la posición y del tiempo, v es la velocidad de dicha propagación de la onda y ∇^2 es el operador Laplaciano.

A continuación definimos algunos elementos de una onda, que aparecerán más adelante, ver Figura 1.1.

- La cresta es el punto de máxima amplitud de la onda; es decir, el punto de la onda más separado de su posición de reposo.
- El valle es el punto más bajo de una onda.
- El periodo, (T), es el tiempo que tarda la onda en ir de un punto de máxima amplitud al siguiente.
- La amplitud, (A), es la distancia vertical entre una cresta y cero.
- La frecuencia, (f), es el número de veces que es repetida dicha vibración

por unidad de tiempo.

- La longitud de onda, (λ), es la distancia que hay entre el mismo punto de dos ondulaciones consecutivas, o la distancia entre dos crestas consecutivas.
- La velocidad de propagación es la velocidad a la que se propaga el movimiento ondulatorio.

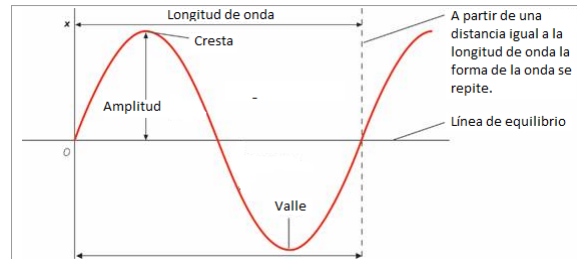


Figura 1.1: Onda.

El caso más sencillo de onda que podamos encontrar es la que viene dada por una solución del tipo de onda viajera

$$u(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad (1.2)$$

donde k es el número de onda y ω la frecuencia angular, que expresa la frecuencia en radianes por segundo. Hay dos velocidades diferentes asociadas a las ondas. La primera es la velocidad de fase, la cual indica la distancia que recorre la onda en una pulsación por unidad de tiempo, y está dada por

$$v_p = \frac{\omega}{k}.$$

Utilizando que $\omega = 2\pi f$ y que $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ podemos expresar también la velocidad de fase como

$$v_p = \lambda f.$$

La segunda es la velocidad de grupo, la cual da la velocidad con la que las variaciones en la forma de la amplitud de la onda se propagan por el espacio. Esta es la tasa a la cual la información puede ser transmitida por la onda. Viene dada por

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}.$$

La función $\omega(k)$, que proporciona ω en función de k , se conoce como la **relación de dispersión**. Si ω es directamente proporcional a k , entonces la velocidad de grupo es exactamente igual a la velocidad de fase, como en el caso del vacío. En caso contrario, la forma de la onda se distorsionará a medida que la misma se propague. El desarrollo indicado arriba asumiendo

una solución del tipo (1.2) se puede aplicar a distintas ecuaciones de evolución. Las diferentes relaciones de dispersión son muy útiles, ya que contienen todas las características particulares originales.

Dependiendo del tipo de ecuación considerada tenemos distintos tipos de relaciones de dispersión como por ejemplo

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \Rightarrow \omega = k,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow \omega = ik^2,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow \omega = -k^2.$$

La primera corresponde a una onda viajera en una línea, la segunda aparece en la ecuación del calor y es la que refleja la disipación, y por último, la tercera es la que muestra la dispersión. Y como veremos en la KdV linealizada, aparece la relación de dispersión $\omega = k^3$ que también muestra dispersión.

1.2. La ecuación de Korteweg-de Vries o KdV

La ecuación KdV tiene la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0. \quad (1.3)$$

En esta ecuación se combina un término no lineal, $u \frac{\partial u}{\partial x}$, con uno dispersivo $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$. La naturaleza no dispersiva de la solución solitón de la ecuación KdV aparece debido a que ambos términos se equilibran [3].

Vamos a trabajar un poco con esta ecuación eliminando algunos de sus términos y viendo su comportamiento, para así entenderla mejor.

- (i) En primer lugar eliminamos el término no lineal $u \frac{\partial u}{\partial x}$, obteniendo la versión linealizada, una ecuación en derivadas parciales respecto de x y t , de tercer grado:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0. \quad (1.4)$$

Resolviendo este problema mediante el método de separación de variables, la solución más elemental es la onda armónica:

$$u(x, t) = A \exp[i(kx + \omega t)], \quad k \in \Re, \quad \omega \in C, \quad (1.5)$$

con k número de onda y ω la frecuencia angular. La relación de dispersión entre ambos parámetros debido a la forma de la solución es $\omega = k^3$.

Observación. Resolvemos el problema:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

usando el método de separación de variables.

Entonces definimos la solución $u(x, t)$ como una función respecto de x y otra respecto de t , es decir,

$$u(x, t) = X(x)T(t) \Rightarrow \frac{X'''(x)}{X(x)} = \frac{-T'(t)}{T(t)} = -\lambda i, \lambda \in \mathfrak{R}.$$

Con lo que llegamos a dos problemas del tipo:

$$\begin{cases} X'''(x) + \lambda i X(x) = 0, \\ T'(t) - \lambda i T(t) = 0. \end{cases}$$

Resolviendo en primer lugar el segundo, vemos que tiene solución tipo:

$$T' = \lambda i T \Rightarrow \frac{T'(t)}{T(t)} = \lambda i \Rightarrow \text{Ln}(T(t)) = \lambda i t + C_1 \Rightarrow$$

$$T(t) = C_2 e^{\lambda i t}, \quad C_1 \text{ y } C_2 \in \mathfrak{R}.$$

Ahora, resolvemos el otro problema respecto a x . Como es un problema de coeficientes constantes calculamos las raíces de su polinomio característico, esto es:

$$r^3 + \lambda i = 0, \quad \lambda \in \mathfrak{R}.$$

Por lo tanto tenemos que las soluciones son:

$$r = \lambda^{1/3} \left[\cos\left(\frac{-\pi}{2} + \frac{2k\pi}{3}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{-\pi}{2} + \frac{2k\pi}{3}\right) \right], \quad \text{con } k = 0, 1, 2.$$

Con lo que concluimos que las tres soluciones del polinomio característico son:

$$r_1 = \lambda^{1/3} \left(\cos\left(\frac{-\pi}{6}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{-\pi}{6}\right) \right) = \lambda^{1/3} \left(\cos\left(\frac{\pi}{6}\right) - i \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{6}\right) \right) = \lambda^{1/3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - i \frac{1}{2} \right)$$

$$r_2 = \lambda^{1/3} \left(\cos\left(\frac{3\pi}{6}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{3\pi}{6}\right) \right) = \lambda^{1/3} \left(\cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right) = \lambda^{1/3} i$$

$$r_3 = \lambda^{1/3} \left(\cos\left(\frac{7\pi}{6}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{7\pi}{6}\right) \right) = \lambda^{1/3} \left(\cos\left(\frac{\pi}{6}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{6}\right) \right) = \lambda^{1/3} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + i \frac{1}{2} \right)$$

Por lo que las soluciones de la parte del problema respecto de x es:

$$X_1(x) = C_1(x)e^{\lambda^{1/3}(\frac{\sqrt{3}}{2}-i\frac{1}{2})x}$$

$$X_2(x) = C_2(x)e^{\lambda^{1/3}ix}$$

$$X_3(x) = C_3(x)e^{\lambda^{1/3}(\frac{\sqrt{3}}{2}+i\frac{1}{2})x}$$

Para conseguir la solución que hemos enunciado damos los siguientes valores:

$$C_1(x) = 0, C_2(x) = 1, C_3(x) = 0.$$

Luego tenemos que, $X(x) = e^{\lambda^{1/3}ix}$.

Así llegamos a que:

$$u(x, t) = X(x)T(t) = e^{\lambda^{1/3}ix}e^{\lambda it} = Ae^{i[\lambda t + \lambda^{1/3}x]}, A \in C.$$

Definiendo, $\lambda = \omega$ y usando la relación de dispersión $\omega = k^3$ enunciada anteriormente, llegamos a la solución que hemos dado del problema:

$$u(x, t) = Ae^{i[\lambda t + \lambda^{1/3}x]} = Ae^{i[\omega t + kx]}, A \in C.$$

Teniendo en cuenta nuestra relación de dispersión de la solución anterior, $\omega = k^3$, tenemos que

$$v_p = \frac{w}{k} = \frac{k^3}{k} = k^2 \quad \text{y} \quad v_g = \frac{\partial w}{\partial k} = \frac{\partial k^3}{\partial k} = 3k^2$$

siendo v_p la velocidad de fase y v_g la de grupo explicadas en la sección anterior.

Las ondas descritas por dicha ecuación lineal, (1.4), tendrán mayor velocidad de fase y de grupo para valores de k grandes que para valores pequeños, debido a los resultados obtenidos. Por lo tanto, una onda formada por superposición de componentes elementales con diferentes números de onda, k , se dispersan o cambian su forma a medida que se propaga.

