

RÉPUBLIQUE DU CAMEROUN

Paix-Travail-Patrie

UNIVERSITÉ DE YAOUNDÉ I

CENTRE DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE EN
SCIENCES TECHNOLOGIE ET
GÉOSCIENCES

UNITÉ DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE EN
PHYSIQUE ET APPLICATIONS

BP : 812 Yaoundé

Email : crfd@uy1.uninet.cm



REPUBLIC OF CAMEROON

Peace-Work-Fatherland

UNIVERSITY OF YAOUNDE I

POSTGRADUATE SCHOOL OF
SCIENCE TECHNOLOGY AND
GEOSCIENCES

RESEARCH AND POSTGRADUATE
TRAINING UNIT FOR PHYSICS
AND APPLICATIONS

P.O. Box : 812 Yaounde

Web Site : www.uy1researchstg.cm



GÉNÉRATION, STABILITÉ ET MOBILITÉ DES MODES
LOCALISÉS INTRINSÈQUES DANS LE MODÈLE D'ADN DE
JOYEUX ET BUYUKDAGLI



THÈSE

Présentée et soutenue publiquement en vue de l'obtention du diplôme
de Doctorat/Ph.D de Physique Spécialité : Mécanique, Matériaux et
Structures

Par :

GNINZANLONG Carlos Lawrence

Matricule : 06W190

Master en Physique, Option Mécanique Fondamentale et Systèmes
Complexes

Sous la direction de :

TCHAWOUA Clément

Professeur



RÉPUBLIQUE DU CAMEROUN

Paix-Travail-Patrie

UNIVERSITÉ DE YAOUNDÉ I

CENTRE DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE EN
SCIENCES TECHNOLOGIE ET
GÉOSCIENCES

UNITÉ DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE EN
PHYSIQUE ET APPLICATIONS

BP : 812 Yaoundé

Email : crfd@uy1.uninet.cm



REPUBLIC OF CAMEROON

Peace-Work-Fatherland

UNIVERSITY OF YAOUNDE I

POSTGRADUATE SCHOOL OF
SCIENCE TECHNOLOGY AND
GEOSCIENCES

RESEARCH AND POSTGRADUATE
TRAINING UNIT FOR PHYSICS
AND APPLICATIONS

P.O. Box : 812 Yaounde

Web Site : www.uy1researchstg.cm



**GÉNÉRATION, STABILITÉ ET MOBILITÉ DES MODES
LOCALISÉS INTRINSÈQUES DANS LE MODÈLE D'ADN DE
JOYEUX ET BUYUKDAGLI**



THÈSE

**Présentée et soutenue publiquement en vue de l'obtention du diplôme
de Doctorat/Ph.D de Physique Spécialité : Mécanique, Matériaux et
Structures**

Par :

GNINZANLONG Carlos Lawrence

Matricule : 06W190

**Master en Physique, Option Mécanique Fondamentale et Systèmes
Complexes**

Sous la direction de :

TCHAWOUA Clément

Professeur

GÉNÉRATION, STABILITÉ ET MOBILITÉ DES MODES LOCALISÉS INTRINSÈQUES DANS LE MODÈLE D'ADN DE JOYEUX ET BUYUKDAGLI

THÈSE

Soumise et défendue pour l'obtention du grade de Docteur
en philosophie (PhD) en physique

Specialité : **Mécanique, Matériaux et Structures**

Par

GNINZANLONG Carlos Lawrence

Matricule : 06W190

Master en Physique, Option **Mécanique Fondamentale et Systèmes Complexes**

Sous la direction de

TCHAWOUA Clément

Professeur

©Université de Yaoundé I 2023. Tous droits réservés.

11 juillet 2023

THÈSE présentée par

GNINZANLONG Carlos Lawrence, Matricule : 06W190

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR/PhD EN PHYSIQUE DE L'UNIVERSITÉ DE
YAOUNDÉ I**

Specialité : Mécanique, Matériaux et Structures

Option : Mécanique Fondamentale et Systèmes Complexes

sous le thème :

**GÉNÉRATION, STABILITÉ ET MOBILITÉ
DES MODES LOCALISÉS INTRINSÈQUES
DANS LE MODÈLE D'ADN DE JOYEUX ET
BUYUKDAGLI**

Soutenue publiquement le 20 Juin 2023 devant le Jury composé de :

Président : WOAFO Paul, Professeur, Université de Yaoundé I ;

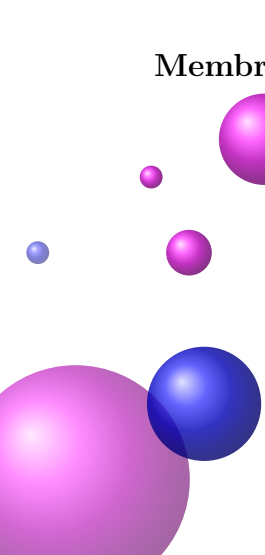
Rapporteur : TCHAWOUA Clément, Professeur, Université de Yaoundé I ;

Membres : NDJAKA Jean-Marie Bienvenu, Professeur, Université de Yaoundé I ;

DJUIDJE KENMOE Germaine, Professeur, Université de Yaoundé I ;

NANA NBENDJO Blaise Roméo, Professeur, Université de Yaoundé I ;

MOUKAM KAKMENI François Marie, Professeur, Université de Buea ;





DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
DEPARTMENT OF PHYSICS

ATTESTATION DE CORRECTION DE LA THÈSE DE DOCTORAT/Ph.D

Nous, Professeur DJUIDJE KENMOE Germaine et Professeur WOAFU Paul, respectivement Examineur et Président du jury de la Thèse de Doctorat/Ph.D de Monsieur GNINZANLONG Carlos Lawrence, Matricule 06W190, préparée sous la direction du Professeur TCHAWOUA Clément, intitulée : « **Génération, stabilité et mobilité des modes localisés intrinsèques dans le modèle d'ADN de Joyeux et Buyukdagli** », soutenue le **Mardi, 20 Juin 2023**, en vue de l'obtention du grade de **Docteur/Ph.D** en Physique, Spécialité **Mécanique Matériaux et Structures**, Option **Mécanique Fondamentale et Systèmes Complexes**, attestons que toutes les corrections demandées par le jury de soutenance ont été effectuées.

En foi de quoi, la présente attestation lui est délivrée pour servir et valoir ce que de droit.

Fait à Yaoundé le.....03 JUL 2023.....

Examineur

Pr DJUIDJE KENMOE
Germaine

Le Président du jury

Pr WOAFU
Paul

Le Chef de Département de Physique



Pr NDJAKA Jean-Marie
Bienvenu

Déclaration

Je déclare que cette thèse intitulé « **GÉNÉRATION, STABILITÉ ET MOBILITÉ DES MODES LOCALISÉS INTRINSÈQUES DANS LE MODÈLE D'ADN DE JOYEUX ET BUYUKDAGLI** » est mon travail original, toutes les sources que j'ai utilisées ou citées ont été indiquées et reconnues au moyen de références complètes, et que ce document n'a été soumis dans aucun autre établissement scolaire.

Carlos Lawrence GNINZANLONG

Matricule : 06W190

Signed : GCL

Date : 11 juillet 2023

Dédicaces

Je dédie cette thèse :

- ☼ À mon père feu **AZAPMO Maurice**.

- ☼ À ma mère Mme **DZOGO Marie Sylviane**. Maman, tu as toujours combattu pour mon succès. Que Dieu le Tout Puissant te bénisse pour tout cela.

- ☼ À mon épouse **DJINSU KOM Ariane Laure** et mes enfants.

- ☼ À mes sœurs **FOLEFACK Huguette Sandrine** et **ATEMKENG Rosy Laure**.

- ☼ À mes frères **NGUELEFACK Clovis** et **LEMOFOUET Mack Bolan**.

Remerciements

Qu'il nous soit permis, au terme de cette thèse qui a commencé depuis l'année académique 2014 – 2015, d'adresser nos sincères remerciements, en général, à tous ceux qui de près ou de loin, nous ont soutenu durant ce parcours.

Et en particulier

- * Au Dieu Tout Puissant pour tout ce qu'il a fait pour moi.
- * À mon directeur de recherche le **Professeur TCHAWOUA Clément** que je remercie à la fois pour n'avoir ménagé aucun effort afin de m'accepter au sein de son unité de recherche depuis 2011, et pour sa rigueur scientifique. Merci Professeur de votre sympathie, de votre bienveillance, de votre disponibilité à encadrer les jeunes. Cela sera à jamais gravé dans mon coeur. Je n'ai rien à vous donner mais que le Dieu Tout Puissant, vous rende à vous, à votre épouse ainsi qu'à tous ceux qui vous sont chers au centuple.
- * Aux membres du Jury qui m'ont fait l'honneur d'accepter de lire et d'évaluer ce travail de thèse de Doctorat/PhD dans l'optique de l'améliorer.
- * Au **Professeur Jean-Marie Bienvenu DJAKA**, Chef du Département de Physique de l'Université de Yaoundé I pour la qualité des enseignements.
- * Aux Professeurs **Timoléon Crépin KOFANE**, **Paul WOAFUO**, **Germaine DJUIDJE KEN-MOE**, **Blaise Roméo NANA NBENDJO**, **François Marie MOUKAM KAKMENI**, **Aurelien KENFACK-JIOTSA**, **Ibraïd Serge FEWO**, **Bertrand BODO**, **Serge Sylvain ZEKENG**, **Thomas BOUETOU BOUETOU**, **Martin SIEWE SIEWE**, pour l'impact positif que vous avez eu sur ma carrière. Je tiens à vous exprimer ma profonde gratitude pour votre contribution collective à ma passion pour la physique. Grâce à vos enseignements et votre engagement envers vos étudiants, j'ai pu développer un intérêt profond et durable pour cette discipline fascinante.
- * Aux éditeurs et reviewers des journaux **Chaos** et **Physical Review E**, pour votre contribution à l'évaluation de mes travaux de recherche. Vos remarques constructives et vos critiques éclairées ont été inestimables pour améliorer la qualité de ma recherche pendant l'évaluation de mes différentes publications.

- * À l'ensemble des enseignants de Département de Physique de l'Université de Yaoundé I pour leur enthousiasme, engagement ainsi que leur connaissance scientifique.
- * Aux aînés du laboratoire **Dr. Alain Togueu Motcheyo**, **Dr. Joel Tchintang** pour l'opportunité que vous m'avez offerte de travailler avec vous et d'apprendre de votre savoir-faire. Vos conseils éclairés et votre soutien continu ont été des éléments clés de mon développement scientifique et personnel.
- * Au **Dr. Thomas Frank NDJOMATCHOUA**, pour ton temps, ton énergie et ta contribution particulière à mon travail de recherche. Je suis honoré de t'avoir comme ami et de pouvoir compter sur ton soutien et ton inspiration.
- * À mes amis **Dr. Igor Simplicite MOKEM**, **Dr. Fabrice Maxime KEPNANG**, **Dr. André-Marie FOPOSSI**, **Dr. Diane Estelle DJOUATSA TEMGOUA**, **Dr. Thierry Landry Michel DJOMO**, **Dr. Duplex Steve MBIEDA**, **Dr. Jules METSEBO**, **Dr. NDE-MANOU B**, **Dr. Lionel ANAGUE**, **Dr. Marcel KEMAYOU WOUAPI**, **Dr. Fernand NAHA**, **Dr. Florent FEUDJIO**, **Dr. Dieudonné ZANGA**, **Dr. Arthur POWANWE**, **M. Zounedou NTIECHE**, **M. Meli Chrispo Sona Metago**, **M. Martial Tefouet** pour les débats édifiants de tous les jours.
- * À mon feu papa **AZAPMO Maurice** et à ma maman **DZOGO Marie Sylviane** pour m'avoir toujours encouragé et avoir toujours cru en moi pendant les moments difficiles et de doutes.
- * À ma tendre épouse **DJINSU KOM Ariane Laure**. Qu'elle trouve ici ma profonde gratitude et mon admiration pour tous les sacrifices consentis.
- * À toutes les personnes qui, de près ou de loin, m'auront prodigué conseils et support tout au long de ces années. Qu'elles trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude.

Table des matières

Déclaration	I
Dédicaces	II
Remerciements	III
Liste des figures	VIII
Liste des tableaux	XIX
Liste des abréviations	XX
Résumé	XXII
Abstract	XXIII
Introduction générale	1
Chapitre 1 Revue de la littérature	4
1.1 Introduction	4
1.2 L'ADN en Biologie	4
1.2.1 Structure statique de l'ADN	5
1.2.2 Structure dynamique de l'ADN	8
1.3 Modélisation de la dynamique de l'ADN en Physique	14
1.3.1 Modèle d'Ising	15
1.3.2 Les modèles Hamiltonien non linéaires de l'ADN	16
1.4 Motivation et problématique de cette thèse	30
1.5 Conclusion	36
Chapitre 2 Modèle et méthodologie	37
2.1 Introduction	37
2.2 Modélisation mathématique du modèle d'ADN de J.B	37
2.2.1 L'équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue (ESNLDE)	38
2.2.2 Instabilité modulationnelle discrète	40
2.2.3 Méthode directe de génération des modes localisés et étude de leurs stabilités	41
2.2.4 Stabilité orbitale du mode localisé	43
2.2.5 Mobilité des breathers discrets	48
2.3 Effets de l'environnement et de l'impureté sur le modèle d'ADN de JB	51

2.3.1	Modélisation mathématique du modèle d'ADN de J.B en présence des forces dissipatives et de la radiation externe	51
2.3.2	Analyse linéaire en l'absence de la dissipation et du forçage périodique	52
2.3.3	Génération des breathers discrets par la méthode de séparation de la dynamique spatiale et temporelle	52
2.3.4	Génération des breathers discrets par la méthode de continuation de la limite anti-continue : effets de la dissipation et du forçage périodique	53
2.3.5	Effets d'une impureté dans la dynamique globale du modèle d'ADN de JB sous influence des forces dissipatives et excitatrices	54
2.4	Effet de la longue portée sur la dynamique du modèle d'ADN de JB	56
2.4.1	Analyse du mode linéaire	58
2.4.2	Analyse du mode non linéaire	59
2.4.3	Solution discrète exacte et analyse de la stabilité	61
2.4.4	Mobilité du mode localisé : résonance avec le mode des phonons	62
2.5	Techniques de simulation numérique	63
2.5.1	La méthode d'approximation par les moindres carrés	64
2.5.2	La méthode de Newton-Raphson	64
2.5.3	La méthode de Gauss-Newton	65
2.5.4	Les méthodes de Runge-Kutta	66
2.5.5	La méthode de Tir	68
2.5.6	Techniques numériques permettant de caractériser un système dynamique	69
2.6	Conclusion	71
Chapitre 3 Résultats et discussions		73
3.1	Introduction	73
3.2	Effets de la fréquence des phonons sur les coefficients de l'ESNLDE	73
3.2.1	Analyse de l'instabilité modulationnelle	74
3.2.2	Génération des breathers et multibreathers discrets et analyse de leurs stabilités	78
3.2.3	Mobilité des breathers et multibreathers discrets	86
3.2.4	Discussion	90
3.3	Effets de l'environnement et de l'impureté sur le modèle d'ADN de JB	91
3.3.1	Breather discret généré par séparation de la dynamique spatiale et temporelle .	91
3.3.2	Breather discret généré par continuation de la limite anti-continue	93
3.3.3	Effets de l'impureté sur la dynamique de l'ADN	97
3.3.4	Discussion	101
3.4	Effet de la longue portée sur la dynamique du modèle d'ADN de JB	105
3.4.1	Analyse du mode linéaire	105
3.4.2	Analyse du mode non linéaire	106
3.4.3	Solution discrète exacte et analyse de la stabilité	115
3.4.4	Mobilité des breathers discrets construits	120
3.4.5	Discussion	123
3.5	Conclusion	124

Conclusion générale	126
Annexes	129
Annexe A Étapes intermédiaires pour l'obtention de l'ESNLDE	129
Annexe B Norme et Hamiltonien de l'ESNLDE	131
B.1 Calcul de la norme	131
B.2 Calcul du Hamiltonien	132
Annexe C Détails des calculs sur la MEH	135
C.1 Équation algébrique vérifiée par $B_{0,n}$ pour $H = 1$	135
C.2 Systèmes d'équations obtenus par la MEH pour $H > 1$	136
Annexe D Expression de la matrice tronquée de Hill de l'équation Eq. (2.71)	138
Annexe E Étapes permettant l'obtention de l'équation de SNL cubique	140
Bibliographie	142
Liste des travaux	153

Liste des figures

Figure 1	Schéma annoté d'une cellule animale [panel (a)], végétale [panel (b)] montrant la localisation de la molécule d'ADN dans le noyau. Images tirée du site https://fr.khanacademy.org/science/high-school-biology/hs-cells/hs-plant-vs-animal-cells	5
Figure 2	Vue schématique de la structure double hélice de l'ADN : (a) : de l'ADN au chromosome, en passant par les histones et nucléosomes, téléchargée à partir du site https://fr.2021outletonline.ru ;(b) : modèle simplifié montrant les différents constituant (composition chimique) de l'ADN. Images tirée du site https://parlonssciences.ca	6
Figure 3	Formules chimique et représentation géométrique des quatre bases azotées : (a) : adénine, (b) : thymine, (c) : guanine, (d) : cytosine. Panels (e)&(f) : correspondance entre bases azotées avec mise en exergue des liaisons hydrogènes (courbes de couleur bleue).	7
Figure 4	Panel (a) : différentes formes (A, B, Z) adoptées par la molécule d'ADN [9]. Panel (b) : Formes d'ADN triple (ou ADN H). le schéma de gauche est l'ADN triple de type $DNA : DNA : DNA$, tandis que celui de droite est du type $DNA : DNA : PNA$ [10].	8
Figure 5	Vue schématique du processus de réplication de l'ADN : (a) : molécule mère de l'ADN, (b) : séparation du double brin sous l'action de l'hélicase, (c) : recombinaison progressive des molécules filles, (d) : molécules filles identiques à la molécule mère, (e) : processus global de réplication montrant les enzymes y intervenant. Images téléchargées à partir du lien https://forums.futura-sciences.com/biologie/665877-replication.html	10
Figure 6	Différence structurelle entre l'ADN et l'ARN. Image téléchargée à partir du lien https://fr.vecteezy.com/art-vectoriel/88822-adn-et-vecteurs-d-arn	11
Figure 7	Processus de transcription de l'ADN en ARN. Panel (a) : Portion d'ADN devant être transcrite ; (b) : Localisation du site promoteur par l'ARN-pol ; (c) : déroulement et ouverture localisée de la double hélice d'ADN par l'ARN-pol ; (d) : lecture du message contenu dans l'ADN et formation de l'ARNm. Images téléchargées à partir du lien https://www.nagwa.com/fr/explainers/918139172415/	12
Figure 8	Différence structurelle entre l'ADN et l'ARN. Image téléchargée à partir du lien https://fr.vecteezy.com/art-vectoriel/88822-adn-et-vecteurs-d-arn	12

Figure 9	Influence de la température sur la dénaturation $[(a) \rightarrow (b) \rightarrow (c) \rightarrow (d) \rightarrow (e) \rightarrow (f)]$ et sur la renaturation $[(a) \leftarrow (b) \leftarrow (c) \leftarrow (d) \leftarrow (e) \leftarrow (f)]$ de la molécule double hélice d'ADN.	13
Figure 10	Localisation des onze (11) angles de torsion caractérisant la dynamique du complexe sucre-phosphate [4, 6].	14
Figure 11	Modèle d'Ising d'un segment d'ADN.	15
Figure 12	Analogie mécanique de la double spirale d'ADN modélisée par deux chaînes linéaires de pendule (les bases azotées) relié par des ressorts (représentant le squelette sucre-phosphate) [28].	17
Figure 13	(a) : Modélisation de la double hélice d'ADN par des filaments élastiques. (b) : Double brins d'ADN du panel (a) selon le modèle de Yakushevich. Les bases azotées y sont représentées sous forme de disque. (c) : Détails supplémentaire sur la paire de base azotée située au site n du panel (b), montrant les points particuliers B_1 et B_2 spatialement séparés d'une distance ℓ , les angles de torsion $\theta^{(1)}$ et $\theta^{(2)}$ par rapport à la position d'équilibre de chaque base azotée de rayon r , distant de ℓ_0 l'une de l'autre [32].	19
Figure 14	(a) : Fragment du modèle composite de la double chaîne d'ADN. La dynamique de chaque mode de la chaîne est faite au moyen de quatre (04) degré de liberté : deux (02) degré de liberté $(\theta_{n,1}, \theta_{n,2})$ pour chaque groupe du complexe acide phosphorique-sucre, et deux (02) degré de liberté $(\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2})$ pour chaque base azotée. (b) : Détails d'une cellule de la chaîne. Chaque base azotée étant capable de roter autour du carbone C_1 de son sucre correspondant, modélisé sur le graphe par le point $B_{n,1}$ [39].	20
Figure 15	(a) : Représentation simplifiée de la double hélice d'ADN selon le modèle de Peyrard Bishop . Les cercles de couleur verte (respectivement de couleur bleue) représentent les nucléotides tandis Les ressorts de couleur noire représentent l'interaction harmonique entre nucléotides du même brin, tandis que ceux de couleur rouge modélisent l'interaction non linéaire entre nucléotide des brins opposés. (b) : Représentation de l'interaction non linéaire modélisé par le potentiel de Morse $V_M[y_n]$, montrant l'état lié/ouvert de la molécule d'ADN. . .	23
Figure 16	(a) : Représentation simplifiée de la double hélice d'ADN selon le modèle de Barbi, Cocco et Peyrard [70]. La n -ième paire de bases azotées est repérée par sa coordonnée radiale r_n et angulaire φ_n . Les paires de bases voisines appartenant à un même brin sont reliées entre elles par des tiges élastiques dont la longueur à l'équilibre est ℓ_0 . R_0 , θ_0 et h sont les paramètres du modèle dont les valeurs sont déduites de la géométrie de la forme B de l'ADN. (b) : Représentation plane des cellules du rang n et $n - 1$ du panel (a) montrant le choix des variables.	26

Figure 17	Représentation tridimensionnelle [panel (a)] et plane [panel (b)] des deux formes de l'énergie d'interaction d'empilement $\mathcal{W}(y_n - y_{n-1})$ entre paires de bases azotées selon le modèle d'ADN de JB [77]. Panel (c) : distance moyenne $\langle y \rangle$ entre les bases d'une même paire en fonction de la température. Les symboles montrent le résultat du calcul par la méthode de l'intégrale de transfert d'une séquence homogène à la limite thermodynamique pour le modèle harmonique de PB [Eq. (1.23)] (croix), le modèle anharmonique de DPB [Eq. (1.25)] (carrés) et le modèle de JB [Eq. (1.38)] (cercles). La courbe continue est celle obtenue par dynamique moléculaire pour une séquence homogène de 2399 paires de bases en utilisant le modèle de JB [77].	31
Figure 18	Illustration d'une impureté localisée sur un seul site [panel (a)], et d'une série d'impuretés localisées sur trois sites [panel (b)].	34
Figure 19	Liaisons hydrogène entre paire de bases azotées mettant en exergue l'existence d'un moment dipolaire issu de la distribution des charges partielles [133]. . .	35
Figure 20	Illustration de l'interaction longue portée entre le nucléotide placé au site n et les nucléotides des sites $n \pm 1, n \pm 2, n \pm 3, n \pm 4, \dots$	35
Figure 21	(a) : Intersection du cycle limite d'une solution période $\tilde{\mathbf{Y}}_0$ avec le plan $\Sigma_{\mathbf{p}}$, (b) : évolution du cycle limite suite à la perturbation $\tilde{\delta}\mathbf{y}$	44
Figure 22	Multiplicateurs de Floquet (quadruplets et paires) traversant le cercle unité dans le plan complexe, révélant la stabilité/l'instabilité d'une solution périodique ainsi que les bifurcations du point limite ($P.L$), du doublement de période ($D.P$) et de Hopf secondaire ($H.S$) [153].	46
Figure 23	Illustration des profils des modes fortement localisés centrés sur un site [panel (a)] et sur deux sites [panel (b)].	49
Figure 24	Variation des coefficients η, P_1, Q_2 et du produit $P_1 \times Q_2$ de l'équation Eq. (2.10) en fonction de ω_b . Le cercle de couleur cyan du panel (a) indexe la valeur $\omega_{b,0} = \omega_{b,1} \sqrt{1 + \frac{\alpha^2 \omega_g^2}{2\alpha^2 \omega_g^2 + 3k_4}}$ pour laquelle $\eta \approx 0$. Les lignes en interrompus de couleur rouge et verte correspondent aux fréquences singulières $\omega_{b,1}$ et $\omega_{b,2}$, dont les expressions sont données à l'équation Eq. (3.1).	74
Figure 25	Diagramme de stabilité/instabilité (zone de couleur blanche/bleue) dans le plan (q, Q) pour $\omega_b = 0.8071$ [panel (a)], $\omega_b = 1$ [panel (b)]. Panel (c) : effet de Q sur $\Sigma(q, Q)$ pour différentes valeurs de ω_b et pour $q = 0.2\pi$. Panels (d) [$Q = 0.3\pi$] et (f) [$Q = 0.55\pi$] : zones de stabilité (hachurées en blanc) et d'instabilité (hachurées en bleue) dans le plan (q, ω_b) . Panel (e) : influence de ω_b sur $\psi_{0,cr}$ en fonction de Q , pour $q = 0.2\pi$. Lorsque cela était nécessaire, la valeur de $ \psi_0 $ a été fixée à $\psi_0 = 0.003 > \psi_{0,cr}$	75

- Figure 26** Évolution temporelle de la distribution de l'énergie $H_n(t)$ d'une onde plane perturbée avec un choix des paramètres n'induisant pas l'IM ($Q = 0.8\pi$, $q = 0.16\pi$, $\chi_0 = 0.005$ et $|\psi_0| = 2 \times 10^{-5}$) aux panels (a) et (b) obtenu pour $t = 0s$ et $t = 390,4ps$ respectivement. (c) : phénomène d'IM visualisé à l'instant $t = 390,4ps$ pour $Q = 0.205\pi$, $q = 0.16\pi$, $\chi_0 = 0.005$ et $|\psi_0| = 0.14$. Le panel (d) montre l'évolution spatio-temporelle de l'IM de l'énergie du système donnée par l'équation Eq. (1.37) pour des paramètres suivants : $\psi_0 = 0.135$, $q = 0.16\pi$, $Q = 0.205\pi$, $\chi_0 = 0.005$ ($\chi_0 \ll 1$). 76
- Figure 27** Évolution temporelle de toutes les composantes spatiales du spectre de Fourier, obtenu pour les paramètres suivants : (a) : $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.014$; (b) : $q = 0.46\pi$, $\psi_0 = 7 \times 10^{-5}$; (c) : $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.08$; (d) : $q = 0.08\pi$, $\psi_0 = 0.08$. Pour tous ces panels, $\chi_0 = 0.001$ et $Q = 0.205\pi$ 77
- Figure 28** (a) : Évolution temporelle de la valeur maximale de l'amplitude du spectre de Fourier pour différentes valeurs de ψ_0 avec $q = 0.46\pi$. Les panels (b) et (c) obtenus respectivement pour $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.014$ et pour $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.08$ montrent l'influence des différents vecteurs d'ondes sur les amplitudes d'ondes modulées. Il en est du même du panel (d) obtenu pour $q = 0.08\pi$, $\psi_0 = 0.08$. Pour tous ces panels $\chi_0 = 0.001$ et $Q = 0.205\pi$ 78
- Figure 29** (a) : carte d'existence de la solution triviale u_n^0 en fonction des paramètres (μ, ω_b) et solution soliton u_n de l'équation algébrique Eq. (2.22) obtenue après correction par NR. Ces solutions viennent respectivement des zones **B** [panel (b) : $\mu = 0.05996$, $\omega_b = 1$], **A** [panel (c) : $\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$] et **C** [panel (d) : $\mu = 0.0995$, $\omega_b = 0.631$] du panel (a). 79
- Figure 30** Représentation dans l'espace (q, ω) de Fourier des solutions obtenues par l'algorithme de NR : panel (a) : ($\mu = 0.0995, \omega_b = 0.631$); panel (b) : ($\mu = 0.05996, \omega_b = 1$); panel (c) : ($\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071$). La courbe en interrompu de couleur cyan est celle de la relation de dispersion donnée par l'équation Eq. (2.61). Panel (d) : densité de puissance spectrale de la paire de base située au site $n_0 = N/2$ des solutions de la figure 29. La zone colorée en gris représente le mode des phonons dont la valeur minimale est $\omega_{min} = \omega_g$ et la valeur maximale est $\omega_{max} = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2^2}$, tandis que la zone de couleur blanche représente les bandes interdites (inférieure avec $\omega < \omega_{min}$ et supérieure avec $\omega > \omega_{max}$) du système. Les courbes en bleu, rouge et noir sont obtenues respectivement pour ($\mu = 0.05996, \omega_b = 1$), ($\mu = 0.0995, \omega_b = 0.631$) et ($\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071$). 80
- Figure 31** Stabilité dynamique [panels (b), (d) et (f)] des différents modes localisés [panels (a), (c) et (e)] issus respectivement des zones **A**, **B** et **C** de la figure 29(a). Les autres paramètres (μ, ω_b) sont ceux des panels (b), (c) et (d) de la figure 29. 81
- Figure 32** Croquis mettant en exergue le processus de transcription en plusieurs sites d'un même brin d'ADN [5, 6]. 81

Figure 33	Multisolitons des paires de bases oscillants en opposition de phase, solution de l'équation algébrique Eq. (2.22) avec $\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$ [panels (a), (c) et (e)] ainsi que leurs stabilités dynamiques correspondantes [panels (b), (d) et (f)].	82
Figure 34	Multisolitons des paires de bases oscillants en phase, solution de l'équation algébrique Eq. (2.22) avec $\mu = 0.05996$, $\omega_b = 1$ [panels (a), (c) et (e)] ainsi que leurs stabilités dynamiques correspondantes [panels (b), (d) et (f)].	83
Figure 35	Multisolitons mixte des paires de bases, solution de l'équation algébrique Eq. (2.22). Les paramètres sont les suivants : panel (a) de la gauche vers la droite $(\mu_1, \omega_{b,1}) = (-0.0715, 0.8071), \forall n \in [1, n_0]$, $(\mu_2, \omega_{b,2}) = (0.05996, 1), \forall n \in [n_0, 2n_0]$ avec $n_0 = 100$; panel (c) de la gauche vers la droite $(\mu_1, \omega_{b,1}) = (0.0995, 0.631), \forall n \in [1, n_{0,1}]$, $(\mu_2, \omega_{b,2}) = (-0.0715, 0.8071), \forall n \in [n_{0,1}, n_{0,2}]$ et $(\mu_3, \omega_{b,3}) = (0.05996, 1), \forall n \in [n_{0,2}, N]$, avec $(n_{0,1}, n_{0,2}) = (67, 132)$. Le panel (b) [respectivement (d)] donne le spectre des valeurs propres du multisoliton mixte obtenu au panel (a) [respectivement (c)].	84
Figure 36	Variation de l'amplitude [panel (a)] et de la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (b)] du mode localisé en fonction de μ pour différentes valeurs de ω_b . Panels (c) [$\omega_b = 0.8071$] et (d) [$\omega_b = 0.05996$] : décroissance de la distance minimale ℓ_δ entre pics consécutifs des différent solitons générés en fonction de la fréquence μ	84
Figure 37	Propagation temporelle des solitons/multisolitons solutions de l'équation Eq. (2.1). Les paramètres (μ, ω_b) sont ceux des figures 35, 34 et 33.	85
Figure 38	Propagation temporelle et stabilité orbitale sur une période $T_b = 1/f_b$ des solutions périodiques de l'équation Eq. (2.1). Panel (a) : $\mu = 0.05996$, $\omega_b = 1$, $f_b = 0.220858895706$; panel (b) : $\mu = 0.0995$, $\omega_b = 0.631$, $f_b = 0.226993865031$; panel (c) : $\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$, $f_b = 0.239263803681$	86
Figure 39	Variation de la norme [panel (a)] et de l'énergie [panel (b)] du mode localisé centré sur 1-site et sur 2-sites en fonction de la fréquence μ . Le panel (c) montre l'évolution de l'énergie du mode A et du mode B en fonction de la norme, tandis que le panel (d) donne la variation de la barrière de Peierl-Nabarro en fonction de μ . Pour tous ces panels, $\omega_b = 1$	87
Figure 40	Propagation spatio-temporelle des modes A [panel (a)] et (B) [panel (b)], mettant en exergue le développement de l'instabilité du mode B après un temps $\tau \approx 1000$, tel que le montrent les ondes instables de couleur rose du panel (b). Les panels (c) et (d) illustrent respectivement l'évolution temporelle du centre de masse [donné par l'équation Eq. (2.98b)] et de la pseudo-largeur [donnée par l'équation Eq. (3.3)] des modes $\psi_n^{(A)}$ et $\psi_n^{(B)}$. L'évolution temporelle des grandeurs conservées telles que la norme [calculée à partir de l'équation Eq. (2.11)] et le hamiltonien [calculé à partir de l'équation Eq. (2.12)] est obtenue aux panels (e) et (f) respectivement. Pour tous ces panels, $\omega_b = 1$ et $\mu = 0.06839$	88

Figure 41	Vitesse moyenne du breather discret initialement localisé sur 1-site pour des bases azotées oscillants en opposition de phase ($\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071$) et en phase ($\mu = 0.05996, \omega_b = 1.0$) en unité de paires de bases par picoseconde, en fonction du kick ϖ	88
Figure 42	Propagation spatio-temporelle de l'énergie [donnée par l'équation Eq. (1.37)] des breathers et multibreathers discrets pour des paires de bases oscillant en phase [panels (a), (c) et (e) avec $\omega_b = 1, \mu = 0.05996, \varpi = 1.3$] et pour celles oscillant en opposition de phase [panels (b), (d) et (f) avec $\omega_b = 0.8071, \mu = -0.0715, \varpi = -1.6$].	89
Figure 43	Propagation spatio-temporelle de l'énergie [donnée par l'équation Eq. (1.37)] montrant la collision entre breathers et multibreathers discrets se propageant en sens contraire pour $\omega_b = 0.8071, \mu = -0.0715, \varpi = \pm 1.6$ [panels (a) – (d)] et pour $\omega_b = 1, \mu = 0.05996, \varpi = \pm 1.3$ [panels (e) – (f)].	90
Figure 44	Panel (a) : Solutions réelles de l'équation algébrique Eq. (2.68) représentées dans le plan (k_0, ϕ_0) . Dans la zone hachurée en gris délimitée par $k_{0cr}^- = -0.0653$ et $k_{0cr}^+ = 0.0056$, cette équation n'admet pas de solution réelle. Le panel (b) montre la variation de la période du breather du ML des différentes zones I^\pm, III du panel (a) en fonction de ϕ_0 . La zone hachurée en gris dans ce panel (b) représente la localisation du mode des phonons.	92
Figure 45	Profil du breather discret pris respectivement dans la branche I^- [panel (a), avec $k_0 = -0.8425$ et $\phi_0 = 0.6546$] et dans la branche I^+ [panel (d), avec $k_0 = 0.0267$ et $\phi_0 = -0.4915$], ainsi que leur stabilité de Floquet donnée respectivement aux panels (b) et (e). Les puissances spectrale de ces BDs sont représentées sur les panels (c) et (f) où la zone hachurée en gris est la localisation des modes phonons, avec $\omega_{max} = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2}$	93
Figure 46	(a) : Évolution de la valeur maximale du module des multiplicateurs de Floquet λ en fonction de la fréquence ω_b du BD en l'absence de l'excitation externe. Carte de stabilité des BDs en fonction des paramètres F_0 et Ω du forçage périodique pour $\omega_b = 0.8$ [panel (b)] et $\omega_b = 0.757$ [panel (c)]. Les zones de couleur bleue sont celles des BDs stables tandis que celles de couleur rouge sont des zones où les BDs sont instables. $\Gamma = 0$ pour tous ces panels.	94
Figure 47	Profils des BDs obtenus (panels de gauche), ainsi que leurs évolutions spatio-temporelle suivi de leurs puissances spectrales (panels de droite), avec $\omega_b = 0.8$ [panels (a) et (b) : $F_0 = 0$; panels (c) et (d) : $F_0 = 0.75$] et $\omega_b = 0.75$ [panels (e) et f : $F_0 = 0$; panels (g) et (h) : $F_0 = 0.75$]. Pour tous ces panels, $\Gamma = 0$. Les figures à l'intérieur des panels (a), (c), (e) et (g) montrent les multiplicateurs de Floquet projetés sur le cercle unité.	95
Figure 48	Profils des BDs ainsi que leurs stabilités orbitales, obtenus sous influence combinée de la dissipation et du forçage périodique [(a) : $\omega_b = 0.8$; (d) : $\omega_b = 0.757$]. Les panels (b), (c), (e) et (f) montrent l'influence du coefficient de viscosité ν et Ω sur la stabilité de ces MLs. Pour tous ces panels, $\Omega = 2\omega_b, F_0 = 0.06, \Gamma \approx 1.95 \times 10^{-4}$	96

- Figure 49** Panel (a) : influence du nombre d’harmoniques sur l’épine dorsale de résonance, (b) : amplitude extrême de la dynamique d’une paire de bases découplées en fonction de la fréquence Ω . Les courbes en traits correspondent aux solutions analytiques données par l’équation Eq. (2.76), tandis que celles en cercle sont obtenues en résolvant numériquement l’équation Eq. (2.71). Panel (c) : influence de F_0 sur les courbes de résonance et sur leur stabilité orbitale, avec les zones de couleur bleue stables et celles de couleur rouge instables. Panel (d) : illustration des zones instables de l’amplitude de résonance par projection des valeurs propres de la matrice de monodromie sur le cercle unité. Panels (e) et (f) : convergences des valeurs propres issues de la matrice tronquée de Hill (voir équation Eq. (D.9) de l’annexe D) par rapport à celles obtenues au moyen de la matrice de monodromie. 98
- Figure 50** Diagramme de bifurcation d’une paire de bases découplées [panel (a)], ses exposants de Lyapunov correspondant [panel (b)] ainsi que l’influence du nombre de périodes de la réponse du système [panel (c)] en fonction de F_0 . Panels (d) : intersection des portraits de phase obtenus respectivement pour $F_0 = 5.78$ (courbe de couleur bleue de période 1T), $F_0 = 6.5$ (courbe de couleur rouge de période 2T), $F_0 = 6.87$ (courbe de couleur rose de période 4T) avec le plan de Poincaré \mathcal{P} localisé en $Y = 1$ (zone rectangulaire de couleur verte). Panel (e) : illustration du comportement chaotique de la paire de bases azotées dans le portrait de phase, avec $F_0 = 7.4$. Panel (f) : carte 2D montrant la distribution du nombre de périodes du système en fonction de F_0 et Ω 100
- Figure 51** Bassins de stabilité dans le plan (F_0, μ) délimitant le comportement périodique/quasi-périodique ou chaotique du réseau lorsque l’impureté localisée en n_0 , a respectivement les potentiels de Morse $V_{M,1} = 0.8D(e^{-0.8ay_n} - 1)^2$ [panel (a)] et $V_{M,2} = 1.2D(e^{-1.2ay_n} - 1)^2$ [panel (d)]. Les panels (b) et (c) donnent respectivement le diagramme de bifurcation ainsi que l’exposant de Lyapunov correspondant donné par l’équation Eq. (3.7) en fonction de μ pour $F_0 = 8.0$ et $V_M = V_{M,1}$. Il en est de même des panels (e) et (f) obtenu pour $V_M = V_{M,2}$. 102
- Figure 52** Évolution spatio-temporelle suivi des exposants de Lyapunov correspondants, montrant le comportement chaotique et régulier d’un réseau constitué de $N = 31$ paires de Bases azotées couplées entre-elles en présence d’une impureté. Panels (a) et (b) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 0.8(a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.215(a, D)$; panels (c) et (d) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = (a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.215(a, D)$; panels (e) et (f) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.2(a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 0.688(a, D)$; panels (g) et (h) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.378(a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.2(a, D)$. Ces coefficients du potentiel de Morse sont pris à partir des figures 51(b) et 51(e). 103
- Figure 53** Relation de dispersion linéaire ω en fonction du vecteur d’onde $k_0 \in [-\frac{\pi}{\ell}, +\frac{\pi}{\ell}]$, pour différentes valeurs du coefficient de longue portée \hat{J} : (a) : $\hat{J} = 0$; (b) : $\hat{J} = 0.048$; (c) : $\hat{J} = 0.053$; (d) : $\hat{J} = 0.063$; (e) : $\hat{J} = 0.1$. Le panel (d) montre la variation de la bande des phonons en fonction de \hat{J} 106

- Figure 54** Carte donnant la variation du couplage dipôle-dipôle critique \hat{J}_{cr} en fonction de k_0 ainsi que les différents signes de la vitesse de groupe v_g [panel (a)] et du produit PQ [panel (b)]. 107
- Figure 55** Évolution spatio-temporelle du breather dark se propageant avec une vitesse de groupe positive [panel (a)]. Panels (b) et (c) : comparaison entre la solution analytique [équation Eq. (3.11)] et la solution numérique [obtenue en résolvant l'équation Eq. (2.79) par RK5] à des instants $\tau = 2000$ et $\tau = 10000$ respectivement. Panel (d) : TFD-2 du signal obtenu au panel (a) dans l'espace (k_0, ω) où la courbe en trait interrompu de couleur verte est obtenue à partir de l'équation Eq. (2.82) et la ligne de couleur bleue est celle de l'équation Eq. (2.97), avec $\mathcal{V} \approx +0.0204$, $k_c = 0.735\pi$ et $\omega_c \approx 1.4695$. Pour tous ces panels, $\hat{J} = 0.02$ 109
- Figure 56** Évolution spatio-temporelle du breather dark se propageant avec une vitesse de groupe négative [panel (a)]. Panels (b) et (c) : comparaison entre la solution analytique [équation Eq. (3.11)] et la solution numérique [obtenue en résolvant l'équation Eq. (2.79) par RK5] à des instants $\tau = 300$ et $\tau = 600$ respectivement. Panel (d) : TFD-2 du signal obtenu au panel (a) dans l'espace (k_0, ω) où la courbe en trait interrompu de couleur verte est obtenue à partir de l'équation Eq. (2.82) et la ligne de couleur bleue est celle de l'équation Eq. (2.97), avec $\mathcal{V} \approx -0.2541$, $k_c = 0.3325\pi$ et $\omega_c \approx 1.5531$. Pour tous ces panels, $\hat{J} = 0.442$ 109
- Figure 57** Évolution spatio-temporelle du breather [panel (a)] et comparaison entre la solution analytique et numérique [panel (b)] à l'instant $\tau = 1000$ pour $\hat{J} = 0.02$, $k_0\ell = 0.45\pi$. Panel (c) : zoom de la solution numérique du panel (b) à l'instant $\tau = 4000$ et pour $n \in [1, 250]$. Les chiffres (1) et (2) du panel (c) indexent les ondes quasi-linéaires de très faibles amplitudes se propageant en sens contraire par rapport au breather indexé par le chiffre (3). Le panel (d) est la TFD-2 du signal dynamique obtenu au panel (a), où la courbe en vert est la relation de dispersion, tandis que les lignes sont obtenues par la formule $\omega^{(p)} = \omega_c^{(p)} + \mathcal{V}^{(p)}(k_0 - k_c^{(p)})$ [$p = 1, 2, 3$] avec $k_c^{(1)} = -0.45\pi$, $\omega_c^{(1)} \approx 1.448$, $\mathcal{V}^{(1)} \approx -2.4551 \times 10^{-2}$ [ligne interrompue de couleur bleue]; $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(2)} \approx 1.477$, $\mathcal{V}^{(2)} \approx -8.8176 \times 10^{-3}$ [ligne interrompue de couleur rouge]; $k_c^{(3)} = -k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(3)} = \omega_c^{(1)}$, $\mathcal{V}^{(3)} = -\mathcal{V}^{(1)}$ [ligne en trait fort de couleur bleue]. Afin d'observer clairement les ondes (1) et (2) au panel (d), elles ont été magnifiées par un facteur de 500. 110

- Figure 58** Évolution spatio-temporelle du breather [panel (a)] et comparaison entre la solution analytique et numérique [panel (b)] à l'instant $\tau = 1000$ pour $\hat{J} = 0.442$, $k_0\ell = 0.4337\pi$. Panel (c) : zoom de la solution numérique du panel (b) à l'instant $\tau = 400$ et pour $n \in [130, 400]$. Les chiffres (1) et (2) du panel (c) indexent les ondes quasi-linéaires de très faibles amplitudes se propageant en sens contraire par rapport au breather indexé par le chiffre (3). Le panel (d) est la TFD-2 du signal dynamique obtenu au panel (a), où la courbe en vert est la relation de dispersion, tandis que les lignes sont obtenues par la formule $\omega^{(p)} = \omega_c^{(p)} + \mathcal{V}^{(p)}(k_0 - k_c^{(p)})$ [$p = 1, 2, 3$] avec $k_c^{(1)} = -0.4337\pi$, $\omega_c^{(1)} \approx 1.467$, $\mathcal{V}^{(1)} \approx +0.2562$ [ligne interrompue de couleur bleue]; $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(2)} \approx 1.212$, $\mathcal{V}^{(2)} \approx +8.3632 \times 10^{-2}$ [ligne interrompue de couleur rouge]; $k_c^{(3)} = -k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(3)} = \omega_c^{(1)}$, $\mathcal{V}^{(3)} = -\mathcal{V}^{(1)}$ [ligne en trait fort de couleur bleue]. Afin d'observer clairement les ondes (1) et (2) au panel (d), elles ont été magnifiées par un facteur de 75. 111
- Figure 59** Variation de la vitesse \mathcal{V} du breather en fonction du coefficient de l'interaction longue portée \hat{J} . La vitesse analytique est la vitesse de groupe v_g [voir Eq. (2.83)], tandis que la vitesse numérique est obtenue au moyen de l'équation Eq. (2.98) après résolution de l'équation Eq. (2.79) par RK5. Panel (a) : $\hat{J} \in [0, \hat{J}_{cr}(k_0)[$, panel (b) : $\hat{J} \in]\hat{J}_{cr}(k_0), 0.45]$. Pour tous ces panels, $k_0\ell = 0.4337\pi$. 112
- Figure 60** Panels (a) et (c) : transformation de Fourier [dans le plan (k_0, ω)] des ondes (1), (2) et (3) observée aux figures 57(c) et 58(c), combinée aux lignes d'intersections du breather (3) avec le mode des phonons. Les panels (b) et (d) sont des moyennes des résultats obtenus aux panels (a) et (c) dans la base des vecteurs d'ondes. 113
- Figure 61** Propagation spatio-temporelle montrant la collision entre des breathers ayant des vitesses de groupe positives et/ou négatives. panel (a) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [obtenu pour $k_1^0\ell = 0.620\pi$, $v_{g_1} = 8.072 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 8.327 \times 10^{-3}$] et le breather $Y_n^{(2)}(\tau)$ [obtenu pour $k_2^0\ell = 0.454\pi$, $v_{g_2} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{max_2} = 1.602 \times 10^{-2}$]. Panel (b) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [$k_1^0\ell = 0.344\pi$, $v_{g_1} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 1.788 \times 10^{-2}$.] et le breather $Y_n^{(2)}(\tau)$ [$k_2^0\ell = 0.152\pi$, $v_{g_2} = -1.277 \times 10^{-2}$, $A_{max_2} = 1.035 \times 10^{-2}$]. Panel (c) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [$k_1^0\ell = 0.454\pi$, $v_{g_1} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 1.602 \times 10^{-2}$] et le breather $Y_n^{(2)}(\tau)$ [$k_2^0\ell = 0.344\pi$, $v_{g_2} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{max_2} = 1.788 \times 10^{-2}$]. Panel (d) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [$k_1^0\ell = 0.454\pi$, $v_{g_1} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 1.602 \times 10^{-2}$.], le $Y_n^{(2)}(\tau)$ [$k_2^0\ell = 0.400\pi$, $v_{g_2} = 0$, $A_{max_2} = 1.721 \times 10^{-2}$] et le breather $Y_n^{(3)}(\tau)$ [$k_3^0\ell = 0.344\pi$, $v_{g_3} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{max_3} = 1.788 \times 10^{-2}$]. Pour tous ces panels, la valeur du coefficient de longue portée est fixée à $\hat{J} = 0.053$ et il y a également concordance entre la solution analytique et la solution numérique. 114

- Figure 62** Propagation spatio-temporelle montrant la collision entre des breathers dark et pulse se propageant dans un même sens [panel (a) : de la gauche vers la droite, avec $k_1^0\ell = 0.466\pi$, $v_{g1} = 6.7 \times 10^{-3}$; $k_2^0\ell = 0.802\pi$, $v_{g2} = 3.0 \times 10^{-3}$]; [panel (b) : de la droite vers la gauche, avec $k_1^0\ell = 0.106\pi$, $v_{g1} = -8,6 \times 10^{-3}$; $k_2^0\ell = 0.27\pi$, $v_{g2} = -1.32 \times 10^{-2}$] ou en sens contraire [panel (c) : $k_1^0\ell = 0.735\pi$, $v_{g1} = 8.0 \times 10^{-3}$; $k_2^0\ell = 0.2887\pi$, $v_{g2} = -8.0 \times 10^{-3}$]. Le panel (d) montre la comparaison entre la solution analytique [courbe en trait de couleur noire] et la solution numérique [cercle de couleur bleue] de la courbe obtenue au panel (c) aux instants $\tau = 2000$, $\tau = 6000$ et $\tau = 10000$. Pour tous ces panels, $\hat{J} = 0.054$. 115
- Figure 63** Breathers discrets corrigés ainsi que leurs spectres de Floquet projetés sur le cercle unité, obtenues pour $k_0\ell = 0$ [(a) : $\omega_b = 1.40$, $\hat{J} = 0$, (b) : $\omega_b = 1.40763$, $\hat{J} = 0.011115$], pour $k_0\ell = \pi$ [(c) : $\omega_b = 1.417$, $\hat{J} = 0.1$, (d) : $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$], pour $k_0\ell = 0.0275\pi$ [(e) : $\omega_b = 1.426$, $\hat{J}_{cr} = 0.0161$, (d) : $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$] et pour $k_0\ell = 0.474\pi$ [(f) : $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J}_{cr} = 0.05874$]. 117
- Figure 64** Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret stable [panel (a) : $\omega_b = 1.426$, $\hat{J}_{cr} = 0.0161$, $k_0\ell = 0.0275\pi$] et du breather discret instable [panel (c) : $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J}_{cr} = 0.05874$, $k_0\ell = 0.474\pi$] obtenu respectivement aux figures 63(e) et 63(f). Les panels (b) et (d) montrent la TFD-2 des solutions $Y_n(\tau)$ des panels (a) et (c), où la ligne en trait fort de couleur bleue est obtenue pour $\omega = \omega_b$ tandis que celle en interrompu de couleur verte est la relation de dispersion ω de l'équation Eq. (2.82). 118
- Figure 65** (a) : Familles de breathers discrets corrigés en fonction de \hat{J} , obtenues pour $k_0\ell = 0$. Panel (b) : stabilité de Floquet des solutions obtenues au panel (a). Influence du coefficient de longue portée \hat{J} sur la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (c)] et sur l'énergie calculée à partir de l'équation Eq. (2.78) [panel (d)]. 119
- Figure 66** (a) : Familles de breathers discrets corrigés en fonction de \hat{J}_{cr} , obtenues pour $k_0 \in k_{0,cr}$. Panel (b) : stabilité de Floquet des solutions obtenues au panel (a). Influence du coefficient de longue portée \hat{J} sur la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (c)] et sur l'énergie calculée à partir de l'équation Eq. (2.78) [panel (d)]. 119
- Figure 67** (a) : Familles de breathers discrets corrigés en fonction de \hat{J} , obtenues pour $k_0\ell = \pi$. Panel (b) : stabilité de Floquet des solutions obtenues au panel (a). Influence du coefficient de longue portée \hat{J} sur la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (c)] et sur l'énergie calculée à partir de l'équation Eq. (2.78) [panel (d)]. 120
- Figure 68** (a) : Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret dynamique obtenue par perturbation du breather discret stationnaire ayant des paramètres $k_0\ell = 0$, $\hat{J} = 0$, $\omega_b = 1.40$, avec $\nu = 0.56$. (b) : TFD-2 dans le plan (k_0, ω) de la solution $Y_n(\tau)$ du BDD, où la courbe de couleur rouge est la relation de dispersion, la ligne de couleur noire correspond à $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, avec $\omega_b = 1.40$, $k_c = 0$ et $\mathcal{V} \approx 1.084 \times 10^{-2}$. Les lignes de couleur grises sont obtenues au moyen des équations Eq. (2.100) et (2.101). Le panel (c) [respectivement (d)] est la projection de la TFD-2 dans la base ω 121

Figure 69 (a) : Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret dynamique obtenue par perturbation du breather discret stationnaire ayant des paramètres $k_0\ell = 0.474\pi$, $\hat{J}_{cr}(k_0) = 0.05874$, $\omega_b = 1.4474$, avec $\nu = 0.14474$. (b) : TFD-2 dans le plan (k_0, ω) de la solution $Y_n(\tau)$ du BDD, où la courbe de couleur rouge est la relation de dispersion, la ligne de couleur noire correspond à $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, avec $\omega_b = 1.4474$, $k_c^{(\pm)} = \pm 0.474\pi$ et $\mathcal{V} \approx 1.105 \times 10^{-3}$. Les lignes de couleur grise sont obtenues au moyen des équations Eq. (2.100) et (2.101). Le panel (c) [respectivement (d)] est la projection de la TFD-2 dans la base ω 122

Figure 70 (a) : Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret dynamique obtenue par perturbation du breather discret stationnaire ayant des paramètres $k_0\ell = \pi$, $\hat{J} = 0.2$, $\omega_b = 1.35$, avec $\nu = 0.27$. (b) : TFD-2 dans le plan (k_0, ω) de la solution $Y_n(\tau)$ du BDD, où la courbe de couleur rouge est la relation de dispersion, la ligne de couleur noire correspond à $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, avec $\omega_b = 1.35$, $k_c = \pi$ et $\mathcal{V} \approx -1.01 \times 10^{-2}$. Les lignes de couleur grise sont obtenues au moyen des équations Eq. (2.100) et (2.101). Le panel (c) [respectivement (d)] est la projection de la TFD-2 dans la base ω 122

Liste des tableaux

Tableau 1	Caractéristiques des trois types de double hélice d'ADN A , B et Z [9].	7
Tableau 2	Rôle des enzymes intervenant lors du processus de réplication de l'ADN illustré à la figure 5.	9
Tableau 3	Différence entre angle de torsion d'un nucléotide de l'ADN- A et de l'ADN- B [4, 6].	15
Tableau 4	Moments dipolaires et pourcentages de caractère ionique associés à différentes liaisons covalentes communes [134].	34
Tableau 5	(A) : Forme générale du tableau de Butcher pour les méthodes de RK; (B) tableau de Butcher pour la méthode classique de RK4.	66
Tableau 6	Tableau de Butcher pour la méthode de <i>Runge-Kutta-Fehlberg</i> . L'estimation de l'erreur est faite au moyen de la formule : $e_{k+1} = \mathbf{X}_{k+1} - \mathbf{X}_{k+1}^* = h \sum_{j=1}^s (b_j - b_j^*) \mathbf{k}_j$ [211].	67
Tableau 7	Tableau de Butcher pour la méthode de <i>Runge-Kutta-5</i> [212].	68
Tableau 8	Valeurs numériques des paramètres de la molécule d'ADN [77, 78].	73

Liste des abréviations

- **ADN** : *Acide DésoxyriboNucléique.*
- **ARN** : *Acide RiboNucléique.*
- **ARN-pol** : *Acide RiboNucléique polymérase.*
- **ARNm** : *Acide RiboNucléique messenger.*
- **RMN** : *Résonance Magnétique Nucléaire.*
- **PB** : *Peyrard-Bishop.*
- **DPB** : *Dauxois-Peyrard-Bishop.*
- **BCP** : *Barbi-Cocco-Peyrard.*
- **PBH** : *Peyrard-Bishop-Holstein.*
- **JB** : *Joyeux et Buyukdagli.*
- **ESNL** : *Équation de Schrödinger Non Linéaire.*
- **BD** : *Breather Discret.*
- **MIL** : *Mode Intrinsèque Localisé.*
- **ML** : *Mode Localisé.*
- **ESNLDE** : *Équation de Schrödinger Non Linéaire Discrète Étendue.*
- **AOR** : *Approximation Onde Rotative.*
- **MBD** : *MultiBreather Discret.*
- **IM** : *Instabilité Modulationnelle.*
- **ESNLD** : *Équation de Schrödinger Non Linéaire Discrète.*
- **LAC** : *Limite Anti-Continue.*
- **NR** : *Newton-Raphson.*
- \mathbb{C} : *Ensemble des nombres complexes.*
- \mathbb{R} : *Ensemble des nombres réels.*
- $\mathfrak{R}_e, \mathfrak{I}_m$: *Partie réelle, Partie imaginaire.*
- **MEH** : *Méthode de l'Équilibrage des Harmoniques.*
- **MAN** : *Méthode Asymptotique Numérique.*
- **BPN** : *Barrière de Peierls-Nabarro.*
- **PPN** : *Potentiel de Peierls-Nabarro.*
- **ILP** : *Interaction Longue Portée.*
- **ASD** : *Approximation Semi-Discrète.*
- **BDD** : *Breather Discret Dynamique.*
- **BDS** : *Breather Discret Stationnaire.*
- **EDO** : *Équation Différentielle Ordinaire.*

- **RK** : *Runge-Kutta*.
- **RK4** : *Runge-Kutta d'ordre 4*.
- **RK5** : *Runge-Kutta d'ordre 5*.
- **RKF** : *Runge-Kutta-Fehlberg*.
- **PVL** : *Problèmes aux Valeurs aux Limites*.
- **EL** : *Exposant de Lyapunov*.
- **MOGS** : *Méthode d'Ortho-normalisation de Gram-Schmidt*.
- **TF** : *Transformation de Fourier*.
- **TFD 1** : *Transformation de Fourier Discrète en dimension 1*.
- **TFD 2** : *Transformation de Fourier Discrète en dimension 2*.
- **DPS** : *Densité de la Puissance Spectrale*.

Résumé

Cette thèse est consacrée au processus de génération des modes intrinsèquement localisés dans la molécule d'ADN. Pour cette fin, nous avons dans un premier temps inventorié des études similaires qui ont déjà été faites dans la littérature, ce qui nous a permis de sélectionner parmi elles, la modélisation Hamiltonienne la plus proche de la réalité physique. En abordant le problème sous un angle nouveau, nous avons montré l'influence de la fréquence fondamentale de l'onde plane non seulement sur les conditions de génération de telles structures, mais également le type du mode localisé généré et de leur stabilité tant bien dynamique que orbitale. Par perturbation du profil initial obtenu, nous avons réalisé la mobilité de ces structures localisées et avons montré qu'elles génèrent des phonons lors de leurs propagations, du fait de la résonance de celles-ci avec la relation de dispersion. Dans un second temps, nous avons pris en compte les effets de la viscosité du milieu et de l'excitation périodique externe dans la dynamique de l'ADN en transformant le Hamiltonien de Joyeux et Buyukdagli sous la forme de Caldirola-Kanai. Dans ces conditions, nous avons montré que les structures localisées existent toujours, moyennant les faibles valeurs de la viscosité du milieu et de l'amplitude du forçage périodique. La stabilité de ces structures localisées sous influence de ces paramètres a été également étudiée. Nous avons également montré qu'une impureté localisée en un site de la molécule peut induire un comportement chaotique ou régulier du réseau tout entier lorsque ces facteurs externes sont pris simultanément. Pour finir, nous avons de nouveau modifié le modèle original de Joyeux et Buyukdagli de tel en sorte que les effets des moments dipolaires soient pris en compte lors de la vibration des liaisons hydrogènes entre les paires de bases azotées. Ces moments dipolaires ont non seulement apporté une interaction longue portée dans la molécule, mais ont également révélé qu'il était toujours possible de localiser de l'énergie dans la molécule, tout en prédisant que ladite énergie pouvait se mouvoir dans les deux sens de la chaîne. Faisant usage d'une méthode d'approximation, une équation d'amplitude a été obtenue ainsi que des solutions approchées du système qui ont corroboré la prédiction faite.

Mots clés : *Modèle d'ADN de Joyeux et Buyukdagli, localisation de l'énergie, mode localisé intrinsèque, stabilité dynamique, stabilité orbitale, mobilité, viscosité du milieu, approximation onde rotative, approximation semi-discrète, moment dipolaire.*

Abstract

This thesis is devoted to the process of generation of intrinsic localized modes in the DNA molecule. For this purpose, we first inventoried similar studies that have already been done in literature, this allowed us to select among them the Hamiltonian model closest to physical reality. Approaching the problem from a new angle, we showed the influence of the fundamental frequency of the plane wave not only on the conditions of generation of such structures, but also the type of generated localized mode, their dynamic and orbital stability. Making use of the perturbation method on the initial profile obtained, we realized the mobility of these localized structures and showed that they radiate phonons during their propagations because of their resonances with the dispersion relation. In a second step, we took into account the effects of viscosity of the medium and external driving in the DNA dynamics by transforming the Joyeux and Buyukdagli Hamiltonian into the Caldirola-Kanai form. Under these conditions, we demonstrated that the localized structures still exist, thanks to the low values of viscosity of the medium and the amplitude of the periodic forcing. The stability of these localized structures under the influence of these parameters was also studied. We also showed that an impurity located at one site of the molecule can induce chaotic or regular behavior of the entire lattice when these external factors are considered simultaneously. Finally, we again modified the original Joyeux and Buyukdagli DNA model so that the effects of dipole moments are taken into account when vibrating hydrogen bonds between nitrogen base pairs. These dipole moments not only brought about a long-range interaction in the molecule, but also revealed that there is still the possibility of energy localization in the molecule, while predicting that the said energy could move in both directions of the chain. Using an approximation method, an amplitude equation was obtained as well as approximate solutions of the system which corroborate the prediction made.

Keywords : *Joyeux and Buyukdagli DNA model, energy localization, intrinsic localized mode, dynamic stability, orbital stability, mobility, medium viscosity, rotative wave approximation, semi-discrete approximation, dipole moment.*

Introduction générale

Devant son émerveillement face à la diversité des espèces animales et végétales qui foisonnent dans son environnement, l'Homme s'est toujours questionné sur les mécanismes qui conduisent à l'émergence d'une telle variété des formes que peut prendre la vie. Ces questionnements lui ont permis après bien de recherches, de déterminer le dénominateur commun à toutes ces espèces : l'acide désoxyribonucléique (ADN) présent dans toutes les cellules. L'ADN est une biomolécule tellement importante et fascinante dont la fonction principale est, de stocker l'information génétique qui sera nécessaire dans la formation des protéines. Depuis que l'on sait que cette molécule de la « vie » encode l'information génétique de tous les organismes vivants tout en assurant par la même occasion leur bon fonctionnement et développement, elle est un sujet d'étude fascinant aussi bien pour les biologistes, biochimistes, chimistes que pour les physiciens. En effet, les processus moléculaires qui permettent de passer de la molécule d'ADN, au fonctionnement de la cellule et à des phénomènes visibles à l'échelle de l'individu entier sont très complexes, intrinsèquement multi-échelles, et ne sont pas toujours évidents à comprendre sans une analyse précise à différentes échelles de grandeur.

La complexité du monde biologique représente depuis toujours l'un des grands défis pour la physique, notamment lorsque celle-ci se propose d'étudier le comportement des systèmes complexes par la modélisation : selon les aspects que l'on veut mettre en évidence dans la description. En effet, étant donné la complexité des fonctions biologiques et l'énorme nombre d'acteurs et de paramètres qui entrent en jeu, un choix différent s'impose pour chaque question posée. En se limitant par exemple au cas particulier de l'ADN pris seul comme « objet biologique », des approches expérimentales, théoriques et numériques très différentes se révèlent indispensables pour cerner la panoplie des phénomènes qui s'y déroulent. C'est en utilisant à cet effet l'approche expérimentale que le généticien Américain James Watson et le physicien Britannique Francis Crick ont élaboré en 1953 [1], la structure de l'ADN admise de nos jours. Cette structure révèle non seulement la composition chimique de l'ADN, mais également ses différentes formes géométrique [1–11]. Depuis lors, l'intérêt pour cette molécule n'a eu de cesse de s'intensifier car, la découverte continue de nouveaux mécanismes biologiques où cet acide nucléique intervient fait que son champ d'étude se renouvelle continuellement.

Des études de plus en plus poussées sur elle ont permis de mettre en évidence une dynamique très complexe de cette macromolécule. En effet, les expériences de spectroscopie d'absorption UV à 260 nm ont apporté des renseignements très importants sur la dénaturation thermique de l'ADN [6, 12, 13]. Il en est de même des expériences d'échanges de protons [14], de résonance magnétique nucléaire (RMN) [15–17] ou Raman [18, 19] qui, ont révélé la présence des états d'ouvertures temporaires (semblables à une respiration) de longue durée de vie en son sein. Ces états d'ouvertures étant

typiques des excitations non linéaires [12], ont été étudiés pour la première fois par Prohofsky et *al.* [20, 21], ce qui a entraîné par la suite la naissance d’une multitude de modélisations mathématiques. Comme modélisation mathématique de la dynamique de l’ADN, figurent les modèles statistiques [22–26] qui, bien que donnant des résultats assez satisfaisant, ne permettent pas de décrire les états intermédiaires entre l’état ouvert et l’état fermé de la molécule comme les modèles Hamiltonien [27–44]. Ces modèles Hamiltonien ont dès lors été longuement utilisés et améliorés dans la littérature, en fonction que les auteurs s’intéressaient au processus de réplication, transcription-traduction de l’ADN [27–39], ou à son processus de dénaturation [40–46, 56–76].

La présente thèse s’inscrit dans la continuité des travaux faits dans la littérature, mais avec un accent particulier sur l’étude des excitations non linéaires. En effet, tout comme cela a été le cas dans le modèle de Englander [28], de Yakushevich [32], de Peyrard-Bishop [44] ou de Peyrard-Bishop-Dauxois [58], nous y menons des investigations sur les conditions d’émergence des structures localisées dans la molécule d’ADN, car elles sont à l’origine de la localisation de l’énergie, et des précurseurs des processus de réplication, transcription-traduction dans un organisme. Étant donné qu’il a été démontré que l’énergie d’interaction d’empilement dans le modèle Hamiltonien d’ADN de Marc Joyeux et Sahin Buyukdagli [77, 78] est en accord avec celle des modèles statistiques (et donc de la réalité physique), quelles peuvent bien être les conditions d’émergence des structures localisées dans ce modèle, lorsque l’accent est mis sur des paramètres non pris en compte dans les précédents travaux ?

Cette thèse est structurée en trois chapitres décrits comme suit :

Dans le premier chapitre, nous faisons une revue de la littérature autour du thème de recherche. Dans ce chapitre, nous présentons l’ADN du point de vue du Biologiste, en mettant en exergue sa structure statique et sa structure dynamique. Nous présentons par la suite la molécule d’ADN telle que vue par le Physicien en énumérant de ce fait, quelques modélisations mathématiques de sa dynamique qui existent dans la revue de littérature. Le chapitre s’achève par la motivation et la problématique de cette thèse.

Le deuxième chapitre est consacré à la présentation des différentes modélisations de la dynamique de l’ADN ainsi que des méthodes mathématiques et numériques utilisées pour répondre à la problématique de cette thèse. Parmi les méthodes analytiques utilisées, nous avons : l’approximation onde rotative et l’approximation semi-discrète pour obtenir l’équation d’amplitude des ondes modulées ; la technique de l’instabilité modulationnelle pour prédire l’existence des structures localisées ; la limite anti-continue pour construire les modes intrinsèquement localisée. La méthode de séparation des variables est également présentée dans ce chapitre pour construire les structures localisées, tout comme la méthode de la balance des harmoniques pour approcher les solutions périodiques. Pour ce qui est des méthodes numériques, nous avons : la méthode de régression linéaire ou méthode des moindres carrés pour approximer les solutions ; la méthode de Newton-Raphson pour la résolution des systèmes algébriques non linéaires ; la méthode de Gauss-Newton pour la résolution des problèmes de moindres carrés non linéaires ; les méthodes de Runge-Kutta pour la résolution des équations différentielles ; la méthode de tir pour la résolution des problèmes aux valeurs aux limites ; la méthode de Floquet pour l’analyse de la stabilité orbitale des solutions périodiques. Les techniques numériques permettant de caractériser les systèmes dynamiques tels que : la séquence temporelle/spatio-temporelle ; l’espace des phases ; le diagramme de bifurcation ; les exposants de

Lyapunov ; la section de Poincaré et les spectres de puissance sont également présentés dans ce chapitre.

Le troisième chapitre quant à lui présente les résultats clés de cette thèse suivis des discussions.

Nous achevons cette thèse par une conclusion générale dans laquelle sont résumés les principaux résultats, ainsi que quelques perspectives pour les futurs travaux.

Chapitre 1

Revue de la littérature

1.1 Introduction

Depuis la découverte de l'Acide Désoxyribonucléique (ADN), celui-ci n'a cessé d'être l'objet d'études de plus en plus poussées aussi bien chez les biologistes, les biochimistes que chez les physiiciens. L'objectif de ces études étant de mieux comprendre son principe de fonctionnement vis-à-vis de son interaction avec son environnement. À cette fin, plusieurs modèles mathématiques ont été développés dans le but de mieux cerner la dynamique de cette macromolécule depuis l'émergence de la problématique sur les relations entre la structure d'une molécule biologique et sa fonction. Le présent chapitre vise à donner dans un premier temps et de façon succincte, quelques notions générales sur la structure de l'ADN, ainsi que les différentes fonctions biologiques qu'elle assure. Puis dans un second temps, nous présenterons quelques modèles mathématiques de l'ADN qui ont été développés dans la littérature afin d'expliquer certaines observations faites sur elle. Ce chapitre est structuré comme suit : à la section §1.2, nous présenterons l'ADN en Biologie, sa structure et ses fonctions. La section §1.3 sera consacrée à une énumération de quelques modèles mathématiques de l'ADN existant dans le domaine de la physique non linéaire. Nous donnerons par la suite à la section §1.4 la motivation ainsi que la problématique de cette thèse, dont les solutions seront présentées aux chapitres suivants. Ce chapitre s'achèvera à la section §1.5 par une conclusion.

1.2 L'ADN en Biologie

L'ADN est un acide nucléique qui contient les informations génétiques permettant le bon fonctionnement de la matière organique. Il est localisé dans le noyau des cellules animales et végétales¹ telle que le montre la figure 1. Cette molécule détient le code chimique hérité de nos parents et dont le rôle est de permettre la fabrication des protéines dont a besoin l'organisme pour son bon fonctionnement. En effet, pour ce qui est de l'espèce humaine, elle est constituée de milliards de cellules qui comportent un noyau renfermant chacun toute l'information génétique. L'information génétique de l'espèce humaine est répartie sur les 46 chromosomes (23 paires). Il est à noter que

1. Notons que la différence entre cellule animale et cellule végétale est que les cellules végétales comportent en plus d'une membrane cellulaire, une paroi cellulaire. Ce qui n'est pas le cas pour les cellules animales qui elles, ont simplement une membrane cellulaire.

l'ADN qui constitue nos chromosomes, porte environ 20000 gènes. Un gène étant une portion d'ADN correspondante à une information génétique particulière. Ce sont eux qui indiquent à chaque cellule son rôle dans l'organisme et, sur leur ordre, elles synthétisent les protéines dont chacune d'elle a un rôle différent à jouer. À titre d'exemple, l'hémoglobine est la protéine servant à transporter l'oxygène dans le sang ; L'actine et la myosine des protéines qui servent à la contraction musculaire. D'autres protéines encore, interviennent pour protéger l'organisme face aux corps étrangers, pour définir la couleur des yeux, la forme du visage, ... C'est dire l'importance que représente cette macromolécule dans le développement de tout organisme vivant.

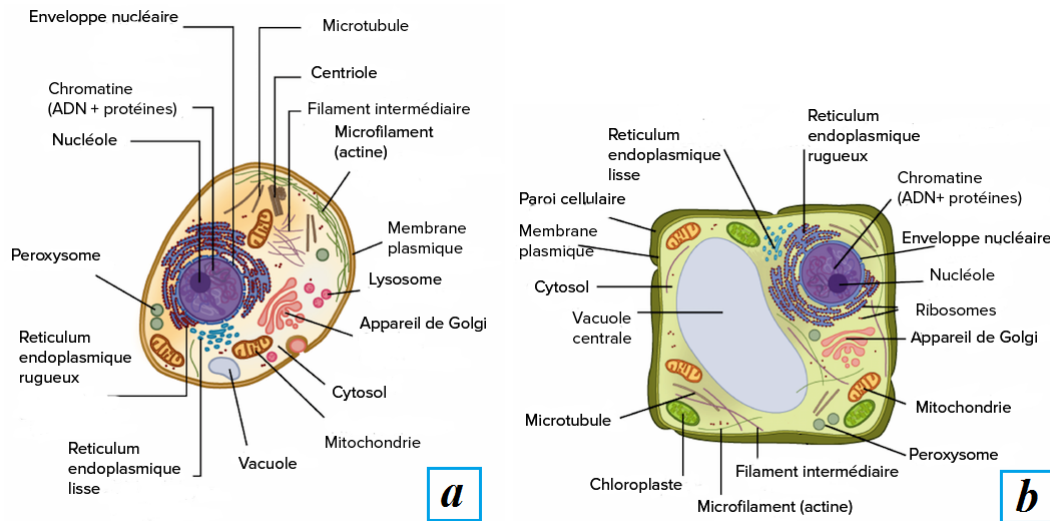


Figure 1: Schéma annoté d'une cellule animale [panel (a)], végétale [panel (b)] montrant la localisation de la molécule d'ADN dans le noyau. Images tirée du site <https://fr.khanacademy.org/science/high-school-biology/hs-cells/hs-plant-vs-animal-cells>.

La figure 2(a) exhibe l'information génétique contenue dans un seul chromosome du noyau d'une cellule animale. C'est une molécule très fine mais aussi très longue. En effet, chaque cellule humaine en contient environ 02 mètres. Toutefois, cette grande longueur est regroupée en paquets dans un noyau qui n'a que quelques microns de diamètre. Notons enfin par rapport à cette figure 2(a) que les histones sont des protéines basiques très conservées autour desquelles s'enroule l'ADN pour former l'unité de base de la chromatine : le nucléosome.

1.2.1 Structure statique de l'ADN

L'ADN comporte deux types de structure dont l'une, statique, est consacrée à sa configuration géométrique et à sa constitution, tandis que l'autre, dynamique, explore les interactions qu'elle peut avoir avec son environnement.

La structure statique de l'ADN admise aujourd'hui a été proposée par Watson et Crick dans les années 1953 [1]. Cette structure révèle que la molécule d'ADN est un long polymère sous forme de double brin entrelacé [voir figure 2(a)&(b)]. Chaque brin est constitué d'une succession de briques élémentaires liées entre elles par des liaisons covalentes appelées nucléotides. Dans chaque nucléotide, on retrouve un groupement phosphate, un sucre en C_5 appelé désoxyribose et une base azotée. L'association de la liaison phosphate-désoxyribose forme le squelette carboné de l'ADN, définissant

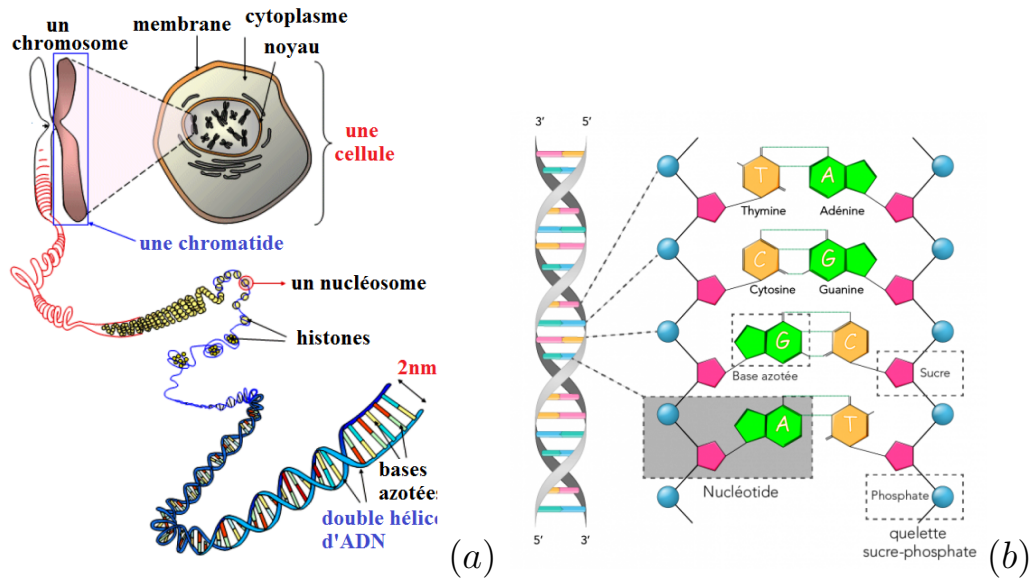


Figure 2: Vue schématique de la structure double hélice de l'ADN : (a) : de l'ADN au chromosome, en passant par les histones et nucléosomes, téléchargée à partir du site <https://fr.2021outletonline.ru> ;(b) : modèle simplifié montrant les différents constituant (composition chimique) de l'ADN. Images tirée du site <https://parlonssciences.ca>.

ainsi l'orientation 5', 3' du brin comme le montre le panel (b) de la figure 2. Les bases qui constituent la molécule d'ADN sont orientées vers l'intérieur du brin et sont perpendiculaire à l'axe du squelette. Elles sont au nombre de quatre (04) à savoir : l'Adénine, la Guanine, la Cytosine, la Thymine, que l'on désigne très souvent par des lettres **A**, **G**, **C**, **T** et dont les formules chimiques détaillées sont données à la figure 3. Ces bases sont regroupées en deux familles distinctes, la famille des bases puriques² (Adénine et Guanine) et la famille des bases pyrimidiques³ (Cytosine et Thymine) [2, 3].

Les deux brins de cette molécule sont de polarités opposées, complémentaires et antiparallèles. Les nucléotides se lient entre les deux brins par des liaisons hydrogènes, conduisant ainsi à la formation d'une paire de bases. L'appariement d'une paire de bases azotées ne se fait pas de façon aléatoire. Chaque base purique est complémentaire à une base pyrimidique. En effet, on retrouve en face d'une Thymine une Adénine qui se lie à elle par deux liaisons hydrogènes, et en face d'une Cytosine une Guanine qui se lie par trois liaisons hydrogènes. Cette complémentarité des paires de base permet de maintenir constant le diamètre de la double hélice à environ $2nm$ [voir figure 2(a)]. Un pas d'hélice est constitué de dix (10) paires de bases et mesure $3.4nm$ [6]. De façon simplifiée, l'ADN peut être grossièrement considéré comme une échelle torsadée (en raison de sa structure en double hélice) dont les montants seraient constitués des groupes phosphate-sucre et dont les barreaux seraient des paires de bases azotées appartenant à chacun des deux brins se faisant face [voir figure 2(a)&(b)].