- (ii) Ahora eliminamos el término de dispersión $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ consiguiendo así la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{1.6}$$

Por lo tanto, tenemos una ecuación no lineal simple, que siempre admite soluciones de onda de la forma

$$u(x, t) = f(x - ut). \tag{1.7}$$

De hecho, haciendo el cambio de variable $\xi = x - ut$, y aplicando la regla de la cadena, obtenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial t} = f' \cdot (-u),$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} = f' \cdot 1.$$

Sustituyendo en la ecuación,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = f' \cdot (-u) + u \cdot f' \cdot 1 = 0.$$

Por lo tanto, en estas ondas la velocidad en cada punto coincide con el valor de la función en ese punto. Esto implica que las ondas se rompen, ya que partes más altas de la onda sufren mayores desplazamientos porque se mueven más rápido, por lo que adelantarán a partes con desplazamientos más pequeños. Luego la no linealidad conduce a un cambio en la forma de cómo se propaga y en una rotura de la onda misma.

Hemos así descrito los dos efectos de dispersión y de no linealidad por separado. Resulta que una propiedad fundamental de la KdV, es que la dispersión y la no linealidad se equilibran entre sí y éste equilibrio permite que las soluciones de onda se propaguen sin cambios en la forma.

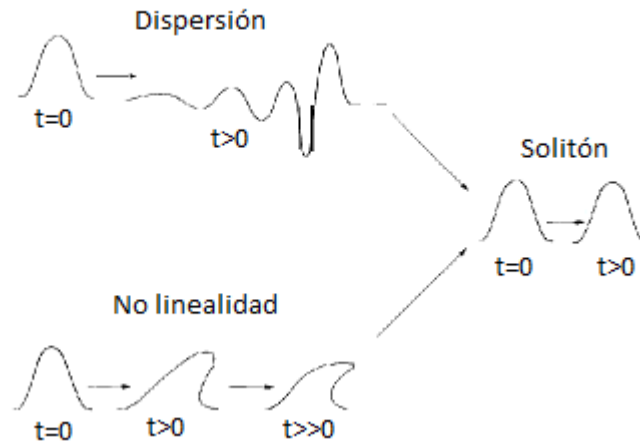


Figura 1.2: Equilibrio entre la no linealidad y la dispersión.

Dicho de otra manera, a causa de estos dos efectos, la dispersión (linealidad) y la no linealidad, una onda cambia a medida que se propaga. Pero para una onda descrita por la ecuación KdV, el equilibrio de ambos efectos,

permite que una onda solitón, se propague sin cambiar su forma, como se ve en la Figura 1.2.

No todas las ecuaciones en derivadas parciales no lineales tienen soluciones solitón. Las que si las tienen, son ecuaciones genéricas y pertenecen a una clase para las que el problema de valores iniciales general puede ser resuelto por una técnica llamada Inverse Scattering Transform, desarrollado por Martin Kruskal entre otros.

Gracias a este método, que es una generalización del método de Fourier para ecuaciones diferenciales no lineales, las soluciones pueden ser producidas a través de una serie de cálculos lineales y dichas ecuaciones se dice que son completamente integrables.

Sin embargo, una resolución analítica de la ecuación no entra en los objetivos de este trabajo, mientras se prefiere dar un enfoque numérico. Por ello en los Apéndices A y B se han presentado los métodos numéricos y el algoritmo específico para resolver la ecuación KdV.

Para continuar, damos un ejemplo de solución solitón de la ecuación KdV

$$u(x, t) = 3A^2 \cdot \operatorname{sech}^2\left[\frac{A}{2}(x - x_0) - A^3t\right], \quad (1.8)$$

siendo $2A^2$ la velocidad que puede coger.

Vemos que a diferencia de los casos lineales, la velocidad, la anchura y la amplitud si están relacionados, no son independientes, ya que la velocidad es $2A^2$, la amplitud es $3A^2$ y la anchura es inversamente proporcional a A ; luego dependen todos del mismo parámetro A .

Así podemos apreciar que en la Figura 1.3 que tiene un valor de $A=5$

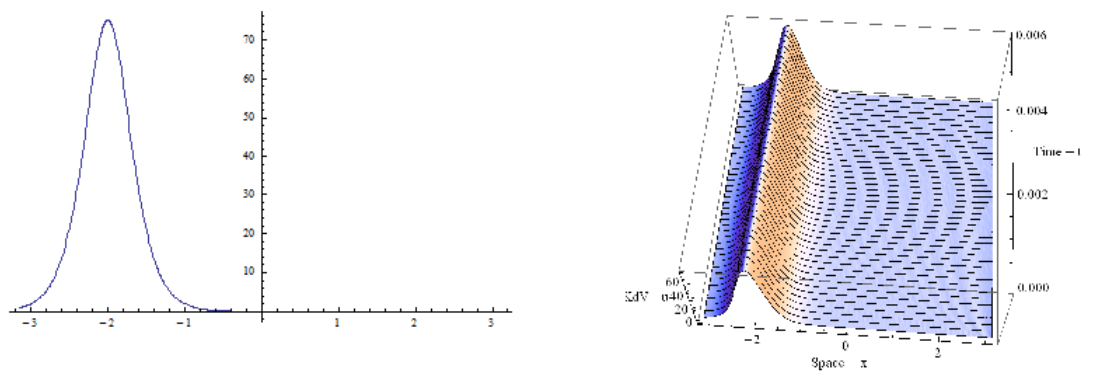


Figura 1.3: Solitón de la ecuación KdV con valor $A=5$.

tiene por lo tanto una amplitud de $3A^2 = 3 \cdot 5^2 = 75$ y una velocidad de $2A^2 = 2 \cdot 5^2 = 50$.

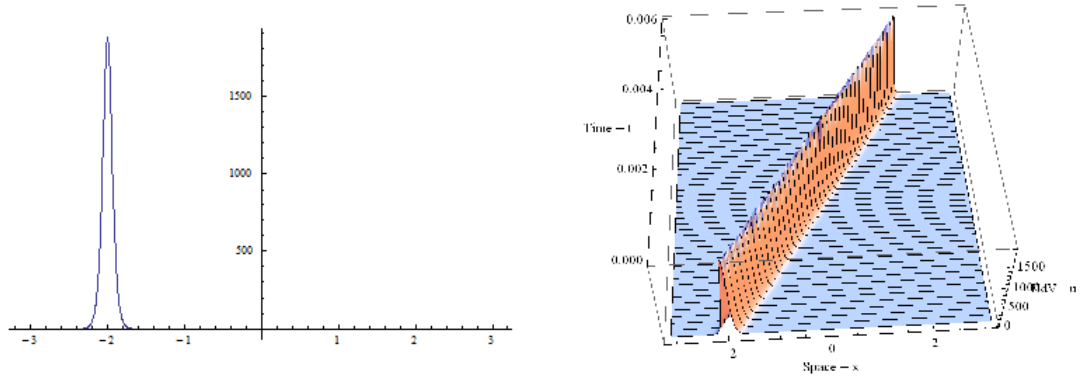


Figura 1.4: Solitón de la ecuación KdV con valor $A=25$.

Sin embargo, en la Figura 1.4 se muestra un solitón con valor $A=25$ que tiene una amplitud de $3A^2 = 3 \cdot 25^2 = 1875$, una velocidad de $2A^2 = 2 \cdot 25^2 = 1250$ y una anchura menor a el caso anterior, ya que A ha aumentado.

Cabe destacar que el choque entre soluciones solitón es una **colisión elástica**, es decir, una colisión entre dos o más cuerpos en la que éstos no sufren deformaciones permanentes durante el impacto; se conservan tanto el momento lineal como la energía cinética del sistema, y no hay intercambio de masa entre los cuerpos, que se separan después del choque. Sin embargo, lo

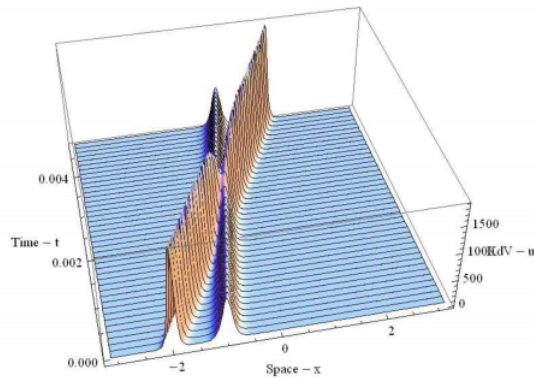


Figura 1.5: Colisión entre dos solitones y evidente desplazamiento de fase.

que ocurre es que se da un desplazamiento de fase, como se puede apreciar en la Figura 1.5, en la que tras el choque de los dos solitones, (con condiciones

iniciales uno de ellos $A = 25$ y $x_0 = -2$ como posición inicial y el otro con $A = 16$ y $x_0 = -1$), ambos han sufrido un ligero cambio en su posición, siguiendo la misma trayectoria y dirección, pero con un pequeño desfase.

1.3. Ecuación cúbica de Schrödinger o Non linear Schrödinger (NLS)

La ecuación cúbica de Schrödinger tiene la forma:

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q|u|^2 u = 0. \quad (1.9)$$

El término no lineal de la ecuación es $q|u|^2 u$. Dicha ecuación NLS es típica de sistemas débilmente no lineales, pero fuertemente dispersivos.

Como ocurría con la ecuación KdV el equilibrio entre la no linealidad y la dispersión da lugar a propiedades y características importantes de esta ecuación. Por ejemplo, la conservación de la energía:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |u(t, x)|^2 dx = 0. \quad (1.10)$$

Consideramos la relación de dispersión de la forma:

$$\omega = \omega(k, |E|^2),$$

con $E = E(x, t)$ una función que varía lentamente en una onda, con ω la frecuencia y k el número de onda. Esta situación se produce, por ejemplo, en fenómenos de óptica no lineal, en la superficie de olas de agua profundas, ondas de plasma electrostático, y enlaces de energía para el transporte de proteínas (se desarrollará este último ejemplo más adelante).

Si desarrollamos por Taylor alrededor de w_0 y k_0 teniendo en cuenta que la no linealidad, $E(x, t)$, sólo hace falta extenderla hasta el primer orden de la serie, pero la dispersión, k , hace falta desarrollarla hasta el segundo orden, ya que el primer orden sólo representa la propagación sin distorsión de la onda con la velocidad de grupo, $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$, tenemos:

$$w - w_0 = \left. \frac{\partial w}{\partial k} \right|_0 (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 w}{\partial k^2} \right|_0 (k - k_0)^2 + \left. \frac{\partial w}{\partial (|E|^2)} \right|_0 |E|^2. \quad (1.11)$$

Si ahora sustituimos el operador $i(\frac{\partial}{\partial t})$ por $(w - w_0)$ y $-i(\frac{\partial}{\partial x})$ por $(k - k_0)$ en (1.9) y lo dejamos en función del operador E , tenemos:

$$i \left[\frac{\partial E}{\partial t} + \left. \frac{\partial w}{\partial k} \right|_0 \frac{\partial E}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 w}{\partial k^2} \right|_0 \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \left. \frac{\partial w}{\partial (|E|^2)} \right|_0 |E|^2 E = 0. \quad (1.12)$$

A esta ecuación se le conoce como la ecuación de Schrödinger no lineal, debido a su parecido con la ecuación de Schrödinger, aunque su derivación no tiene nada que ver.

Analizando los términos de (1.12):

-El primer término representa la propagación sin distorsión de la onda en la velocidad de grupo.

-El segundo representa la dispersión lineal.

-Por último el tercero es la dispersión no lineal.

A menudo es preferible mostrar (1.12) de forma más ordenada, para ello transformamos las variables x y t a z y τ siendo el movimiento coordinado del grupo de velocidad y el tiempo normalizado, respectivamente estas nuevas variables, definidas como:

$$z = x - \left. \frac{\partial w}{\partial k} \right|_0 t \quad y \quad \tau = \frac{1}{2} \left[\left. \frac{\partial^2 w}{\partial k^2} \right|_0 t \right].$$

Luego tenemos que (1.9) es:

$$i \frac{\partial E}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + 2k|E|^2 E = 0$$

con $k = - \left[\left. \frac{\partial w}{\partial (|E|^2)} \right|_0 / \left[\left. \frac{\partial^2 w}{\partial k^2} \right|_0 \right] \right]$.

La ecuación NLS es, al igual que la KdV, completamente integrable y tiene soluciones solitón, cuya expresión analítica tiene la forma:

$$E(x, t) = \sqrt{\frac{2\alpha}{q}} \exp\left(i \left[\frac{c}{2}(x - x_0) - \left(\frac{c^2}{4} - \alpha\right)t \right]\right) \operatorname{sech}^2(\sqrt{\alpha}(x - x_0 - ct))$$

donde α y q son parámetros libres que determinan la amplitud además de α determinar también la anchura; y por otro lado c y x_0 son la velocidad y la posición inicial respectivamente del solitón.

En la siguiente Figura 1.6 podemos ver la aproximación numérica de la ecuación de Schrödinger para unas condiciones iniciales y de contorno determinadas, uno de los solitones con $\alpha=1$, $c=2$ y $x_0 = -20$ y el otro solitón con $\alpha = 1,5$, $c = -1$ y $x_0 = 20$, con $q = 1$ para ambos. En el Apéndice C se muestra el algoritmo y el programa para resolver esta ecuación. En ella, podemos observar el choque de los solitones. Se aprecia como la colisión es elástica, ya que cada solución solitón sigue su trayectoria teniendo en cuenta el desplazamiento de fase mencionado anteriormente.

1.4. Otras ecuaciones con soluciones solitón

Por último vamos a destacar otras ecuaciones importantes que tienen soluciones tipo solitón muy diferentes a las soluciones de las ecuaciones anteriores.

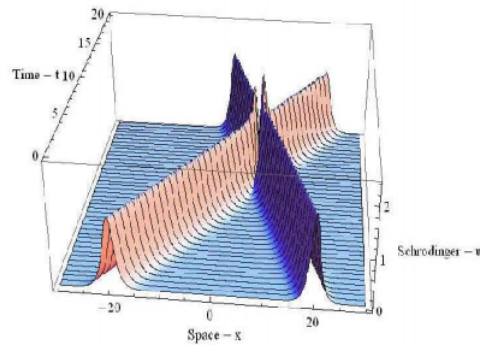


Figura 1.6: Aproximación numérica de la ecuación de Schrödinger.

Por ejemplo, está el problema de la ecuación de **Sine-Gordon**

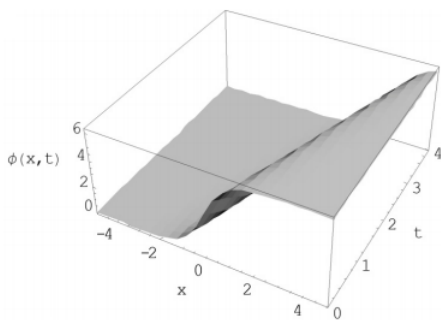
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \sin u. \quad (1.13)$$

Vemos que esta ecuación admite la solución trivial cero.

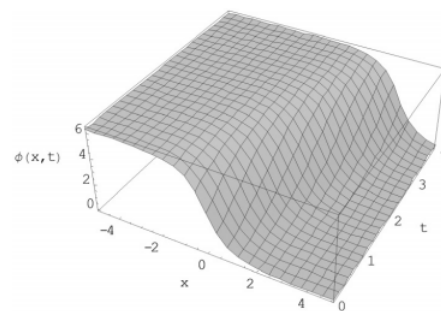
Además, otras soluciones son $u = \pm 2\pi, \pm 4\pi, \dots$. Este tipo de soluciones son llamadas a menudo kink y para la ecuación de Sine-Gordon son solitones exactos, es decir, chocan elásticamente sin generación de radiación dispersiva. La expresión analítica de estas soluciones es

$$u_{\pm}(x, t) = 4 \tan^{-1}[\exp[\pm(x - x_0 - ct)/(1 - c^2)^{1/2}]] \quad (1.14)$$

y el solitón u_- lo solemos llamar antikink. El parámetro c es la velocidad ($-1 < c < 1$) y x_0 la posición inicial. En la Figura 1.7 se muestran dos



Solitón kink para $c=0.8$ y una variación del tiempo entre 0 y 4.



Solitón antikink para $c=0.8$ y una variación del tiempo entre 0 y 4.

Figura 1.7: Soluciones kink y antikink de la ecuación Sine-Gordon.

soluciones solitón kink y antikink tomadas de un artículo de F.A. Segovia

Chaves titulado Solitones kink y antikink en la ecuación de Sine-Gordon, de la Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá.

Otras ecuaciones también tienen soluciones kink y antikink, pero no son soluciones solitón exactas como las de la ecuación Sine-Gordon. Por ejemplo, la ecuación de **difusión no lineal**:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u(u-a)(u-1), \quad 0 < a < 1 \quad (1.15)$$

y una de sus soluciones es:

$$u = [1 + \exp(\frac{x-ct}{\sqrt{2}})]^{-1}, \quad \text{con } c = \frac{1-2a}{\sqrt{2}}. \quad (1.16)$$

Para interpretar esta solución hacemos que $u(x,t) = X(\tau)$ y definimos $V(u)$ a través de la igualdad $-u(u-a)(u-1) = \frac{\partial V}{\partial u}$. Así, la ecuación de difusión queda:

$$\frac{\partial X^2}{\partial \tau^2} = -c \frac{\partial X}{\partial \tau} - \frac{\partial V}{\partial X}$$

que representa una partícula de masa unidad moviéndose bajo la acción del potencial V con coeficiente de amortiguación c ; X representa el desplazamiento y τ el tiempo correspondientes.

En conclusión, las ecuaciones con soluciones solitón aparecen con frecuencia, y aunque los sistemas reales presentan mecanismos (impurezas, fuerzas disipativas...) que destruyen el comportamiento del solitón exacto, son muy útiles como punto de partida para el análisis de algunos fenómenos.

Estas ecuaciones originales son por lo tanto muy útiles y los mecanismos que dan lugar a soluciones solitón son frecuentes, luego no nos extrañará decir que los solitones suelen aparecer en biología. La pregunta que vamos a hacernos es si un sistema biológico particular cumple los criterios que son necesarios para que aparezca dicha solución solitón.

Capítulo 2

Aplicación a la biología

Como hemos visto los solitones son entidades ondulatorias localizadas con propiedades de estabilidad que se propagan, sin deformarse y en condiciones muy concretas, en un medio no lineal. Su existencia tiene como fundamento que son soluciones de ecuaciones de ondas (ecuaciones diferenciales) no lineales. Se conocen en torno a un centenar de ecuaciones con soluciones solitón, entre ellas las desarrolladas en el capítulo anterior; la ecuación KdV, la NLS y la Sine-Gordon entre otras. Los solitones tienen, un comportamiento de tipo partícula, por ejemplo en la interacción de unos con otros.