La succession d'acides nucléiques constitue l'information génétique et on l'appelle structure primaire de l'ADN ou génome, tandis que la liaison des deux brins d'ADN par les liaisons hydrogène traduit la structure dite secondaire de l'ADN. Il existe une structure supplémentaire de l'ADN que l'on appelle structure tertiaire et qui se réfère à la structure en hélice de la chaîne de nucléotides. En

2. Dont la structure est formée d'un noyau purine à deux cycle.

3. Car le noyau qui constitue ces bases est formé d'un noyau pyrimidine à un seul cycle.

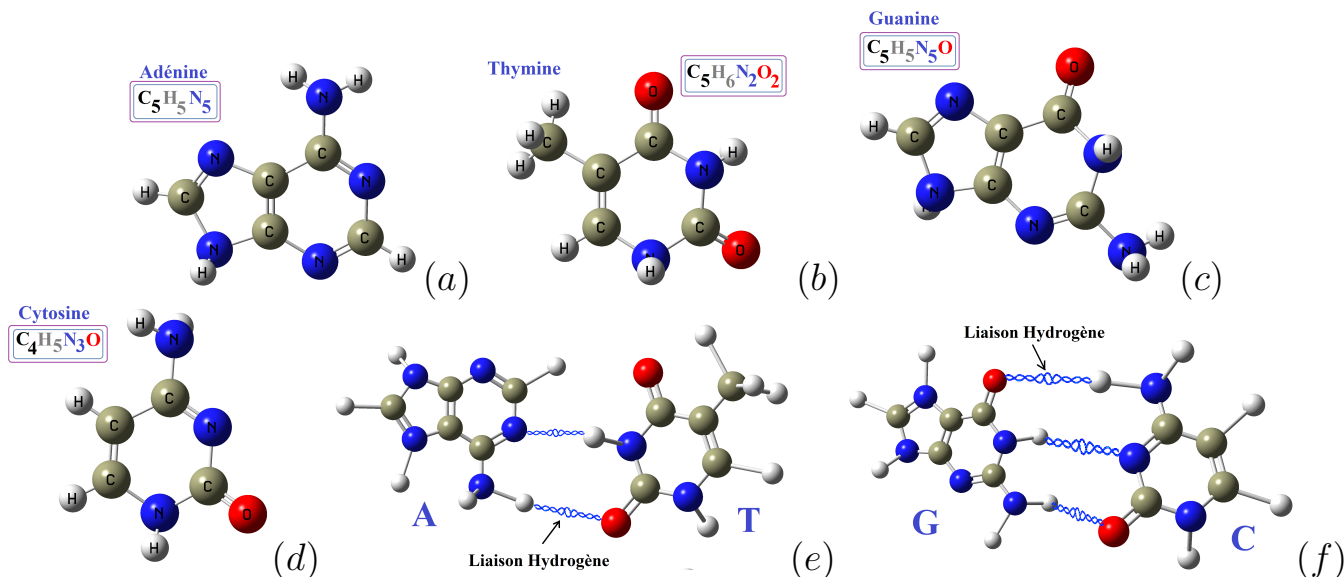


Figure 3: Formules chimique et représentation géométrique des quatre bases azotées : (a) : adénine, (b) : thymin, (c) : guanine, (d) : cytosine. Panels (e)&(f) : correspondance entre bases azotées avec mise en exergue des liaisons hydrogènes (courbes de couleur bleue).

Tableau 1: Caractéristiques des trois types de double hélice d'ADN *A*, *B* et *Z* [9].

	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>Z</i>
Sens de l'hélice	Droite	Droite	Gauche
Pas de l'hélice (Å)	28	34	44
Diamètre de l'hélice (Å)	23	20	18
Nombre de paires de bases par tour de l'hélice	11	10	12
Largeur du grand sillon (Å)	2.7	11.7	2
Profondeur du grand sillon (Å)	13.5	8.5	13.8
Largeur du petit sillon (Å)	11	5.7	8.8
Profondeur du petit sillon (Å)	2.8	7.5	3.7
Angle de torsion par paire de base	32° – 33°	36°	–15° pour CG et –45° pour GC

effet, Il existe plusieurs types d'hélices qui diffèrent par la position relative des paires de bases et leur inclinaison par rapport à l'axe de symétrie de l'hélice. Les conformations les plus souvent rencontrées sont notées *A*, *B* et *Z*. Les premières conformations à avoir été décrites sont celles correspondant aux hélices *A* et *B*, dites hélices droites (car l'hélice tourne autour de son axe dans le sens inverse des aiguilles d'une montre). L'ADN *A* est une forme de la double hélice d'ADN proche de l'ADN *B*. Ses bases nucléiques sont plus inclinées par rapport à l'axe de la double hélice, ce qui entraîne une augmentation du diamètre de la structure et le nombre de paire de bases par unité de longueur de la double hélice. Le diamètre d'un ADN *A* est typiquement de $2.3nm$ (contre $2.0nm$ pour l'ADN *B*) tandis que la double hélice s'allonge en moyenne de $0.24nm$ par paire de bases (contre $0.34nm$ pour l'ADN *B*). Ceci a pour effet d'élargir le grand sillon et de rendre le petit sillon plus étroit.

Notons que l'ADN *B* est celle qui a été découverte par Watson et Crick et, est la forme la plus courante de la double hélice d'ADN constituant le matériel génétique des cellules vivantes [7]. D'autres variantes de la double hélice droite [8] désignée par les lettres successives de l'alphabet

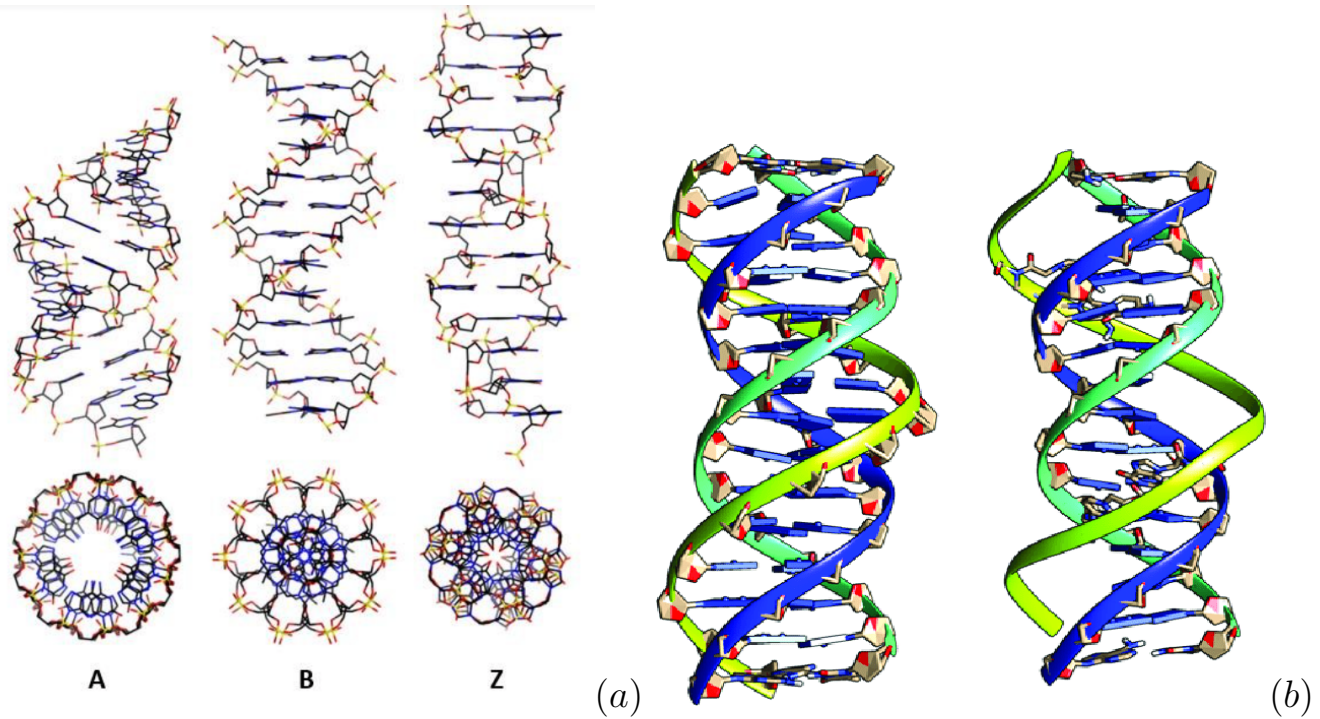


Figure 4: Panel (a) : différentes formes (A, B, Z) adoptées par la molécule d'ADN [9]. Panel (b) : Formes d'ADN triple (ou ADN H). le schéma de gauche est l'ADN triple de type $DNA : DNA : DNA$, tandis que celui de droite est du type $DNA : DNA : PNA$ [10].

existent également, tout comme des ADN à trois brins⁴ [11]. À la différence des formes A et B, la forme Z est une hélice gauche, avec pour motif le dinucléotide (et non plus la paire de bases comme les cas classiques d'ADN A, B, ...). Elle a été découverte récemment et sa structure révèle que son squelette sucre-phosphate zigzague à la surface de l'hélice (d'où son nom). On rencontre généralement cette forme d'ADN-Z dans des conditions très particulières : fortes concentrations de sels en solution, contraintes de torsion à l'état natif... Ce sont, de préférence, les séquences alternées en purines et pyrimidines qui adoptent cette forme Z. La figure 4 donne une représentation simplifiée des ADN A, B, Z et du triplex H.

Cette molécule d'ADN aux différentes formes remplit des fonctions d'une importance capitale, notamment lors du transport du bagage génétique entre les générations. En effet, la vie de tout organisme et sa pérennité de génération en génération dépendent de la stabilité de l'information génétique contenue dans la double-hélice et de sa dynamique. L'ADN est vivement sollicitée lors du cycle cellulaire ainsi que lorsque l'organisme a besoin d'une protéine. Cette sollicitation est matérialisée par des processus importants tels que la réplication et la transcription-traduction.

1.2.2 Structure dynamique de l'ADN

On dénombre à l'échelle cellulaire deux processus biologiques très importants impliquant la molécule d'ADN : la réplication et la transcription-traduction.

4. L'ADN triplex, ou encore ADN triple brin, correspond à l'ADN H dans laquelle trois brins d'ADN s'enroulent l'un autour de l'autre pour former une triple hélice. En effet, une paire de bases Watson-Crick telle que thymine-adénine, notée T-A, peut former un appariement Hoogsteen avec une autre thymine, donnant un triplet de bases noté T-A*T

La réplication de l'ADN

La capacité qu'a l'ADN à se répliquer est l'une des propriétés fonctionnelles des plus importantes qu'elle possède. En effet, lors de la division cellulaire, le matériel génétique que comporte la cellule est copié et dupliqué à l'identique. Ainsi, la réplication de l'ADN est un processus de reproduction à l'identique d'un brin complémentaire. Cette reproduction est plus perceptible lors de la mitose, où une cellule mère à $2n$ chromosomes donne naissance à deux cellules filles ayant également $2n$ chromosomes, identiques entre elles et à la cellule mère.

La réplication débute par la séparation des doubles brins, chaque brin parental étant utilisé comme matrice pour les complémentaires des nucléotides, afin de construire deux nouvelles molécules. Elle se produit dans la direction $5' \rightarrow 3'$ par l'ajout de nouveaux nucléotides au carbone $3'$ du brin nouvellement formé. La réplication de l'ADN débute dans un endroit spécifique de la molécule qu'on appelle origine de la réplication. Cet origine désigne l'emplacement de la réplication active appelé fourche de la réplication. Une fois que la fourche de réplication est établie, l'hélicase rompt les liaisons hydrogène entre les deux brins et sépare la double hélice, moyennant l'action des protéines stabilisantes dont le rôle est d'empêcher le ré-appariement. Cette réplication se produit sous l'action de l'ADN polymérase qui catalyse l'addition des nouveaux nucléotides. Il est à noter que la réplication des deux brins se fait en même temps, l'une utilisant une synthèse continue et l'autre discontinue. La synthèse continue se produit sur le brin parental orienté $3' \rightarrow 5'$, tandis que celle discontinue se produit sur le brin parental orienté $5' \rightarrow 3'$ (appelé brin retardé). Au niveau de ce brin, la réplication se fait par segments sous l'action de l'ADN-primase (qui permet d'ajouter les amorces en avant de l'extrémité $5'$ du brin retardé) et de l'ADN-ligase (permettant d'assurer la liaison des fragments). Une fois le processus terminé on obtient deux copies identiques de la molécule d'ADN répliquée. La figure 5 résume une description un peu plus complète des mécanismes et enzymes mis en jeu durant la réplication.

Tableau 2: Rôle des enzymes intervenant lors du processus de réplication de l'ADN illustré à la figure 5.

Enzyme	Rôle
Hélicase	Déroule et sépare les deux brins d'ADN
ADN gyrase	Atténue la contrainte topologique créée par l'action de l'hélicase
Protéine d'union aux brins monocaténaux	Empêche les deux brins de se re-spiraliser
Primase	Synthétise une amorce d'ADN
ADN polymérase III	Permet d'ajouter des nucléotides d'ADN
ADN polymérase I	Remplace l'amorce par des nucléotides d'ADN
ADN ligase	Relie les fragments de bases répliquées dans le brin retardé
Pince β	Attire l'ADN polymérase sur l'amorce

La transcription-traduction de l'ADN

Un deuxième processus essentiel dont fait partie l'ADN est la transcription. En effet, bien que l'ADN détienne le code génétique, il ne peut pas directement ordonner à une cellule de fabriquer des protéines. Afin de répondre aux besoins de la cellule en protéines, le code génétique contenu dans cette macromolécule d'ADN doit être transcrit en ARN (Acide Ribonucléique). Notons que

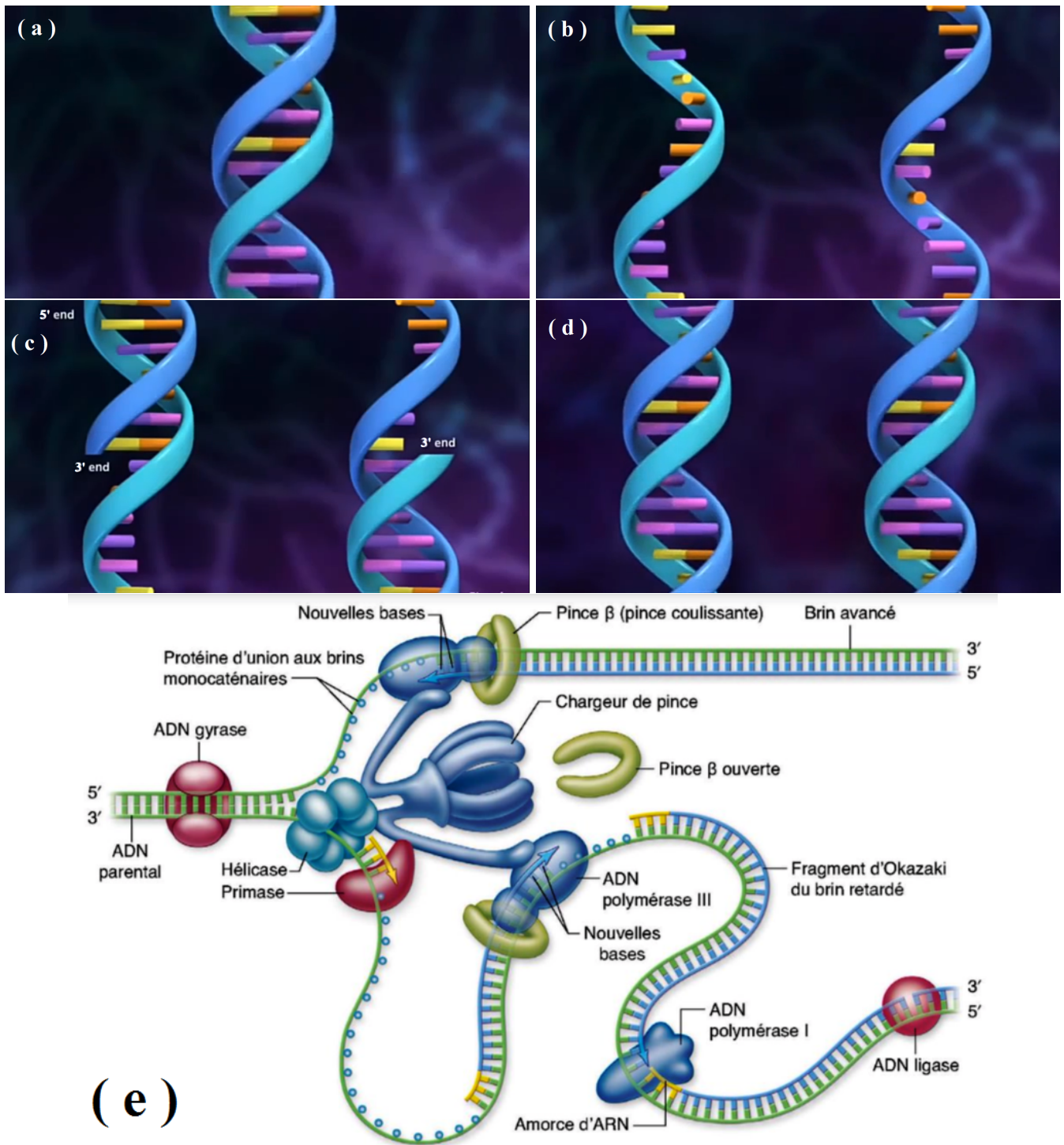


Figure 5: Vue schématique du processus de réplication de l'ADN : (a) : molécule mère de l'ADN, (b) : séparation du double brin sous l'action de l'hélicase, (c) : recombinaison progressive des molécules filles, (d) : molécules filles identiques à la molécule mère, (e) : processus global de réplication montrant les enzymes y intervenant. Images téléchargées à partir du lien <https://forums.futura-sciences.com/biologie/665877-replication.html>.

l'acide ribonucléique est un acide nucléique présent chez pratiquement tous les êtres vivants, et aussi chez certains virus. C'est un acide qui est généralement synthétisé dans les cellules à partir d'un segment d'ADN. Les bases azotées de cette molécule d'ARN sont identiques à celles de l'ADN, exceptée la thymine qui y est remplacée en uracile. Il en est de même du sucre qui, dans l'ARN est le ribose de formule chimique $C_5H_{10}O_5$, au lieu du désoxyribose de l'ADN dont la formule chimique est $C_5H_{10}O_4$.

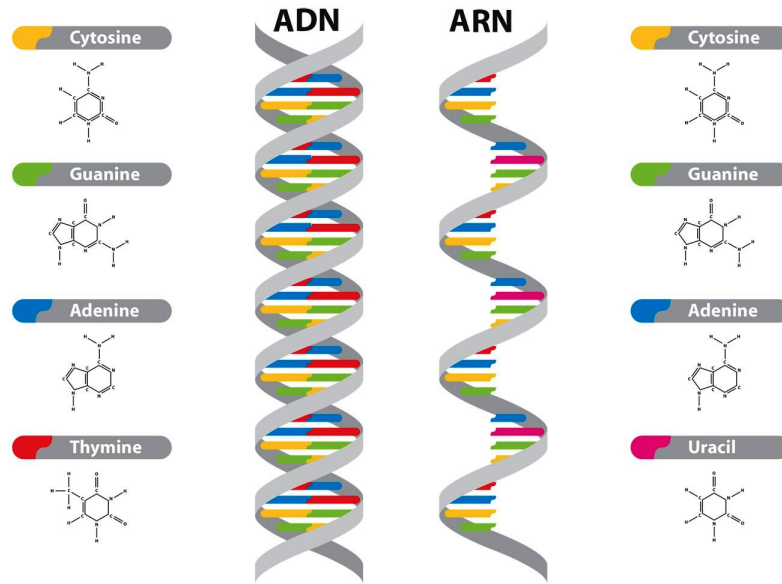


Figure 6: Différence structurelle entre l'ADN et l'ARN. Image téléchargée à partir du lien <https://fr.vecteezy.com/art-vectoriel/88822-adn-et-vecteurs-d-arn>.

La transcription est initiée par un moteur moléculaire appelé ARN polymérase (ARN-pol). Ce moteur moléculaire se fixe sur une région particulière de l'ADN située en amont de la partie codante. Cette région de fixation est appelée site promoteur. En partant du promoteur, l'ARN-pol avance sur le gène en écartant localement les deux brins de façon à former une bulle d'une dizaine de paires de base : c'est la bulle de transcription qui se refermera une fois l'ARN-pol éloigné. Au fur et à mesure que l'ARN-pol lit le gène, il produit un brin complémentaire que l'on appelle l'ARN-messager (ARNm). L'ARN-pol arrête la transcription dès qu'il rencontre une séquence particulière qui se trouve à la fin du gène, et qui lui donne l'ordre de s'arrêter. L'ARN messager formé va ainsi sortir du noyau cellulaire [cas des cellules eucaryotes] une fois sa maturation atteinte pour être traduit dans le cytoplasme au moyen des ARN de transfert, en vue de former les polypeptides qui se transformeront plus tard en protéines. Notons que le processus de transcription-traduction s'effectue simultanément pour les cellules procaryotes [qui ne possèdent pas de noyau cellulaire]. La figure 7 donne certaines étapes de ce processus de transcription.

Une fois que l'ARN messagé est formé dans le noyau, celui ci migre dans le cytoplasme de la cellule pour y être traduit par la machinerie cellulaire. Cette machinerie cellulaire ayant pour but de fabriquer des acides aminés nécessaires à la formation des polypeptides et des protéines, tel que le montre la figure 8. Ainsi, la transcription est un processus de lecture de l'information génétique contenue dans l'ADN pour la fabrication des protéines.

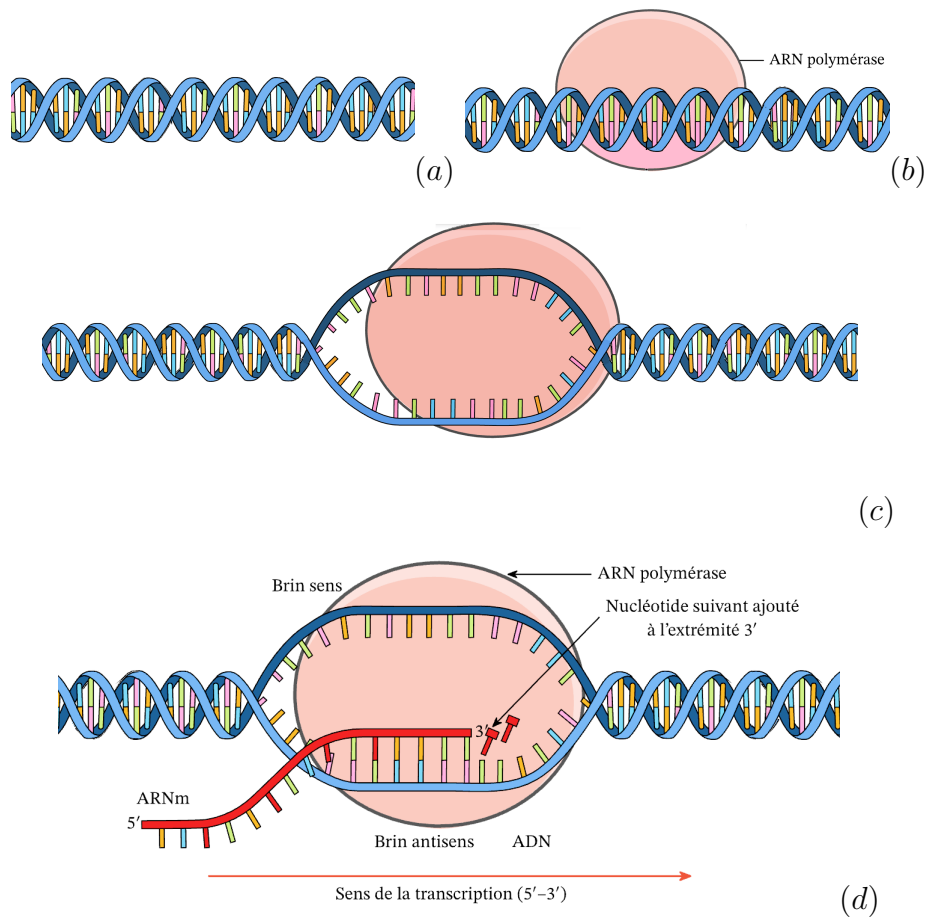


Figure 7: Processus de transcription de l'ADN en ARN. Panel (a) : Portion d'ADN devant être transcrite; (b) : Localisation du site promoteur par l'ARN-pol; (c) : déroulement et ouverture localisée de la double hélice d'ADN par l'ARN-pol; (d) : lecture du message contenu dans l'ADN et formation de l'ARNm. Images téléchargées à partir du lien <https://www.nagwa.com/fr/explainers/918139172415/>.

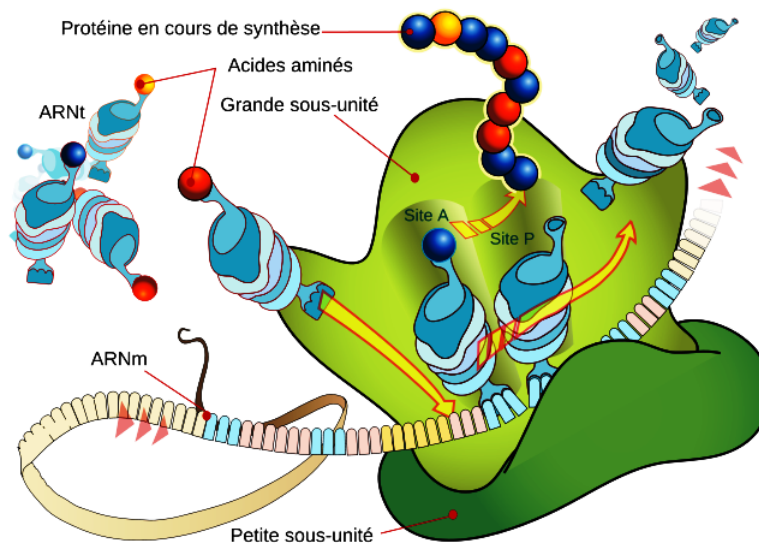


Figure 8: Différence structurelle entre l'ADN et l'ARN. Image téléchargée à partir du lien <https://fr.vecteezy.com/art-vectoriel/88822-adn-et-vecteurs-d-arn>.

Dénaturation thermique de l'ADN

Au delà de ces deux processus (réplication et transcription) intervenant à des moments clés de la division cellulaire ou de la synthèse des protéines, la molécule d'ADN exhibe également une dynamique vibrationnelle et rotationnelle très active aux températures biologiques [4, 12, 13]. En effet, le fait qu'elle soit formée de deux simple brins complémentaires associés par des liaisons labiles est un élément fondamental pour de nombreux processus physiologiques. Des expériences révèlent que si on chauffe une solution contenant cette macromolécule d'ADN jusqu'à une certaine température caractéristique, les liaisons hydrogènes qui assurent la cohésion des deux brins appariés se rompent, le double brin se sépare en deux et la molécule se dissocie. Ce processus de séparation des deux brins de la molécule d'ADN sous l'effet de la température est appelé dénaturation thermique de l'ADN. Compte tenu du fait que la dénaturation soit assimilée à la rupture des liaisons hydrogènes entre les deux brins, elle est dépendante du nombre de ces liaisons hydrogènes, de la taille de la molécule d'ADN et de la proportion des paires de bases $C \equiv G$ et $A = T$.

La figure 9 montre l'influence de la température sur l'ouverture des paires de bases de l'ADN, entraînant ainsi une séparation complète du double brin. Cette dénaturation est réversible. En effet, le processus de renaturation s'amorce une fois que la température de la solution baisse de manière graduelle, ce qui entraîne une réassociation des deux brins suivant les règles de complémentarité.

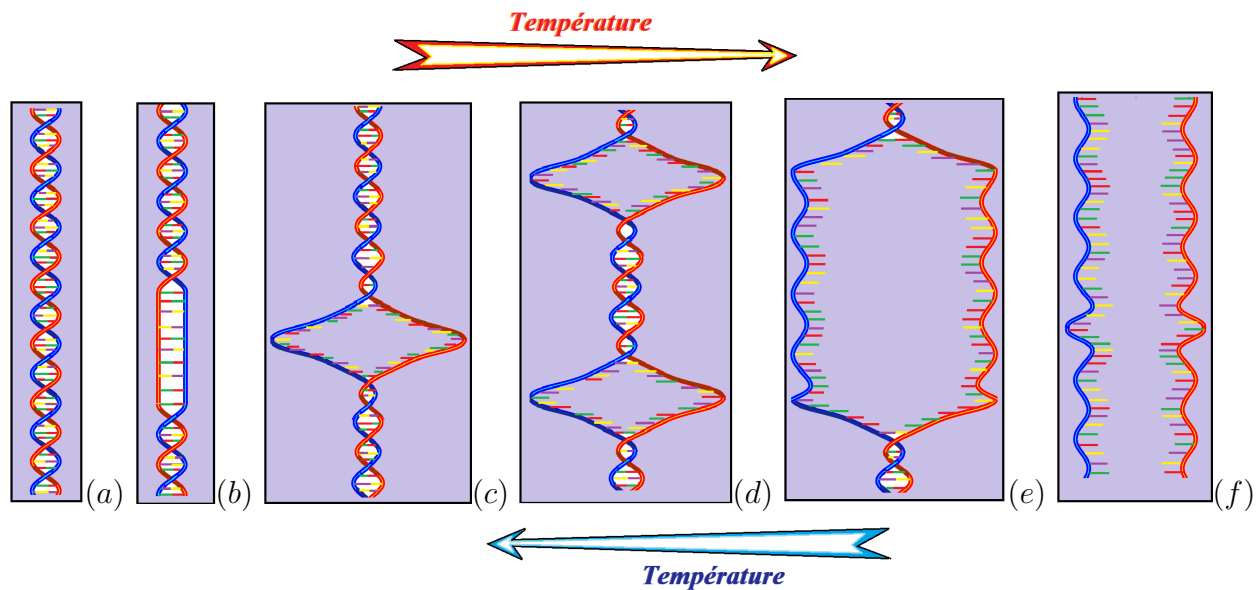


Figure 9: Influence de la température sur la dénaturation [(a) → (b) → (c) → (d) → (e) → (f)] et sur la renaturation [(a) ← (b) ← (c) ← (d) ← (e) ← (f)] de la molécule double hélice d'ADN.

Ouvertures fluctuantes et « respirations » dans l'ADN

Tel qu'il a été vu précédemment, la structure double hélice de l'ADN est stabilisée par des interactions faibles (liaisons hydrogène). On peut donc s'attendre à des fluctuations, dues aux mouvements thermiques, même de faible énergie. En effet, il a été observé chez certaines doubles hélices synthétiques de polynucléotides (lors de mesures d'échange des protons avec le milieu [14]), des états d'ouvertures temporaires de l'ADN. Ces états d'ouvertures de relativement basse fréquence et de

bien plus longue durée de vie, semblables à une « respiration » ('breather' en anglais) ont également été détectés au début des années 80 dans des expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN) [15–17], ou Raman [18, 19] menées sur l'ADN.

Partant des résultats de ces expériences, le groupe de Prohofsky [20, 21] a effectué des études théoriques afin de mieux les comprendre. Les résultats de ces études révèlent que les breathers sont généralement fortement localisés et pourraient être à l'origine de la localisation de l'énergie dans le double brin d'ADN entraînant ainsi sa dénaturation locale.

1.3 Modélisation de la dynamique de l'ADN en Physique

La molécule d'ADN a une dynamique très complexe. En effet, en plus des mouvements de translation, de vibration, de cisaillement ou de rotation que peuvent effectuer les paires de bases, on note aussi les multiples rotations de l'unité de nucléotide (squelette sucre-phosphate) comme le montre la figure 10 et dont le tableau 3 donne les différences existantes entre la forme *A* et la forme *B* de l'ADN [4, 6].

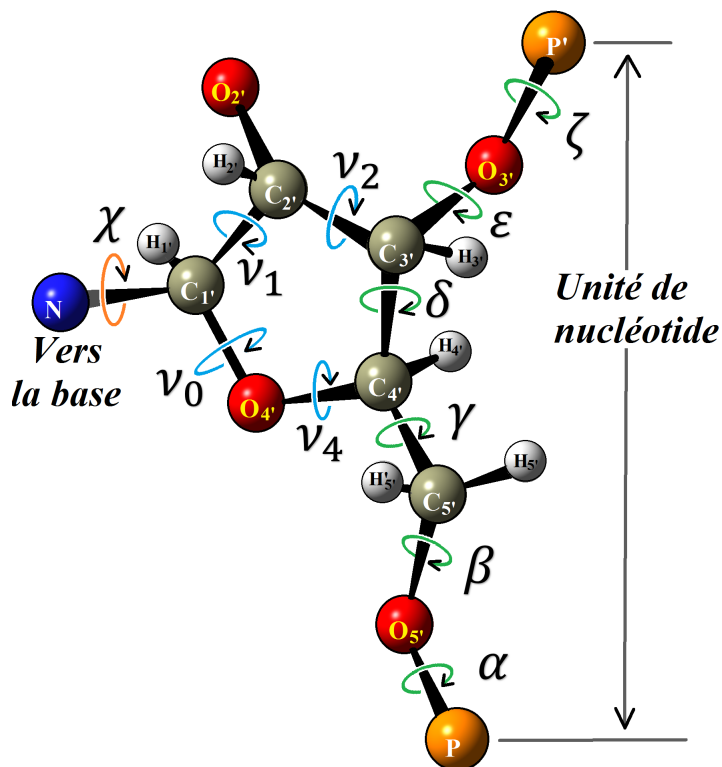


Figure 10: Localisation des onze (11) angles de torsion caractérisant la dynamique du complexe sucre-phosphate [4, 6].

Ainsi, au regard de la figure 10, une étude complète de la dynamique de cette macromolécule reviendrait à prendre en compte les multiples degrés de libertés qui, auront pour conséquence une restriction à quelques dizaine de nucléotides même pour les ordinateurs les plus sophistiqués [6, 12]. Le problème peut cependant être simplifié lorsqu'on construit des modèles approximatifs qui imitent

Tableau 3: Différence entre angle de torsion d'un nucléotide de l'ADN-A et de l'ADN-B [4, 6].

	α	β	γ	δ	ε	ζ	χ	ν_0	ν_1	ν_2	ν_4
ADN - A	-52°	175°	42°	79°	-148°	-75°	-157°	8°	-34°	44°	21°
ADN - B	-30°	-136°	31°	143°	-141°	-161°	-98°	-33°	45°	-40°	6°

les mouvements internes qui apportent une contribution principale au processus considéré. C'est cette approche qui est largement répandue lors de l'étude de la dynamique interne de l'ADN.

Pour construire un modèle approximatif de la dynamique de l'ADN, il est nécessaire de simplifier dans un premier temps sa dynamique globale en se focalisant uniquement sur les mouvements internes dominants qui apportent un changement significatif sur sa structure. Une fois que le choix a été opéré, il revient dans un second temps de décrire ces mouvements par des équations mathématiques et de les résoudre dans un troisième temps afin d'interpréter les solutions en terme des paramètres de la dynamique interne de l'ADN [6]. Compte tenu de l'observation faite par certains biologistes sur cette macromolécule (notamment la présence des excitations très fortement localisées), les mouvements des macromolécules ne sont ni simples ni harmoniques, mais fortement non linéaires. En effet, l'ouverture locale de la double hélice et son éventuel déplacement sont deux signatures caractéristiques des excitations non linéaires [12]. Partant des progrès de la Biologie moléculaire qui fournissent un ensemble de données expérimentales détaillées, des études théoriques ont été menées et ont permis le développement des modèles physiques pertinents.

Nous présenterons dans les lignes qui suivent, quelques modèles d'ADN développés dans la littérature ayant non seulement permis d'apporter des éclairages sur la dénaturation de l'ADN, mais également sur la présence des excitations localisées sur elle, en accord avec des observations expérimentales.

1.3.1 Modèle d'Ising

C'est un modèle statistique qui décrit de façon très satisfaisante les observables statistiques liées au processus de dénaturation thermique de l'ADN. L'idée principale consiste à représenter une paire de bases par une variable de type Ising qui ne prend que deux valeurs à savoir **0** (fermée) ou **1** (ouverte) tel que le montre la figure 11.

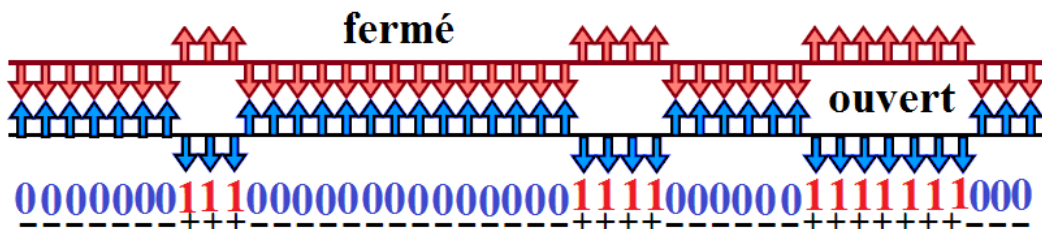


Figure 11: Modèle d'Ising d'un segment d'ADN.

Ce modèle prend en compte des liaisons hydrogènes entre bases complémentaires d'une part, et des interactions hydrophobes (qui évitent tout contact avec les molécules d'eau) entre bases voisines d'autre part. Toutefois, afin de décrire la transition de l'ADN, il est ajouté à l'énergie propre de chaque paire de bases voisine, la différence d'entropie de configuration entre brins non liés dans un

premier temps, puis dans un second temps, l'équilibre de dissociation résultant de la séparation des deux brins lorsque la dernière paire de bases est ouverte [12].

La fraction des paires de bases cassées dans ce modèle d'Ising est donnée par la formule [12] :

$$x_B = \frac{1}{N} \sum_k \frac{N_k Z_k}{Z}, \quad (1.1)$$

où N est le nombre de paires de bases dans la molécule, Z est la fonction de partition, k est un indice de configuration et N_k est le nombre de paires de bases ouvertes, correspondant à une probabilité Z_k/Z . Le poids statistique Z_k est fonction d'un paramètre de stabilité \mathbf{s} pour chaque paire de bases, d'un paramètre de coopérativité σ qui tient compte du fait que briser une paire de bases détruit deux interactions de stacking ; et enfin, d'un paramètre d'entropie pour chaque boucle qui mesure la raideur des brins d'ADN. La prise en compte des effets du solvant du milieu ainsi que les interactions de type liaison hydrogène est faite dans ce modèle par l'introduction d'une différence d'énergie libre \mathbf{G}_i entre l'état fermé et l'état ouvert. L'énergie libre de stacking entre l'état intact et l'état fermé incluant par la même occasion l'entropie configurationnelle pour positionner les bases par paires est $\mathbf{G}_{i-1,i}^s$. Ainsi, la constante de la réaction d'une fermeture du modèle d'Ising est :

$$\mathbf{s}'_i = \exp \left[-\frac{\mathbf{G}_i + \mathbf{G}_{i-1,i}^s}{\mathbf{RT}} \right], \quad (1.2)$$

où \mathbf{T} est la température absolue du milieu et \mathbf{R} est la constante des gaz.

De tels modèles d'Ising ont donné des résultats intéressants pour la transition de dénaturation, donnant ainsi naissance à de nombreux variants dans la littérature [22–26]. Toutefois, l'un des inconvénients de ce modèle est que les paramètres qu'ils contiennent, qui déterminent par exemple la probabilité d'ouverture d'une paire de bases selon que la voisine soit ouverte ou fermée, sont déterminés de manière phénoménologique afin d'obtenir le meilleur accord avec les prédictions théoriques et expérimentales. Un autre inconvénient de ce modèle est qu'il interdit toute tentative de description de la dynamique d'ouverture de l'ADN, car les états intermédiaires ne sont pas pris en compte. De ce fait, la dynamique d'un breather ainsi que les expériences de traction mécanique où les informations dynamiques sont cruciales, sont impossibles à décrire dans ce modèle. C'est la raison pour laquelle des modèles Hamiltonien non linéaires de l'ADN ont été développés dans la littérature.

1.3.2 Les modèles Hamiltonien non linéaires de l'ADN

Tel qu'il a été vu à la section §1.2, la molécule d'ADN est le disque dur sur lequel est stocké toutes les informations nécessaires à la survie d'une espèce. Le dynamisme de cette molécule est nettement observé lors de la division cellulaire (où le bagage génétique est répliqué) ou lorsque l'un de ses segments est transcrit (ouverture locale, formation et propagation d'une bulle sur ledit segment) pour fabriquer une protéine. Partant de ces deux comportements d'une extrême importance, des modèles Hamiltonien non linéaires (car les présences des excitations localisées observées par les biologistes sont typiques des systèmes non linéaires) ont été mis sur pieds dans la littérature afin d'expliquer par des équations mathématiques, le processus de dénaturation et/ou de transcription de l'ADN observé expérimentalement.

Modèle d'ADN d'Englander

C'est le tout premier modèle Hamiltonien non linéaire modélisant la dynamique de l'ADN en imitant l'ouverture locale de celle-ci. En effet, suite aux expériences d'échange d'hydrogène-deuterium que Englander et *al.* [28] ont menée au début des années 1980, ceux-ci ont observé des états d'ouverture partielle qui se déplaçaient le long de la séquence d'ADN. S'appuyant sur les travaux d'Alwyn Scott [27], ils ont modélisé la double hélice d'ADN par un réseau de pendule parallèle reliés entre eux par des ressorts tel que le montre la figure 12.(A).

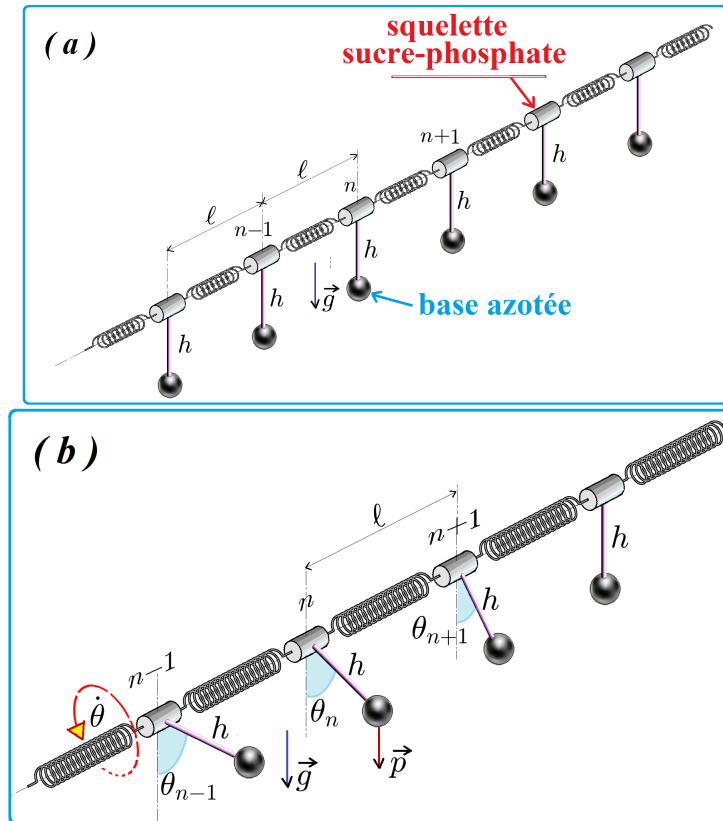


Figure 12: Analogie mécanique de la double spirale d'ADN modélisée par deux chaînes linéaires de pendule (les bases azotées) relié par des ressorts (représentant le squelette sucre-phosphate) [28].

Dans ce modèle, chaque paire de bases est représentée par une masse \mathbf{m} attachée par l'intermédiaire d'une tige (sans masse et de longueur \mathbf{h}) à un support (modélisant le squelette sucre-phosphate), constitué de ressort de raideur S résistant à la torsion. Les paires de bases consécutives sont séparées d'une distance $\ell = 3.4\text{\AA}$. Ces pendules étant dans un champ de pesanteur uniforme \vec{g} , il va naitre dans le système une énergie potentielle attractive $V(\theta_n)$ qui modélisera non seulement les liaisons hydrogènes entre les bases, mais également l'interaction de ces bases avec le solvant. Le minimum de $V(\theta_n)$ correspondant à la configuration d'équilibre où les bases azotées appartenant à des brins différents sont liées. Le Hamiltonien de ce modèle en terme de la rotation angulaire θ_n est [28] :

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} m h^2 \left(\frac{d\theta_n}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} S (\theta_n - \theta_{n-1})^2 + m g h [1 - \cos(\theta_n)] \right\}. \quad (1.3)$$

Le premier terme de l'équation Eq. (1.3) est l'énergie cinétique rotationnelle, le deuxième terme correspond à l'énergie élastique du squelette sucre-phosphate et le dernier terme est un potentiel attractif à un corps représentant les liaisons hydrogène. L'équation différentielle discrète découlant du Hamiltonien précédent, vérifiée par un seul brin d'ADN ayant subi une torsion θ_n du nucléotide placé au site n [voir figure 12.(B)] est :

$$mh^2 \frac{d^2\theta_n}{dt^2} = S(\theta_{n+1} - 2\theta_n + \theta_{n-1}) - mgh \sin[\theta_n]. \quad (1.4)$$

L'équation Eq. (1.4) est une équation non linéaire (à cause de la présence du terme $\sin[\theta_n]$) plus connue sous le nom d'équation de sine-Gordon admettant pour solution :

$$\theta_n(t) = 4 \arctan \left\{ \exp \left[\pm \frac{1}{\ell} \sqrt{\frac{mgh}{S}} \frac{(n - n_0)\ell - vt}{\sqrt{1 - \frac{mh^2}{S\ell^2} v^2}} \right] \right\}, \quad v < \frac{\ell}{h} \sqrt{\frac{S}{m}}, \quad (1.5)$$

qui est un soliton⁵ de type 'kink' (+) [respectivement de type 'antikink' (-)] centré en n_0 à $t = 0$ et se propageant avec la vitesse v dans le réseau. La solution soliton 'kink-antikink' donnée par l'équation Eq. (1.5) modélise l'ouverture locale de la molécule d'ADN observée lors du processus de transcription.

Modèle d'ADN de Yakushevich

Le modèle d'ADN de Yakushevich (encore appelé modèle 'Y') est un modèle idéal qui considère le double brin comme une chaîne infinie et où toutes les paires de bases azotées sont supposées identiques. En s'inspirant des travaux de Barkley et Zimm [29] (où la molécule d'ADN est considérée comme un filament mince élastique) d'une part, ainsi que ceux de Yomosa [30, 31] d'autres part, Yakushevich a proposé un modèle constitué de deux filaments élastiques s'enroulant l'un autour de l'autre sous forme d'une double hélice [voir figure 13.(a)], dont la version discrète est donnée par la figure 13.(b). Dans ce modèle le nucléotide est l'unité de base et sa dynamique est décrite par une variable angulaire. Plus précisément, chaque nucléotide est modélisé par un disque rigide de rayon r pouvant rotter autour d'un axe et ayant un moment d'inertie I [6, 32, 33]. Tel qu'il est observé à la figure 13.(b), les nucléotides d'un même brin sont connectés entre eux par des ressorts et interagissent avec ceux de l'autre brin au moyen des liaisons hydrogène. C'est un modèle plus réaliste par rapport à celui d'Englander. Dans ce modèle, le champ de pesanteur \vec{g} est supprimé et la dynamique du brin complémentaire est prise en compte (contrairement au modèle d'Englander où la dynamique d'un seul brin est étudiée, celle de l'autre brin se déduisant de la solution).

Le Hamiltonien du modèle 'Y' est donné par [32] :

$$H = \sum_{j=1}^2 \sum_n \left\{ \frac{1}{2} I_j \left(\frac{d\theta_n^{(j)}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} K_j \left(\theta_{n+1}^{(j)} - \theta_n^{(j)} \right)^2 \right\} + \sum_n \frac{1}{2} k (\Delta \ell_n)^2, \quad (1.6)$$

où le premier terme de l'équation Eq. (1.6) représente l'énergie cinétique de rotation du disque, le deuxième terme l'énergie potentielle élastique issue de la torsion entre nucléotides appartenant à un même brin, tandis que le troisième terme modélise les liaisons hydrogène interagissant entre

5. Un soliton est une onde solitaire, solution exacte d'une équation non linéaire, qui se propage sans déformation et sans changement de vitesse au cours des collisions avec d'autres ondes solitaires.

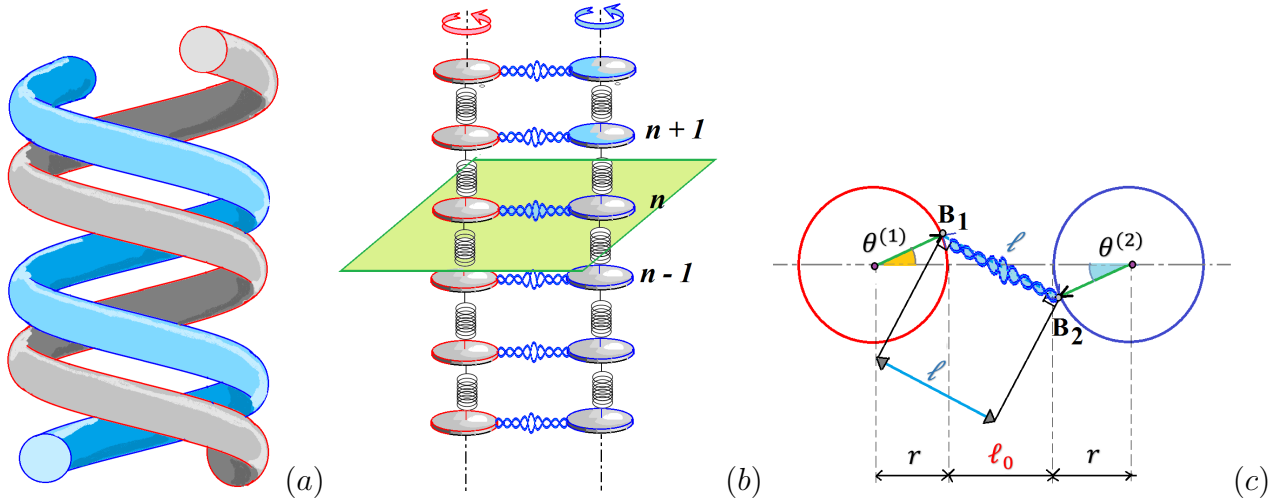


Figure 13: (a) : Modélisation de la double hélice d'ADN par des filaments élastiques. (b) : Double brins d'ADN du panel (a) selon le modèle de Yakushevich. Les bases azotées y sont représentées sous forme de disque. (c) : Détails supplémentaire sur la paire de base azotée située au site n du panel (b), montrant les points particuliers B_1 et B_2 spatialement séparés d'une distance ℓ , les angles de torsion $\theta^{(1)}$ et $\theta^{(2)}$ par rapport à la position d'équilibre de chaque base azotée de rayon r , distant de ℓ_0 l'une de l'autre [32].

nucléotides appartenant à des brins différents. Dans le troisième terme de l'équation Eq. (1.6), $\Delta\ell_n$ caractérise la variation de la longueur de la liaison hydrogène suite aux rotations des différents nucléotides. Son expression est [voir figure 13.(c)] :

$$\begin{aligned} \Delta\ell_n &= (\ell_n - \ell_0) = \sqrt{\left[2r + \ell_0 - r \cos \theta_n^{(1)} - r \cos \theta_n^{(2)}\right]^2 + r^2 \left(\sin \theta_n^{(1)} + \sin \theta_n^{(2)}\right)^2} - \ell_0, \\ &= \sqrt{(\ell_0^2 + 6r^2 + 4r\ell_0) - 2r(2r + \ell_0) \left(\cos \theta_n^{(1)} + \cos \theta_n^{(2)}\right) + 2r^2 \cos \left[\theta_n^{(1)} - \theta_n^{(2)}\right]} - \ell_0. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Faisant usage des équations canonique de Hamilton à l'équation Eq. (1.6), le système couplé d'équation différentielle non linéaire suivant est obtenu :

$$\begin{cases} I_1 \ddot{\theta}_n^{(1)} &= K_1 \left(\theta_{n+1}^{(1)} - 2\theta_n^{(1)} + \theta_{n-1}^{(1)} \right) - \frac{k\Delta\ell_n}{\ell_n} \left\{ r(2r + \ell_0) \sin \theta_n^{(1)} + r^2 \sin \left[\theta_n^{(2)} - \theta_n^{(1)} \right] \right\}, \\ I_2 \ddot{\theta}_n^{(2)} &= K_2 \left(\theta_{n+1}^{(2)} - 2\theta_n^{(2)} + \theta_{n-1}^{(2)} \right) - \frac{k\Delta\ell_n}{\ell_n} \left\{ r(2r + \ell_0) \sin \theta_n^{(2)} + r^2 \sin \left[\theta_n^{(1)} - \theta_n^{(2)} \right] \right\}. \end{cases} \quad (1.8)$$

Les équations Eq. (1.8) sont très complexes à résoudre analytiquement compte tenu de la dépendance de $\Delta\ell_n/\ell_n$ en $\theta_n^{(1)}$ et $\theta_n^{(2)}$. Toutefois, elles peuvent être simplifiées si l'on suppose que la distance ℓ_0 est très faible devant le rayon de chaque nucléotide r ($\ell_0 \ll r$), et que l'on pose $\ell_0 \approx 0$ [32]. Cette hypothèse combinée à l'approximation des milieux continus conduit pour des cas particuliers ($\theta^{(1)} \neq 0, \theta^{(2)} = 0$; $\theta^{(1)} = 0, \theta^{(2)} \neq 0$) ou ($\theta^{(1)} = \theta^{(2)}$) à un système couplé d'équations non linéaires de type sine-Gordon, ou à une seule équation de type double sine-Gordon [32], admettant également des solutions solitons 'kink-antikink'.

Toujours dans l'optique de mieux comprendre la dynamique de cette molécule, plusieurs améliorations du modèle 'Y'ont été opérées par la suite. De ce fait, Gaeta et al. [34–36] y ont inclus un couplage "hélicoïdal", qui couple des bases appartenant à deux brins différents situées l'une

au-dessous de l'autre, pour rendre compte de la structure tridimensionnelle mise en exergue par Watson et Crick [1].

Modèle composite d'ADN de Yakushevich

Telle que le prévoit la structure géométrique de l'ADN, les mouvements de rotation peuvent survenir non seulement autour de l'atome de carbone C_1 du sucre directement lié à l'azote N d'une base azotée, mais aussi autour du groupement sucre-phosphate (voir figure 10). Tenant compte de cela et s'appuyant sur les travaux de Yakushevich [32], Cadoni, Demelio et *al.* [37–39] ont modifié le modèle 'Y' en y incluant également la rotation des bases azotées, portant ainsi à quatre (04) le nombre de degré de liberté requis pour décrire la dynamique de la molécule d'ADN comme le montre la figure 14.(a). Parmi ces quatre degré de liberté, deux (02) sont qualifié de "topologiques" $\theta_{n,1}$, $\theta_{n,2}$ et décrivent la rotation du complexe sucre-phosphate, tandis que les deux (02) autres $\varphi_{n,1}$, $\varphi_{n,2}$ dit "non topologiques" représentent les oscillations de faibles amplitudes des bases azotées. Le modèle composite est une généralisation du modèle de Yakushevich et a l'avantage de pouvoir introduire aisément les inhomogénéités des bases azotées. La figure 14.(b) donne la représentation simplifiée de la cellule placée au site n , où d_{Bs} est la distance entre la base azotée et le complexe sucre-phosphate, d_{eq} la distance entre les bases azotées appartenant à des brins différents lorsque la molécule est à l'équilibre.

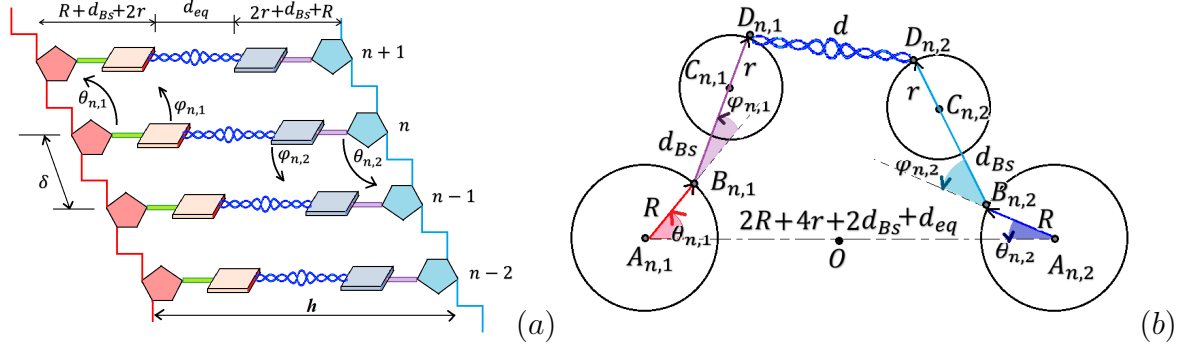


Figure 14: (a) : Fragment du modèle composite de la double chaîne d'ADN. La dynamique de chaque mode de la chaîne est faite au moyen de quatre (04) degré de liberté : deux (02) degré de liberté ($\theta_{n,1}$, $\theta_{n,2}$) pour chaque groupe du complexe acide phosphorique-sucre, et deux (02) degré de liberté ($\varphi_{n,1}$, $\varphi_{n,2}$) pour chaque base azotée. (b) : Détails d'une cellule de la chaîne. Chaque base azotée étant capable de roter autour du carbone C_1 de son sucre correspondant, modélisé sur le graphe par le point $B_{n,1}$ [39].

En se référant à la figure 14.(b), les coordonnées dans la base cartésienne $(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ des centres des différents disques, ainsi que celles des extremum des bases par rapport à l'origine O sont :

$$\begin{aligned}
 A_{n,\ell} & \begin{cases} x = (-1)^\ell h/2, \\ y = 0, \\ z = n\delta, \end{cases} & C_{n,\ell} & \begin{cases} x = (-1)^\ell h/2 + (-1)^{\ell+1} [R \cos(\theta_{n,\ell}) + (d_{Bs} + r) \cos(\theta_{n,\ell} + \varphi_{n,\ell})], \\ y = (-1)^{\ell+1} [R \sin(\theta_{n,\ell}) + (d_{Bs} + r) \sin(\theta_{n,\ell} + \varphi_{n,\ell})], \\ z = n\delta, \end{cases} \\
 D_{n,\ell} & \begin{cases} x = (-1)^\ell h/2 + (-1)^{\ell+1} [R \cos(\theta_{n,\ell}) + (d_{Bs} + 2r) \cos(\theta_{n,\ell} + \varphi_{n,\ell})], \\ y = (-1)^{\ell+1} [R \sin(\theta_{n,\ell}) + (d_{Bs} + 2r) \sin(\theta_{n,\ell} + \varphi_{n,\ell})], \\ z = n\delta, \end{cases} & & \ell = 1, 2,
 \end{aligned} \tag{1.9}$$

avec $h = 2R + 4r + 2d_{Bs} + d_{eq}$. Le Lagrangien définissant la dynamique du modèle composite est donné par [39] :

$$\mathcal{L}_{CY} = T - (V_t + V_s + V_p + V_h + V_{sw}), \quad (1.10)$$

où T représente l'énergie cinétique cumulée du complexe sucre-phosphate et de la base azotée. Son expression est :

$$T = \sum_{n=1}^N \sum_{\ell=1}^2 \frac{1}{2} \left\{ I_t \dot{\theta}_{n,\ell}^2 + I_S \dot{\varphi}_{n,\ell}^2 + 2 [1 + \alpha \cos(\varphi_{n,\ell})] \dot{\theta}_{n,\ell} \dot{\varphi}_{n,\ell} + [1 + \alpha^2 + 2\alpha \cos(\varphi_{n,\ell})] \dot{\theta}_{n,\ell}^2 \right\}, \quad (1.11)$$

avec $I_t = m_s R^2$ le moment d'inertie du complexe sucre-phosphate, $I_S = m_b (d_{Bs} + r)^2$ le moment d'inertie de la base azotée et $\alpha = R/(d_{Bs} + r)$ une constante sans dimension. Les expressions des énergies potentielle de torsion du complexe sucre-phosphate (V_t), d'empilement (V_s), de couplage entre bases azotées appartenant à différents brins (V_p), de couplage hélicoïdal (V_h) et effective V_{sw} de l'équation Eq. (1.10) sont :

$$\begin{aligned} V_t &= \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{\ell=1}^2 k_t R^2 [1 - \cos(\Delta\theta_{n,\ell})], \\ V_s &= \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{\ell=1}^2 k_s (d_{Bs} + r)^2 \{1 - \cos(\Delta\theta_{n,\ell} + \Delta\varphi_{n,\ell}) + \alpha \cos(\varphi_{n+1,\ell}) + \alpha^2 [1 - \cos(\Delta\theta_{n,\ell})]\} \\ &\quad + \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{\ell=1}^2 \alpha k_s (d_{Bs} + r)^2 [\cos(\varphi_{n,\ell}) - \cos(\Delta\theta_{n,\ell} + \varphi_{n,\ell}) - \cos(\Delta\theta_{n,\ell} + \varphi_{n+1,\ell})], \\ V_p &\approx \sum_{n=1}^N 2D\mu^2 (d_{Bs} + 2r)^2 \{1 + 2\beta_0^2 - 2\beta_0 [\cos(\theta_{n,2} + \varphi_{n,2}) + \cos(\theta_{n,1} + \varphi_{n,1})] - 2\beta_0\beta \cos\theta_{n,1} \\ &\quad - 2\beta_0\beta \cos\theta_{n,2} + \cos[(\theta_{n,2} - \theta_{n,1}) + (\varphi_{n,2} - \varphi_{n,1})] + \beta^2 [1 + \cos(\theta_{n,2} - \theta_{n,1})] + \beta \cos\varphi_{n,1} \\ &\quad + \beta [\cos\varphi_{n,2} + \cos(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} - \varphi_{n,1}) + \cos(\theta_{n,1} - \theta_{n,2} - \varphi_{n,2})]\}, \\ V_h &= \sum_{n=1}^N \sum_{\ell=1}^2 k_h R^2 [1 - \cos(\theta_{n+5,\ell+1} - \theta_{n,\ell})], \\ &= \sum_{n=1}^N k_h R^2 [2 - \cos(\theta_{n+5,2} - \theta_{n,1}) - \cos(\theta_{n+5,1} - \theta_{n,2})], \\ V_{sw} &= \sum_{n=1}^N \sum_{\ell=1}^2 K_{sw} \sin^k(\varphi_{n,\ell}), \end{aligned} \quad (1.12)$$

avec $\Delta\theta_{n,\ell} = \theta_{n+1,\ell} - \theta_{n,\ell}$, $\Delta\varphi_{n,\ell} = \varphi_{n+1,\ell} - \varphi_{n,\ell}$, $\beta_0 = h/[2(d_{Bs} + 2r)]$, $\beta = R/(d_{Bs} + 2r)$ [39]. Les équations de la dynamique de ce modèle composite, correspondant au Lagrangien donnée par l'équation Eq. (1.10), sont obtenues au moyen des équations d'Euler-Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{CY}}{\partial \dot{\psi}_n} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}_{CY}}{\partial \psi_n} = 0, \quad \text{avec } \psi_n = (\theta_{n,1}, \theta_{n,2}, \varphi_{n,1}, \varphi_{n,2}); \quad (1.13)$$

tels que le montrent les équations Eq. (1.14)–Eq. (1.17) suivantes :

$$\begin{aligned}
& [I_t + 1 + \alpha^2 + 2\alpha \cos(\varphi_{n,1})] \ddot{\theta}_{n,1} + [1 + \alpha \cos(\varphi_{n,1})] \ddot{\varphi}_{n,1} - \alpha [\dot{\varphi}_{n,1} + 2\dot{\theta}_{n,1}] \dot{\varphi}_{n,1} \sin(\varphi_{n,1}) \\
& + k_t R^2 [\sin(\theta_{n,1} - \theta_{n-1,1}) - \sin(\theta_{n+1,1} - \theta_{n,1})] + k_h R^2 [\sin(\theta_{n,1} - \theta_{n-5,2}) - \sin(\theta_{n+5,2} - \theta_{n,1})] \\
& + X [\sin(\Delta\theta_{n-1,1} + \Delta\varphi_{n-1,1}) - \sin(\Delta\theta_{n,1} + \Delta\varphi_{n,1}) + \alpha \sin(\Delta\theta_{n-1,1}) - \alpha \sin(\Delta\theta_{n,1})] \\
& + Y [\sin(\Delta\theta_{n-1,1} + \Delta\varphi_{n-1,1}) - \sin(\Delta\theta_{n,1} + \Delta\varphi_{n,1}) + \sin(\Delta\theta_{n-1,1} + \varphi_{n,1}) - \sin(\Delta\theta_{n,1} + \varphi_{n+1,1})] \\
& + Z [2\beta_0 \sin(\theta_{n,1} + \varphi_{n,1}) + 2\beta_0 \beta \sin(\theta_{n,1}) + \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} + \varphi_{n,2} - \varphi_{n,1}) + \beta^2 \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1})] \\
& + \beta Z [\sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} - \varphi_{n,1}) - \sin(\theta_{n,1} - \theta_{n,2} - \varphi_{n,2})] = 0;
\end{aligned} \tag{1.14}$$

$$\begin{aligned}
& [I_t + 1 + \alpha^2 + 2\alpha \cos(\varphi_{n,2})] \ddot{\theta}_{n,2} + [1 + \alpha \cos(\varphi_{n,2})] \ddot{\varphi}_{n,2} - \alpha [\dot{\varphi}_{n,2} + 2\dot{\theta}_{n,2}] \dot{\varphi}_{n,2} \sin(\varphi_{n,2}) \\
& + k_t R^2 [\sin(\theta_{n,2} - \theta_{n-1,2}) - \sin(\theta_{n+1,2} - \theta_{n,2})] + k_h R^2 [\sin(\theta_{n,2} - \theta_{n-5,1}) - \sin(\theta_{n+5,1} - \theta_{n,2})] \\
& + X [\sin(\Delta\theta_{n-1,2} + \Delta\varphi_{n-1,2}) - \sin(\Delta\theta_{n,2} + \Delta\varphi_{n,2}) + \alpha \sin(\Delta\theta_{n-1,2}) - \alpha \sin(\Delta\theta_{n,2})] \\
& + Y [\sin(\Delta\theta_{n-1,2} + \Delta\varphi_{n-1,2}) - \sin(\Delta\theta_{n,2} + \Delta\varphi_{n,2}) + \sin(\Delta\theta_{n-1,2} + \varphi_{n,2}) - \sin(\Delta\theta_{n,2} + \varphi_{n+1,2})] \\
& + Z [2\beta_0 \sin(\theta_{n,2} + \varphi_{n,2}) + 2\beta_0 \beta \sin(\theta_{n,2}) - \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} + \varphi_{n,2} - \varphi_{n,1}) - \beta^2 \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1})] \\
& + \beta Z [\sin(\theta_{n,1} - \theta_{n,2} - \varphi_{n,2}) - \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} - \varphi_{n,1})] = 0;
\end{aligned} \tag{1.15}$$

$$\begin{aligned}
& I_S \ddot{\varphi}_{n,1} + [1 + \alpha \cos(\varphi_{n,1})] \ddot{\theta}_{n,1} - \alpha \dot{\varphi}_{n,1} \dot{\theta}_{n,1} \sin(\varphi_{n,1}) + K_{sw} k \cos(\varphi_{n,1}) \sin^{k-1}(\varphi_{n,1}) \\
& + X [\sin(\Delta\theta_{n-1,1} + \Delta\varphi_{n-1,1}) - \sin(\Delta\theta_{n,1} + \Delta\varphi_{n,1}) - \alpha \sin(\varphi_{n,1})] \\
& + Y [-\sin(\varphi_{n,1}) + \sin(\Delta\theta_{n-1,1} + \Delta\varphi_{n-1,1}) - \sin(\Delta\theta_{n,1} + \Delta\varphi_{n,1}) + \sin(\Delta\theta_{n-1,1}) + \varphi_{n,1}] \\
& + Z [2\beta_0 \sin(\theta_{n,1} + \varphi_{n,1}) + \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} + \varphi_{n,2} - \varphi_{n,1}) + \beta \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} - \varphi_{n,1})] \\
& - \beta Z \sin(\varphi_{n,1}) = 0;
\end{aligned} \tag{1.16}$$

$$\begin{aligned}
& I_S \ddot{\varphi}_{n,2} + [1 + \alpha \cos(\varphi_{n,2})] \ddot{\theta}_{n,2} - \alpha \dot{\varphi}_{n,2} \dot{\theta}_{n,2} \sin(\varphi_{n,2}) + K_{sw} k \cos(\varphi_{n,2}) \sin^{k-1}(\varphi_{n,2}) \\
& + X [\sin(\Delta\theta_{n-1,2} + \Delta\varphi_{n-1,2}) - \sin(\Delta\theta_{n,2} + \Delta\varphi_{n,2}) - \alpha \sin(\varphi_{n,2})] \\
& + Y [-\sin(\varphi_{n,2}) + \sin(\Delta\theta_{n-1,2} + \Delta\varphi_{n-1,2}) - \sin(\Delta\theta_{n,2} + \Delta\varphi_{n,2}) + \sin(\Delta\theta_{n-1,2}) + \varphi_{n,2}] \\
& + Z [2\beta_0 \sin(\theta_{n,2} + \varphi_{n,2}) - \sin(\theta_{n,2} - \theta_{n,1} + \varphi_{n,2} - \varphi_{n,1}) + \beta \sin(\theta_{n,1} - \theta_{n,2} - \varphi_{n,2})] \\
& - \beta Z \sin(\varphi_{n,2}) = 0;
\end{aligned} \tag{1.17}$$

avec $X = k_s(d_{Bs} + r)^2$, $Y = \alpha k_s(d_{Bs} + r)^2$ et $Z = 2D\mu^2(d_{Bs} + 2r)^2$. Compte tenu du fait que les non linéarités dominantes sont celles décrivant la dynamique du complexe sucre-phosphate, le modèle composite exhibe tout comme le modèle ‘Y’, des solutions solitons topologiques du type ‘kink-antikink’[37–39].

Modèle d’ADN de Peyrard-Bishop et de Dauxois-Peyrard-Bishop

Les modèles torsionnels cités plus haut sont adaptés à la description du processus de transcription de l’ADN. Cependant, ces modèles ne permettent pas de décrire la dénaturation thermique de celle-ci car leur degré de liberté tiennent compte la rotation des bases autour des brins tandis que le degré de liberté décrivant la dissociation est l’élongation relative des paires de bases [13].

S'inspirant des travaux de Prohofsky et *al.* [40–43], Peyrard et Bishop (PB) ont proposé un modèle Hamiltonien à variables continues pour étudier de façon poussée la dissociation de l'ADN. Ce modèle est constitué de deux chaînes linéaires de particules décrivant phénoménologiquement les nucléotides que comportent chacun des brins de la molécule comme schématiquement représenté à la figure 15.(a). Dans sa formulation la plus simple, les particules de la même chaîne sont couplées harmoniquement entre elles, tandis que celles appartenant à des chaînes différentes sont couplées par un potentiel d'interaction de type Morse tel que représenté à la figure 15.(b). Ce modèle original exclut également les interactions de type longue portée.

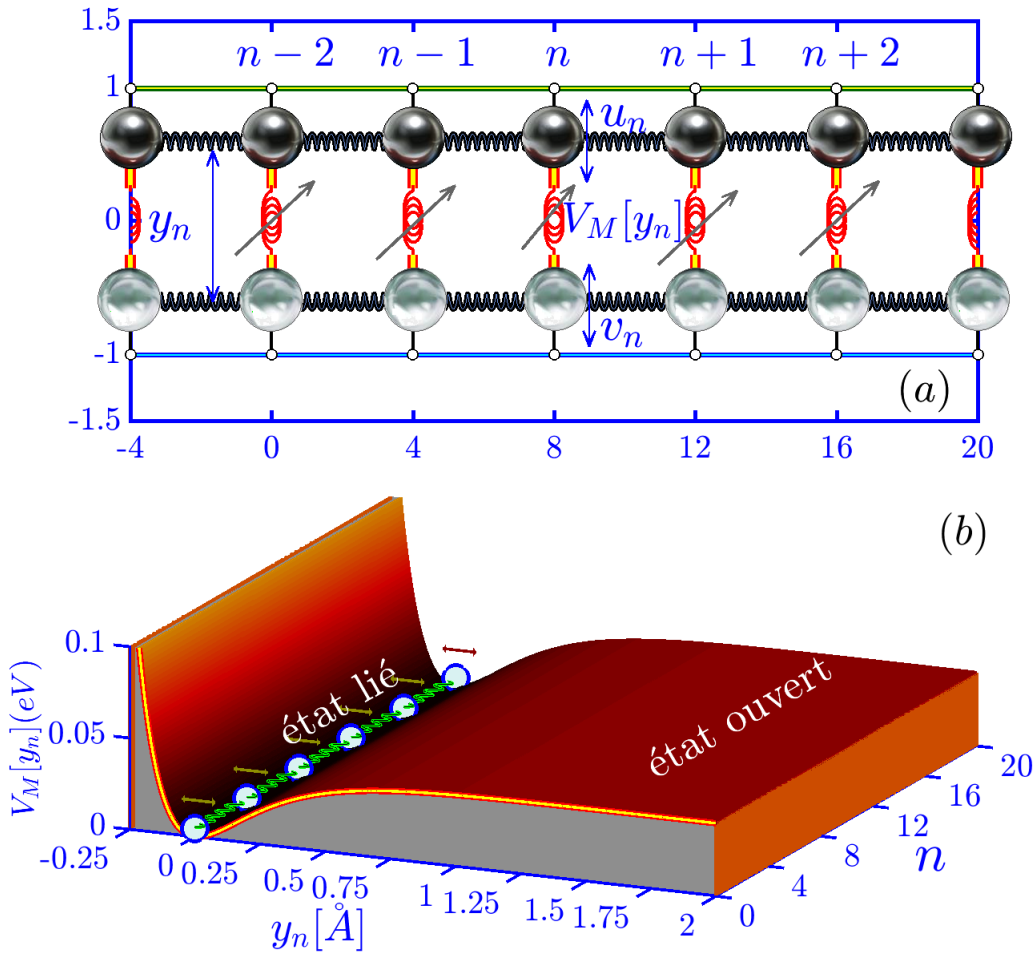


Figure 15: (a) : Représentation simplifiée de la double hélice d'ADN selon le modèle de Peyrard Bishop . Les cercles de couleur verte (respectivement de couleur bleue) représentent les nucléotides tandis que les ressorts de couleur noire représentent l'interaction harmonique entre nucléotides du même brin, tandis que ceux de couleur rouge modélisent l'interaction non linéaire entre nucléotides des brins opposés. (b) : Représentation de l'interaction non linéaire modélisée par le potentiel de Morse $V_M[y_n]$, montrant l'état lié/ouvert de la molécule d'ADN.

Le Hamiltonien proposé par PB est donné par [44] :

$$H = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{m}{2} (\dot{u}_n^2 + \dot{v}_n^2) + \frac{k}{2} [(u_n - u_{n-1})^2 + (v_n - v_{n-1})^2] + D \left(1 - e^{-\frac{a}{\sqrt{2}}(u_n - v_n)} \right)^2 \right\}, \quad (1.18)$$

où m est la masse d'un nucléotide, u_n, v_n sont les coordonnées des déplacements transversaux de ces nucléotides par rapport à la position d'équilibre et \dot{u}_n, \dot{v}_n sont leurs vitesses. k est la constante

de l'interaction harmonique, D l'énergie de dissociation et a est la distance caractéristique de l'interaction. Le premier terme de l'équation Eq. (1.18) représente l'énergie cinétique de translation, le deuxième terme traduit l'énergie d'empilement entre paires de bases successives tandis que le dernier terme modélise les liaisons hydrogènes assurant la cohésion d'une paire de base donnée. Ces liaisons hydrogènes sont modélisées par le potentiel de Morse dont la représentation est donnée à la figure 15.(b). Le potentiel de Morse modélise non seulement la répulsion (pour $y_n < 0$) entre paires de base symbolisant le fait que les paires de bases ne peuvent s'interpénétrer, mais aussi la faible interaction de ces bases pour les grands étirements où les bases azotées occupent le plateau du potentiel.

Le Hamiltonien de PB donné à l'équation Eq. (1.18) peut encore se mettre sous la forme :

$$H = \mathcal{H}_1(x_1, x_2, \dots, x_N, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots, \dot{x}_N) + \mathcal{H}_2(y_1, y_2, \dots, y_N, \dot{y}_1, \dot{y}_2, \dots, \dot{y}_N), \quad (1.19)$$

où $x_n = (u_n + v_n)/\sqrt{2}$ et $y_n = (u_n - v_n)/\sqrt{2}$ sont respectivement les coordonnées normales des modes symétriques et antisymétriques. Le premier terme de l'équation Eq. (1.19) est la partie quadratique qui correspond au mouvement du centre de masse de chacune des paires de bases. Son expression est donnée par :

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}_n^2 + \frac{1}{2} k (x_n - x_{n-1})^2 \right\}, \quad (1.20)$$

et l'équation différentielle correspondante est :

$$m \ddot{x}_n - k(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}) = 0. \quad (1.21)$$

Le second terme de l'équation Eq. (1.19) contient quant à lui l'information intéressante relative à la dynamique interne de chacune des paires de bases. Il prend non seulement en compte la dynamique de chaque base azotée par rapport aux paires voisines, mais également par rapport à la base qui lui est appariée. Ce terme s'écrit :

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{1}{2} m \dot{y}_n^2 + \frac{1}{2} k (y_n - y_{n-1})^2 + D (1 - e^{-ay_n})^2 \right\}. \quad (1.22)$$

L'équation régissant la dynamique des nucléotides correspondant au Hamiltonien \mathcal{H}_2 est :

$$m \ddot{y}_n - k(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + 2aD (1 - e^{-ay_n}) e^{-ay_n} = 0. \quad (1.23)$$

Cet Hamiltonien \mathcal{H}_2 , encore appelé Hamiltonien de Peyrard-Bishop, a été utilisé par ces auteurs pour donner une description du processus de dénaturation de l'ADN en mesurant la valeur moyenne $\langle y \rangle$ ⁶ de la vibration des liaisons hydrogène entre paires de bases sous l'effet de la température⁷, révélant au passage l'influence non négligeable du couplage harmonique k sur cette dénaturation [44–46]. En 1991, Thierry Dauxois a incorporé la géométrie double hélice de l'ADN en ajoutant au Hamiltonien \mathcal{H}_2 un couplage hélicoïdal [56].

6. $\langle y \rangle = \frac{1}{N t_s} \sum_{n,t}^{N, t_s} y_n(t)$, avec N le nombre total de nucléotides et t_s le temps final de calcul.

7. Afin de tenir compte de l'effet de la température sur la dénaturation de l'ADN, les auteurs ont ajouté au terme de droite de l'équation Eq. (1.23), l'expression $-m\gamma\dot{y}_n + \xi_n(t)$. Avec $\xi_n(t)$ un bruit blanc gaussien vérifiant $\langle \xi_n(t) \rangle = 0$ et $\langle \xi_n(t) \xi_{n'}(t') \rangle = 2m\gamma k_B T \delta_{nn'} \delta(t - t')$, où γ est le coefficient de viscosité du milieu, k_B est la constante de Boltzmann et T est la température du milieu.

Il est toutefois à noter que les courbes de dénaturation obtenues ne sont pas en accord avec celles obtenues expérimentalement. Une explication de cet écart vient de la forme du Hamiltonien \mathcal{H}_2 donnée à l'équation Eq. (1.22). En effet, \mathcal{H}_2 possède un inconvénient majeur suite à la forme harmonique de l'énergie potentielle d'empilement. Cette forme particulière correspond en fait au développement au second ordre autour des positions d'équilibre $y_n \approx y_{n-1}$, uniquement valide lorsque la force entre les paires de bases successives est assez forte pour garder y_n proche de y_{n-1} pendant la dynamique [57]. Or lors du processus de dénaturation la différence $y_n - y_{n-1}$ est très importante, invalidant ainsi l'approximation harmonique du premier ordre pour l'interaction d'empilement. Pour corriger ce défaut du modèle, Dauxois, Peyrard et Bishop ont proposé un modèle amélioré de la forme [58] :

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{1}{2} m \dot{y}_n^2 + \frac{1}{2} k [1 + \rho e^{-\alpha(y_n + y_{n-1})}] (y_n - y_{n-1})^2 + D (1 - e^{-ay_n})^2 \right\}, \quad (1.24)$$

où ρ et α sont des constantes. L'équation différentielle correspondant au Hamiltonien \mathcal{H} est :

$$\begin{aligned} m \ddot{y}_n - k(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + \frac{1}{2} \rho k [2 - \alpha(y_n - y_{n-1})] (y_n - y_{n-1}) e^{-\alpha(y_n + y_{n-1})} \\ - \frac{1}{2} \rho k [2 + \alpha(y_{n+1} - y_n)] (y_{n+1} - y_n) e^{-\alpha(y_{n+1} + y_n)} + 2aD (1 - e^{-ay_n}) e^{-ay_n} = 0. \end{aligned} \quad (1.25)$$

L'avantage de cette nouvelle interaction d'empilement anharmonique est que, grâce au terme exponentiel, le terme d'interaction chute de $k(1 + \rho)$ à k lorsque les bases appariées s'écartent, ce qui décroît la rigidité de la chaîne d'ADN près de la dissociation. Cet effet est conforme au phénomène attendu de diminution de l'interaction d'empilement. Ce nouveau modèle Hamiltonien de l'ADN, appelé modèle de Dauxois-Peyrard-Bishop (DPB), conduit à une dénaturation thermique abrupte, compatible avec les résultats expérimentaux [58]. Depuis lors, plusieurs études visant à mieux comprendre le processus de dénaturation de l'ADN ont été menées sur ce modèle amélioré de DPB [59–69]. Certaines de ces études modifiant le Hamiltonien \mathcal{H} en y incorporant aussi bien la viscosité du milieu, les inhomogénéités des bases azotées ou les effets du solvant, rendant le modèle encore plus réaliste.