Cuando tenemos una onda electromagnética, los solitones son solitones ópticos. Y, el hecho de que no se deforman los hacen ideales para transmitir información a grandes distancias, en medios no lineales como, por ejemplo, la fibra óptica. De ellos hay dos tipos básicos o fundamentales: Los solitones ópticos espaciales y los solitones ópticos temporales.

-Solitones temporales: Son pulsos de luz que, bajo ciertas condiciones se desplazan sin distorsión a cualquier distancia. Es una solución especial de pulso viajera, que es la única solución estable de una ecuación dispersiva. Intuitivamente corresponde a un pico de luz desplazándose aisladamente.

-Solitones espaciales: Son haces espaciales de luz, robustos, autoguiados, que se propagan sin distorsión en ciertos métodos ópticos y exhiben comportamiento como las partículas. Se forman por el enfocado y atrapado mutuo de ondas en medios no lineales.

-También existe solitones espacio-temporales, conocidos como balas de luz. Gracias a las propiedades y características de estas soluciones solitón tienen importantes aplicaciones en la vida real, como en mejorar el rendimiento de las transmisiones en las redes ópticas de telecomunicaciones, como en la transmisión de datos por Internet; también aparecen en campos de la física como en ondas internas estratificadas, ondas ionicoacústicas, física de plasma o dinámica de redes entre otros. Son a destacar debido a que son muy espectaculares los solitones en fenómenos oceánicos, como podemos observar en la Figura 2.1.

A parte de en el terreno de la física, aparecen en el ámbito de la biología

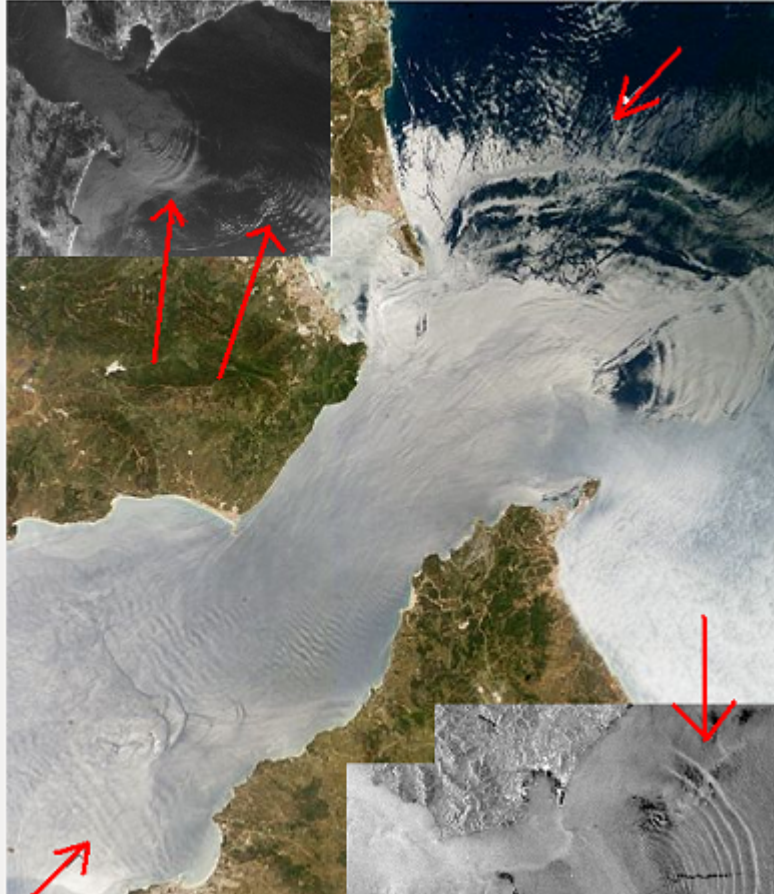


Figura 2.1: Fotos hechas desde los satélites ERS de la ESA (las blanco y negro) y desde la Estación Espacial Internacional, ISS de la NASA (la foto a color tomada por un astronauta a bordo).

como en áreas de selección genética o en la teoría de combustión. Otro aspecto importante en la biología es el problema de cómo conseguir energía mediante mecanismos basados en la excitación molecular, ya que parecía que estos tenían un corto periodo de vida.

Davydov dió una solución, en la que vamos a basar esta segunda parte del trabajo.

2.1. Modelo de Davydov

Alexander Davydov, físico soviético y ucraniano, sugirió que la no linealidad entre fuerzas interatómicas puede conducir a la construcción de una onda solitaria, solitón, que tiene un gran tiempo de vida y con ello una mejora en la posibilidad para transportar energía a lo largo de grandes distancias.

Basándose en esta idea, Davydov se centró en el estudio de la α -hélice proteica. En dicho estudio de las proteínas se observó que siguiendo un análisis lineal de la energía que se transporta mediante la amide-I y el enlace peptido C=O, los efectos de la dispersión pueden extenderse haciendo que se desorganice el sistema y produciendo así la pérdida de la fuente del mecanismo biológico.

Sin embargo, en los casos de los análisis no lineales de Davydov, la propagación de las vibraciones de amide-I se retroactivan por parejas en la α -hélice, y la propagación de esta pareja excitada está localizada y es dinámicamente autosuficiente, estamos hablando de los solitones. Esta pareja excitada es viable gracias a que se dan unas condiciones umbral concretas y satisfactorias.

Por debajo de este umbral necesario, el solitón no llega a formarse, ya que no consigue su forma y comportamiento característico. Por otro lado, por encima de este umbral, el solitón es un posible mecanismo que transmite energía. Un fuerte umbral entre la parte lineal (dispersión) y la parte no lineal (solitón) es fácil de ver y depende de parámetros físicos que describen la α -hélice proteica.

Debido a este comportamiento, Davydov propuso un modelo, en 1973, ahora bien consolidado, que se conoce como: **Modelo de Davydov para la α -hélice proteica.**

Primero describiremos la estructura de la α -hélice que podemos ver en la siguiente imagen, Figura 2.2.

Los componentes que forman una proteína se conocen con el nombre de aminoácidos, éstos son unas moléculas que poseen al menos un grupo amino ($-NH_2$) y un grupo carboxilo ($-COOH$), éste último necesariamente terminal. Una α -hélice, es una cadena polipeptídica, una cadena de aminoácidos unidos por enlaces peptídicos, de ahí su nombre. Dicho enlace peptídico se realiza entre el grupo carboxilo de un aminoácido y el grupo amino del siguiente aminoácido, liberándose una molécula de agua. La α -hélice es un conjunto de planos articulados, ya que estos enlaces son rígidos, no se pueden girar, y hacen que los átomos de carbono, nitrógeno y oxígeno que participan en ellos, se sitúen en un mismo plano. Estas cadenas tienen una forma helicoidal en el sentido de las agujas del reloj, con 3,6 aminoácidos por cada vuelta. El plegamiento se mantiene estable, por medio de los puentes de hidrógeno que se establecen entre el grupo $-NH-$ de un aminoácido (n) y el grupo $-CO-$ del cuarto aminoácido ($n+4$) que le sigue en la cadena

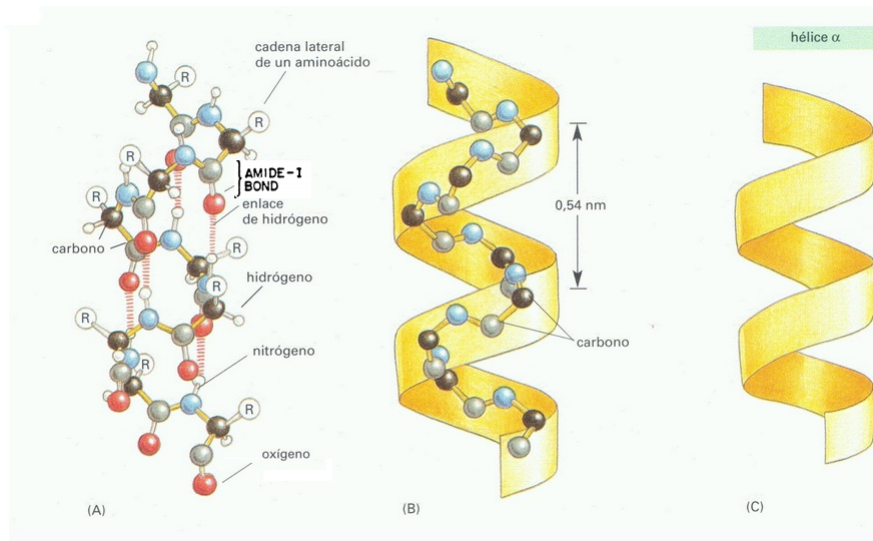


Figura 2.2: A) Estructura molecular. B) Forma helicoidal. C) α -hélice.

lineal. De esta forma, cada aminoácido (n) de la hélice forma dos puentes de hidrógeno con su enlace peptídico y el enlace peptídico del aminoácido en $(n+4)$ y en $(n-4)$. En total son 7 enlaces de hidrógeno por vuelta y es gracias a esta estructura y a que está estrechamente empaquetada (no hay espacio libre en su interior) por lo que se estabiliza enormemente, permitiendo que tenga esta forma helicoidal.

La ecuación de Davydov describe la propagación de energía mediante enlaces y ondas longitudinales a lo largo de la hélice. El enlace no lineal de hidrógeno (puentes de hidrógeno) conduce a que se emparejen dos de estos sistemas de propagación, y si las condiciones umbral son las adecuadas, que se forme un solitón.