Modèle hélicoïdal d'ADN de Barbi, Cocco et Peyrard

Bien que le modèle de Peyrard-Bishop reproduise certaines propriétés intéressantes de la molécule d'ADN, il ne prend pas en compte la structure géométrique de celle-ci. Afin de remédier à cela, Barbi, Cocco et Peyrard ont proposé en 1999 un modèle modifié de PB [70, 71]. Ce nouveau modèle inclus les interactions de torsion dues à l'ouverture de la double hélice. Dans ce modèle encore appelé modèle BCP, chaque base azotée (plus exactement chaque complexe sucre-base azotée) est considérée comme un objet simple indéformable, tandis que la liaison sucre-phosphate entre les bases azotées appartenant à un même brin est modélisée par une tige élastique. La figure 16 donne la représentation graphique du modèle [70, 71].

Le modèle possède deux degré de liberté par paire de bases : une variable radiale r_n modélisant la vibration entre bases azotées appartenant à des brins différents, et une variable ortho-radiale φ_n modélisant la torsion de chaque paire de bases par rapport à une direction de référence. Cet angle de torsion est restreint dans le plan contenant la paire de bases azotées. φ_n croît de la paire de bases

azotées n à celle qui la suit directement $n + 1$ et permet de rendre compte de la structure hélicoïdale du double brin. Le Lagrangien \mathcal{L}_{BCP} du modèle est [70, 71] :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{BCP} = & \sum_{n=1}^N \left\{ (mr_n^2 + mr_n^2 \dot{\varphi}_n^2) - D (1 - e^{-\alpha(r_n - R_0)})^2 - K (\ell_{n,n-1} - \ell_0)^2 \right\} \\ & - \frac{1}{2} KR_0^2 \sum_{n=1}^N (\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1})^2, \end{aligned} \quad (1.26)$$

où ℓ_0 est la distance à l'équilibre entre deux paires de bases consécutives situées sur le même brin, tandis que $\ell_{n,n-1}$ est celle entre deux bases consécutives [ici la base au rang n et celle au rang $n - 1$] lorsque l'angle de torsion φ_n varie. Les expressions de ℓ_0 et de $\ell_{n,n-1}$ se déduisent des figures 16.(a), 16.(b) et valent respectivement :

$$\ell_0 = \sqrt{h^2 + 4R_0^2 \sin^2 \left(\frac{\theta_0}{2} \right)}, \quad \ell_{n,n-1} = \sqrt{h^2 + r_n^2 + r_{n-1}^2 - 2r_n r_{n-1} \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1})}. \quad (1.27)$$

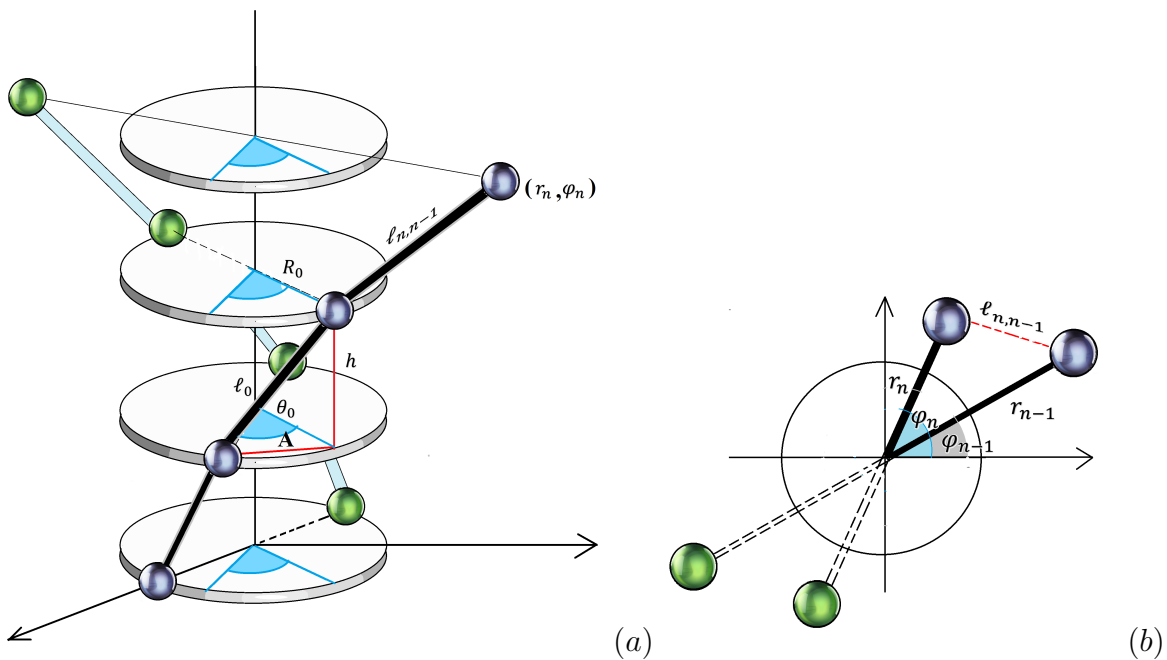


Figure 16: (a) : Représentation simplifiée de la double hélice d'ADN selon le modèle de Barbi, Cocco et Peyrard [70]. La n -ième paire de bases azotées est repérée par sa coordonnée radiale r_n et angulaire φ_n . Les paires de bases voisines appartenant à un même brin sont reliées entre elles par des tiges élastiques dont la longueur à l'équilibre est ℓ_0 . R_0 , θ_0 et h sont les paramètres du modèle dont les valeurs sont déduites de la géométrie de la forme B de l'ADN. (b) : Représentation plane des cellules du rang n et $n - 1$ du panel (a) montrant le choix des variables.

Le premier terme de l'équation Eq. (1.26) représente l'énergie cinétique de la paire de bases, le deuxième terme modélise l'interaction anharmonique de type Morse entre bases azotées appartenant à des brins différents, avec R_0 la distance à l'équilibre, D l'énergie de dissociation et α un paramètre ayant la dimension de l'inverse d'une longueur. Le troisième terme du Lagrangien \mathcal{L}_{BCP} modélise l'énergie potentielle élastique entre bases azotées appartenant au même brin. Pour ce qui est du

dernier terme de l'équation Eq. (1.26), il représente l'interaction d'empilement entre paires de bases voisines et dont le rôle est de diminuer la rigidité d'une paire de base ouverte par rapport à celle fermée tout en la stabilisant. L'équation différentielle des nucléotide dont le Lagrangien est donné à l'équation Eq. (1.27) est :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2m\ddot{r}_n - 2mr_n\dot{\varphi}_n^2 + 2\alpha D (1 - e^{-\alpha(r_n - R_0)}) e^{-\alpha(r_n - R_0)} + 2K [2r_n - r_{n+1} \cos(\varphi_{n+1} - \varphi_n)] \\ - 2Kr_{n-1} \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1}) \\ - 2K\ell_0 \left[\frac{r_n - r_{n+1} \cos(\varphi_{n+1} - \varphi_n)}{\ell_{n+1,n}} + \frac{r_n - r_{n-1} \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1})}{\ell_{n,n-1}} \right] = 0, \\ 2mr_n^2\ddot{\varphi}_n + 4mr_n\dot{r}_n\dot{\varphi}_n + KR_0^2(\varphi_{n+2} - 4\varphi_{n+1} + 6\varphi_n - 4\varphi_{n-1} + \varphi_{n-2}) \\ + 2Kr_n [r_{n-1} \sin(\varphi_n - \varphi_{n-1}) - r_{n+1} \sin(\varphi_{n+1} - \varphi_n)] \\ + 2K\ell_0 r_n \left[\frac{r_{n+1} \sin(\varphi_{n+1} - \varphi_n)}{\ell_{n+1,n}} - \frac{r_{n-1} \sin(\varphi_n - \varphi_{n-1})}{\ell_{n,n-1}} \right] = 0. \end{array} \right. \quad (1.28)$$

Le modèle de BCP a tout comme le modèle de DPB fait l'objet de plusieurs études dans la littérature. Certaines de ces études se focalisant sur l'existence et la propagation des structures localisées de faibles/grandes amplitudes, tandis que d'autres l'explorant pour une meilleure compréhension du processus de dénaturation thermique [72–76].

Modèle d'ADN de Peyrard-Bishop-Holstein

C'est un modèle dérivé de celui de Peyrard-Bishop anharmonique. En effet, il a été suggéré que le modèle anharmonique de PB pourrait être étendu afin d'investiguer sur les propriétés de migration des charges en couplant les degrés de liberté de la dynamique vibrationnelle du réseau à ceux du recouvrement électronique [46–48]. De plus, un couplage fort entre électron et phonon pourrait conduire à la formation des polarons modélisant la migration des charges [47, 49, 50]. Notons qu'un polaron est une quasi-particule utilisée en physique des solides polaires (cristaux ioniques) pour décrire l'effet de polarisation électrique d'un électron sur son voisinage. Malgré le fait que la grande masse effective de la quasi-particule soit un handicap pour l'efficacité du transport des charges, l'interaction électron-phonon devrait tout de même être prise en compte lors de l'étude de la dynamique de l'ADN.

C'est dans l'optique de prendre en compte ces effets que le modèle anharmonique de Peyrard-Bishop-Dauxois a été modifié et transformé en modèle de Peyrard-Bishop-Holstein (PBH). Le modèle de PBH suppose que la molécule d'ADN est uniforme avec la même valeur de l'énergie de site pour chaque base. Néanmoins, l'environnement des molécules et des ions des corps dissous entourant la molécule d'ADN peut affecter non seulement l'épine dorsale du complexe sucre-phosphate, mais également les molécules de base. Le Hamiltonien de PBH est donné par [51–53] :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ch} + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_{lat}, \quad (1.29)$$

où le premier terme de droite de l'équation Eq. (1.29) décrit le saut de charge entre des paires de bases adjacentes et a pour expression :

$$\mathcal{H}_{ch} = -V \sum_n (c_n^\dagger c_{n+1} + c_n^\dagger c_{n-1}). \quad (1.30)$$

Avec c_n^\dagger et c_n représentant respectivement les opérateurs création et annihilation pour le porteur de charge placé à la n -ième paire de bases azotées du double brin, V représente l'intégrale de transfert entre les orbitales π des paires de bases adjacentes. Le deuxième terme de l'équation Eq. (1.29) modélise l'énergie de couplage entre la vibration des paires de bases du réseau et le transfert des charges. Il est calqué sur le couplage de type Holstein [54] et vient du fait que l'étirement local d'une paire de bases affecte l'énergie du porteur de charge. Son expression est :

$$\mathcal{H}_{int} = \chi \sum_n y_n c_n^\dagger c_n, \quad (1.31)$$

avec χ la constante de couplage et y_n le déplacement transverse par rapport à la position d'équilibre de la paire de bases située au site n . Le dernier terme \mathcal{H}_{lat} de l'équation Eq. (1.29) correspond au Hamiltonien du modèle anharmonique de PBD donné à l'équation Eq. (1.24) de la section §1.3.2.

L'équation de la dynamique du modèle de PBH est obtenue dans l'approximation semi classique. Cette approximation consiste à traiter le mouvement des électrons dans le domaine quantique et celui de la vibration des nucléotides dans le domaine classique [55]. Ainsi, le vecteur d'état $|\psi\rangle$ du système est le produit d'un état exciton normalisé $|ex\rangle$ et d'un état cohérent $|ph\rangle$ d'expression :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) c_n^\dagger |0\rangle_{ex} \left\{ e^{\frac{1}{i\hbar} \sum_n [\beta_n(t) P_n - \pi_n(t) y_n]} \right\} |0\rangle_{ph}, \quad (1.32)$$

où $\hbar = h/2\pi$ est le quantum d'action, avec h la constante de Planck, $|0\rangle_{ex}$ et $|0\rangle_{ph}$ l'état fondamental de l'exciton et du phonon respectivement, $a_n(t)$ l'amplitude de probabilité de trouver l'électron dans l'état $c_n^\dagger |0\rangle_{ex}$, $\beta_n(t) = \langle \psi(t) | y_n | \psi(t) \rangle$, $\pi_n(t) = \langle \psi(t) | P_n | \psi(t) \rangle$ les valeurs moyennes de la vibration de la position $y_n(t)$ et de l'impulsion $P_n(t)$. Faisant usage de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \left\langle \psi \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \psi \right\rangle = \langle \psi | \mathcal{H}_{ch} + \mathcal{H}_{int} | \psi \rangle,$$

où le ket $|\psi\rangle$ est donné à l'équation Eq. (1.32), l'équation différentielle vérifiée par l'amplitude $a_n(t)$ de l'exciton est :

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = -V(a_{n+1} + a_{n-1}) + \chi a_n \beta_n. \quad (1.33)$$

Pour ce qui est de la dynamique de la partie classique, elle est obtenue au moyen des équations de Hamilton données par :

$$\begin{cases} \dot{P}_n = -\frac{\partial}{\partial \beta_n} \langle \psi | \mathcal{H}_{ch} + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_{lat} | \psi \rangle, \\ \dot{q}_n = \frac{\partial}{\partial \pi_n} \langle \psi | \mathcal{H}_{ch} + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_{lat} | \psi \rangle, \end{cases}$$

ce qui conduit à l'équation :

$$\begin{aligned} m\ddot{\beta}_n &= \frac{1}{2} k\rho b [(\beta_n - \beta_{n-1})^2 e^{-b(\beta_n + \beta_{n+1})} + (\beta_{n+1} - \beta_n)^2 e^{-b(\beta_{n+1} + \beta_n)}] + 2aD (e^{-\alpha\beta_n} - 1) e^{-\alpha\beta_n} \\ &\quad + k(\beta_{n+1} - 2\beta_n + \beta_{n-1}) - k\rho [(\beta_n - \beta_{n-1}) e^{-b(\beta_n + \beta_{n+1})} - (\beta_{n+1} - \beta_n) e^{-b(\beta_{n+1} + \beta_n)}] \\ &\quad - \chi |a_n|^2. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Les équations Eq. (1.33) et Eq. (1.34) constituent les équations de base du modèle d'ADN de PBH.

Bien que le modèle Hamiltonien amélioré de DPB reproduise de façon acceptable les courbes de dénaturations obtenues expérimentalement, il contient un défaut de modélisation au niveau de l'énergie potentielle d'interaction d'empilement. En effet, tel qu'il est observé sur le deuxième terme de l'équation Eq. (1.24), cette énergie potentielle associée diverge lorsque les paires de bases successives se séparent à l'infini. Ce résultat ne cadre pas avec la réalité physique qui stipule que cette énergie devrait atteindre un plateau (une limite finie) car, la force résultante de l'interaction d'empilement tend à s'annuler au fur et à mesure que l'écartement entre paires de bases croît. Afin de prendre en compte [comme c'est le cas dans les modèles statistiques] ce comportement de couplage entre paires de bases successives, Marc Joyeux et Sahin Buyukdagli (JB) ont amélioré le modèle de DPB en modifiant la forme dudit potentiel d'interaction d'empilement.

Pour cette fin, ils ont dans un premier temps proposé une première forme de cette énergie d'interaction d'empilement, dont l'expression mathématique est [77, 78] :

$$\mathcal{W}(y_n - y_{n-1}) = \min \left[\frac{\Delta H}{2}, \frac{1}{2}K(y_n - y_{n-1})^2 \right], \quad (1.35)$$

avec $\Delta H/2$ la limite supérieure de l'énergie d'empilement.

Faisant usage de cette nouvelle forme d'interaction, Joyeux et Buyukdagli (JB) ont obtenu tout comme dans le modèle de DPB, des courbes de dénaturation abruptes au voisinage de la température critique T_c ($T_c \approx 80^\circ C$). Ce résultat leur a ainsi permis de conclure que la prise en compte de la finitude de l'énergie d'empilement est suffisante pour obtenir une transition discontinue. Cependant, ils ont également observé lors des simulations par dynamique moléculaire que cette forme d'interaction d'empilement conduit à des configurations non physiques. En effet, au voisinage de la température critique, l'équation Eq. (1.35) conduit non seulement à des grandes valeurs de y_n (ce qui est normal), mais aussi de $y_n - y_{n-1}$ (ce qui l'est beaucoup moins car correspond à une situation non physique où après la séparation, le brin d'ADN s'est brisé au lieu de rester intact).

Afin d'éliminer cet effet, JB ont modifié de nouveau l'interaction donnée par l'équation Eq. (1.35) en introduisant dans un premier temps, un terme harmonique qui intègre dans le modèle la rigidité du squelette sucre-phosphate, puis en remplaçant dans un second temps la fonction $\min()$ par une fonction exponentielle plus proche de la réalité physique [13, 57, 77–81]. Finalement le terme d'interaction obtenu s'écrit :

$$\mathcal{W}(y_n - y_{n-1}) = \frac{\Delta H}{2} \left(1 - e^{-b(y_n - y_{n-1})^2} \right) + K_b (y_n - y_{n-1})^2, \quad (1.36)$$

où la constante harmonique K_b est 2000 fois plus petite que celle k du modèle de DPB et b un paramètre d'échelle. C'est cette constante qui permet de conserver suffisamment basses les valeurs de $(y_n - y_{n-1})$, évitant ainsi la contribution de configuration dans laquelle un brin se retrouve brisé. Contrairement au cas du modèle de DPB, l'interaction d'empilement donnée par l'équation Eq. (1.36) dépend uniquement de la distance entre les plateaux successifs. Les panels (a) et (b) de la figure 17 donnent respectivement une représentation tridimensionnelle et plane des deux formes du potentiel d'interaction d'empilement du modèle de JB. Les similitudes et différences de ces deux formes sont mises en exergue au panel (b). Quant au panel (c), il montre une comparaison des résultats obtenus aussi bien par la méthode de l'intégrale de transfert que par celle de la dynamique

moléculaire, du modèle harmonique de PB [donné par l'équation Eq. (1.23)], anharmonique de DPB [voir équation Eq. (1.25)] et de JB [équation Eq. (1.38)] lorsqu'une molécule homogène d'ADN est soumise à une augmentation graduelle de la température [77, 78]. Le Hamiltonien du modèle de JB est donné par :

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{1}{2} m \dot{y}_n^2 + \frac{\Delta H}{2} \left[1 - e^{-b(y_n - y_{n-1})^2} \right] + K_b (y_n - y_{n-1})^2 + D (1 - e^{-ay_n})^2 \right\}, \quad (1.37)$$

et l'équation différentielle correspondant :

$$m \ddot{y}_n - 2aD(e^{-ay_n} - 1)e^{-ay_n} + \frac{2\Delta H b}{C} \left[(y_n - y_{n-1})e^{-b(y_n - y_{n-1})^2} - (y_{n+1} - y_n)e^{-b(y_{n+1} - y_n)^2} \right] - 2K_b(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) = 0. \quad (1.38)$$

Au regard des résultats de cette figure 17(c), on serait tenté de dire que le modèle de JB n'apporte pas de grande nouveauté par rapport au modèle de DPB, puisqu'il conduit qualitativement au même résultat quant à la dénaturation thermique. Cette assertion serait erronée car l'apport essentiel du modèle de JB est qu'il peut être en partie dérivé des modèles statistiques du type Poland-Scheraga (PS) [82], contrairement au modèle de DPB dont les paramètres ont été ajustés directement sur les données expérimentales [57]. En effet, dans le modèle de JB, l'énergie d'empilement du plateau $\Delta H = 0.44eV$ est du même ordre de grandeur que les énergies d'empilement introduites dans les modèles thermodynamiques. Ces modèles phénoménologiques, reproduisant de façon très fidèle les courbes expérimentales. Par exemple, selon le Tableau I de la référence [83], l'énergie libérée par le système lors de l'ajout d'une paire de bases supplémentaire à la séquence originale varie entre $0.347eV$ et $0.465eV$ en fonction de la nature des nouvelles bases appariées [77]. Ce qui signifie que l'équation Eq. (1.36) est assez sensible et peut tout simplement être prolongée pour s'appliquer au cas des séquences hétérogènes [77, 80]. Plusieurs études s'appuyant sur le modèle de JB ont été menées dans la littérature, comme l'attestent les références suivantes [84–91].

Tel qu'on peut le constater, de nombreuses approches et divers modèles ont été proposés dans la littérature pour étudier les mouvements mis en jeu dans la macromolécule d'ADN. Ces approches et modèles ont été d'ailleurs appréciés diversement dans la communauté des Biologistes, comme le prouve une succession de publications dans la revue scientifique Nature [92–95].

Contrairement aux différentes études statistiques menées sur des modèles Hamiltonien de cette macromolécule, nous étudions dans cette thèse les conditions d'existence des excitations non linéaires localisées, ainsi que leurs propagations. Ces structures localisées étant non seulement responsables de la localisation de l'énergie dans l'ADN, mais également des potentiels initiateurs des processus de base de la vie tel que la réplication ou la transcription. Le modèle Hamiltonien utilisé pour la circonstance est celui de Joyeux et Buyukdagli (JB) car la modélisation de l'énergie d'interaction d'empilement y est plus réaliste et proche de celle des modèles statistiques.

1.4 Motivation et problématique de cette thèse

Comme nous l'avons mentionné plus haut, l'ouverture locale de la double hélice sous forme d'une bulle et l'éventuel déplacement de cette bulle tout au long de la chaîne lors du processus de transcriptions, sont des signatures caractéristiques des excitations non linéaires [12]. De plus, des

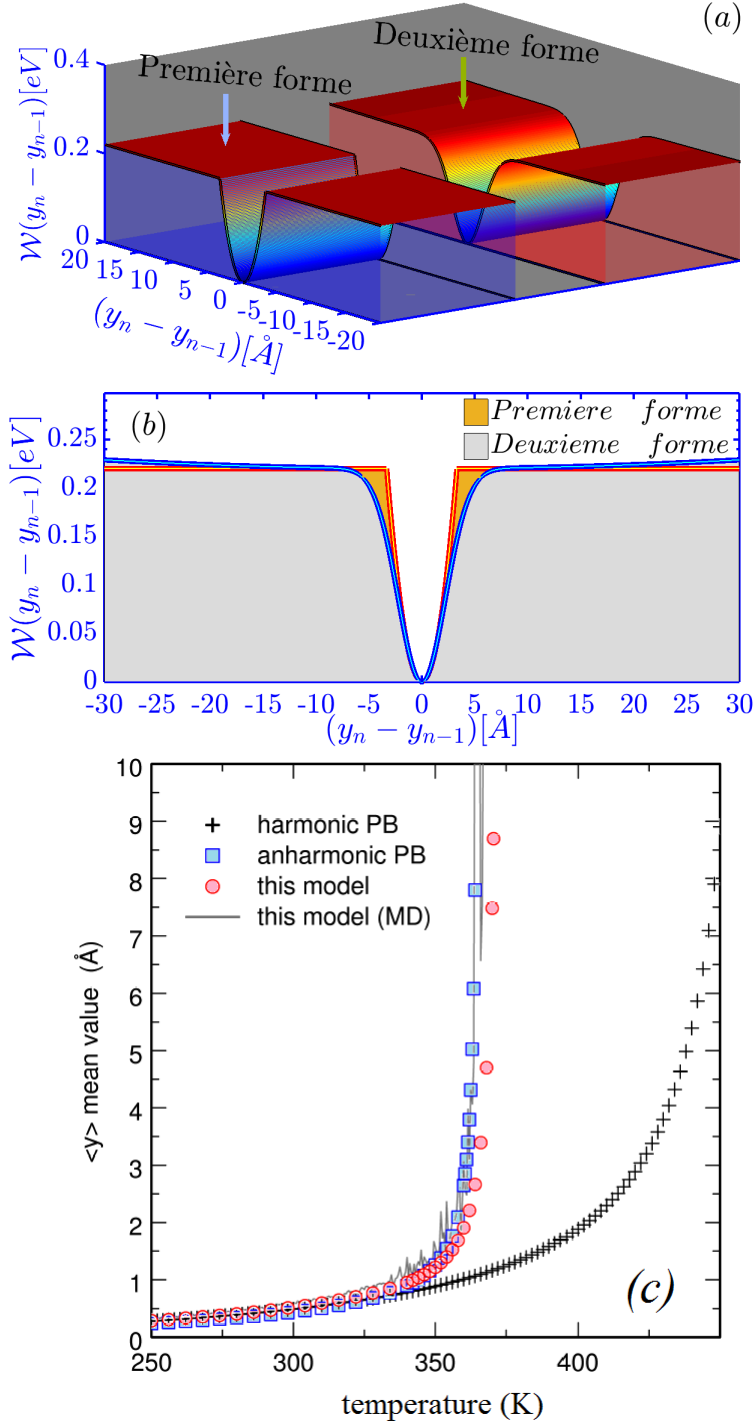


Figure 17: Représentation tridimensionnelle [panel (a)] et plane [panel (b)] des deux formes de l'énergie d'interaction d'empilement $\mathcal{W}(y_n - y_{n-1})$ entre paires de bases azotées selon le modèle d'ADN de JB [77]. Panel (c) : distance moyenne $\langle y \rangle$ entre les bases d'une même paire en fonction de la température. Les symboles montrent le résultat du calcul par la méthode de l'intégrale de transfert d'une séquence homogène à la limite thermodynamique pour le modèle harmonique de PB [Eq. (1.23)] (croix), le modèle anharmonique de DPB [Eq. (1.25)] (carrés) et le modèle de JB [Eq. (1.38)] (cercles). La courbe continue est celle obtenue par dynamique moléculaire pour une séquence homogène de 2399 paires de bases en utilisant le modèle de JB [77].

expériences de RMN [15–17] ou Raman [18, 19] menées sur cette macromolécule ont révélées la présence des états d’ouvertures temporaires de basses fréquences semblables à une respiration, et ayant une longue durée de vie. Afin de mieux comprendre le fonctionnement de cette macromolécule, des chercheurs ont élaborés des modèles mathématiques dont l’objectif serait de donner une explication satisfaisante des processus observés. Compte tenu du fait que l’apparition spontanée des excitations non linéaires fortement localisées dans la molécule d’ADN pourrait être un signe précurseur de sa transcription ou de sa réplication, des études ont été menées dans la littérature pour comprendre leurs modes de création. La floraison des études dans ce sens témoigne à suffisance l’intérêt qu’ont celles-ci sur le fonctionnement de la molécule.

Ces études ont été menées aussi bien sur des modèles Hamiltonien privilégiant une dynamique torsionnelle [27–33], sur ceux privilégiant une dynamique vibrationnelle [44–46, 58, 63, 64, 77, 78] que sur ceux combinant les deux types de dynamiques [70–76]. Ces excitations non linéaires ont, lorsque cela était l’objectif recherché, été prises sous la forme d’ondes non linéaires, solutions d’une équation non linéaire obtenue par approximation du milieu discret par le milieu continu. C’est le cas des solutions solitons type topologiques kink-antikink obtenues dans les références [28, 32, 33, 70, 72] imitant la dynamique des nucléotides lors du processus de transcription, ou le cas le cas des solutions solitons types non topologiques tels que les breathers, obtenus dans les différents modèles de DPB [56, 60, 62, 70, 71], modélisant le processus de dénaturation.

Tout comme les modèles de DPB, l’existence ainsi que la dynamique des ondes non linéaires dans le modèle de JB a été longuement exploré par plusieurs auteurs [84–88]. Ces auteurs ont montré qu’il y était possible qu’une onde plane modulationnellement instable conduise à la localisation de l’énergie dans la molécule d’ADN par l’émergence des structures localisées [85]. Ils ont également montré que les structures cohérentes telles que les compactons [86], les breathers issus d’une dérivée temporelle ordinaire [84, 87], ou fractionnaire [88] pouvaient également exister et se mouvoir dans cette macromolécule. Il est à noter qu’afin de prouver l’existence de ces structures, ces auteurs se sont appuyés sur des méthodes d’approximation. Ces méthodes d’approximation leur ont ainsi permis d’obtenir une équation de Schrödinger non linéaire (ESNL) cubique continue, et d’étudier au moyen d’elle, les conditions d’apparitions des ondes modulées, ou des solutions approchées du système.

Cependant, des études ont montré que les breathers discrets (BDs), encore appelés modes intrinsèquement localisés (MILs) sont des solutions obtenues dans des modèles discrets non linéaires rencontrés dans divers contextes de la physique et de la biologie [96, 97]. Ainsi, compte tenu du fait que la molécule d’ADN est un milieu discret, les structures localisées devraient également être obtenues dans le milieu discret pour être en accord avec la réalité physique. Dès lors, une question s’impose : comment générer les MILs dans le modèle d’ADN de JB sans avoir recours aux méthodes d’approximations des références [84–88]? De ce fait, nous examinons dans la présente étude, les conditions d’existences de ces MILs discrets par le biais d’une équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue (ESNLDE), obtenue au moyen de l’approximation onde rotative (AOR) [98–107].

L’obtention d’une équation de Schrödinger non linéaire discrète au moyen de l’AOR a déjà été explorée dans les modèles d’ADN de DPB [62, 75, 108]. Toutefois, ces auteurs ont toujours eu à fixer la fréquence du mode fondamental ω_b de l’onde plane de faible amplitude à l’unité. Est-ce à dire que ω_b n’influe pas considérablement les solutions du systèmes? Quel serait l’impact de ω_b sur

les MILs si elle prenait une gamme de valeurs ?

Notons que plusieurs variantes de l'ESNLDE sont trouvées dans divers contextes de la physique et de la biologie. Nous pouvons citer entre autres, la localisation de l'énergie dans un modèle torsionnel d'ADN de DPB sous influence du solvant [108], le transport de l'énergie dans l'hélice α de la protéine [109], l'évolution du champ électrique dans un réseau de guide d'ondes optique couplé dans un matériau ayant une non linéarité Kerr [110, 111], le système Fermi-Pasta-Ulam (FPU) [112], la dynamique des superfluides dans un condensat de Bose-Einstein [114], et dans les milieux contenant des non linéarités Kerr soutenu par un gain intrinsèque [115]. S'appuyant sur cette ESNLDE, ces auteurs ont principalement étudié la stabilité et la mobilité des BDs, ainsi que l'existence des BDs de types compactons. Curieusement, aucune de ces études ne s'est orientée vers la recherche des multibreathers discrets (MBDs) sur une ESNLDE, comme cela a été le cas pour une équation de Schrödinger non linéaire discrète (ESNLD) avec une non linéarité cubique [122], saturable [123], dans une chaîne de type Klein-Gordon [124, 125], ou dans une ligne de transmission électrique [126]. Malgré le fait que les multisolitons discrets ont été observés dans plusieurs systèmes physiques, ils n'ont jusqu'alors pas encore été investigués dans l'ADN, bien que cette molécule puisse s'ouvrir localement et simultanément en plusieurs sites pour être transcrite. Quelles sont ainsi les conditions à remplir pour que ces MBDs existent et se meuvent dans le modèle d'ADN de JB ? Qu'en est-il de leurs stabilités ?

Il est bien connu que la dénaturation thermique du double brin d'ADN dépend de la solution dans laquelle elle baigne. En fait, l'interaction de l'ADN avec le milieu environnant correspond à l'effet de l'atténuation visqueuse, ayant pour conséquence l'amortissement de l'amplitude des oscillations des nucléotides [127, 128]. Tenant compte du fait que la majorité des biomolécules sont assemblées sous forme de réseau, elles sont non seulement constamment soumises aux forces de friction dues à la viscosité du liquide biologique, mais également exposées aux rayonnements électromagnétiques périodique externe. Ces facteurs impactent certainement sur le processus de génération des breathers dans la molécule de l'ADN et, ne peuvent par conséquent pas être ignorés. C'est dans cette optique que le modèle de DPB a été modifié dans la littérature afin d'y inclure la viscosité du milieu et/ou un forçage périodique monochromatique [129–132]. Toutefois, aucune de ces études ne s'est intéressée au processus de génération des MILs discrets dans la molécule d'ADN lorsque ces facteurs sont pris en compte. Dès lors, une question s'impose : comment générer les BDs et étudier leurs stabilités dans une molécule d'ADN soumise à la viscosité du milieu et à un forçage périodique uniforme ?

Comme mentionné à la section §1.2.1, l'acide désoxyribonucléique comporte quatre bases azotées appelées Adénine, Guanine, Thymine et Cytosine. L'association entre ces bases s'effectue par complémentarité au moyen des liaisons hydrogènes. Ainsi, la base Adénine s'associe à la base Thymine par l'intermédiaire de deux liaisons hydrogène, tandis que trois liaisons hydrogènes sont requises pour associer la Guanine à la Cytosine. Cette molécule n'étant pas isolée, elle interagit avec son milieu environnemental direct (viscosité) et lointain (excitation périodique), ce qui rend possible les dommages sur elle, pouvant conduire à la formation des cellules cancérogènes. Comme dommage, nous avons entre autres l'altération partielle ou totale du nombre de liaisons hydrogène entre les paires de bases. Lorsque cette altération est observée sur un unique couple localisé au site i dans une succession homogène de bases azotées de même type ($A = T$ ou $G \equiv C$) comme le montre la

figure 18(a), ou sur un ensemble de paires de bases azotées [voir figure 18(b)], cette paire i (ou série de paires $i, i \pm 1$) peut (peuvent) être assimilée(s) à une impureté. Dès lors, quel type de dynamique exhibe une chaîne d'ADN ayant en son sein une impureté localisée, et subissant simultanément l'influence de la viscosité du milieu et du forçage périodique ?

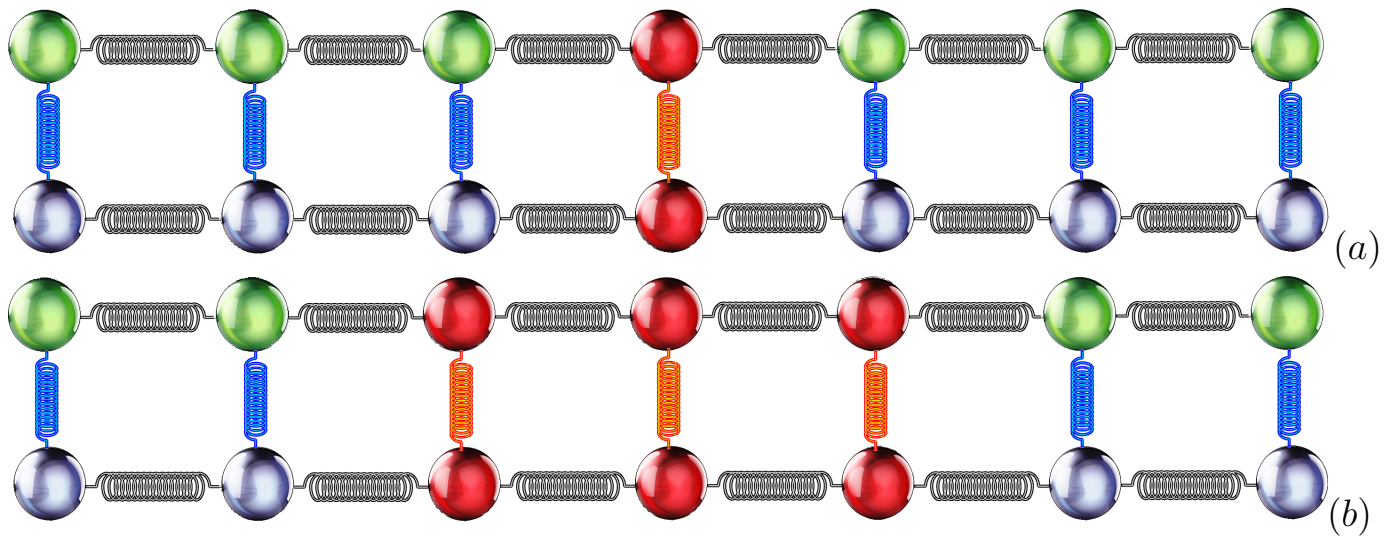


Figure 18: Illustration d'une impureté localisée sur un seul site [panel (a)], et d'une série d'impuretés localisées sur trois sites [panel (b)].

Il est bien connu en Physique/Chimie que lorsqu'il y a différence d'électronégativité entre les atomes entrant dans la formation d'une molécule, il apparaît des charges partielles $\delta^{(-)}$ et $\delta^{(+)}$. Ces charges partielles ont pour conséquence la formation d'un moment dipolaire d'intensité $p = |\delta e|d$, où d représente la distance entre le centre des noyaux des atomes et e est la charge élémentaire. Ce moment dipolaire permet non seulement de quantifier la polarité d'une liaison covalente, mais également de décrire le sens et la direction du déplacement des électrons du pôle positif vers le pôle négatif. Le tableau 4 donne la comparaison, en valeurs absolues, entre la charge réelle portée par chaque atome de la liaison polarisée et la charge maximale portée par un atome impliqué dans une liaison polarisée à l'extrême [134]. Compte tenu du fait que les nucléotides sont formés par l'association des molécules du tableau 4 [voir figure 3(a) – (d)], ceux-ci possèdent un moment dipolaire moyen compris entre 5.755 – 6.44 Debyes pour une paire de base $A - T$, et 6.004 – 6.483 Debyes pour la paire de base $G - C$ [135]. Cette différence de polarité entre bases azotées rend possible la formation par complémentarité des liaisons hydrogènes responsable du couplage inter-base [voir traits de couleur bleu de la figure 3(e)&(f)].

Tableau 4: Moments dipolaires et pourcentages de caractère ionique associés à différentes liaisons covalentes communes [134].

	$C - H$	$C = C$	$C = O$	$O - H$	$N - H$
Moment dipolaire (D)	0.3	0	2.4	1.5	1.3
Pourcentage de caractère ionique (%)	5.8%	0%	41%	33%	27%

Par conséquent, une vibration de la paire de base azotée causera un changement du moment dipolaire, si bien que le transfert de l'excitation dans la molécule serait dû à l'interaction dipôle-

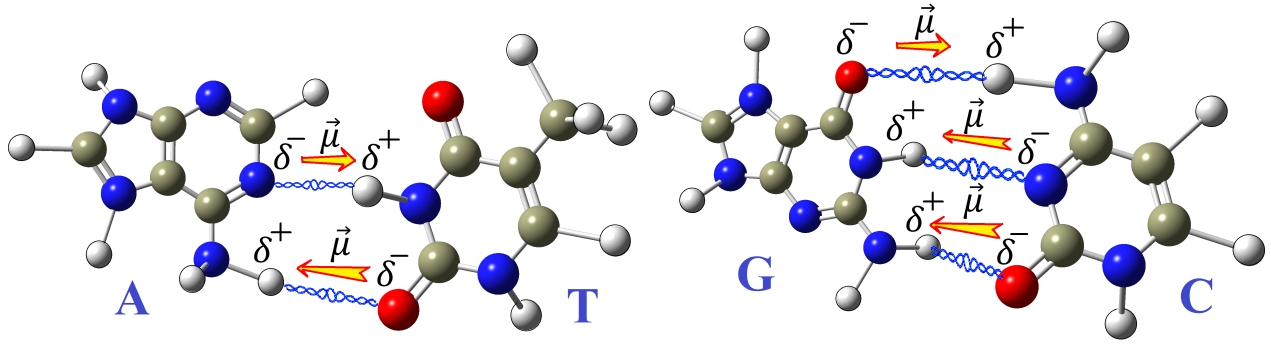


Figure 19: Liaisons hydrogène entre paire de bases azotées mettant en exergue l'existence d'un moment dipolaire issu de la distribution des charges partielles [133].

dipôle, avec une dépendance en $1/r^3$ sur la distance [136]. Il est également bien connu que les nucléotides de l'ADN interagissent avec des molécules d'eau de son milieu environnemental par des filaments de liaisons hydrogènes [137, 138], rendant de ce fait possible l'existence d'un transfert d'excitation par interaction longue portée effective comme l'illustre la figure 20, en raison du couplage

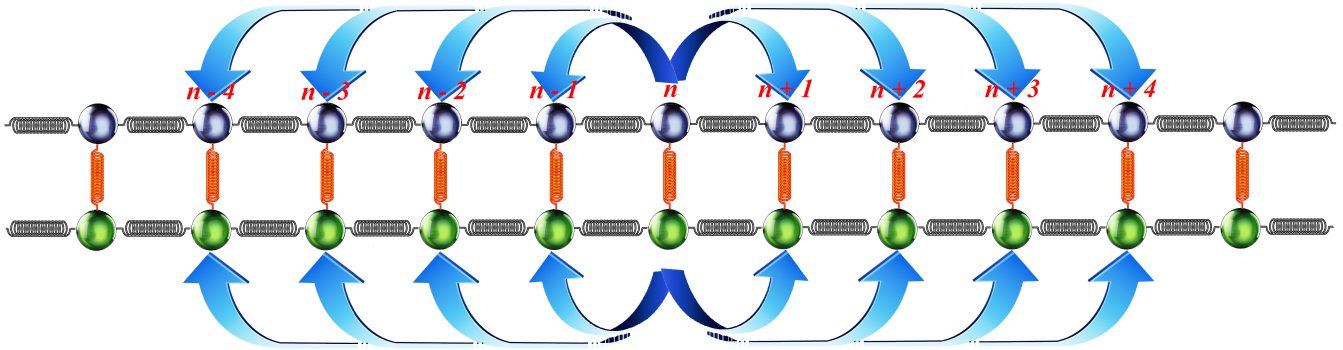


Figure 20: Illustration de l'interaction longue portée entre le nucléotide placé au site n et les nucléotides des sites $n \pm 1, n \pm 2, n \pm 3, n \pm 4, \dots$

nucléotide-eau [136]. Il devient donc clair qu'une modélisation plus réaliste de la dynamique de l'ADN devrait prendre en compte cette interaction longue portée.