Ahora vamos a ver como se describe la propagación según el medio por el que se realice usando la ecuación de Davydov [4].

Antes vamos a establecer la notación de los distintos parámetros que aparecerán en la ecuaciones:

Con la función a denotaremos a las vibraciones amide-I en una celda unidad particular n a lo largo de la hélice y en una vuelta concreta, α . Esto es $a_{n,\alpha}$, con los valores $n = -1, 0, 1, 2, \dots$ y $\alpha = 1, 2, 3, \dots$

La función β será el sonido longitudinal que al igual que las vibraciones amide-I se establecerá en un n y α concretos, $\beta_{n,\alpha}$.

Por último denotaremos con W al total de la energía del sonido.

Por otro lado, en las ecuaciones de la propagación de estas tres cantidades

aparecen los parámetros $\chi_1, \chi_2, J, L, \hbar^*, \xi_0, \omega$ y M que estarán acompañando a las diferentes relaciones de los valores anteriores en sus propagaciones y en las interacciones entre ellos.

Así, tenemos las siguientes tres ecuaciones:

- (i) En primer lugar, tenemos la ecuación que describe la propagación de las vibraciones amide-I a través de las interacciones dipolo-dipolo, que son los puentes de hidrógeno:

$$i\hbar \frac{\partial a_{n,\alpha}}{\partial t} = [\xi_0 + W + \chi_1(\beta_{n+1,\alpha} - \beta_{n-1,\alpha})]a_{n,\alpha} - J(a_{n-1,\alpha} + a_{n+1,\alpha}) + L(a_{n,\alpha+1} + a_{n,\alpha-1}) + \chi_2[\beta_{n+1,\alpha}a_{n+1,\alpha} - \beta_{n-1,\alpha}a_{n-1,\alpha} - \beta_{n,\alpha}(a_{n+1,\alpha} - a_{n-1,\alpha})].$$

- (ii) En segundo lugar, tenemos la propagación del sonido longitudinal:

$$M \frac{\partial^2 \beta_{n,\alpha}}{\partial t^2} - w(\beta_{n+1,\alpha} - 2\beta_{n,\alpha} + \beta_{n-1,\alpha}) = \chi_1(|a_{n+1,\alpha}|^2 - |a_{n-1,\alpha}|^2) + \chi_2[a_{n,\alpha}^*(a_{n+1,\alpha} - a_{n-1,\alpha}) + (a_{n+1,\alpha}^* - a_{n-1,\alpha}^*)a_{n,\alpha}].$$

- (iii) Por último, tenemos que la siguiente ecuación describe el total de la energía del sonido:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{n,\alpha} [M(\frac{\partial \beta_{n,\alpha}}{\partial t})^2 + w(\beta_{n,\alpha} - \beta_{n-1,\alpha})^2].$$

A continuación trabajaremos con dichas formulas para así entender su significado y estudiar cada uno de sus componentes:

Empezamos analizando i) considerando tanto los coeficientes no lineales, χ_1 y χ_2 , los coeficientes J y L y la energía del sonido W todo igual a cero, tenemos:

$$i\hbar \frac{\partial a_{n,\alpha}}{\partial t} = \xi_0 a_{n,\alpha}.$$

En esta ecuación $|a_{n,\alpha}|^2 = a_{n,\alpha} a_{n,\alpha}^*$ que representa la probabilidad de encontrar un cuanto de energía de enlace ξ_0 en una celda unidad, n , en una vuelta concreta α . Si la suma de estas probabiidades es uno, entonces habrá un único cuanto de energía de enlace en la hélice. Este es el ejemplo más sencillo de un oscilador simple. De aquí sacamos que la magnitud $a_{n,\alpha}$ permanece constante y que progresa linealmente con el tiempo como:

$$a_{n,\alpha}(t) = a_{n,\alpha}(0) \exp(\frac{-i\xi_0 t}{\hbar}).$$

* Constante de Planck.

Consideramos que ξ_0 toma el valor constante de $0,328 \times 10^{-19}$ J. Así hemos estudiado la magnitud $a_{n,\alpha}$ que denotamos como amplitud de la ocupación del enlace.

En este caso por la segunda ecuación, ii), se tiene que χ_1 y χ_2 son cero teniendo así:

$$M \frac{\partial^2 \beta_{n,\alpha}}{\partial t^2} - w(\beta_{n+1,\alpha} - 2\beta_{n,\alpha} + \beta_{n-1,\alpha}) = 0$$

siendo $\beta_{n,\alpha}$ el desplazamiento de un n y α concretos, correspondientes a su posición de equilibrio y M en la masa de dos átomos de carbono, uno de oxígeno, otro de nitrógeno, otro más de hidrógeno y por último una molécula de metilo.

A través de numerosos estudios e investigaciones se han estimado estos valores basándose en aproximaciones, obteniendo que $M = 1,17 \times 10^{-25}$ Kg. El parámetro w es la fuerza de reparación de un enlace de hidrógeno por unidad de extensión, vamos a dar a este parámetro un valor constante de 76N/m.

Para seguir, vamos a considerar la ecuación i) de nuevo, pero esta vez con los coeficientes J y L distintos de cero. Obtenemos así:

$$i\hbar \frac{\partial a_{n\alpha}}{\partial t} + J(a_{n-1,\alpha} - 2a_{n\alpha} + a_{n+1,\alpha}) - \xi_0 a_{n\alpha} = -2Ja_{n\alpha} + L(a_{n,\alpha+1} + a_{n,\alpha-1}).$$

Esta ecuación representa los efectos del enlace dipolo-dipolo en las vibraciones amide-I. Así vemos que el parámetro J es importante para la propagación de energía del enlace. Si la parte derecha de esta ecuación fuera cero, entonces habría una amplia gama de posibilidades de propagación. Los valores estimados para estos parámetros son: $J = 7,8 \text{ cm}^{-1} = 1,55 \times 10^{-22} \text{ J}$ y $L = 12,4 \text{ cm}^{-1} = 2,46 \times 10^{-22} \text{ J}$.

Ahora vamos a considerar el estudio de los coeficientes no lineales χ_1 y χ_2 . Estos coeficientes muestran la parte no armónica de los enlaces de hidrógeno. Este efecto viene de la no linealidad de las ondas longitudinales de la ecuación anterior, ecuación ii), cuando χ_1 y χ_2 son iguales a cero:

$$M \frac{\partial^2 \beta_{n\alpha}}{\partial t^2} - w(\beta_{n+1,\alpha} - 2\beta_{n\alpha} + \beta_{n-1,\alpha}) = 0$$

y de la propagación dispersiva de la energía de enlace de la amide-I, descrita por la ecuación i) con $W=0$ y $\chi_1 = 0$ y $\chi_2 = 0$:

$$i\hbar \frac{\partial a_{n\alpha}}{\partial t} + J(a_{n-1,\alpha} - 2a_{n\alpha} + a_{n+1,\alpha}) - \xi_0 a_{n\alpha} = -2Ja_{n\alpha} + L(a_{n,\alpha+1} + a_{n,\alpha-1}).$$

Así, hemos conseguido la pareja que permite la formación de un solitón, antes mencionada. Mediante el estudio numérico seguido por los investigadores y asumiendo que $\chi = \chi_1 = \chi_2$, se estima que $\chi = 2,6 \times 10^{-11}$.

Por último, consideramos la energía de sonido, W . Su estimación está representada en la ecuación iii) y participa en la i) sin embargo los investigadores vieron que en el estudio numérico su valor es despreciable para los cálculos.

Estas ecuaciones, contienen demasiadas constantes físicas para un conveniente estudio analítico, entonces vamos a escribirlas de forma normalizada. Para la primera, tenemos:

$$i\hbar \frac{\partial A_{n,\alpha}}{\partial \tau} = 1,41 A_{n,\alpha} \sum_{n,\alpha} [(\frac{\partial B_{n,\alpha}}{\partial \tau})^2 + (B_{n,\alpha} - B_{n-1,\alpha})^2] - 0,058(A_{n-1,\alpha} + A_{n+1,\alpha}) + 0,092(A_{n,\alpha+1} + A_{n,\alpha-1}) + 0,0372 \times (10^{10}\chi)[(B_{n+1,\alpha} - B_{n-1,\alpha})A_{n,\alpha} + B_{n+1,\alpha}A_{n+1,\alpha} - B_{n-1,\alpha}A_{n-1,\alpha} - B_{n,\alpha}(A_{n+1,\alpha} - A_{n-1,\alpha})].$$

En segundo lugar,

$$\frac{\partial^2 B_{n,\alpha}}{\partial \tau^2} - (B_{n+1,\alpha} - 2B_{n,\alpha} + B_{n-1,\alpha}) = 0,132(10^{10}\chi) \times [|A_{n+1,\alpha}|^2 - |A_{n-1,\alpha}|^2] + A_{n,\alpha}^*(A_{n+1,\alpha} - A_{n-1,\alpha}) + (A_{n+1,\alpha}^* - A_{n-1,\alpha}^*)A_{n,\alpha}.$$

Teniendo en cuenta que las nuevas variables son:

$$\begin{aligned} a_{n,\alpha} &= A_{n,\alpha} \exp(\frac{-i\xi_0 t}{\hbar}) \\ \beta_{n,\alpha} &= B_{n,\alpha} \times 10^{-11} m \\ \tau &= t(\frac{\omega}{M})^{1/2}. \end{aligned}$$

Si tomamos como número de celdas $n_{max} = 200$ unidades, sabiendo que la longitud de una celda en la fibra protéica es de $4,5 \text{ \AA}$, tenemos que en total la longitud es $4,5 \times 200 = 900 \text{ \AA}$, que es la longitud típica de una molécula de miosina en una fibra de músculo estriado. Los investigadores consideran como condiciones iniciales:

- $A_{n,\alpha} = 1$, para $n=1$
- $A_{n,\alpha} = 0$, para $n \neq 1$
- $B_{n,\alpha} = 0$, $\forall n$
- $\tau = 0$.