La prise en compte de l'interaction longue portée dans la dynamique de l'ADN a été faite dans la littérature par l'ajout d'une énergie supplémentaire sur le Hamiltonien du modèle harmonique de PB comme l'attestent les références suivantes [139–142]. Dans ces références, les auteurs ont étudiés l'influence de l'interaction dipôle-dipôle sur l'existence et la propagation des breathers discrets dans la macromolécule. Or le modèle de PB n'est pas approprié pour décrire la dynamique de l'ADN car, sa courbe de dénaturation thermique ne concorde pas avec celle expérimentale [voir figure 17(c)]. La relation de dispersion ω_{ph} ⁸ du mode des phonons donnée par l'équation Eq. (24) de la référence [140] nous montre que le coefficient de longue portée \mathbf{J} pourrait impacter sur le sens de propagation des ondes dans le système. Ladite équation renseigne également qu'il pourrait exister des configurations

8. Relation de dispersion du mode linéaire : $\left(\frac{\omega_{\text{ph}}}{\omega_0}\right)^2 = 1 + 4\mathbf{C} \sin^2\left(\frac{q}{2}\right) + 2\mathbf{J} \sum_{\mathbf{m}} \frac{\cos(\mathbf{m}\mathbf{q})}{m^3}$ [140], avec $\omega_0 = \sqrt{\frac{2b^2D}{m}}$ la fréquence des oscillations dans la limite harmonique, b le paramètre d'échelle spatial du potentiel de Morse et D son énergie de dissociation, q est le vecteur d'onde et m un entier. $\mathbf{C} = \frac{C}{m\omega_0^2}$ et $\mathbf{J} = \frac{J}{m\omega_0^2}$ représentent respectivement les constantes de couplage adimensionnées de l'énergie potentielle d'empilement harmonique et de longue portée [140].

pour lesquelles le signe du rapport de la vitesse de groupe \mathbf{v}_g ⁹ à la relation de dispersion ω_{ph} soit positif [$\text{sgn}(\mathbf{v}_g/\omega_{ph}) > \mathbf{0}$] ou négatif [$\text{sgn}(\mathbf{v}_g/\omega_{ph}) < \mathbf{0}$]. Cette configuration est très intéressante car elle montre clairement que les ondes peuvent se propager dans les deux sens (de la gauche vers la droite ou de la droite vers la gauche) dans la molécule d'ADN moyennant la valeur de l'intensité du couplage \mathbf{J} . Un phénomène similaire qualifié d'« effet caméléon » par les auteurs de la référence [143] a été observé dans un réseau électrique. De plus, la vitesse de groupe prédit également l'existence des ondes stationnaires lorsque le vecteur d'onde \mathbf{q} est en dehors du centre et de la limite supérieure de la première zone de Brillouin¹⁰ ($\mathbf{q} \neq [\mathbf{0}; \pi]$) [144].

Ainsi donc la prise en compte du couplage dipôle-dipôle pourrait clairement enrichir la dynamique du système. Curieusement, aucune étude menée sur cette macromolécule d'ADN ne l'a exploré dans cet axe. Compte tenu de cela, il serait intéressant de vérifier les conditions d'apparition de l'« effet caméléon » dans le modèle anharmonique d'ADN de JB, et de voir par la suite comment ce couplage dipôle-dipôle influence l'existence des MILs d'une part, le type des MILs ainsi que leur stabilité d'autre part.

1.5 Conclusion

Il a été question pour nous dans ce chapitre 1, de faire une revue de la littérature sur les études qui ont déjà été menées sur la molécule d'ADN. Pour cela, nous avons commencé par présenter structurellement cette molécule aussi bien sur le plan statique que sur le plan dynamique. Ensuite, les modèles statistiques et certains modèles Hamiltonien ont été présentés. Partant des travaux effectués dans la littérature, nous avons relevé quelques insuffisances, ce qui nous a conduit à assortir la problématique et motivation de cette thèse par l'énumération d'un certain nombre de questions. Cette thèse s'articulera autour de ces différentes questions, questions qui seront résolues dans les chapitres suivants.

9. Vitesse de groupe des ondes : $\mathbf{v}_g = \frac{\omega_0^2}{\omega_{ph}} \left[\mathbf{C} \sin(\mathbf{q}) - \mathbf{J} \sum_{\mathbf{m}} \frac{\sin(\mathbf{m}\mathbf{q})}{\mathbf{m}^2} \right]$. [140]

10. En dynamique des réseaux, la première zone de Brillouin est une région de l'espace réciproque qui contient les vecteurs d'onde les plus proches de zéro. Elle est délimitée par les plans perpendiculaires aux vecteurs de base du réseau réciproque et, est utilisée pour caractériser les propriétés de propagation des ondes dans les matériaux périodiques.

Chapitre 2

Modèle et méthodologie

2.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons non seulement présenté la molécule d'ADN de façon générale ainsi que son rôle et ses fonctions dans le fonctionnement d'un organisme vivant, mais aussi avons donné les différents modèles physiques simplifiés de cette macromolécule développés dans la littérature. Dans le présent chapitre, nous donnerons les différents modèles ainsi que les méthodes analytiques et numériques nécessaires pour répondre à nos différentes questions de recherche. Ce chapitre sera structuré comme suit : nous utiliserons dans un premier temps le modèle discret original présenté par JB pour trouver les conditions favorables à l'apparition des modes localisés stationnaires/dynamiques ainsi que leurs stabilités. Nous modifierons ensuite ce modèle pour tenir compte aussi bien de la viscosité du milieu où baigne l'ADN ainsi que les effets du rayonnement périodique environnemental sur cette macromolécule. Afin de tenir compte des effets de la polarisation des liaisons hydrogènes dans cette macromolécule, nous modifierons le modèle original de JB en conséquence en incorporant une interaction longue portée de type dipôle-dipôle. Une brève vue d'ensemble des méthodes analytiques et numériques sera également donnée dans ce chapitre qui s'achèvera sur une conclusion.

2.2 Modélisation mathématique du modèle d'ADN de J.B

Considérons l'équation différentielle discrète du modèle unidimensionnel d'ADN de JB définie à la section §1.3.2 du chapitre §1 :

$$m\ddot{y}_n - 2aD(e^{-ay_n} - 1)e^{-ay_n} + \frac{2\Delta Hb}{C} \left[(y_n - y_{n-1})e^{-b(y_n - y_{n-1})^2} - (y_{n+1} - y_n)e^{-b(y_{n+1} - y_n)^2} \right] - 2K_b(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) = 0. \quad (2.1)$$

À cause de la forte non linéarité de l'équation Eq. (2.1), toute approche de recherche des solutions analytique requiert au préalable certaines hypothèses simplificatrices. En effet, comme il est coutume dans ce modèle, nous supposons que l'amplitude des oscillations des paires de bases au fond du puits de potentiel de Morse représenté à la figure 15(b) est assez importante pour être considérée comme

anharmonique, mais d'énergie insuffisante par rapport à l'énergie de dissociation D . Ce qui permet d'effectuer un développement limité des termes $e^{-b(y_{n\pm 1}-y_n)^2}$ de l'équation Eq. (1.36) et e^{-ay_n} du potentiel de Morse, au second et au troisième ordre respectivement [$e^{-b(y_{n\pm 1}-y_n)^2} \approx 1 - b(y_{n\pm 1}-y_n)^2$, $e^{-ay_n} \approx 1 - ay_n + \frac{1}{2}a^2y_n^2 - \frac{1}{6}a^3y_n^3$], réduisant ainsi l'équation Eq. (2.1) à :

$$\begin{aligned} \ddot{y}_n + \frac{2a^2D}{m} \left(y_n - \frac{3}{2}ay_n^2 + \frac{7}{6}a^2y_n^3 \right) + \frac{2\Delta Hb^2}{mC} [(y_{n+1}-y_n)^3 - (y_n-y_{n-1})^3] \\ - \frac{2}{m} \left(K_b + \frac{\Delta Hb}{C} \right) (y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) = 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Cette équation Eq. (2.2) se met encore sous la forme adimensionnée suivante :

$$\ddot{Y}_n - k_2(Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) + \omega_g^2(Y_n + \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) + k_4[(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] = 0, \quad (2.3)$$

où les paramètres d'adimensionnement sont :

$$\begin{aligned} Y_n = ay_n \quad t = \sqrt{\frac{m}{a^2D}}\tau; \quad k_2 = \frac{2}{a^2D} \left(K_b + \frac{\Delta Hb}{C} \right); \quad \omega_g^2 = 2; \quad \alpha = -\frac{3}{2}; \quad \beta = \frac{7}{6} \\ k_4 = \frac{2\Delta Hb^2}{CDa^4}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dans la section §2.2.1 suivante, nous investiguerons sur l'existence des BDs, solution de l'équation discrète Eq. (2.3) au moyen d'une équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue (ESNLDE).

2.2.1 L'équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue (ESNLDE)

Afin de résoudre l'équation Eq. (2.3), nous cherchons des solutions stationnaires de faibles amplitudes spatialement localisées et périodiques dans le temps sous la forme [98–100] :

$$Y_n(\tau) = \sum_{p=-L}^{p=L} a_n^{(p)}(\epsilon^2\tau) e^{ip\omega_b\tau}, \quad (2.5)$$

où ω_b est la fréquence du mode fondamental et ϵ son amplitude, $i^2 = -1$ un nombre complexe et les coefficients de Fourier $a_n^{(p)}(\epsilon^2\tau)$ varient lentement dans le temps. Il est à noter que l'ansatz donné par l'équation Eq. (2.5) est encore appelé approximation onde rotative (AOR) [98–107]. À cause de la décroissance exponentielle des coefficients de Fourier en p , ils doivent satisfaire les relations $a_n^{(p)} \sim \epsilon^p$ pour $p > 0$ avec $a_n^{(0)} \sim \epsilon^2$. De plus, compte tenu du fait que Y_n est réel, on doit également avoir $a_n^{(p)} = a_n^{(-p)*}$. Après insertion de l'équation Eq. (2.5) dans l'équation Eq. (2.3), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \sum_{p=-L}^{p=L} \left[\ddot{a}_n^{(p)} + 2ip\omega_b \dot{a}_n^{(p)} - p^2\omega_b^2 a_n^{(p)} - k_2 \left(a_{n+1}^{(p)} - 2a_n^{(p)} + a_{n-1}^{(p)} \right) + \omega_g^2 a_n^{(p)} \right] e^{ip\omega_b\tau} \\ + k_4 \left\{ \left[\sum_{p=-L}^{p=L} \left(a_{n+1}^{(p)} - a_n^{(p)} \right) e^{ip\omega_b\tau} \right]^3 - \left[\sum_{p=-L}^{p=L} \left(a_n^{(p)} - a_{n-1}^{(p)} \right) e^{ip\omega_b\tau} \right]^3 \right\} + \alpha\omega_g^2 \left[\sum_{p=-L}^{p=L} a_n^{(p)} e^{ip\omega_b\tau} \right]^2 \\ + \beta\omega_g^2 \left[\sum_{p=-L}^{p=L} a_n^{(p)} e^{ip\omega_b\tau} \right]^3 = 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

En prenant $L = 2$ et en supposant que le coefficient de couplage linéaire k_2 est de l'ordre de ϵ^2 ($k_2 \sim \epsilon^2$), nous obtenons en combinant les termes d'ordre $\epsilon^3 e^{i\omega_b \tau}$ et $\epsilon e^{i\omega_b \tau}$, l'équation suivante : (voir l'Annexe A pour plus de détails de calcul)

$$\begin{aligned}
i\dot{a}_n^{(1)} + \frac{2k_2 + \omega_g^2 - \omega_b^2}{2\omega_b} a_n^{(1)} - \frac{k_2}{2\omega_b} (a_{n+1}^{(1)} + a_{n-1}^{(1)}) + \frac{3\beta\omega_g^2 - \left[6k_4 + 4\alpha^2\omega_g^2 + \frac{2\alpha^2\omega_g^4}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2}\right]}{2\omega_b} |a_n^{(1)}|^2 a_n^{(1)} \\
+ \frac{3k_4}{2\omega_b} \left\{ 2 (a_{n+1}^{(1)} + a_{n-1}^{(1)}) |a_n^{(1)}|^2 + 2 \left(|a_{n+1}^{(1)}|^2 + |a_{n-1}^{(1)}|^2 \right) a_n^{(1)} + |a_{n+1}^{(1)}|^2 a_{n+1}^{(1)} + |a_{n-1}^{(1)}|^2 a_{n-1}^{(1)} \right\} \\
+ \frac{3k_4}{2\omega_b} \left\{ [a_{n+1}^{(1)*} + a_{n-1}^{(1)*}] (a_n^{(1)})^2 - \left[(a_{n+1}^{(1)})^2 + (a_{n-1}^{(1)})^2 \right] a_n^{(1)*} \right\} = 0,
\end{aligned} \tag{2.7}$$

où $a_n^{(1)*}$ est le complexe conjugué de $a_n^{(1)}$. Lorsque le changement de fonction suivant est posé

$$\psi_n = \sqrt{\frac{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}{2\omega_b}} a_n^{(1)} e^{-i\vartheta\tau}; \implies a_n^{(1)} = \sqrt{\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}} \psi_n e^{i\vartheta\tau}; i\dot{a}_n^{(1)} = \sqrt{\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}} (i\dot{\psi}_n - \vartheta\psi_n) e^{i\vartheta\tau}, \tag{2.8}$$

l'équation Eq. (2.7) se réduit à l'équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue (ESNLDE) telle que suit :

$$\begin{aligned}
i\dot{\psi}_n + (P_1 + Q_1 |\psi_n|^2) (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + Q_2 |\psi_n|^2 \psi_n + R_1 (\psi_{n+1} - 2\psi_n) |\psi_{n+1}|^2 \\
+ R_1 \{ (\psi_{n-1} - 2\psi_n) |\psi_{n-1}|^2 + (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \psi_n^2 - (\psi_{n+1}^2 + \psi_{n-1}^2) \psi_n^* \} = 0,
\end{aligned} \tag{2.9}$$

où les coefficients P_1, Q_1, Q_2, R_1 de l'équation Eq. (2.9), ainsi que les variables η et ϑ de équation Eq. (2.8) sont donnés par :

$$\begin{aligned}
P_1 = -\frac{k_2}{2\omega_b}, \quad R_1 = \frac{3k_4}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}, \quad Q_1 = 2R_1, \quad Q_2 = \frac{3\beta\omega_g^2 - \eta}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}, \quad \vartheta = \frac{2k_2 + \omega_g^2 - \omega_b^2}{2\omega_b}, \\
\eta = 6k_4 + 4\alpha^2\omega_g^2 + \frac{2\alpha^2\omega_g^4}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Cette équation est différente de l'ESNLDE trouvée dans la littérature [108–112, 114, 115]. Sans ces termes étendus (exclusion des termes de non linéarités dispersive $R_1 \approx 0$), l'équation Eq. (2.9) est une forme modifiée de l'équation discrète de Schrödinger avec une non linéarité cubique encore appelée équation de Salerno [116–118]. Notons que des études précédents faites sur ce modèle n'ont pas tenu compte du terme d'asymétrie (terme proportionnel à α) lors de la dérivation de l'équation de Schrödinger non linéaire [85, 86, 88]. Les deux grandeurs conservées de l'ESNLDE donnée par à l'Eq. (2.9) sont la norme/puissance \mathcal{P} ,

$$\mathcal{P} = \sum_n |\psi_n|^2, \tag{2.11}$$

et le Hamiltonien/énergie \mathcal{H} [109–115] (voir l'annexe B pour plus de détails de calcul)

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = \sum_n \left\{ P_1 \psi_n^* \psi_{n+1} + \frac{1}{4} Q_2 |\psi_n|^4 + \frac{1}{2} R_1 [2\psi_n \psi_{n+1} (\psi_n^{*2} + \psi_{n+1}^{*2}) - \psi_n^2 \psi_{n+1}^{*2} - 2|\psi_n|^2 |\psi_{n+1}|^2] \right\} \\
+ c.c.,
\end{aligned} \tag{2.12}$$

où *c.c* désigne le complexe conjugué. L'équation Eq. (2.9) constitue le noyau des développements à venir.

2.2.2 Instabilité modulationnelle discrète

Le phénomène d'instabilité modulationnelle (IM) est considéré comme l'une des première étapes conduisant à la localisation de l'énergie dans un réseau non linéaire [145]. C'est un moyen de production des modes intrinsèquement localisés dans le système moyennant la modulation d'une onde plane. Ce phénomène s'appuie sur la linéarisation d'une onde perturbatrice de très faible amplitude par rapport à l'onde plane initiale et se révèle dans un système lorsque certaines conditions spécifiques sont atteintes ou respectées. Comme toutes les variantes de l'ESNLD, l'ESNLDE devrait également exhiber ce phénomène d'IM, ce qui conduirait à la formation des MLs dans le réseau. Le processus de création de ces structures localisées sera détaillé dans cette présente section.

Afin d'effectuer l'analyse de la stabilité linéaire de l'équation Eq. (2.9) nous supposons que l'onde plane non perturbée est de la forme :

$$\psi_n(\tau) = \psi_0 e^{i(qn - \omega\tau)}, \quad (2.13)$$

où ψ_0 est une amplitude constante, q est le vecteur d'onde et ω est la fréquence. Après avoir substitué l'équation Eq. (2.13) dans l'équation Eq. (2.9) et effectué quelques simplifications, la relation de dispersion non linéaire satisfaite par cette fréquence est donnée par :

$$\omega = -2P_1 \cos(q) - \left\{ Q_2 + 2R_1 \left[1 - 8 \sin^4 \left(\frac{q}{2} \right) \right] \right\} |\psi_0|^2. \quad (2.14)$$

Pour mener une investigation du phénomène d'IM de l'amplitude de cette onde plane, nous introduisons une très faible perturbation à ψ_0 de telle sorte qu'on puisse linéariser l'équation de l'enveloppe de l'onde porteuse. Par conséquent, nous cherchons une solution de la forme :

$$\psi_n(\tau) = [\psi_0 + B_1 e^{i(Qn - \Omega\tau)} + B_2^* e^{-i(Qn - \Omega^*\tau)}] e^{i(qn - \omega\tau)}, \quad (2.15)$$

où l'amplitude de l'onde perturbative $\chi_n(\tau) = B_1 e^{i(Qn - \Omega\tau)} + B_2^* e^{-i(Qn - \Omega^*\tau)}$ est supposée être petite par rapport à l'onde porteuse ψ_0 . Dans cette expression (*) désigne le complexe conjugué, Q et Ω représentent respectivement le vecteur d'onde et la fréquence de la perturbation tandis que B_1 et B_2 sont des amplitudes complexes. Injectons l'équation Eq. (2.15) dans l'équation Eq. (2.9) dans un premier temps puis, exploitant dans un second temps l'équation Eq. (2.14), nous obtenons après linéarisation par rapport aux amplitudes complexes, le système homogène suivant :

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 + \Omega & \beta_1 \\ \beta_1 & \alpha_2 - \Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

où

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \left\{ Q_2 + 2R_1 [1 - 2 \cos(2q + Q) + 4 \cos(q + Q) + 2(\cos^2(q) - \cos(Q))] \right\} |\psi_0|^2 \\ &\quad + 2P_1 [\cos(q + Q) - \cos(q)], \\ \alpha_2 &= \left\{ Q_2 - 2R_1 [1 + 2 \cos(2q - Q) + 4 \cos(q - Q) - 2(\cos^2(q) - \cos(Q))] \right\} |\psi_0|^2 \\ &\quad + 2P_1 [\cos(q - Q) - \cos(q)], \\ \beta_1 &= \left\{ Q_2 + 2R_1 \left[4 \cos(q) \cos^2 \left(\frac{Q}{2} \right) - \cos(2q) - 2 \cos(Q) \right] \right\} |\psi_0|^2. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Le système donné par l'équation Eq. (2.16) admet des solutions non triviales si et seulement si son déterminant est nul. En posant $\Omega_1 = \Omega - \Omega_0$, le précédent système admet l'onde plane de vecteur d'onde Q et de fréquence Ω si la relation de dispersion de l'onde modulée est :

$$\Omega_1^2 = (\Omega - \Omega_0)^2 = 4 \left\{ 2P_1 \cos(q) \sin^2 \left(\frac{Q}{2} \right) + R_1 \left[1 + 2 \cos(q) - 4 \cos(Q) \sin^2 \left(\frac{q}{2} \right) \right] |\psi_0|^2 \right\} \times \left\{ 2P_1 \cos(q) \sin^2 \left(\frac{Q}{2} \right) - \{Q_2 + R_1 [1 + 2(1 + 3 \cos(Q)) \cos(q) - 2(1 + 2 \cos^2(q)) \cos(Q)]\} |\psi_0|^2 \right\}, \quad (2.18)$$

avec

$$\Omega_0 = 2P_1 \sin(q) \sin(Q) - 2R_1 \left[1 - 8 \sin(q) \sin(Q) \sin^2 \left(\frac{q}{2} \right) \right] |\psi_0|^2. \quad (2.19)$$

Lorsque le terme de droite de $(\Omega_1)^2$ est négatif, l'équation précédente admet deux solutions complexes induisant une instabilité de la perturbation qui divergera exponentiellement avec le taux $\Sigma(q, Q) = \sqrt{-\Omega_1^2}$. Cette IM n'est possible que dans le cas où l'amplitude initiale $|\psi_0|$ excède le seuil $|\psi_{0,cr}|$ défini comme suit :

$$|\psi_0|^2 \geq |\psi_{0,cr}|^2 = \frac{2P_1 \cos(q) \sin^2 \left(\frac{Q}{2} \right)}{Q_2 + R_1 \{1 + 2[1 + 3 \cos(Q)] \cos(q) - 2[1 + 2 \cos^2(q)] \cos(Q)\}}. \quad (2.20)$$

Une fois que les conditions précédentes sont remplies, l'onde plane se propageant dans le réseau sous l'effet de cette perturbation infinitésimale s'auto modulera et se fragmentera en paquets d'ondes « isolées » appelés solitons pulses.

2.2.3 Méthode directe de génération des modes localisés et étude de leurs stabilités

Bien que la technique de l'instabilité modulationnelle soit particulièrement intéressante pour la production des modes localisés, l'une de ses principaux désavantages est qu'elle fait intervenir certaines contraintes sur l'onde plane initiale (amplitude critique ainsi que des vecteurs d'ondes spécifiques) pour un choix convenable des paramètres du système. Cependant, il existe une méthode alternative plus directe visant à générer des MLs sans toutefois recourir aux contraintes de l'IM. Cette méthode est appelée limite anti-continue (LAC) [119–122]. Le principe de la LAC consiste dans un premier temps à annuler l'interaction entre les particules adjacentes ($n \pm 1 = 0$, $n \pm 2 = 0$, ...), résoudre dans un second temps le système découplé afin de trouver la solution triviale. Une fois la solution triviale obtenue, la méthode est parachevée en augmentant peu à peu des incréments de couplage et en résolvant numériquement à chaque fois le système algébrique non linéaire correspondant. Cette méthode a été appliquée avec succès aussi bien dans l'ESNLD avec une non linéarité cubique [122], que dans l'ESNLDE [110].

Allant donc dans ce sens, nous cherchons une solution de l'équation Eq. (2.9), stationnaire discrète et localisée avec une dépendance temporelle purement harmonique de la forme :

$$\psi_n(\tau) = u_n e^{-i\mu\tau}, \quad (2.21)$$

où u_n est une fonction réelle indépendante du temps et μ sa fréquence. L'insertion de l'équation Eq. (2.21) dans l'équation Eq. (2.9) donne l'équation algébrique couplée suivante :

$$\begin{aligned} \mu u_n + (P_1 + Q_1 u_n^2) (u_{n+1} + u_{n-1}) + Q_2 u_n^3 + R_1 [(u_{n+1} - 2u_n) u_{n+1}^2 + (u_{n-1} - 2u_n) u_{n-1}^2] \\ + R_1 [(u_{n+1} + u_{n-1}) u_n^2 - (u_{n+1}^2 + u_{n-1}^2) u_n] = 0. \end{aligned} \quad (2.22)$$

En appliquant le principe de la LAC à l'équation Eq. (2.22), il est aisé de voir que les solutions triviales sont : $u_n = \left(0, \pm \sqrt{-\frac{\mu}{Q_2}}\right)$ [146]. La solution triviale $u_n = 0$ n'est toutefois pas prise en compte car nous recherchons des solutions modélisant l'ouverture locale d'une paire de bases dans le réseau, lorsque les autres paires sont fermées. Par ailleurs, u_n étant réelle, le terme sous radical devrait toujours être positif. Les solutions de l'équation non linéaire algébrique couplée sont recherchées numériquement au moyen du schéma itératif de la méthode de Newton-Raphson (NR) multidimensionnel.

Une fois que ces solutions stationnaires ont été obtenues numériquement via l'algorithme de NR, l'étape suivante consiste à faire une étude de leurs stabilités dynamiques en introduisant une perturbation à l'équation Eq. (2.21) comme suit :

$$\psi_n(\tau) = [u_n + \varepsilon v_n(\tau)] e^{-i\mu\tau}, \quad (2.23)$$

où ε est une constante infinitésimale, $v_n(\tau)$ une fonction perturbatrice complexe dont l'expression est donnée par :

$$v_n(\tau) = a_n e^{\lambda\tau} + b_n e^{\bar{\lambda}\tau}, \quad (2.24)$$

avec a_n et b_n des amplitudes complexes, $\bar{\lambda}$ le complexe conjugué de la valeur propre λ . Il est à noter que le terme $e^{-i\mu\tau}$ introduit tout simplement une rotation des solutions u_n dans le plan complexe. Par conséquent, il n'a aucune incidence sur l'amplification ou pas de la perturbation. Par ailleurs, les termes $e^{\lambda\tau}$ et $e^{\bar{\lambda}\tau}$ sont notre cible puisqu'ils modifient le module des solutions. Introduisons donc par la suite l'équation Eq. (2.23) dans l'équation Eq. (2.9) et en exploitant le fait que u_n soit une solution stationnaire de l'équation Eq. (2.22), nous obtenons après avoir négligé les termes d'ordre élevé en ε ($\varepsilon^p \approx 0, \forall p \geq 2$), l'équation linéarisée en v_n suivante :

$$\begin{aligned} & i\dot{v}_n + \mu v_n + (P_1 + Q_1 u_n^2) (v_{n+1} + v_{n-1}) + Q_1 (u_{n+1} + u_{n-1}) (v_n + \bar{v}_n) u_n + Q_2 (v_n + \bar{v}_n) u_n^2 \\ & + R_1 \left\{ (u_{n+1} - 2u_n)(v_{n+1} + \bar{v}_{n+1})u_{n+1} + (v_{n+1} - 2v_n)u_{n+1}^2 + (u_{n-1} - 2u_n)(v_{n-1} + \bar{v}_{n-1})u_{n-1} \right\} \\ & + R_1 \left\{ (v_{n-1} - 2v_n)u_{n-1}^2 + (\bar{v}_{n+1} + \bar{v}_{n-1})u_n^2 - (u_{n+1}^2 + u_{n-1}^2)\bar{v}_n + 2(u_{n+1} + u_{n-1})u_n v_n \right\} \\ & - 2R_1 (u_{n+1}v_{n+1} + u_{n-1}v_{n-1})u_n = 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Après l'injection de l'expression de $v_n(\tau)$ donnée par l'équation Eq. (2.24) dans l'équation Eq. (2.25), la collecte des termes proportionnels à $e^{\lambda\tau}$ et $e^{\bar{\lambda}\tau}$ de l'équation résultante conduit à l'obtention du problème aux valeurs propres ci-dessous :

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_n \\ \bar{b}_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} a_n \\ \bar{b}_n \end{bmatrix}. \quad (2.26)$$

M_{11} , M_{12} , M_{21} et M_{22} sont des matrices $N \times N$ tridiagonales dont les éléments de la diagonale

principale (n, n) , supérieure $(n, n + 1)$ et inférieure $(n, n - 1)$ sont :

$$\begin{aligned}
M_{11}(n, n) &= i \{ \mu + Q_2 u_n^2 - 2R_1 [(u_{n+1} - 2u_n) u_{n+1} + (u_{n-1} - 2u_n) u_{n-1}] \}, \\
M_{11}(n, n + 1) &= i [P_1 + 2R_1 (u_{n+1} - u_n)^2]; \\
M_{11}(n, n - 1) &= i [P_1 + 2R_1 (u_{n-1} - u_n)^2], \\
M_{12}(n, n) &= i \{ Q_2 u_n^2 - R_1 [(u_{n+1} - 2u_n) u_{n+1} + (u_{n-1} - 2u_n) u_{n-1}] \}, \\
M_{12}(n, n + 1) &= i [R_1 (u_{n+1} - u_n)^2]; \\
M_{12}(n, n - 1) &= i [R_1 (u_{n-1} - u_n)^2],
\end{aligned} \tag{2.27}$$

avec $M_{21} = \overline{M_{12}}$ et $M_{22} = \overline{M_{11}}$. La résolution de ce problème aux valeurs propres permet de déterminer les vecteurs propres $(a_n, \overline{b_n})$ correspondant aux valeurs propres λ . La solution construite via l'algorithme de NR sera considérée comme instable s'il existe au moins une valeur propre ayant une partie réelle positive, et stable dans le cas contraire. Une fois que le ML u_n et sa stabilité dynamique ont été obtenus, le profil initial $Y_n(\tau)$ de l'onde discret se déduit au moyen des équations Eq. (2.21), Eq. (2.8) et Eq. (2.5) par :

$$\begin{aligned}
Y_n(\tau) &= -\frac{4\alpha\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|} u_n^2 + \sqrt{\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}} u_n \cos[qn - (\omega_b + \vartheta - \mu)\tau] \\
&\quad - \frac{\alpha\omega_g^2}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2} \left(\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|} \right) u_n^2 \cos[2qn - 2(\omega_b + \vartheta - \mu)\tau].
\end{aligned} \tag{2.28}$$

La prochaine étape consistera à étudier la stabilité orbitale du ML donnée à l'équation Eq. (2.28) suite à une perturbation infinitésimale.

2.2.4 Stabilité orbitale du mode localisé

Dans la section Sec. §2.2.3 précédente, nous avons construit dans le cadre de l'AOR des solutions localisées discrètes au moyen de la limite anti-continue et avons fait une étude de leurs stabilités dynamiques. Toutefois, il se pose la question de savoir si la solution approchée donnée par l'équation Eq. (2.28) restera toujours localisée dans l'espace et périodique dans le temps suite à une perturbation infinitésimale? La réponse à cette question passe par l'analyse de la stabilité orbitale au sens de Floquet de la solution $Y_n(\tau)$, puisqu'elle est périodique de période :

$$T = \frac{2\pi}{\omega_b + \vartheta - \mu} = \frac{4\pi\omega_b}{(\omega_b - 2\mu)\omega_b + \omega_g^2 + 2k_2}. \tag{2.29}$$

La théorie de la stabilité de Floquet [147–153] est le moyen le plus utilisé pour déterminer la stabilité des solutions périodiques. Le principe de cette théorie consiste à étudier le comportement de la solution périodique suite à une perturbation infinitésimale. La solution périodique sera considérée comme stable si toute perturbation infinitésimale de son cycle limite conduit au même cycle limite après une période, tandis qu'elle sera instable dans le cas contraire. La Figure 21 met en exergue l'intersection du cycle limite d'une solution période $\tilde{\mathbf{Y}}_0$ avec le plan $\Sigma_{\mathbf{p}}$ [Figure. 21(a)] et l'évolution de ce cycle limite suite à une perturbation $\delta\tilde{\mathbf{y}}$ [Figure. 21(b)].

Pour analyser la stabilité orbitale de la solution périodique $\hat{Y}_n(\tau)$ donnée par l'équation Eq. (2.28), nous la perturbons avec une variable infinitésimale $\epsilon_n(\tau)$ telle que :

$$Y_n(\tau) = \hat{Y}_n(\tau) + \epsilon_n(\tau). \tag{2.30}$$

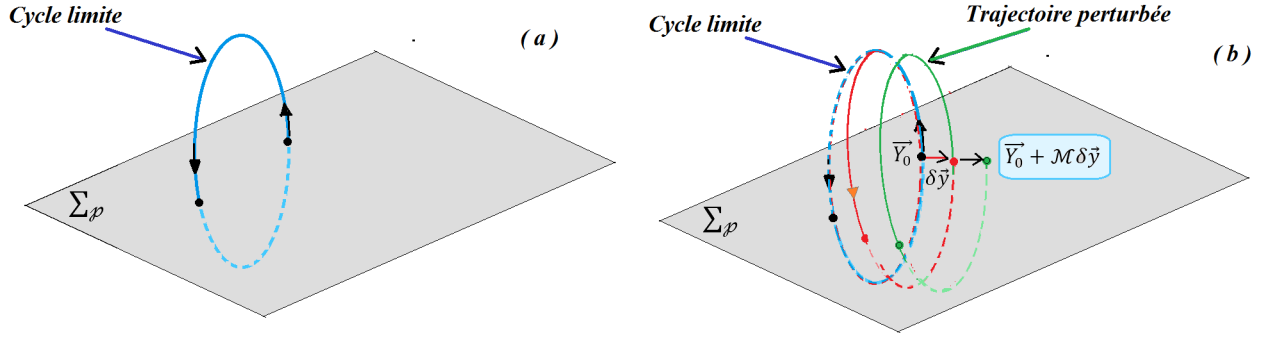


Figure 21: (a) : Intersection du cycle limite d'une solution période \tilde{Y}_0 avec le plan Σ_p , (b) : évolution du cycle limite suite à la perturbation $\delta\tilde{y}$.

Introduisons cette valeur de $Y_n(\tau)$ de l'équation Eq. (2.30) dans l'équation Eq. (2.3) puis, linéarisons l'expression obtenue autour de la perturbation $\epsilon_n(\tau)$. Le système discret suivant est obtenu :

$$\begin{aligned} \ddot{\epsilon}_n - k_2(\epsilon_{n+1} - 2\epsilon_n + \epsilon_{n-1}) + \omega_g^2(1 + 2\alpha\hat{Y}_n + 3\beta\hat{Y}_n^2)\epsilon_n - 3k_4[(\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n)^2(\epsilon_{n+1} - \epsilon_n) \\ + (\hat{Y}_{n-1} - \hat{Y}_n)^2(\epsilon_{n-1} - \epsilon_n)] = 0. \end{aligned} \quad (2.31)$$

En posant $\pi_n(\tau) = \dot{\epsilon}_n(\tau)$, l'équation Eq. (2.31) prend la forme compacte :

$$\dot{\xi}(\tau) = \mathcal{J}(\tau)\xi(\tau), \quad (2.32)$$

où $\xi(\tau) = [\epsilon_n(\tau), \pi_n(\tau)]'$ est un vecteur colonne de dimension $2N$ et $\mathcal{J}(\tau)$ est la matrice Jacobienne de taille $2N \times 2N$ et d'expression :

$$\mathcal{J}(\tau) = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{\{N \times N\}} & \mathbf{I}_{\{N \times N\}} \\ \mathcal{M}_{\{N \times N\}}(\tau) & \mathbf{0}_{\{N \times N\}} \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Les terme $\mathbf{0}_{\{N \times N\}}$ et $\mathbf{I}_{\{N \times N\}}$ dans l'équation Eq. (2.33) correspondent respectivement à la matrice nulle et à la matrice identité, tandis que $\mathcal{M}_{\{N \times N\}}(\tau)$ est une matrice tridiagonale dont les éléments sont :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(n, n) &= - \left\{ 2k_2 + \omega_g^2 \left(1 + 2\alpha\hat{Y}_n + 3\beta\hat{Y}_n^2 \right) + 3k_4 \left[\left(\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n \right)^2 + \left(\hat{Y}_{n-1} - \hat{Y}_n \right)^2 \right] \right\}, \\ \mathcal{M}(n, n-1) &= k_2 + 3k_4 \left(\hat{Y}_{n-1} - \hat{Y}_n \right)^2, \\ \mathcal{M}(n, n+1) &= k_2 + 3k_4 \left(\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n \right)^2. \end{aligned} \quad (2.34)$$

L'étude de la stabilité de la solution périodique $\hat{Y}_n(\tau)$ consistera donc par la suite à déterminer si la perturbation $\epsilon_n(\tau)$, solution de l'équation Eq. (2.32) s'accroît ou décroît avec le temps. Sachant que $\hat{Y}_n(\tau)$ vérifie la relation $\hat{Y}_n(\tau + T) = \hat{Y}_n(\tau)$ avec la période temporelle T donnée par l'équation Eq. (2.29), on a également $\xi(\tau + T) = \xi(\tau)$ et $\mathcal{J}(\tau + T) = \mathcal{J}(\tau)$. Puisque l'équation Eq. (2.31) [plus particulièrement l'équation Eq. (2.32)] admet des solutions périodiques, la théorie de Floquet de la stabilité nous permet d'étudier la stabilité de ces solutions. Il est bien connu que le système linéarisé donné par l'équation Eq. (2.32) admet $2N$ solutions fondamentales linéairement indépendantes $\xi_n(\tau)$

[151–153]. Ainsi, toute solution $\xi(\tau)$ de Eq. (2.32) s'écrit sous la forme :

$$\xi(\tau) = \sum_{n=1}^{2N} c_n \xi_n(\tau), \quad (2.35)$$

où les c_n sont les $2N$ constantes qui dépendent des conditions initiales.

Analyse de la stabilité au moyen de la matrice de monodromie

D'après le théorème de Floquet, il existe une matrice fondamentale constante $\Phi(\tau)$ solution de l'équation Eq. (2.32) construite à partir des $2N$ solutions linéairement indépendantes fondamentales, et vérifiant la relation [153] :

$$\dot{\Phi}(\tau) = \mathcal{J}(\tau)\Phi(\tau). \quad (2.36)$$

Compte tenu du fait que $\mathcal{J}(\tau)$ est une matrice périodique, la matrice fondamentale $\Phi(\tau + T)$ dont les éléments sont des combinaisons linéaires de $\Phi(\tau)$ est également solution de Eq. (2.32). Ainsi, $\Phi(\tau + T)$ peut encore se mettre sous la forme [153] :

$$\Phi(\tau + T) = \Phi(\tau)\mathcal{M}, \quad (2.37)$$

où $\mathcal{M} = \Phi^{-1}(\tau)\Phi(\tau + T)$ est la matrice de monodromie¹ de taille $2N \times 2N$. C'est cette matrice qui est utilisée pour étudier la stabilité de la solution périodique $\hat{Y}_n(\tau)$, puisqu'elle fait correspondre à un ensemble de solutions fondamentales $\Xi(\tau) = [\xi_1(\tau), \xi_2(\tau), \dots]$ à la date τ leur valeur une période plus tard, à la date $\tau + T$, définissant ainsi la classique application de Poincaré [152]. Notons que les valeurs propres λ_n de la matrice de monodromie, ou multiplicateurs de Floquet, sont uniques et donnent des informations sur la stabilité de la solution périodique.

En considérant de nouveau les solutions fondamentales, chaque $\xi_n(\tau)$ peut s'écrire sous sa forme de Floquet [152] :

$$\xi_n(\tau) = P_n(\tau)e^{\alpha_n\tau}, \quad (2.38)$$

avec $P_n(\tau + T) = P_n(\tau)$ un vecteur T -périodique complexe de taille $2N$ et α_n une variable complexe. Ainsi, en remplaçant τ par $\tau + T$ dans l'équation Eq. (2.38) on obtient :

$$\xi_n(\tau + T) = P_n(\tau + T)e^{\alpha_n(\tau + T)} = P_n(\tau)e^{\alpha_n\tau}e^{\alpha_n T} = \xi_n(\tau)e^{\alpha_n T}. \quad (2.39)$$

L'équation Eq. (2.39) ci-dessus, comparée à l'équation Eq. (2.37), prouve que les α_n sont liés aux multiplicateurs de Floquet λ_n par :

$$\lambda_n := e^{\alpha_n T}. \quad (2.40)$$

Les α_n sont appelés exposants de Floquet, et sont uniques modulo $\frac{2\pi i}{T}$

$$\alpha_n = \frac{1}{T} \ln(\lambda_n) + \frac{2\pi k}{T} i, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.41)$$

1. La **monodromie** est l'étude du comportement de certains objets mathématiques « lorsqu'on tourne autour d'une singularité » : source : fr.m.wikipedia.org/wiki/Monodromie.