Físicamente, estas condiciones se corresponden con la introducción de un cuanto de energía de enlace de Amide-I en cada una de las tres fibras.

Para la interpretación de la Figura 2.3 , primero definimos como

$$U(1) = A_{n,1}^2 + A_{n,2}^2 + A_{n,3}^2$$

y como

$$U(2) = \sum [(\frac{\partial B_{n,\alpha}}{\partial \tau})^2 + (B_{n+1,\alpha} - B_{n,\alpha})^2]$$

donde $U(1)$ es la energía de enlace y donde $U(2)$ es la energía de sonido.

Entonces veamos los diferentes resultados para valores de τ distintos, 300, 600, 900 y 1200.

Para $\tau=300$, primer caso estudiado, la parte de la gráfica que nos muestra la energía de enlace, $U(1)$, nos deja ver que se ha dispersado algo y por otro lado para la $U(2)$ podemos apreciar que tiene dos componentes distintas, una

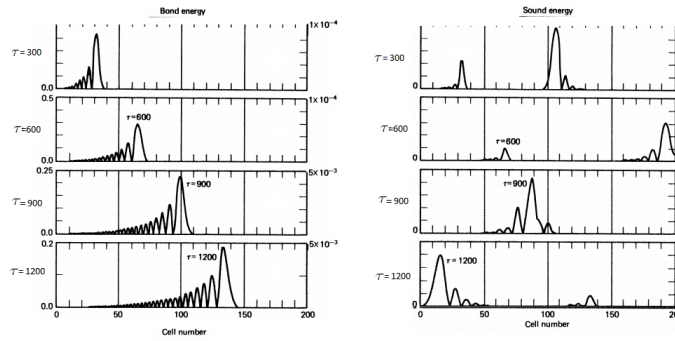


Figura 2.3: A la izquierda energía de enlace (bond energy) y a la derecha energía del sonido (sound energy) para el valor $\chi = 10^{-11} N$

de ellas es una componente rápida, viajando hasta la velocidad del sonido límite, en $n=100$, y otra componente lenta que es la que bloquea a la energía de enlace. ¿Es esta interacción entre la energía de enlace y la parte lenta de la energía de sonido las que constituyen un solitón?

Gracias a la gráfica para los cuatro valores diferentes de τ podemos afirmar que la energía de enlace no es la responsable de que se produzca la forma hiperbólica característica de un solitón.

Ahora vamos a ver como afecta la no linealidad a la dispersión de la energía de enlace. Los resultados anteriores estaban realizados con un valor de $\chi = 10^{-11} N$, ahora representamos dicha dispersión para $\chi=0$ para $\tau=300$ y $\tau=600$ y podemos ver que ambas gráficas, Figura 2.3 y Figura 2.4, son idénticas. Por lo tanto, podemos concluir que la pareja no lineal formada por la energía de la amide-I y la energía de sonido no influyen en esta dispersión. No se ha alcanzado el nivel umbral mínimo, luego los solitones no se han formado.

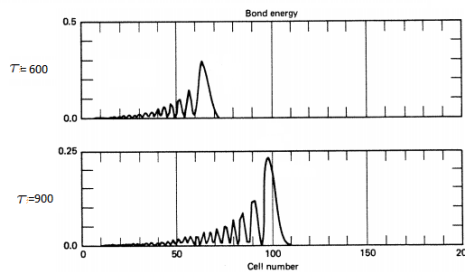


Figura 2.4: Energía de enlace con $\chi=0$.

Sin embargo, si aumentamos el parámetro de no linealidad χ al valor de 10^{-10} Newton el comportamiento dinámico del enlace de energía es sorprendentemente diferente. Como podemos ver en la siguiente Figura 2.5, la energía de enlace ya no se dispersa, sino que se propaga a lo largo de la hélice con un patrón fijo y una velocidad de 0,132. Aquí, claramente se aprecia la presencia de un solitón que permite el transporte de energía de un punto a otro de la α -hélice.

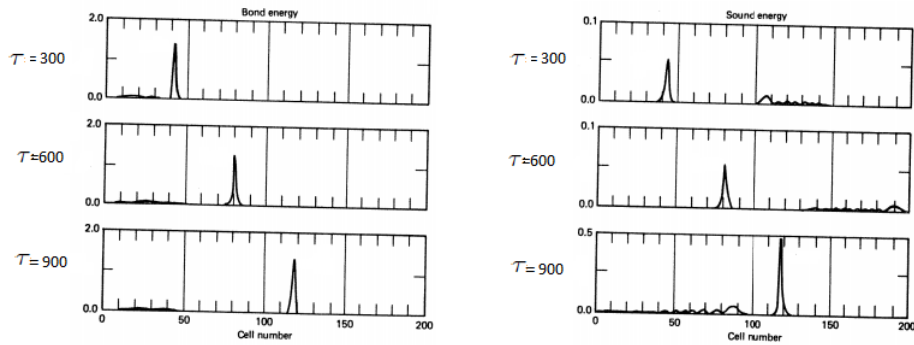


Figura 2.5: Energía de enlace y energía de sonido con $\chi = 10^{-10}$.

Por último vamos a ver que para un valor de $\chi=5 \times 10^{-11}$, Figura 2.6, el solitón no se desarrolla, sino que lo que ocurre es que la energía de enlace emite como explosiones en la energía de sonido. Sin embargo, si aumentamos

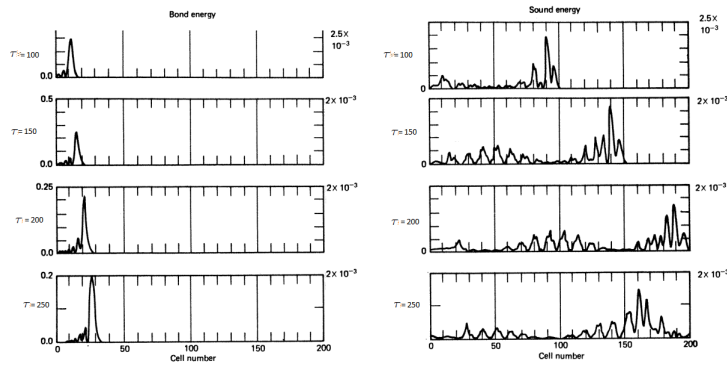


Figura 2.6: Energía de enlace y energía de sonido con $\chi = 5 \cdot 10^{-11}$.

este valor a 7×10^{-11} N como vemos en la Figura 2.7, se ve claramente el comportamiento de un solitón. Luego podemos concluir que el valor mínimo

de umbral para la formación de un solitón para dicho problema de la α -hélice está en $7 \cdot 10^{-11} < \chi < 10^{-10}$.

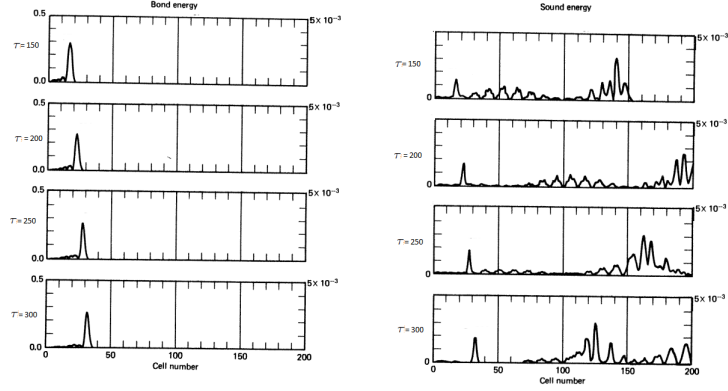


Figura 2.7: Energía de enlace y energía de sonido con $\chi = 7 \cdot 10^{-11}$.

Mediante los estudios numéricos realizados se muestra que con una excitación de la celda inicial, el nivel umbral de la parte no lineal para la formación del solitón es de:

$$\chi > \frac{3}{N} \times 10^{-11} \text{ Newton,}$$

con N el número de cuantos de amide-I introducidos en cada fibra. Cuanto más grande es el número de cuantos introducidos, la probabilidad de formación de un solitón se incrementa, pues la cota para alcanzar el umbral mínimo es menor.

Apéndice A

Soluciones numéricas para EDO y EDP

A.1. Métodos Runge-Kutta

Para la resolución numérica de Ecuaciones Diferenciales Ordinales, EDO, hemos elegido el método más usado de los métodos de un paso para aproximar ecuaciones y sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, el Método de Runge-Kutta [6].

Dado un problema diferencial

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) \\ y(a) = \eta \end{cases}$$

un método de un paso tiene la forma

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \phi(x_n, y_n; h) \\ y_0 = \eta_h. \end{cases}$$

Dentro de los métodos Runge-Kutta podemos diferenciar dos casos, los explícitos y los implícitos.

Estudiando los primeros, vemos que el esquema general del método es

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \phi(x_n, y_n; h) \\ \phi(x, y; h) = \sum_{r=1}^R c_r k_r \\ k_1 = f(x, y) \\ k_r = f(x + h a_r, y + h \sum_{s=1}^{r-1} b_{rs} k_s), \text{ con } r = 2, 3, \dots, R \\ a_r = \sum_{s=1}^r b_{rs} \end{cases}$$

siendo R el número de etapas del método.

Este método realiza en cada etapa una evaluación de la función $f(x, y)$ que puede considerarse como aproximaciones de la derivada $y'(x)$ en diversos puntos y así podemos interpretar $\phi(x, y; h)$ como una media de dichas aproximaciones.

Además, se debe cumplir que en la elección de los parámetros c_i se cumpla $\sum_{r=1}^R c_r = 1$, para que sea consistente. Así, eligiendo distintos valores para c_r , a_r y b_{rs} darán lugar a distintos métodos de Runge-Kutta.

La diferencia con los métodos implícitos radica en que en el cálculo de los coeficientes k_r , dependen no solamente de los k_i anteriores, sino que depende de todos ellos.

A pesar de que éstos últimos son más eficientes que los explícitos, también tienen un coste computacional más alto.

Con ello, hemos elegido para la resolución numérica de la KdV un método Runge-Kutta explícito de cuatro etapas, $R=4$. Que es el siguiente:

$$\begin{cases} u_{i+1} = u_i + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ k_1 = f(t_i, u_i) \\ k_2 = f(t_i + \frac{\Delta t}{2}, u_i + \frac{\Delta t}{2}k_1) \\ k_3 = f(t_i + \frac{\Delta t}{2}, u_i + \frac{\Delta t}{2}k_2) \\ k_4 = f(t_{i+1}, u_i + \Delta t \cdot k_3). \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

A.2. Transformada Rápida de Fourier

Para la resolución numérica en derivadas parciales, EDP, se pueden usar distintos métodos de aproximación [7]. Empezando por algunos más sencillos como el Método de Líneas, en el que solamente se discretiza una variable; hasta otros más complejos como el Método de Diferencias Finitas en los que todas las variables son discretizadas.

Para la resolución numérica de nuestros problemas hemos decidido usar un método pseudoespectral que usa la Transformada de Fourier o mejor conocido como Fast Fourier Transform, FFT.

Así, una función $u(x)$ definida en \mathfrak{R} , tiene como transformada de Fourier a $\hat{u}(\xi)$ definida como

$$\hat{u}(\xi) = (Fu)(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-i\xi x] u(x) dx, \quad \forall \xi \in \mathfrak{R} \quad (\text{A.2})$$

donde ξ es la variable de Fourier que representa la frecuencia si x es el tiempo o el número de onda si x es el espacio, como en nuestro caso.

Dicha transformada tiene propiedades importantes como la linealidad, diferenciabilidad o que cumple que

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial x}(\xi) = (i\xi)\hat{u}(\xi).$$

Por otro lado, vamos a exponer como se define la Transformada de Fourier Discreta. En este caso, la variable x , se mueve en un entorno finito, esto es $x \in [0, L]$ y se considera el espacio discretizando en una malla, es decir,

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = L$$

Esto es, los puntos de la malla son $x_j = j \cdot h$, con $j = 0, \dots, N$ donde $h = \frac{L}{N}$. Así, la transformada viene definida como:

$$\hat{v}_\xi = (F_N v)(\xi) = h \cdot \sum_{j=1}^N \exp[-i\xi x_j] v_j, \text{ con } \xi = \frac{-N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}. \quad (\text{A.3})$$

También podemos definir su inversa de la forma:

$$v_j = (F_N^{-1} \hat{v})(x_j) = \frac{1}{L} \cdot \sum_{\xi=\frac{-N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} \exp[i\xi x_j] \hat{v}_\xi, \text{ con } j = 1, \dots, N. \quad (\text{A.4})$$

Escrito de forma matricial tenemos:

$$\hat{v} = Bv \quad \text{y} \quad v = B^{-1}\hat{v},$$

con B perteneciendo al conjunto de las matrices inversibles de tamaño $N \times N$. Sin embargo, éste método se mejoró mucho, reduciendo su coste computacional de $O(N^2)$ flops a $O(N \log(N))$ flops. La mejora consiste en aprovechar que los elementos en la matriz están repetidos y reducir así el número de operaciones. Definimos por tanto, la FFT como

$$v_j = \frac{1}{L} \cdot \sum_{\xi=\frac{-N}{2}}^{\frac{N}{2}} c_\xi \cdot \exp[i\xi x_j] \hat{v}_\xi, \text{ con } j = 1, \dots, N. \quad (\text{A.5})$$

con $c_\xi = \frac{1}{2}$ para $\xi = \pm \frac{N}{2}$ y $c_\xi = 1$ en el resto de casos.

Esta transformada es la que hemos usado en la resolución numérica de los problemas en derivadas parciales de los apéndices siguientes.

Apéndice B

Resolución numérica de la KdV mediante Mathematica

En este segundo apéndice desarrollaremos el algoritmo para la resolución numérica de la ecuación KdV mediante el programa *Mathematica*. Esta resolución está basada en los siguientes seis pasos, que usa la Fast Fourier Transform y el método del **Factor integrante** [7].

i) Se escribe la KdV en su forma conservativa, esto es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0.$$

ii) Pasando al espacio de Fourier usando que

$$\hat{u}(k) = (Fu)(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-ikx] u(x) dx, \quad \forall k \in \mathfrak{R}$$

obtenemos que:

$$\hat{u}_t + \frac{i}{2} k \widehat{(u^2)} - ik^3 \hat{u} = 0.$$

iii) Ahora multiplicamos por el factor integrante, $\exp[-ik^3 t]$, teniendo:

$$\exp[-ik^3 t] \hat{u}_t + \frac{i}{2} k \exp[-ik^3 t] \widehat{(u^2)} - ik^3 \exp[-ik^3 t] \hat{u} = 0.$$

iv) Definimos la nueva variable:

$$\hat{U} = \exp[-ik^3 t] \hat{u},$$

y derivando:

$$\hat{U}_t = -ik^3 \hat{U} + \exp[-ik^3 t] \hat{u}_t,$$

por lo tanto, tenemos

$$\hat{U}_t + \frac{i}{2} \exp[-ik^3 t] k \widehat{(u^2)} = 0$$

donde el término lineal desaparece.

v) Escribiendo de forma explícita el término no lineal, tenemos:

$$\widehat{U}_t + \frac{i}{2} \exp[-ik^3 t] k F[(F^{-1}(\exp[ik^3 t] \widehat{U}))^2] = 0.$$

vi) Por último se discretiza el espacio y se resuelve usando métodos para resolver problemas de ecuaciones en derivadas ordinales para espacios discretizados, como los métodos Runge-Kutta (A.1) descrito en el Apéndice A.

El resultado obtenido a partir del programa siguiente es la Figura B.1, en la que vemos como dos solitones chocan y cumple lo explicado anteriormente.

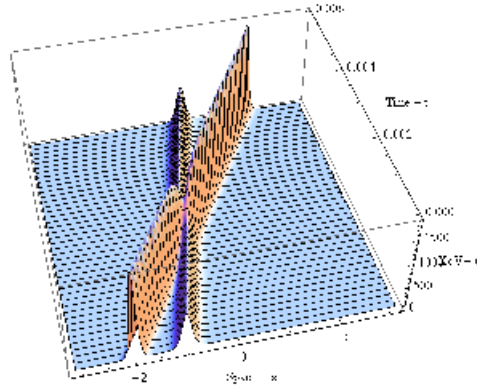


Figura B.1: Resolución numérica de la KdV.

El scrip escrito en lenguaje de programación *Mathematica* usado para las simulaciones, es:

```

Clear["Global`*"]
NN = 256;          (* Divisiones de la malla espacio. *)
MM = NN / 2;      (* Definimos este valor para el vector k. *)
L = 2 Pi;         (* El espacio está definido de -Pi a Pi. *)
Δx = L / NN;      (* Cada incremento de x. *)
Δt = 0.000005;    (* Elegimos este valor para cada paso en el tiempo. *)

(* Elección de las condiciones iniciales. *)
A = 25;
B = 16;
u0[x_] := 3 A^2 (Sech[0.5 (A (x + 2))])^2 + 3 B^2 (Sech[0.5 (B (x + 1))])^2;

T[j_, n_] := T[j, n];
T[j_, 0] = u0[x] /. x → - Pi + j Δx;

(* Ahora vamos a definir el vector k que aparecerá en el factor integrante,
que tiene la forma: k = [0:N/2-1 0 -N/2+1:-1] *)
parte1 = Table[j, {j, 0, MM - 1}];
parte2 = Table[j - NN, {j, MM + 1, NN - 1}];
parte3 = Append[parte1, 0. I];
k = Join[parte3, parte2];

(* Valores que necesitamos definir. *)
ik3 = I * k^3;
tmax := 0.006;
nmax = Round[tmax / Δt]; (* Iteraciones necesarias para alcanzar el tmax. *)

(* Cada x en el que se va a trabajar. *)
x = 2 Pi / NN * Table[j, {j, -NN / 2, NN / 2 - 1}];
(* Resolvemos el EDP usando la FFT y
los EDO mediante Runge-Kutta de cuatro etapas *)
For [n = 1, n ≤ nmax, n++, {

u = Table[N[T[j, n - 1]], {j, 1, NN}];
v = Fourier [u, FourierParameters → {1, -1}];

g = -0.5 I * Δt * k;
EE = Exp[(Δt * ik3) / 2];
EE2 = EE^2;
a = g * Fourier [Re [InverseFourier [v, FourierParameters → {1, -1}]]^2,
FourierParameters → {1, -1}];
b = g * Fourier [Re [InverseFourier [EE * (v + a / 2), FourierParameters → {1, -1}]]^2,
FourierParameters → {1, -1}];
c = g * Fourier [Re [InverseFourier [EE * v + b / 2, FourierParameters → {1, -1}]]^2,
FourierParameters → {1, -1}];
d = g * Fourier [Re [InverseFourier [EE2 * v + EE * c, FourierParameters → {1, -1}]]^2,
FourierParameters → {1, -1}];
v = EE2 * v + (EE2 * a + 2 * EE * (b + c) + d) / 6;
IFdata = InverseFourier [v, FourierParameters → {1, -1}];
For [j = 1, j ≤ NN, j++, {T[j, n] = Re [IFdata[[j]]];}]}];