Ainsi, caractériser la stabilité d'une solution périodique revient à déterminer les valeurs propres de la matrice de monodromie, encore appelées opérateurs de Floquet. Puisque la matrice $\mathcal{J}(\tau)$ du système linéarisé est symplectique², l'opérateur de Floquet possède également cette propriété. Sachant que \mathcal{M} est réelle, nous pouvons déduire que si λ est un multiplicateur de Floquet, alors λ^* l'est également. À cause de la symplecticité de \mathcal{M} , $1/\lambda$ est aussi un multiplicateur de Floquet. En d'autres termes, les multiplicateurs de Floquet viennent toujours en quadruplets $(\lambda, \lambda^*, 1/\lambda, 1/\lambda^*)$ si $\lambda \in \mathbb{C}$ et en paires $(\lambda, 1/\lambda)$ si $\lambda \in \mathbb{R}$ [96, 97, 154]. Si tous les multiplicateurs de Floquet sont contenus à l'intérieur du cercle unité du plan complexe (\Re_e, \Im_m) , $(|\lambda_n| \leq 1 \quad \forall n$ ou $\Re_e(\alpha_n) < 0 \quad \forall n)$, la solution périodique $\hat{Y}_n(\tau)$ sera soit asymptotiquement stable $(|\lambda_n| < 1)$, soit stable $(\lambda_n=1)$ [151–153, 155, 156]. Par contre si au moins un multiplicateur de Floquet se trouve à l'extérieur du cercle unité $(\exists j \in \{1, 2, \dots, 2N\} \ / \ |\lambda_j| > 1$ ou $\Re_e(\alpha_j) > 0)$, la solution périodique $\hat{Y}_n(\tau)$ sera dite instable [151–153, 155, 156]. La façon dont les multiplicateurs de Floquet traversent le cercle unité renseigne sur le type de bifurcation. En effet, si un multiplicateur de Floquet sort du cercle unité en $+1$, il s'agira d'une bifurcation du point limite. S'il sort du cercle unité en -1 , il s'agira d'une bifurcation de dédoublement de période. Si une paire de multiplicateurs complexes conjugués sortent du cercle unité, il s'agira d'une bifurcation de type **Neimark-Sacker** encore appelée **Hopf secondaire** [151–153, 155]. La Figure. 22 donne une illustration des quadruplets/paires de Floquet ainsi que les types de bifurcations.

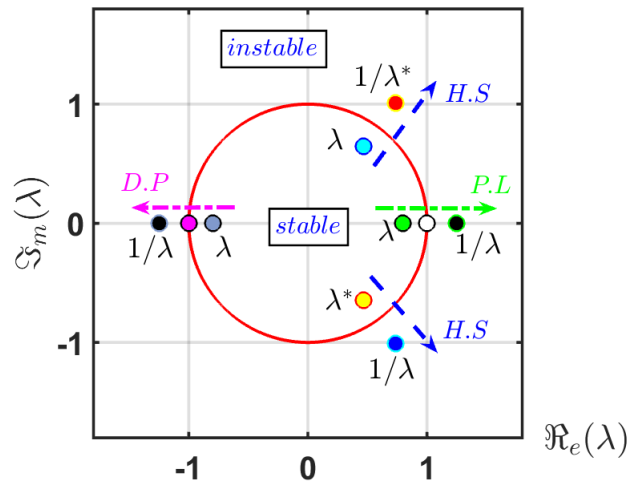


Figure 22: Multiplicateurs de Floquet (quadruplets et paires) traversant le cercle unité dans le plan complexe, révélant la stabilité/l'instabilité d'une solution périodique ainsi que les bifurcations du point limite (*P.L.*), du doublement de période (*D.P.*) et de Hopf secondaire (*H.S.*) [153].

De façon générale, la méthode d'analyse de la stabilité des solutions périodiques au moyen de la théorie de la stabilité de Floquet est faite au moyen du calcul de la matrice de monodromie des solutions dans l'espace réel. L'application directe de cette théorie consiste à calculer la matrice de transition par intégration en temps des équations du système. La matrice de transition donne la matrice de monodromie dont les valeurs propres sont les multiplicateurs de Floquet qui caractérisent

2. Mathématiquement parlant, une matrice symplectique est une matrice M de taille $2n$ (dont les éléments peuvent être complexes ou réels) satisfaisant la condition $M^T J M = J$, où M^T est la matrice transposée de M et J est une matrice antisymétrique définie par $J = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I}_n \\ -\mathbf{I}_n & 0 \end{pmatrix}$ avec \mathbf{I}_n la matrice identité d'ordre n .

la stabilité de la solution. Toutefois, il existe une autre variante de la théorie de Floquet appelée méthode de **Hill** qui elle, se base plutôt sur l'espace fréquentiel.

Analyse de la stabilité au moyen de la méthode de Hill

La méthode de Hill est généralement appliquée pour déterminer la stabilité des solutions obtenues dans le domaine fréquentiel. Le but de cette méthode consiste à calculer les solutions $P_n(\tau)$ ainsi que les exposants de Floquet α_n du système linéarisé à coefficients périodiques tel que donné par l'équation Eq. (2.32), en se basant sur le développement en série de Fourier. Ceci étant, supposons que les développements en série de Fourier de $\mathcal{J}(\tau)$ [donnée par l'équation Eq. (2.32)] et de $P_n(\tau)$ [donnés par l'équation Eq. (2.38)] soient de la forme [151, 155] :

$$\begin{Bmatrix} \mathcal{J}(\tau) \\ P_n(\tau) \end{Bmatrix} = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \begin{Bmatrix} \mathcal{J}_h \\ P_{n,h} \end{Bmatrix} e^{ih\omega\tau}, \quad (2.42)$$

avec $\omega = 2\pi/T$ la fréquence du mouvement, $P_{n,h}$ des vecteurs complexes de dimension $2N$ et \mathcal{J}_h des matrices de taille $2N \times 2N$. L'introduction de l'expression de $P_n(\tau)$ issue de l'équation Eq. (2.42) dans l'équation Eq. (2.38) donne :

$$\begin{cases} \xi_n(\tau) = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} P_{n,h} e^{(\alpha_n + ih\omega)\tau}, \\ \dot{\xi}_n(\tau) = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} (\alpha_n + ih\omega) P_{n,h} e^{(\alpha_n + ih\omega)\tau}. \end{cases} \quad (2.43)$$

Compte tenu du fait que $\xi_n(\tau)$ vérifie également l'équation $\dot{\xi}_n(\tau) = \mathcal{J}(\tau)\xi_n(\tau)$, car étant une solution fondamentale de l'équation Eq. (2.32), nous obtenons des relations de l'équation Eq. (2.43) et du développement en série de Fourier de $\mathcal{J}(\tau)$ de l'équation Eq. (2.42), la relation suivante :

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} (\alpha_n + ik\omega) P_{n,k} e^{(\alpha_n + ik\omega)\tau} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \mathcal{J}_h P_{n,k} e^{[\alpha_n + i(k+h)\omega]\tau}. \quad (2.44)$$

En posant par la suite le changement d'indice $k' = k + h$ ($\Rightarrow k = k' - h$) sur le terme de droite de l'équation Eq. (2.44) d'une part et en exploitant le fait que les sommations soient infinies ($k' = k$), l'équation Eq. (2.44) devient :

$$\sum_{k=-\infty}^{+\infty} \left[\sum_{h=-\infty}^{+\infty} \mathcal{J}_h P_{n,k-h} - (\alpha_n + ik\omega) P_{n,h} \right] e^{(\alpha_n + ik\omega)\tau} = 0. \quad (2.45)$$

L'application de la méthode de l'équilibrage harmonique (MEH) [157–159] à l'équation précédente [c'est-à-dire en égalant séparément chaque harmonique de l'équation Eq. (2.45) à zéro pour chaque valeur de l'indice k] permet de la réécrire sous la forme du problème aux valeurs propres de taille infinie suivant [151, 155] :

$$(\mathbf{H} - \Lambda \mathbf{I}) \mathbf{q} = \mathbf{0}, \quad (2.46)$$

où \mathbf{H} est la matrice infinie de Hill :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \mathcal{J}_0 + 2i\omega\mathbf{I} & \mathcal{J}_{-1} & \mathcal{J}_{-2} & \mathcal{J}_{-3} & \mathcal{J}_{-4} & \dots \\ \dots & \mathcal{J}_1 & \mathcal{J}_0 + i\omega\mathbf{I} & \mathcal{J}_{-1} & \mathcal{J}_{-2} & \mathcal{J}_{-3} & \dots \\ \dots & \mathcal{J}_2 & \mathcal{J}_1 & \mathcal{J}_0 & \mathcal{J}_{-1} & \mathcal{J}_{-2} & \dots \\ \dots & \mathcal{J}_3 & \mathcal{J}_2 & \mathcal{J}_1 & \mathcal{J}_0 - i\omega\mathbf{I} & \mathcal{J}_{-1} & \dots \\ \dots & \mathcal{J}_4 & \mathcal{J}_3 & \mathcal{J}_2 & \mathcal{J}_1 & \mathcal{J}_0 - 2i\omega\mathbf{I} & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

Λ est un nombre complexe, \mathbf{q} est un vecteur de taille infinie et \mathbf{I} est la matrice identité. En comparant les équations Eq. (2.46) et Eq. (2.45), les valeurs propres (Λ) et les vecteurs propres (\mathbf{q}) sont liés à α_n et à P_n par la relation :

$$\Lambda_{n,\ell} = \alpha_n + i\ell\omega, \quad \text{et} \quad \mathbf{q}_{n,\ell} = [\dots, P_{n,-2-\ell}, P_{n,-1-\ell}, P_{n,0-\ell}, P_{n,1-\ell}, P_{n,2-\ell}, \dots]', \quad (2.48)$$

$$\forall \ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \infty; \quad n = 1, 2, \dots, 2N.$$

En pratique, l'ordre h du développement en série de Fourier est fixé et pris entre $-H$ et $+H$, tronquant ainsi la matrice de Hill. Le point le plus crucial dans la théorie de stabilité selon Hill est le calcul des coefficients de Fourier de la matrice $\mathcal{J}(\tau)$. En effet, l'équation Eq. (2.3) ainsi que la matrice jacobienne $\mathcal{J}(\tau)$ présentent des non linéarités de différents ordres, ce qui rend très complexe le calcul des coefficients de Fourier \mathcal{J}_h . Cependant, dans le cas particulier où la MEH est combinée à la Méthode Asymptotique Numérique (MAN) [160] pour calculer les coefficients de Fourier de la solution périodique $\hat{Y}_n(\tau)$, le calcul de \mathcal{J}_h devient relativement simple.

Notons que Les valeurs propres calculées sur cette matrice tronquée de Hill ne sont pas celles du problème non tronqué mais convergent vers elles. La méthode d'analyse de stabilité par la théorie de Hill a l'avantage de rester dans le domaine fréquentiel. Il convient toutefois de préciser que la méthode de Hill n'est pas très commode pour le calcul numérique des systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté. En effet, l'étude comparative menée par Loïc Peletan et *al.* [161] montre que les techniques basées sur le calcul de la matrice de monodromie dans le domaine temporel ont une bien meilleure précision que la méthode de Hill. Un autre inconvénient de la méthode de Hill réside dans la recherche des valeurs propres d'un système de très grande taille nécessitant un nombre élevé d'harmoniques pour l'analyse non linéaire, conduisant ainsi à un coût de calcul prohibitif.

2.2.5 Mobilité des breathers discrets

En réalité, les MILs investigués à la section §2.2.3 se présentent sous deux états stationnaires correspondant à des énergies différentes : l'état centré sur 1-site et l'état centré sur 2-sites. Ces énergies dépendent fortement de la fréquence μ et leur différence détermine le minimum d'énergie que doit surmonter le ML pour se déplacer d'une cellule à l'autre. Cette différence d'énergie s'appelle barrière de Peierls-Nabarro (BPN) ou potentiel de Peierls-Nabarro (PPN) [115, 162–164]. Ainsi, le mode localisé aura plus de chance de se mouvoir dans le réseau lorsque la BPN sera la plus faible possible. Ce concept a été aussi bien utilisé de façon satisfaisante dans les multiples variantes de l'ESNLD [115, 162–164] que dans l'ESNLDE [109–112, 114, 115].

Afin d'estimer une telle énergie, nous supposons que l'équation Eq. (2.3) admet deux types de modes fortement localisés dont l'amplitude u_n donnée par l'équation Eq. (2.21) est obtenue en résolvant l'équation algébrique Eq. (2.22). Le premier mode [voir Figure. 23(a)] centré sur le site n_0 et le second mode [voir Figure. 23(b)] centré sur les sites $n_0 \pm 1$ dont les expressions sont respectivement :

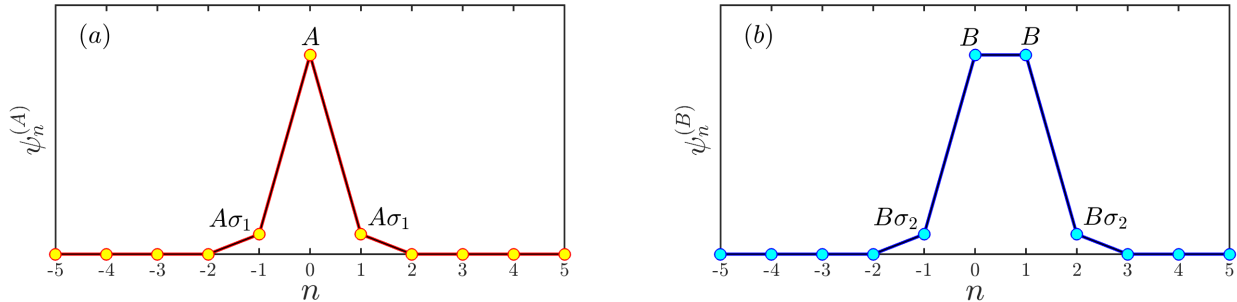


Figure 23: Illustration des profils des modes fortement localisés centrés sur un site [panel (a)] et sur deux sites [panel (b)].

$$\begin{aligned}\psi_n^{(A)}(\tau) &= A(0, \dots, 0, \sigma_1, 1, \sigma_1, 0, \dots, 0) e^{-i\mu_A \tau}, \\ \psi_n^{(B)}(\tau) &= B(0, \dots, 0, \sigma_2, 1, 1, \sigma_2, 0, \dots, 0) e^{-i\mu_B \tau},\end{aligned}\tag{2.49}$$

avec $\sigma_{1,2} \geq 0$ et $\sigma_{1,2} \ll 1$. Pour un mode fortement localisé satisfaisant $|u_{n+1}| \ll |u_n|$ pour $n \geq 0$, nous pouvons estimer cette différence d'énergie $E_{PN} = \Delta E_{AB} = \mathcal{H}_A(N) - \mathcal{H}_B(N)$ [115, 162–165] entre le *mode A* et le *mode B* et déduire le potentiel effectif de PN en égalant les normes de ces deux modes ($N_A = N_B = N$). Après insertion de ces formes de solutions dans l'équation Eq. (2.11), nous obtenons l'équation Eq. (2.50) suivante :

$$\begin{cases} \sigma_1 = \frac{P_1 + R_1 A^2}{(Q_2 + 3R_1)A^2}, \\ \mu_A = -2R_1 A^2 \sigma_1^3 - 2Q_2 A^2 \sigma_1^2 - 4R_1 A^2 \sigma_1 - Q_2 A^2, & n = (0, 1); \\ \sigma_2 = \frac{P_1 + R_1 B^2}{(Q_2 + 3R_1)B^2}, \\ \mu_B = -(Q_2 + 3R_1)B^2 \sigma_2^2 - 2R_1 B^2 \sigma_2 - Q_2 B^2, & n = (1, 2); \end{cases}\tag{2.50}$$

dans laquelle il y est observée la dépendance des fréquences μ_A et μ_B en fonction de l'amplitude de l'onde et des constantes σ_1 et σ_2 . À l'ordre le plus petit des coefficients σ_1 (respectivement σ_2) ces fréquences prennent la forme simplifiée :

$$\begin{cases} \mu_A \approx -Q_2 A^2, \\ \mu_B \approx -Q_2 B^2. \end{cases}\tag{2.51}$$

Par ailleurs, faisant usage de la conservation de la norme [voir équation Eq. (2.11)] moyennant l'approximation précédente³, nous obtenons la relation entre les amplitudes du mode centré sur 1-site et celui centré sur 2-sites suivante :

$$A^2 = 2B^2.\tag{2.52}$$

3. $\mathcal{P}_A = (2\sigma_1^2 + 1)A^2 \approx A^2$ tandis que $\mathcal{P}_B = (2\sigma_2^2 + 2)B^2 \approx 2B^2$. $\mathcal{P}_A = \mathcal{P}_B \implies A^2 = 2B^2$

Ainsi, après introduction de l'ansatz donnée par l'équation Eq. (2.49) dans l'équation Eq. (2.12) tout en tenant compte de l'équation Eq. (2.52), les énergies des paires de bases dont les ondes y sont localisées via le *mode A* et le *mode B* ont respectivement pour expression :

$$\begin{cases} \mathcal{H}_A = 4P_1\sigma_1 A^2 + [Q_2\sigma_1^4 + 4R_1\sigma_1^3 - 6R_1\sigma_1^2 + 4R_1\sigma_1 + \frac{1}{2}Q_2] A^4, \\ \mathcal{H}_B = 2P_1\sigma_2 A^2 + \frac{1}{4} [Q_2\sigma_2^4 + 4R_1\sigma_2^3 - 6R_1\sigma_2^2 + 4R_1\sigma_2 + Q_2] A^4. \end{cases} \quad (2.53)$$

L'énergie de PN à l'ordre la plus faible des coefficients ($\sigma_j^p \approx 0, j = 1, 2; p \geq 1$) obtenue en opérant la différence $\Delta\mathcal{H}_{AB}$ des énergies des deux états stationnaires est :

$$\Delta\mathcal{H}_{AB} = E_{PN} = \mathcal{H}_A - \mathcal{H}_B = \frac{1}{4}Q_2A^4 \neq 0. \quad (2.54)$$

L'expression de cette énergie montre qu'il existe une barrière de potentiel effective entre ces deux états stationnaires, venant du fait que l'un des modes localisé a une énergie plus faible que l'autre. En effet, pour des basses fréquences (soit pour $Q_2 > 0$) l'énergie du mode centré sur un site [Figure. 23(a)] est supérieure à celle centrée sur deux sites [Figure. 23(b)], ce qui est le contraire pour les hautes fréquences obtenue pour $Q_2 < 0$ car en ce moment là $\Delta\mathcal{H}_{AB} = -\frac{1}{4}|Q_2|A^4 \neq 0$. Ce résultat montre que pour qu'un breather discret puisse se mouvoir d'un site à l'autre, il devrait avoir suffisamment d'énergie pour pouvoir vaincre celle de la barrière de Peierls-Nabarro, faute de quoi il serait capturé et entrera probablement en résonance avec le mode phonon. Ainsi, pour un choix convenable de la fréquence μ , il est possible de minimiser cette barrière de PN, favorisant de ce fait une mobilité de l'onde solitaire. Généralement, cette mobilité est initiée au moyen d'un gradient d'énergie apporté à la solution en multipliant $Y_n(\tau)$ par $\cos[\varpi(n - n_0)]$ et par $\pm \sin[\varpi(n - n_0)]$, avec $n_0 = N/2$ et ϖ un vecteur d'onde encore appelé « kick », devant également être convenablement choisi⁴ [166].

Il existe également d'autres méthodes permettant de réaliser la mobilité des modes localisés. Parmi elles, nous pouvons citer celle basée sur la théorie de la stabilité de Floquet qui, exploite l'instabilité des solutions. En effet l'onde solitaire ne doit pas être rigoureusement stable et ses multiplicateurs de Floquet proches de l'unité. Ladite méthode consiste notamment à perturber la vitesse initiale du BD avec l'impulsion moyenne de la valeur propre instable, sous la contrainte d'un choix approprié d'une constante multiplicative, qui tient lieu d'amplitude de la perturbation [154, 167–171].

Une autre façon de réaliser la mobilité des MLs consiste à utiliser la méthode de tir pour rechercher numériquement les points fixes de l'application [172–174] :

$$\mathcal{P} : \begin{bmatrix} Y_{n+r}(\tau + sT_b) \\ \dot{Y}_{n+r}(\tau + sT_b) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Y_n(\tau) \\ \dot{Y}_n(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.55)$$

où r et s sont des entiers représentant respectivement la translation du réseau et le nombre de périodes T_b nécessaires pour réaliser cette translation. Cette méthode produirait moins d'interactions entre le BD et le mode des phonons [173, 174].

Malgré le fait que le modèle d'ADN de JB reproduise des résultats en accords avec des courbes de transitions de phases observées expérimentalement, il n'en reste pas moins incomplet. En effet,

4. Dans le cas où ϖ n'est pas adéquat, l'onde pourrait soit se mouvoir en résonnant considérablement avec le mode des phonons, soit être piégée ou même détruite.

la molécule d'ADN baigne dans un milieu visqueux et est constamment soumise à l'influence des radiations venant du milieu extérieur. Dès lors, afin d'avoir un modèle plus réaliste de cette macromolécule, il faudrait prendre en compte ces facteurs et voir leur impact dans la dynamique globale de l'ADN.

2.3 Effets de l'environnement et de l'impureté sur le modèle d'ADN de JB

Tel que nous l'avons dit mentionné au septième paragraphe de la section §1.4, la molécule d'ADN est généralement en interaction avec son milieu environnemental, notamment à la viscosité du milieu et aux radiations externes. Il est donc d'une importance capitale d'étudier les effets de ces facteurs sur sa dynamique. Pour cela, nous modifions le modèle originel de JB en y incorporant ces termes.

2.3.1 Modélisation mathématique du modèle d'ADN de J.B en présence des forces dissipatives et de la radiation externe

Soit le modèle d'ADN de JB caractérisé par le Hamiltonien H dont l'expression est donnée par l'équation Eq. (1.37) de la section. §1.3.2. Afin de prendre en compte les effets de la viscosité du milieu ainsi que l'influence d'un champ externe, le modèle Hamiltonien de JB est modifié et transformé sous la forme de Caldirola-Kanai⁵[175, 176] à savoir :

$$\mathcal{H} = \sum_n \frac{e^{-\nu t} P_n^2}{2m} + e^{\nu t} \left\{ +D[1 - e^{-ay_n}]^2 + \frac{\Delta H}{C} [1 - e^{-b(y_n - y_{n-1})^2}] + K_b[y_n - y_{n-1}]^2 - F_n(t)y_n \right\} \quad (2.56)$$

où $F_n(t) = A_n \cos(\omega t)$ est le champ alternatif venant du milieu extérieur, ν est le coefficient de dissipation effectif du système et $P_n = m e^{\nu t} \dot{y}_n$ est l'impulsion du système. D'un point de vue Physique, les radiations externes peuvent provenir des sources lasers, des dispositifs électroniques ou des sources d'accélération des électrons [177]. Il en est de même en imagerie biomédicale où ces molécules d'ADN sont irradiées par des sources oscillantes contrôlables [178]. Ainsi donc, l'équation du mouvement adimensionnée d'une telle molécule soumise à ces influences est :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 Y_n}{d\tau^2} + \frac{\nu}{a} \sqrt{\frac{m}{D}} \frac{dY_n}{d\tau} - \frac{2K_b}{a^2 D} (Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) - 2(e^{-Y_n} - 1)e^{-Y_n} - \frac{A_n}{aD} \cos\left(\omega \sqrt{\frac{m}{a^2 D}} \tau\right) \\ + \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} \left[(Y_n - Y_{n-1})e^{-\frac{b}{a^2}(Y_n - Y_{n-1})^2} - (Y_{n+1} - Y_n)e^{-\frac{b}{a^2}(Y_{n+1} - Y_n)^2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.57)$$

En utilisant les mêmes considérations que celles ayant permis l'obtention de l'équation Eq. (2.2) ainsi que les variables adimensionnées données à l'équation Eq. (2.4), l'équation Eq. (2.57) prend la forme :

$$\begin{aligned} \ddot{Y}_n + \Gamma \dot{Y}_n - k_2(Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) + \omega_g^2 (Y_n + \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) + k_4 [(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] \\ = F_0 \cos(\Omega\tau), \end{aligned} \quad (2.58)$$

5. Le Hamiltonien de Caldirola-Kanai est un Hamiltonien dépendant explicitement du temps. En effet, pour une particule de masse m , d'impulsion P , de coordonnée généralisée q , évoluant dans un milieu visqueux de coefficient de viscosité ν , sous l'action d'un potentiel $V(q)$ et d'un champ externe $F(t)$, le Hamiltonien de Caldirola-Kanai est : $H(P, q, t) = \frac{P^2}{2m} e^{-\nu t} + [V(q) - qF(t)]e^{\nu t}$.

où Γ , F_0 et Ω sont donnés par :

$$\Gamma = \frac{\nu}{a} \sqrt{\frac{m}{D}}, \quad F_0 = \frac{A_n}{aD}, \quad \Omega_g = \sqrt{\frac{a^2 D}{m}}, \quad \Omega = \frac{\omega}{\Omega_g}. \quad (2.59)$$

2.3.2 Analyse linéaire en l'absence de la dissipation et du forçage périodique

Cette analyse est faite en supposant que la solution de l'équation Eq. (2.58) en mode linéaire est de la forme :

$$Y_n(\tau) = a_0 e^{i(k_0 \ell n - \omega \tau)}, \quad (2.60)$$

avec a_0 une amplitude réelle, k_0 , ω représentant respectivement le vecteur d'onde et la fréquence. ℓ est la distance séparant les paires de bases adjacents et $i = \sqrt{-1}$ est un complexe. Après injection de l'équation Eq. (2.60) dans l'équation linéarisée de l'équation Eq. (2.58), nous obtenons la relation de dispersion du mode linéaire donnée par :

$$\omega = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right)}. \quad (2.61)$$

Ainsi, en mode linéaire, le modèle d'ADN de JB est un filtre passe-bande dont les limites inférieures et supérieures sont respectivement $\omega_{min} = \omega_g$, $\omega_{max} = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2}$. Cette relation est capitale car pour qu'un BD puisse prendre forme, sa fréquence doit être dans la bande interdite inférieure/supérieure pour éviter la résonance avec les modes phonons.

Il est à noter que la présence de la dissipation et du champ externe n'empêchent généralement pas la molécule d'ADN d'exercer ses fonctions vitales (transcription, réplication, traduction ...) essentielles pour la survie de l'organisme. Ainsi, il est intéressant d'explorer non seulement les conditions de générations des modes localisés en présence de ces facteurs, mais également de connaître les valeurs critiques de ces facteurs qui conduiraient à un dysfonctionnement de cette macromolécule.

2.3.3 Génération des breathers discrets par la méthode de séparation de la dynamique spatiale et temporelle

Il existe dans la littérature plusieurs méthodes permettant de générer les modes localisés. La méthode consistant à séparer la dynamique spatiale de celle temporelle fait partie de l'une d'elles. Tenant compte de cela, nous supposons que l'équation Eq. (2.58) admet pour solution une excitation non linéaire de la forme [179–184] :

$$Y_n(\tau) = \phi_n G(\tau), \quad (2.62)$$

avec $G(\tau)$ une fonction arbitraire dépendant uniquement du temps et modélisant les oscillations uniformes de la chaîne tout entière. Après substitution de cet *ansatz* $Y_n(\tau)$ dans l'équation Eq. (2.58), nous obtenons l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \phi_n \ddot{G}(\tau) + \Gamma \phi_n \dot{G}(\tau) - k_2 (\phi_{n-1} - 2\phi_n + \phi_{n+1}) G(\tau) + \omega_g^2 [\phi_n G(\tau) + \alpha \phi_n^2 G^2(\tau) + \beta \phi_n^3 G^3(\tau)] \\ + k_4 G^3(\tau) [(\phi_{n+1} - \phi_n)^3 - (\phi_n - \phi_{n-1})^3] - F_0 \cos(\Omega \tau) = 0. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Afin de comprendre la dynamique des différentes classes des solutions de l'équation Eq. (2.63), il est primordial de commencer par la dynamique d'un nombre réduit de paires de bases couplées et fortement localisées. Ce modèle simplifié donne une approximation plutôt bonne des BDs qui ne sont pratiquement pas affectés par des interactions à longue portée [180]. Ainsi, sans toutefois perdre la généralité, nous cherchons des modes localisés uniquement centré au site $j = 0$ sous la forme :

$$\phi_n = (0, \dots, 0, \phi_{-2}, \phi_{-1}, \phi_0, \phi_1, \phi_2, 0, \dots, 0). \quad (2.64)$$

Par la suite, nous supposons également que $\phi_{\pm(j+1)} = (-k_0)^{j+1} \phi_0$ avec $j = 0, 1$ et k_0 un paramètre réel plus petit que l'unité ($|k_0| < 1$). En variant les paramètres (k_0, ϕ_0) , cette approximation permet de générer des BDs avec des formes plus ou moins variables [180]. Après insertion de cette forme de ϕ_n dans l'équation Eq. (2.63), nous obtenons pour les cas $n = 0$ et $n = 1$, l'équation couplée suivante :

$$\phi_0 \ddot{G} + \Gamma \phi_0 \dot{G} = F_0 \cos(\Omega\tau) - [\omega_g^2 + 2k_2(1 + k_0)] \phi_0 G - \alpha \omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - [\beta \omega_g^2 - 2k_4(1 + k_0)^3] \phi_0^3 G^3, \quad (2.65)$$

$$k_0 \phi_0 \ddot{G} + k_0 \Gamma \phi_0 \dot{G} = -F_0 \cos(\Omega\tau) + \alpha \omega_g^2 k_0^2 \phi_0^2 G^2 - [\beta \omega_g^2 k_0^3 - k_4(1 + k_0^3)(1 + k_0)^3] \phi_0^3 G^3 - [k_0 \omega_g^2 + k_2(1 + k_0)^2] \phi_0 G. \quad (2.66)$$

Il convient de noter qu'en raison de la présence d'un terme symétrique dans l'équation Eq. (2.63), il n'est pas possible de complètement découpler la dynamique spatiale de celle temporelle comme dans les références [179–184]. La multiplication de l'équation Eq. (2.65) par k_0 donne :

$$k_0 \phi_0 \ddot{G} + k_0 \Gamma \phi_0 \dot{G} = k_0 F_0 \cos(\Omega\tau) - k_0 \alpha \omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - k_0 [\beta \omega_g^2 - 2k_4(1 + k_0)^3] \phi_0^3 G^3 - k_0 [\omega_g^2 + 2k_2(1 + k_0)] \phi_0 G. \quad (2.67)$$

Nous constatons après avoir effectué l'opération précédente que le terme de gauche de l'équation Eq. (2.67) est identique à celui de l'équation Eq. (2.66). Ainsi, en substituant la valeur de l'expression du terme $(k_0 \phi_0 \ddot{G} + k_0 \Gamma \phi_0 \dot{G})$ obtenue à partir de l'équation Eq. (2.67) dans l'équation Eq. (2.66) et en collectant le résultat obtenu en fonction des puissances de k_0 , l'équation algébrique non linéaire suivante est obtenue :

$$k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^6 + 3k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^5 + k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^4 - [\beta \omega_g^2 G^3 \phi_0^3 + 4k_4 G^3 \phi_0^3] k_0^3 + [\alpha \omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - 3k_4 \phi_0^3 G^3 + k_2 \phi_0 G] k_0^2 + [k_4 \phi_0^3 G^3 + \beta \omega_g^2 \phi_0^3 G^3 + \alpha \omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - F_0 \cos(\Omega\tau)] k_0 - k_2 \phi_0 G + k_4 \phi_0^3 G^3 - F_0 \cos(\Omega\tau) = 0. \quad (2.68)$$

En recherchant des solutions dont le profil initial est exempt de l'excitation périodique d'une part ($F_0 \approx 0$) avec $G(\tau = 0) = G = 1$ d'autre part, il devient possible de résoudre l'équation non linéaire précédent et de trouver le couple des valeurs (k_0, ϕ_0) à utiliser pour le profil initial du mode localisé. Cette équation sera résolue par la méthode de NR et la stabilité des solutions obtenues sera étudiée au moyen de la méthode de stabilité de Floquet développée à la section §2.2.4.

2.3.4 Génération des breathers discrets par la méthode de continuation de la limite anti-continue : effets de la dissipation et du forçage périodique

Dans la section précédente, les breathers discrets ont été estimés en l'absence de la dissipation et du forçage périodique pour des valeurs spécifiques des paramètres du système. Dans la présente

section, les effets de ces paramètres seront pris en compte pour construire les BDs ayant des fréquences arbitraires $f_b = \omega_b/2\pi$ contenues dans la bande interdite. En effet, il est bien établi que pour qu'un breather puisse prendre forme, sa fréquence doit être différente de celle des modes phonons afin d'éviter toute résonance avec ces modes [96, 97, 185, 186]. Ainsi, si ω_b est la fréquence du breather et ω_{ph} celle des phonons, l'existence du breather implique la condition de non résonance $z \times \omega_b \neq \omega_{ph}$ où ω_{ph} est déduite de la relation de dispersion [voir Eq. (2.61)] et donnée par $\omega_g \leq \omega_{ph} \leq \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2^2}$ tandis que z est un entier.

La méthode de continuation de la limite anti continue développée à la section §2.2.3 peut également être utilisée pour générer les modes localisés sans toutefois avoir recours à une équation de Schrödinger comme ce fut le cas dans ladite section. Le principe restant cependant le même. En effet, l'équation Eq. (2.58) peut se mettre sous la forme :

$$\ddot{Y}_n + \Gamma \dot{Y}_n - k_2 \left\{ (Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) - \frac{b^2 \Delta H}{a^2 D (K_b + \frac{b \Delta H}{C})} [(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] \right\} + \omega_g^2 (Y_n + \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) = F_0 \cos(\Omega \tau). \quad (2.69)$$

Appliquer la LAC à l'équation Eq. (2.69) revient dans un premier à rechercher une solution périodique $\hat{Y}_n^{(0)}(\tau)$ pour $k_2 = k_2^{(0)} = 0$, puis dans un second temps utiliser la solution $\hat{Y}_n^{(0)}(\tau)$ pour déterminer $\hat{Y}_n^{(1)}(\tau)$ obtenue pour $k_2^{(1)} = k_2^{(0)} + \delta k_2^{(0)}$ où $\delta k_2^{(0)} = k_2/p$ est un incrément assez petit, avec p le nombre total d'itérations. Le processus se poursuivant ainsi jusqu'à $k_2^{(p)} \rightarrow k_2$ ce qui conduirait au BD recherché $\hat{Y}_n^{(p)}(\tau) \rightarrow \hat{Y}_n(\tau)$. Puisque les BDs sont des orbites périodiques dans l'espace de phase, ils peuvent être calculés soit en utilisant la méthode de l'espace de Fourier dans laquelle les breathers discrets sont déterminés par une troncation de Galerkin jusqu'à l'indice k_m du développement en série de Fourier⁶ [96, 154, 187, 188], ou en cherchant numériquement par la méthode de tir combinée à celle de NR, les points fixes de l'application [121, 174, 189] :

$$\mathcal{P} : \begin{bmatrix} Y_n(\tau) \\ \dot{Y}_n(\tau) \end{bmatrix}_{\tau=0} \mapsto \begin{bmatrix} Y_n(\tau) \\ \dot{Y}_n(\tau) \end{bmatrix}_{\tau=T_b}, \quad (2.70)$$

dont les BDs en sont des solutions, avec $T_b = 2\pi/\omega_b$ leurs périodes temporelles.

2.3.5 Effets d'une impureté dans la dynamique globale du modèle d'ADN de JB sous influence des forces dissipatives et excitatrices

Il est bien établi de nos jours que des erreurs génétiques peuvent survenir lors des processus de réplifications, transcriptions ou de traductions de la molécule d'ADN. Ces erreurs peuvent avoir des conséquences dramatiques sur les descendants d'une espèce. Les erreurs génétiques sont généralement soit localisées sur une paire de bases bien précise, soit sur un ensemble de paires de bases [voir figures 18(a)&(b) de la section §1.4 du Chapitre 1]. Compte tenu du fait que dans la molécule d'ADN les liaisons d'hydrogène entre l'adénine (A) et la thymine (T) sont environ 2 et qu'entre la guanine (G) et la cytosine (C) elles sont environ 3, un changement de cette configuration peut mener à

6. Cette méthode consiste à chercher une solution sous la forme $Y_n(\tau) = \sum_{\hat{k}=-k_m}^{\hat{k}+k_m} X_n^{\hat{k}} e^{i\hat{k}\omega_b \tau}$, avec $x_n^{\hat{k}} \in \mathbb{C}$, ce qui conduira à un système algébrique couplé non linéaire pouvant être résolu par la méthode de Newton-Raphson.

une autre séquence pouvant être assimilée à une impureté. Dans cette section, nous définissons l'impureté à travers les coefficients du potentiel de Morse, représentant l'interaction entre paires de bases appartenant à différents brins.

Le modèle donné par l'équation Eq. (2.69) étant dissipatif et forcé, il est fortement probable que la molécule entre en résonance avec la force excitatrice si les paramètres (amplitude du forçage F_0 , fréquence du forçage Ω et coefficient de dissipation Γ) ne sont pas convenablement choisis. Pour pallier à cela, une étude de la réponse en amplitude de la dynamique d'une paire de bases découplée du reste du réseau est faite en amont. Pour cette étude, nous supposons que la molécule est homogène. Ainsi donc, en découplant complètement le système (c'est-à-dire en posant $k_2 \approx 0$, $k_4 \approx 0$), la dynamique d'une paire de bases plongée dans le potentiel de site est donnée par :

$$\begin{aligned} \ddot{Y}_n(\tau) + \Gamma \dot{Y}_n(\tau) + \alpha_1 Y_n(\tau) + \alpha_2 Y_n^2(\tau) + \alpha_3 Y_n^3(\tau) &= F_0 \cos(\Omega\tau), \\ \alpha_1 &= \omega_g^2; \quad \alpha_2 = \alpha\omega_g^2; \quad \alpha_3 = \beta\omega_g^2. \end{aligned} \quad (2.71)$$

À cause des non linéarités présentes dans l'équation Eq. (2.71), il est très difficile d'obtenir une solution analytique exacte. Toutefois, plusieurs techniques permettant d'approcher ces solutions ont été développées dans la littérature. Parmi ces techniques figure la méthode de l'équilibrage des harmoniques (MEH) évoquée à la section §2.2.4, qui approxime la solution périodique d'une équation non linéaire moyennant une sommation des fonctions trigonométriques à un ordre fini [157–159]. Ceci étant, nous supposons qu'une solution périodique de l'équation Eq. (2.71) peut s'écrire sous la forme :

$$Y_n(\tau) = B_{0,n} + \sum_{k=1}^H C_{k,n} \cos(k\Omega\tau) + S_{k,n} \sin(k\Omega\tau), \quad (2.72)$$

où $B_{0,n}$, $C_{k,n}$ et $S_{k,n}$ sont des coefficients à déterminer, et H est le nombre maximum d'harmoniques requis pour tronquer la série de Fourier. Afin d'avoir une expression analytique de la réponse en amplitude du système, nous posons $H = 1$ ⁷ (première harmonique). L'équation précédente devient :

$$Y_n(\tau) = B_{0,n} + C_{1,n} \cos(\Omega\tau) + S_{1,n} \sin(\Omega\tau). \quad (2.73)$$

L'introduction par la suite de l'équation Eq. (2.73) dans l'équation Eq. (2.71) suivi d'une collecte des termes constants et des termes proportionnels à $\cos(\Omega\tau)$ et à $\sin(\Omega\tau)$ permet d'avoir le système couplé non linéaire suivant :

$$-\Gamma\Omega C_{1,n} + \left[\left(3B_{0,n}^2 + \frac{3}{4}A^2 \right) \alpha_3 + 2\alpha_2 B_{0,n} + \alpha_1 - \Omega^2 \right] S_{1,n} = 0, \quad (2.74a)$$

$$\left[\left(3B_{0,n}^2 + \frac{3}{4}A^2 \right) \alpha_3 + 2\alpha_2 B_{0,n} + \alpha_1 - \Omega^2 \right] C_{1,n} + \Gamma\Omega S_{1,n} = F_0, \quad (2.74b)$$

$$\left(B_{0,n}^2 + \frac{3}{2}A^2 \right) \alpha_3 B_{0,n} + \left(B_{0,n}^2 + \frac{1}{2}A^2 \right) \alpha_2 + \alpha_1 B_{0,n} = 0, \quad (2.74c)$$

où $A^2 = C_{1,n}^2 + S_{1,n}^2$. Le découplage des termes en $B_{0,n}$ de ceux de $C_{1,n}$ et $S_{1,n}$ dans les équations Eq. (2.74) conduit après quelques arrangements, à l'équation non linéaire algébrique vérifiée par $B_{0,n}$

⁷. Pour $H \geq 2$ il devient quasiment impossible de résoudre analytiquement le système d'équation non linéaire formé comme l'atteste les équations Eq. (C.5) et Eq. (C.6) de l'annexe.