```

```
(*Representaciones en 3D*)  
Plot1 = Table[{- Pi + Δx j, 0, T[j, 0]}, {j, 1, NN}];  
Do[Plot1 = Join[Plot1, Table[{- Pi + Δx j, Δt k, T[j, k]}, {j, 1, NN}]],  
  {k, 1, nmax, 10}]  
  
ListPlot3D[Plot1, PlotRange → All, Mesh → {0, 40},  
  AxesLabel → {"Space - x", "Time - t", "KdV- u"}]
```

Apéndice C

Resolución numérica de la ecuación NLS mediante Mathematica

En este último apéndice de este proyecto se ha realizado la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger [7].

El proceso que seguiremos consiste en utilizar el **método splitting** para separar la parte lineal de la no lineal de la ecuación.

Asumiendo que $|u(t, x)|^2$ es constante por (1.10), la ecuación de Schrödinger

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q|u|^2 u = 0$$

se escribe como

$$i \hat{u}_t - \xi^2 \hat{u} + q|u|^2 \hat{u} = 0$$

haciendo la transformada de Fourier. Su solución es:

$$\hat{u}(t, k) = \exp[i(-k^2 + q|u|^2)t] \hat{u}(0, k).$$

Finalmente, si aplicamos la Transformada Inversa de Fourier

$$\begin{aligned} u(t, x) &= F^{-1}(\hat{u}(t, k)) = F^{-1}[\exp[i(-k^2 + q|u|^2)t] \hat{u}(0, k)] = \\ &= F^{-1}[\exp(-ik^2 t) \cdot F[\exp(iq|u|^2 t) u(0, x)]] . \end{aligned}$$

Es decir, esta expresión nos indica como pasar de un tiempo t a un tiempo $t + \Delta t$ usando:

$$u(t + \Delta t, x) = F^{-1}[\exp(-i\xi^2 \Delta t) \cdot F[\exp(iq|u|^2 \Delta t) u(t, x)]] .$$

Podemos concluir así que los pasos a realizar para la resolución numérica de (1.9) son:

i) Calcular la expresión $\exp(iq|u|^2\Delta t)u(t,x)$ que es como resolver la parte no lineal de la ecuación.

ii) Pasar al espacio de Fourier, donde la parte lineal de la ecuación tiene una solución sencilla, que podemos describir como dicha transformada de Fourier multiplicada por $\exp(-i\xi^2\Delta t)$.

iii) Por último, volver al espacio inicial utilizando la Transformada de Fourier Inversa.

El resultado obtenido a partir del programa siguiente es la Figura C.1, en la que vemos como dos solitones chocan y cumple lo explicado anteriormente.

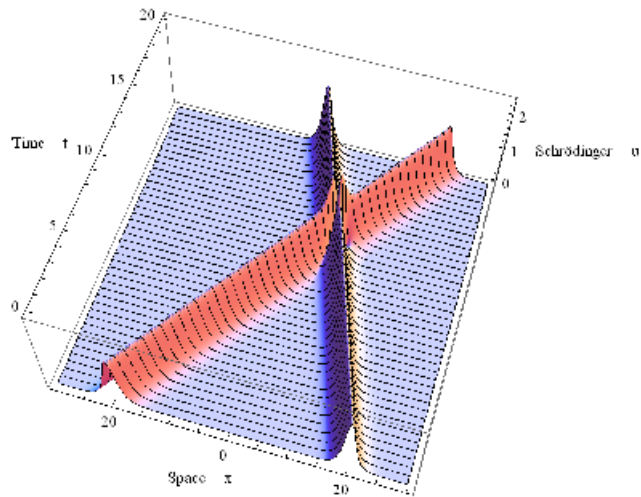


Figura C.1: Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger.

El programa escrito en *Mathematica* es:


```

Clear["Global`*"]
NN = 512; (* Divisiones de la malla espacio. *)
MM = NN / 2; (* Definimos este valor para el vector k. *)
L = 60; (* Espacio está definido de -30 a 30. *)
Δx = L / NN; (* Cada incremento de x. *)
Δt = 0.0001; (* Paso en el tiempo. *)
nfinal = 200000; (* Número de iteraciones. *)
iterstep = 100;
backupiter = nfinal / iterstep;
kfin = 0;

(* Elección de las condiciones iniciales. *)
q = 1;
alpha1 = 1;
speed1 = 2;
alpha2 = 1.5;
speed2 = -1;

u0[x_] :=
  Sqrt[2 alpha1 / q] Exp[I (0.5 speed1 (x + 20))] * Sech[Sqrt[alpha1] (x + 20)] +
  Sqrt[2 alpha2 / q] Exp[I (0.5 speed2 (x - 20))] * Sech[Sqrt[alpha2] (x - 20)];

Aux[j_] := Aux[j];
T[j_, n_] := T[j, n];
T[j_, 0] = u0[x] /. x -> -30 + (j - 1) Δx;
Aux[j_] = N[T[j, 0]];

(* Resolvemos el problema usando la FFT y el metodo splitting *)
For[n = 1, n ≤ nfinal, n++, {
  data = Table[N[Exp[I q Abs[Aux[j]] Abs[Aux[j]] Δt] Aux[j]], {j, 1, NN}];
  Fdata = Fourier[data, FourierParameters -> {1, -1}];
  newFdata = Table[0, {j, 1, NN}];
  For[j = 1, j ≤ MM, j++, newFdata[[j]] = Fdata[[j + MM]];
  For[j = 1, j ≤ MM, j++, newFdata[[j + MM]] = Fdata[[j]];
  Fk[j_] := Piecewise[{{j, j < MM}, {j - NN, j ≥ MM}}];
  Fdatapar1 = Table[N[Fk[j]], {j, 0, MM - 1}];
  Fdatapar2 = Table[N[Fk[j]], {j, MM, NN - 1}];
  Fkdata = Join[Fdatapar2, Fdatapar1];
  ik2 = -4 * Fkdata^2 (Pi / L)^2;
  EE = Exp[Δt * I * ik2];
  Fdata = EE newFdata;
  newFdata = Table[0, {j, 1, NN}];
  For[j = 1, j ≤ MM, j++, newFdata[[j]] = Fdata[[j + MM]];
  For[j = 1, j ≤ MM, j++, newFdata[[j + MM]] = Fdata[[j]];
  IFdata = InverseFourier[newFdata, FourierParameters -> {1, -1}];
  For[j = 1, j ≤ NN, j++, Aux[j] = IFdata[[j]];
  If[Mod[n, backupiter] == 0,
    {kfin = kfin + 1, For[j = 1, j ≤ NN, j++, T[j, kfin] = IFdata[[j]]}];
  kfin;
}];

```

```
(*Representaciones en 3D*)
Plot1 = Table[{-30 + Δx (j - 1), 0, Abs[T[j, 0]]}, {j, 1, NN}];
Do[Plot1 = Join[Plot1, Table[
  {-30 + Δx (j - 1), Δtbackupiter k, Abs[T[j, k]]}, {j, 1, NN}]], {k, 1, kfin}]

ListPlot3D[Plot1, PlotRange → All, Mesh → {0, 40},
  AxesLabel -> {"Space - x", "Time - t", "Schrödinger - u"}]
```

Bibliografía

- [1] Mathematica-<http://www.wolfram.com/mathematica/>Stephen Wolfram
- [2] R.Eiseberg and R.Resnick, Física cuántica átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas. Ed.Limusa, edición 2012.
- [3] P. S. Lomdahl, What Is a Soliton?, Solitons in Biology, 1984.
- [4] J.M.Whiley and D.W.McLaughlin, On Davydovs α -helix solitons, 1983. (<http://www.http://math.lanl.gov/mac/papers/bio/HMS83.pdf>).
- [5] M.A. G. León, Kinks, Sistemas Integrables y Geodésicas: Solitones en el Modelo Sigma $O(3)$ Lineal, Universidad de Salamanca, 2001.
- [6] E. Sáinz de la Maza, Métodos numéricos II, UPV/EHU.
- [7] V. Muto, Numerical Resolution of Differential Equation, UPV/EHU.