(voir l'annexe C pour plus de détails de calculs) :

$$\sum_{j=0}^9 e_j B_{0,n}^j = 0, \quad (2.75)$$

dont les coefficients e_j sont donnés à l'équation Eq. (C.4) de l'annexe C. La relation amplitude-fréquence du système peut dès lors être estimée au moyen de la formule :

$$\mathcal{A} = |B_{0,n}| + \sqrt{\sum_{k=1}^H (C_{k,n}^2 + S_{k,n}^2)}. \quad (2.76)$$

Cette réponse fréquentielle du système au moyen de l'équation d'amplitude ci-dessus nous permettra d'identifier la bande des fréquences à éviter afin de prévoir le phénomène de résonance.

Une fois que les paramètres F_0 , Ω , Γ ont été convenablement choisis, l'étude d'une impureté localisée est conduite. Pour cela, les paires de bases sont cette fois soumises à un potentiel de Morse inhomogène. À cette fin, les coefficients dudit potentiel sont modifiés de façon à inclure ceux d'une impureté localisée au site n_0 . Ces coefficients a'_n et D'_n sont donnés par :

$$\begin{aligned} a'_n &= [(\mu - 1)\delta_{nn_0} + 1]a, \\ D'_n &= [(\mu - 1)\delta_{nn_0} + 1]D, \end{aligned} \quad (2.77)$$

avec δ_{nn_0} le symbole de Kronecker, μ un paramètre sans dimension modélisant le degré de l'impureté dont les valeurs sont comprises entre 0.399 et 1.5 ($0.399 \leq \mu \leq 1.5$). Le choix de cet intervalle de μ n'est pas anodin. En effet il est supposé comme c'est le cas dans la littérature [190–193] qu'une base azotée liée à travers une seule liaison hydrogène à son complémentaire fixé sur l'autre brin d'ADN, a pour caractéristique du potentiel de Morse, les coefficients suivants : $(a_{1H}, D_{1H}) \approx (0.5a, 0.5D)$. Partant de là, une double liaison hydrogène (cas de la correspondance **Adenine=Thymine**) et une triple liaison hydrogène (cas de la correspondance **Guanine≡Cytosine**) auront pour coefficient de Morse respectivement $(a_{2H}, D_{2H}) \approx (a, D)$ et $(a_{3H}, D_{3H}) \approx (1.5a, 1.5D)$. Notons que le cas de $\mu < 0.5$ correspond à une unique liaison hydrogène altérée. L'influence de cette impureté localisée sera étudiée numériquement et la détermination des zones pouvant induire une dynamique périodique, quasi-périodique ou chaotique de la chaîne toute entière sera faite par les outils numériques tels que l'exposant de Lyapounov, le diagramme de bifurcation et la section de Poincaré.

2.4 Effet de la longue portée sur la dynamique du modèle d'ADN de JB

Les études menées dans la section §2.2 ont révélé la richesse du modèle de JB quant à l'existence des modes localisées, moyennant l'approche de l'instabilité modulationnelle que celle de la limite anti-continue. Dans la section §2.3, les effets combinés de la dissipation, du forçage périodique et de l'impureté ont également été étudiés. Dans cette section, nous nous intéressons à l'influence du moment dipolaire dans la dynamique de cette macromolécule. En effet, il est bien établi que les paires de bases azotées sont polarisées [notamment la paire de liaison Hydrogène-Oxygène ($\delta^+ \text{H} \dots \text{O} \delta^-$) ou celle de liaison Hydrogène-Azote ($\delta^+ \text{H} \dots \text{N} \delta^-$) comme le montrent les figures 19(a)&(b)]. Ainsi, afin

de rendre le modèle encore plus réaliste, l'influence de l'interaction dipôle-dipôle illustrée à la figure 20 de la section §1.4 ne devrait pas être ignorée. La prise en compte de cette interaction pourrait en effet jouer un rôle crucial dans la dynamique de l'ADN. Fort donc de cela et dans l'optique d'incorporer ces effets dipolaires, nous modifions le modèle original de JB [voir équation Eq. (1.37)] en ajoutant une énergie qui tient compte de l'interaction longue portée (ILP) venant des forces dipolaires. Le Hamiltonien du modèle modifié de JB peut donc s'écrire sous la forme :

$$H = \sum_{n=1} \left\{ \frac{1}{2m} P_n^2 + D[1 - \exp(-ay_n)]^2 + \frac{\Delta H}{C} [1 - \exp(-b(y_n - y_{n-1})^2)] + K_b(y_n - y_{n-1})^2 \right\} + \sum_{n=1} \left\{ \sum_{\kappa \neq n} \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 d^3} \frac{1}{|\kappa|^3} y_{n+\kappa} y_n \right\}. \quad (2.78)$$

Cet Hamiltonien correspond au cas particulier d'une molécule d'ADN homogène dans laquelle les moments dipolaires sont parallèles entre eux et pointent tous vers la même direction. Avec $P_n = m\dot{y}_n$ l'impulsion, y_n la vibration transverse de la paire de nucléotide placée au site n et m est sa masse. Les paramètres D , a , ΔH , b et K_b sont définis à la section §1.3.2. Le dernier terme de l'équation Eq. (2.78), qui n'a pas été pris en compte dans le modèle original de JB [77, 78] a les coefficients suivants : d est la distance entre paires de bases adjacentes situées sur le même brin, q est le transfert de charge issu de la vibration des liaisons hydrogène [139–142]. L'ILP sera limitée aux $(N - 1)/2$ paires de bases voisines et dans chaque direction si N est impair, sinon elle sera limitée aux $(N - 2)/2$ paires de bases voisines dans les mêmes directions que précédentes [139–142]. L'équation adimensionnée correspondant au Hamiltonien donné par l'équation Eq. (2.78) est :

$$\frac{d^2 Y_n}{d\tau^2} + \frac{2K_b}{a^2 D} (2Y_n - Y_{n+1} - Y_{n-1}) + \frac{1}{a^2 D} \sum_{\kappa \neq n} J_\kappa Y_{n+\kappa} - 2(e^{-Y_n} - 1)e^{-Y_n} + \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} \left[(Y_n - Y_{n-1})e^{-\frac{b}{a^2}(Y_n - Y_{n-1})^2} - (Y_{n+1} - Y_n)e^{-\frac{b}{a^2}(Y_{n+1} - Y_n)^2} \right] = 0, \quad (2.79)$$

où $Y_n = ay_n$, $\tau = t\sqrt{a^2 D/m}$ et $J_\kappa = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 d^3 |\kappa|^3}$. La constante de couplage J_κ provient du transfert de charges (q) issues de la vibration des liaisons hydrogènes. L'indice κ quant à lui représente la distance normalisée entre paires de bases adjacentes situées sur le même brin [139–142].

Suivant l'approche communément utilisée dans la littérature [58], nous supposons que les oscillations des paires de bases azotées au fond du puits du potentiel de Morse [voir figure 15(b)], ont des amplitudes assez importantes pour être considérées comme anharmoniques, mais sont cependant insuffisantes pour produire la séparation complète du double brin [état ouvert de la figure 15(b)]. En d'autres termes, ces amplitudes d'oscillations permettent d'incorporer les effets non linéaires qui jouent un rôle essentiel dans la dynamique de l'ADN [6, 194]. Cette considération étant prise en compte, nous pouvons dès lors effectuer le développement en série de Taylor des termes $\exp[-\frac{b}{a^2}(Y_{n\pm 1} - Y_n)^2]$ et $\exp[-Y_n]$ dans l'équation Eq. (2.79) au second et troisième ordre respectivement [84–89]. L'équation différentielle résultant de ces approximations est de ce fait :

$$\ddot{Y}_n - k_2(Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) + \omega_g^2 (Y_n - \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) + k_4 [(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] + \sum_{\kappa} \hat{J}_\kappa Y_{n+\kappa} = 0, \quad (2.80)$$

dont les coefficients sont :

$$\hat{J}_\kappa = \begin{cases} \frac{\hat{J}}{|\kappa|^3} & \text{si } 1 \leq |\kappa| \leq (N - \mathcal{P})/2, \quad \mathcal{P} = 1 \text{ ou } 2, \\ 0 & \text{sinon;} \end{cases}, \quad \alpha = \frac{3}{2}; \quad \hat{J} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 a^2 d^3 D}. \quad (2.81)$$

Les autres coefficients (k_2 , k_4 , ω_g et β) sont les mêmes que dans les équations Eq. (2.4) et Eq. (2.58) des sections §2.2 et §2.3 respectivement.

Dans la suite, nous ferons aussi bien une analyse du mode linéaire que du mode non linéaire afin de voir l'impact de cette ILP sur la dynamique globale de l'ADN.

2.4.1 Analyse du mode linéaire

Pour mener à bien cette analyse, nous annulons dans un premier temps les termes non linéaires dans l'équation Eq. (2.80), puis dans un second temps, nous supposons qu'une solution de l'équation linéaire résultante a la même forme que celle donnée à l'équation Eq. (2.60) de la section §2.3.2. Cette considération nous permet d'obtenir le spectre des phonons donnée par la relation de dispersion ci-dessous :

$$\omega^2 = \omega_g^2 + 4k_2 \sin^2\left(\frac{k_0 \ell}{2}\right) + 2\hat{J} \sum_m \frac{\cos(k_0 m \ell)}{m^3}. \quad (2.82)$$

Notons que, tout comme l'équation Eq. (2.61) (obtenue dans le cas de l'absence de la longue portée), l'équation Eq. (2.82) traduit également une relation de dispersion passe bande, à la différence que le terme issu de l'ILP pourrait la modifier. Ainsi donc, la prise en compte des effets dipolaires enrichit davantage la dynamique de la macromolécule, ouvrant la porte à la possibilité d'émergence des phénomènes nouveaux. On peut s'en convaincre en calculant la vitesse de groupe des ondes :

$$v_g \equiv \frac{\partial \omega}{\partial k_0} = \frac{1}{\omega} \left[k_2 \ell \sin(k_0 \ell) - \hat{J} \ell \sum_m \frac{\sin(k_0 \ell m)}{m^2} \right]. \quad (2.83)$$

La présence d'une différence dans l'expression de v_g nous renseigne sur les différents cas de figure dont l'ADN sous ILP pourrait exhiber :

- Si $|k_2 \ell \sin(k_0 \ell)| > \left| \hat{J} \ell \sum_m \frac{\sin(k_0 \ell m)}{m^2} \right|$ alors, $v_g > 0$ et par conséquent la pente de la courbe de dispersion sera positive pour un choix convenable des paramètres, conduisant de facto à l'émergence des ondes se propageant dans le sens des indices croissants (ou de la gauche vers la droite).
- Si par contre $|k_2 \ell \sin(k_0 \ell)| < \left| \hat{J} \ell \sum_m \frac{\sin(k_0 \ell m)}{m^2} \right|$ alors, $v_g < 0$ et par conséquent la pente de la courbe de dispersion sera négative pour un choix convenable des paramètres, conduisant à l'émergence des ondes se propageant dans le sens des indices décroissants (ou de la droite vers la gauche).
- Si nous avons cette fois ci $|k_2 \ell \sin(k_0 \ell)| = \left| \hat{J} \ell \sum_m \frac{\sin(k_0 \ell m)}{m^2} \right|$ alors $v_g = 0$. Ce cas nous renseigne qu'il est possible d'avoir des ondes stationnaires quand bien même on ne se situerait pas au centre ($k_0 = 0$) ou à la limite supérieure ($k_0 = \pi/\ell$) de la première zone de Brillouin.

Les contraintes ci-dessus peuvent se résumer en trouvant la valeur critique $\hat{J}_{cr}(k_0)$ du coefficient de couplage dipolaire $\hat{J}(k_0)$ qui annule la vitesse de groupe. Cette valeur critique a pour expression :

$$\hat{J}_{cr}(k_0) = \frac{k_2 \sin(k_0 \ell)}{\sum_m \left(\frac{\sin(k_0 \ell m)}{m^2} \right)}. \quad (2.84)$$

Ainsi, nous dirons qu'il y aura création des ondes progressives lorsque $\hat{J}(k_0) < \hat{J}_{cr}(k_0)$ et régressives lorsque $\hat{J}(k_0) > \hat{J}_{cr}(k_0)$.

2.4.2 Analyse du mode non linéaire

À cause des non linéarités présents dans l'équation Eq. (2.80), il est très difficile d'en trouver une solution exacte. Toutefois, tout comme l'équation Eq. (2.3) de la section §2.2, il existe dans la littérature des méthodes permettant d'approcher ces solutions [195, 196]. Parmi ces méthodes figure celle de l'approximation semi-discrète (ASD) qui consiste à considérer le mouvement de l'enveloppe de l'onde dans le domaine continu, tandis que la phase reste purement dans le discret. Le procédé de l'ASD consiste à utiliser la technique de perturbation réductive donnée par l'expression générale [196–199] :

$$Y_n(\tau) = \sum_s \varepsilon^s \Psi_s(n, \tau) = \sum_s \varepsilon^s \sum_\iota F_{s\iota}(n, \tau) e^{i\iota\theta_n} + CC, \quad (2.85)$$

dans laquelle ε est un paramètre d'échelle sans dimension désignant la perturbation et CC est le complexe conjugué. Notons que seuls les trois premiers termes de l'équation Eq. (2.85) sont les plus importants, comme cela a été démontré dans la littérature [196–199], car la contribution des autres termes non nuls sont supposés n'être que des termes de correction. De ce fait, nous cherchons une solution approchée de l'équation Eq. (2.80) sous la forme :

$$Y_n(\tau) = \varepsilon F_1(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau) e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 [F_0(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau) + F_2(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau) e^{2i\theta_n}] + CC + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \quad (2.86)$$

où $\theta_n = n\ell k_0 - \omega\tau$, $F_1(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)$, $F_2(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)$ sont des fonctions complexes et CC leur complexe conjugué, $i^2 = -1$, $F_0(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)$ est une fonction réelle. ω et k_0 représentent respectivement la fréquence et le vecteur d'onde. Après insertion de l'équation Eq. (2.86) dans l'équation Eq. (2.80) nous obtenons à des différents ordres en ε et $\exp(i\theta_n)$ les relations suivantes (voir l'annexe E pour des détails de calcul) :

→ **À l'ordre** ($\varepsilon e^{i\theta_n}$) :

$$-\omega^2 + 4k_2 \sin^2\left(\frac{k_0\ell}{2}\right) + \omega_g^2 + 2\hat{J} \sum_m \frac{\cos(k_0\ell m)}{m^3} = 0,$$

c'est la relation de dispersion des phonons donnée par l'équation Eq. (2.82).

→ **À l'ordre** ($\varepsilon^2 e^{2i\theta_n}$), nous obtenons :

$$\left\{ -4\omega^2 + \omega_g^2 + 4k_2 \sin^2(k_0\ell) + 2\hat{J} \sum_m \frac{\cos(2k_0\ell m)}{m^3} \right\} F_2 - \alpha\omega_g^2 F_1^2 = 0,$$

qui montre que F_2 peut se mettre sous la forme :

$$F_2 = \delta F_1^2, \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{\alpha\omega_g^2}{\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2(k_0\ell) - 4\omega^2 + 2\hat{J} \sum_m \frac{\cos(2k_0\ell m)}{m^3}}. \quad (2.87)$$

→ À l'ordre $(\varepsilon^2 \mathbf{e}^{i0\theta_n})$:

$$F_0 \left(\omega_g^2 + 2\hat{J} \sum_m \frac{1}{m^3} \right) - 2\alpha\omega_g^2 |F_1|^2 = 0,$$

on obtient également une relation de contrainte liant F_0 à F_1 comme le montre l'équation Eq. (2.88) suivante :

$$F_0 = \mu |F_1|^2, \quad \text{avec} \quad \mu = \frac{2\alpha\omega_g^2}{\omega_g^2 + 2\hat{J} \sum_m \frac{1}{m^3}}. \quad (2.88)$$

→ À l'ordre $(\varepsilon^2 \mathbf{e}^{i\theta_n})$, nous avons :

$$2i \left[\omega v_g + \hat{J}\ell \sum_m \frac{\sin(k_0\ell m)}{m^2} - k_2\ell \sin(k_0\ell) \right] \frac{\partial F_1}{\partial \eta} = 0, \quad (2.89)$$

on retrouve ainsi l'expression de la vitesse de groupe v_g des ondes donnée par l'équation Eq. (2.83).

→ À l'ordre $(\varepsilon^3 \mathbf{e}^{i\theta_n})$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} -2i\omega \frac{\partial F_1}{\partial \tau} + \left[v_g^2 + \hat{J}\ell^2 \sum_m \frac{\cos(k_0\ell m)}{m} - k_2\ell^2 \cos(k_0\ell) \right] \frac{\partial^2 F_1}{\partial \eta^2} - 48k_4 |F_1|^2 F_1 \sin^4 \left(\frac{k_0\ell}{2} \right) \\ + \omega_g^2 [3\beta |F_1|^2 - 2\alpha(F_1 F_0 + F_2 F_1^*)] = 0. \end{aligned} \quad (2.90)$$

Après substitution des expressions de F_2 et F_0 obtenues respectivement aux équations Eq. (2.87) et Eq. (2.88) dans l'équation Eq. (2.90), nous obtenons après simplification, l'équation de Schrödinger non linéaire cubique ci-dessous :

$$i \frac{\partial F_1}{\partial \tau} + P \frac{\partial^2 F_1}{\partial \eta^2} + Q |F_1|^2 F_1 = 0, \quad (2.91)$$

où le coefficient de dispersion P et de non linéarité cubique Q sont donnés par :

$$P = \frac{1}{2\omega} \left[k_2\ell^2 \cos(k_0\ell) - v_g^2 - \hat{J}\ell^2 \sum_m \frac{\cos(k_0\ell m)}{m} \right], \quad (2.92)$$

$$Q = \frac{1}{2\omega} \left[-\omega_g^2 [3\beta - 2\alpha(\delta + \mu)] + 48k_4 \sin^4 \left(\frac{k_0\ell}{2} \right) \right]. \quad (2.93)$$

Physiquement, le coefficient P mesure la dispersion linéaire de l'onde tandis que le coefficient Q détermine comment la fréquence de l'onde est modulée par les effets non linéaires.

Dans les systèmes physiques dont la dynamique est traduite par l'ESNL, il est établi que l'existence et la nature des solutions dépendent fortement du signe des coefficients de l'équation d'amplitude P et de Q [195, 196, 200]. Ces solutions sont des solitons topologiques lorsque le produit $PQ < 0$, tandis qu'elles sont des solitons non topologiques lorsque $PQ > 0$ [195, 196, 200]. Dans la suite, nous verrons l'impact de l'interaction dipôle-dipôle sur les coefficients P et Q et par conséquent le type de solitons.

2.4.3 Solution discrète exacte et analyse de la stabilité

Dans la section §2.2.3, nous avons généré les modes localisés (principalement pour le cas des solitons non topologiques) au moyen de la limite anti-continue (LAC). Contrairement à ce qui a été fait à la section §2.2.1 où l'AOR a été utilisée pour obtenir une équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue, la section §2.4.2 nous a montré, qu'en utilisant l'ASD, l'équation d'amplitude est donnée par une ESNL standard. Compte tenu du fait que nous nous intéressons au processus de dénaturation de l'ADN (bulle d'ouverture localisée se propageant sur la macromolécule), nous mettons l'accent au cas où le produit des coefficients P et Q est positif ($PQ > 0$) entraînant l'existence des solitons non topologiques.

Il est à noter que l'ASD a été utilisée dans la section §2.4.3 pour trouver une solution approchée à l'équation discrète Eq. (2.80) (elle-même étant issue d'une approximation en série de Taylor). Or le modèle de départ [voir Eq. (2.79)] quant à lui est purement discret et contient tous les termes non linéaires de la fonction exponentielle. Raison pour laquelle il est primordial de rechercher les solutions exactes du réseau discret. Pour cela, nous exploitons les solutions venant de l'ASD et les utilisons comme point de départ.

La méthode utilisée pour générer ces solutions est celle de la LAC développée à la section §2.2.3, couplée à la méthode de tir évoquée à la section §2.3.4, où la solution triviale est celle dérivant des équations Eqs. (2.86)-(2.88) et Eq. (2.91). Généralement, la construction des modes localisés stationnaires (vitesse de groupe nulle) n'est possible que pour des valeurs du vecteur d'onde situées soit au centre de la première zone de Brillouin, soit à sa périphérie. Or la présence de l'ILP nous donne d'autres valeurs du vecteur d'onde annulant la vitesse de groupe. Ainsi, la construction de ces MLs sera plus enrichissante dans un ce modèle avec ILP.

Une fois que le breather discret sera construit, la prochaine étape consistera à étudier sa stabilité orbitale et la meilleure approche est celle de la technique de stabilité de Floquet, car les BDs sont des solutions périodiques. La procédure développée à la section §2.2.4 consiste à analyser l'évolution d'une perturbation $\chi_n(\tau)$ de la solution périodique $\hat{Y}_n(\tau)$. L'équation régissant la dynamique de la perturbation [obtenue en remplaçant $Y_n(\tau) = \hat{Y}_n(\tau) + \chi_n(\tau)$ dans l'équation Eq. (2.79), puis en linéarisant autour de la perturbation $\chi_n(\tau)$] est :

$$\begin{aligned} \ddot{\chi}_n + \frac{2K_b}{a^2 D} (2\chi_n - \chi_{n+1} - \chi_{n-1}) + 2 \left(2e^{-\hat{Y}_n} - 1 \right) e^{-\hat{Y}_n} \chi_n + \sum_{i \neq n} \hat{J}_i \chi_{n+i} \\ + \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} \left[1 - \frac{2b}{a^2} \left(\hat{Y}_n - \hat{Y}_{n-1} \right)^2 \right] (\chi_n - \chi_{n-1}) e^{-\frac{b}{a^2} (\hat{Y}_n - \hat{Y}_{n-1})^2} \\ - \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} \left[1 - \frac{2b}{a^2} \left(\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n \right)^2 \right] (\chi_{n+1} - \chi_n) e^{-\frac{b}{a^2} (\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n)^2} = 0. \end{aligned} \quad (2.94)$$

Rappelons que la solution $\hat{Y}_n(\tau)$ sera dite stable lorsque la perturbation $\chi_n(\tau)$ n'accroîtra pas exponentiellement avec le temps et, instable dans le cas contraire. Étant donné par hypothèse que $\hat{Y}_n(\tau)$ est une solution périodique de période T_b , l'équation Eq. (2.94) définit une application linéaire liant

l'évolution de la perturbation aux instants $\tau = 0$ et $\tau = T_b$ donnée par :

$$\begin{bmatrix} \chi_n \\ \dot{\chi}_n \end{bmatrix}_{\tau=T_b} = \mathcal{M} \times \begin{bmatrix} \chi_n \\ \dot{\chi}_n \end{bmatrix}_{\tau=0} \quad (2.95)$$

où $\mathcal{M} = \mathcal{M}(\hat{Y}_n)$ est la matrice de monodromie. Les valeurs propres de cette matrice déterminent l'état de la stabilité de $\hat{Y}_n(\tau)$ tel que développé à la section §2.2.4.

2.4.4 Mobilité du mode localisé : résonance avec le mode des phonons

Une fois que la solution périodique stationnaire a été obtenue, la prochaine étape consiste à la faire se mouvoir. En effet, afin de pouvoir répondre à la demande de l'organisme au besoin d'une protéine précise, la molécule d'ADN a besoin d'être transcrite sur le segment codant pour ladite protéine. Cette transcription étant modélisée par une bulle d'ouverture locale effectuant une translation sur la séquence codante, d'où la nécessité de rendre les solutions dynamiques (car les breathers discrets sont des solutions solitons fortement localisées).

La méthode utilisée pour rendre les solutions (lorsqu'elles existent) dynamique est celle développée par Alvarez et *al.* [166] et évoquée à la section §2.2.5. Cette méthode consiste à perturber l'onde stationnaire par un « kick » au moyen de la formule :

$$\begin{aligned} Y_{BDD,n}^0 &= Y_{BDS,n}^0 \cos[\nu(n - n_0)], \\ \dot{Y}_{BDD,n}^0 &= \pm Y_{BDS,n}^0 \sin[\nu(n - n_0)], \end{aligned} \quad (2.96)$$

où BDD/BDS signifie breather discret dynamique/stationnaire. Le paramètre ν est le vecteur d'onde de la perturbation et \pm modélise la propagation progressive (+) ou régressive (-) des ondes. Notons au passage que lorsque le paramètre ν est mal choisi, l'onde peut être détruite, être piégée ou rester stationnaire.

Il est à noter que durant leurs propagations, les BDDs peuvent interagir avec le mode des phonons. En effet, il est généralement observé des ailes et/ou des queues d'oscillations accompagnant la propagation de l'énergie dans le système. Ces queues ou ailes d'oscillations de très faibles amplitudes par rapport au paquet d'énergie initial proviennent pour la plupart des cas de l'interaction du BDD avec la courbe de dispersion du système. Sato et *al.* [201] ont montré à travers la représentation dans le domaine spectral bi-dimensionnel (k_0, ω) qu'un breather résonant interagit avec la relation de dispersion ω suivant les lignes données par l'équation :

$$\omega = \omega_c + \mathcal{V}(k_0 - k_c), \quad (2.97)$$

où k_c et ω_c sont respectivement le vecteur d'onde et la fréquence de l'onde porteuse. La variable \mathcal{V} représente quant à elle la vitesse de propagation du paquet d'onde et peut être estimée numériquement

suivant les formules :

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\mathcal{T}} \sum_{k=1}^{\mathcal{T}_k} \dot{\mathcal{Y}}(\tau_k), \quad (2.98a)$$

$$\mathcal{Y}(\tau_k) = \frac{\sum_{n=1}^N n Y_n^2(\tau_k)}{\sum_{n=1}^N Y_n^2(\tau_k)}, \quad (2.98b)$$

avec \mathcal{T} le temps total de simulation, \mathcal{T}_k le nombre de nœuds du pas d'intégration et $\mathcal{Y}(\tau_k)$ l'évolution du pseudo-centre de masse du BDD [202]. Afin de déterminer ces lignes et points d'interactions du BDD avec la relation de dispersion, nous faisons l'hypothèse selon laquelle l'onde effectue une translation de son centre de masse du site n au temps τ vers le site $n' = n \pm p$ au temps $\tau' = \tau + qT_b$, avec p, q des entiers. En cas de résonance du BDD avec ω , la relation ci-dessous est également respectée :

$$Y_{n \pm p}(\tau + qT_b) = Y_n(\tau), \forall n. \quad (2.99)$$

En combinant par la suite l'équation Eq. (2.99) et l'équation Eq. (2.60), nous aboutissons à la condition de résonance du BDD avec l'onde plane que suit [172] :

$$\frac{\omega}{\omega_b} = \frac{1}{q} \left[\pm \left(\frac{k_0 \ell}{2\pi} \right) p - m \right], \quad (2.100)$$

avec m un entier, et ω donnée par l'équation Eq. (2.82). Faisant usage des valeurs du couple (k_0, ω) appartenant à la ligne de propagation de l'onde d'une part, et la méthode de Gauss-Newton d'autre part, il devient possible d'avoir les entiers p, q, m et, de façon plus générale, les autres lignes et points résonant avec le BDD moyennant l'usage des équations Eq. (2.82) et Eq. (2.100), soit :

$$m = \pm \left(\frac{k_0 \ell}{2\pi} \right) p \mp \frac{q}{\omega_b} \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right) + 2\hat{J} \sum_s \frac{\cos(k_0 \ell s)}{s^3}}. \quad (2.101)$$

2.5 Techniques de simulation numérique

La simulation numérique ou informatique désigne l'exécution d'un programme informatique sur un ordinateur ou réseau en vue de simuler un phénomène physique réel et complexe. Elle est rapidement devenue incontournable non seulement pour modéliser des systèmes naturels en physique, chimie et biologie, mais également pour des systèmes humains en économie et science sociale. En ce qui concerne les sciences physiques, on y fait souvent face à des problèmes qui, quand bien même ils ont une expression analytique, demeurent dans la plupart des cas très difficile à exploiter et, nécessitent ainsi le recours de l'outil informatique. Dans cette section, nous énumérons quelques techniques et méthodes numériques généralement utilisées pour résoudre non seulement les équations algébriques non linéaires, les équations différentielles, mais aussi pour exploiter les caractéristiques de la réponse d'un système.

2.5.1 La méthode d'approximation par les moindres carrés

C'est une méthode de régression permettant de trouver une bonne approximation des données issues d'une expérience ou d'une simulation numérique, dont le nombre de valeurs restreintes ne permet pas une bonne appréciation du phénomène mis en jeu. Elle est basée sur la minimisation du reste \mathcal{R} , qui est la somme des carrés de la différence entre la fonction test et les données. Cette méthode a de nombreuses applications en physique. La résolution d'un problème physique par cette méthode passe par la détermination de la solution du système algébrique $\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \mathbf{a}_k} = \mathbf{0}; \mathbf{k} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots$. Pour mieux fixer les idées, supposons qu'il soit demandé de trouver les constantes \mathbf{A} et \mathbf{r} de la loi physique ci-dessous :

$$\omega_{\mathbf{b}} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{J}}^{\mathbf{r}}. \quad (2.102)$$

En appliquant la fonction logarithme à l'équation Eq. (2.102), nous obtenons un système linéaire dont les inconnues sont $\ln(\mathbf{A})$ et \mathbf{r} . Ainsi, la minimisation du reste :

$$\mathcal{R} = \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left\{ \ln(\omega_{\mathbf{b},\mathbf{k}}) - \left[\ln(\mathbf{A}) + \mathbf{r} \ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right] \right\}, \quad (2.103)$$

conduit à l'obtention des inconnues recherchées tel que suit :

$$\mathbf{A} = \exp \left\{ \frac{\sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right]^2 \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\omega_{\mathbf{b},\mathbf{k}}) \right] - \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right] \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\omega_{\mathbf{b},\mathbf{k}}) \ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right]}{\mathbf{m} \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right]^2 - \left(\sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right] \right)^2} \right\}, \quad (2.104)$$

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{m} \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\omega_{\mathbf{b},\mathbf{k}}) \ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right] - \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right] \sum \left[\ln(\omega_{\mathbf{b},\mathbf{k}}) \right]}{\mathbf{m} \sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right]^2 - \left(\sum_{\mathbf{k}=1}^{\mathbf{m}} \left[\ln(\hat{\mathbf{J}}_{\mathbf{k}}) \right] \right)^2}.$$

2.5.2 La méthode de Newton-Raphson

Il existe en physique des équations transcendantales qui sont impossibles à résoudre analytiquement. Pour surmonter cette difficulté, on utilise généralement la méthode de Newton-Raphson (NR). Cette méthode est probablement la meilleure en ce qui concerne la recherche des racines d'une fonction. Le principe de la méthode repose sur le développement en série de Taylor à l'ordre réduit de la fonction $\mathbf{F}(\mathbf{X})$ aux alentours de la solution recherchée, c'est-à-dire $\mathbf{F}(\mathbf{X}_n + h) = \mathbf{F}(\mathbf{X}_n) + h\mathbf{F}'(\mathbf{X}_n) + \mathcal{O}(h^2)$, avec \mathbf{X}_n une approximation de la solution. Ainsi, si nous posons $h = \mathbf{X} - \mathbf{X}_n$ et supposons que \mathbf{X} est une solution de \mathbf{F} à l'itération suivante, nous obtenons le schéma itératif : $\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n - \frac{\mathbf{F}(\mathbf{X}_n)}{\mathbf{F}'(\mathbf{X}_n)}$ où $\mathbf{F}'(\mathbf{X}_n)$ est la dérivée première de la fonction non linéaire $\mathbf{F}(\mathbf{X}_n)$ par rapport à la variable \mathbf{X}_n .

Considérons par exemple que l'on souhaite rechercher les solutions $\mathbf{U} = (u_1, u_2, \dots, u_N)^T$ du système algébrique non linéaire donné par l'équation Eq. (2.22). La méthode itérative de NR pour cette équation est donnée par :

$$\mathbf{U}^{k+1} = \mathbf{U}^k - \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}^k), \quad (2.105)$$

avec \mathbf{U}^k la valeur de \mathbf{U} après la k^{eme} itération et \mathbf{J} une matrice tridiagonale appelée matrice jacobienne (*i.e.*, $\mathbf{J}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U}_i)}{\partial \mathbf{U}_j}$). Notons que cette matrice doit être inversible et, pour que le schéma

itératif puisse converger, il faudrait que la valeur initiale \mathbf{U}^0 soit assez proche de la solution recherchée. C'est la raison pour laquelle la LAC a été utilisée pour cette équation afin d'avoir la solution triviale à corriger. Le schéma itératif s'arrêtera lorsque la condition suivante sera satisfaite :

$$\|\mathbf{U}^{k+1} - \mathbf{U}^k\| \leq Tol, \quad (2.106)$$

où Tol est la précision désirée.

2.5.3 La méthode de Gauss-Newton

La méthode de Gauss-Newton est une classe de méthode pour la résolution des problèmes de moindres carrés non linéaires. Elle peut être vue comme une modification de la méthode de Newton dans le cas multidimensionnel afin de trouver le minimum d'une fonction (à plusieurs variables).

Soit q fonctions \mathbf{r}_i de n variables $\mathbf{\Upsilon} = (\Upsilon_1, \Upsilon_2, \dots, \Upsilon_n)$ avec $q \geq n$, l'algorithme de Gauss-Newton doit trouver le minimum de la somme des carrés [203] :

$$\mathbf{S}(\mathbf{\Upsilon}) = \sum_{i=1}^q \mathbf{r}_i^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{\Upsilon}) = \sum_{i=1}^q [\mathbf{y}_i - \mathbf{f}_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{\Upsilon})]^2, \quad (2.107)$$

où $y = f(x, \Upsilon)$ est un certain modèle permettant le meilleur ajustement aux observations (x_i, y_i) . En notant \mathbf{f} le vecteur des fonctions $f_i(x_i, \Upsilon)$, le schéma itératif de l'algorithme de Gauss-Newton minimisant l'équation Eq. (2.107) est donné par :

$$\mathbf{\Upsilon}^{k+1} = \mathbf{\Upsilon}^k - (\mathbf{J}_r^T \mathbf{J}_r)^{-1} \mathbf{J}_r^T \mathbf{r}, \quad (2.108)$$

avec \mathbf{r} le vecteur des fonctions \mathbf{r}_i , \mathbf{J}_r la matrice jacobienne de taille $q \times n$ de \mathbf{r} par rapport à $\mathbf{\Upsilon}$ et \mathbf{J}_r^T la matrice transposée de \mathbf{J}_r . L'hypothèse $q \geq n$ est nécessaire, car dans le cas contraire la matrice $\mathbf{J}_z = (\mathbf{J}_r^T \mathbf{J}_r)$ serait non inversible, entraînant ainsi l'échec de l'algorithme.

Pour être plus précis, supposons qu'on souhaite déterminer les paramètres p , q et m de l'équation Eq. (2.100), caractérisant un breather discret dynamique résonant avec le mode des phonons. Dans ce cas, la fonction \mathbf{r}_i de 3 variables $\mathbf{\Upsilon} = (p, q, m)$ a pour expression :

$$r_i(\omega_i, k_{0,i}, \mathbf{\Upsilon}) = \omega_i - \frac{\omega_b}{q} \left[\pm \left(\frac{k_{0,i}\ell}{2\pi} \right) p - m \right], \quad (2.109)$$

où $\omega = f(k_0, \Upsilon)$ permet une meilleure observation aux points $(k_{0,i}, \omega_i)$. Ainsi, la recherche de ces paramètres passe par l'implémentation du schéma itératif donné par l'équation Eq. (2.108) :

$$\begin{pmatrix} p \\ q \\ m \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} p \\ q \\ m \end{pmatrix}^k - \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N J_{i,3} J_{i,1} & \sum_{i=1}^N J_{i,3} J_{i,2} & \sum_{i=1}^N J_{i,3}^2 \\ \sum_{i=1}^N J_{i,2} J_{i,1} & \sum_{i=1}^N J_{i,2}^2 & \sum_{i=1}^N J_{i,2} J_{i,3} \\ \sum_{i=1}^N J_{i,1}^2 & \sum_{i=1}^N J_{i,1} J_{i,2} & \sum_{i=1}^N J_{i,1} J_{i,3} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N J_{i,3} r_i \\ \sum_{i=1}^N J_{i,2} r_i \\ \sum_{i=1}^N J_{i,1} r_i \end{pmatrix}, \quad (2.110)$$

dont les expressions $J_{i,1}$, $J_{i,2}$ et $J_{i,3}$ de la matrice $\mathbf{J}_z = (\mathbf{J}_r^T \mathbf{J}_r)$ sont données par :

$$\begin{aligned} J_{i,1} &= \frac{\partial}{\partial p} r_i(\omega_i, k_{0,i}, \mathbf{\Upsilon}) = -\frac{\omega_b}{q} \left[\pm \left(\frac{k_{0,i}\ell}{2\pi} \right) \right], \\ J_{i,2} &= \frac{\partial}{\partial q} r_i(\omega_i, k_{0,i}, \mathbf{\Upsilon}) = +\frac{\omega_b}{q^2} \left[\pm \left(\frac{k_{0,i}\ell}{2\pi} \right) p - m \right], \\ J_{i,3} &= \frac{\partial}{\partial m} r_i(\omega_i, k_{0,i}, \mathbf{\Upsilon}) = \frac{\omega_b}{q}. \end{aligned} \quad (2.111)$$

2.5.4 Les méthodes de Runge-Kutta

Les méthodes de Runge-Kutta (RK) sont des techniques d'approximation des solutions des équations différentielles ordinaires (EDO). Elles ont été développées par *Runge* en 1895 [204] et améliorées par *Kutta* en 1901 [205]. Ces méthodes s'appuient sur les techniques numériques d'intégration des trapèzes et de Simpson. Elles sont très stables et faciles à programmer. Pour implémenter ces méthodes, il faudrait avant toute chose transformer les équations différentielles à intégrer en un système d'équations différentielles de premier ordre. Si nous prenons par exemple le cas de l'équation Eq. (2.58), et que nous posons le changement de variable $V_n(\tau) = \dot{Y}_n(\tau)$, nous obtenons ainsi un système d'EDO de premier ordre :

$$\begin{cases} \dot{Y}_n = V_n \\ \dot{V}_n = -\Gamma V_n + k_2(Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) - \omega_g^2(Y_n + \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) \\ \quad - k_4[(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] + F_0 \cos(\Omega\tau); \end{cases} \quad (2.112)$$

ou encore sous une forme plus compacte :

$$\dot{\mathbf{X}}_n = \mathbf{F}[\tau, \mathbf{X}_n(\tau)]; \quad \mathbf{X}_n(\tau = 0) = \mathbf{X}_n^0, \quad (2.113)$$

avec $\mathbf{X}_n = [Y_1, Y_2, \dots, Y_N, V_1, V_2, \dots, V_N]^T$ et $\mathbf{F}[\tau, \mathbf{X}_n(\tau)] = [V_1, V_2, \dots, V_n, f_1, f_2, \dots, f_N]^T$ et dont f_n est le terme de droite de la seconde équation de Eq. (2.112).

Considérons donc le problème aux valeurs initiales donné à l'équation Eq. (2.113). Les méthodes de RK d'ordre s de cette équation sont généralisées par la formule ci-dessous [206–210] :

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_n^{k+1} &= \mathbf{X}_n^k + h \sum_{j=1}^s b_j \mathbf{k}_j, \\ \mathbf{k}_j &= \mathbf{F} \left(\tau^k + c_j h, \mathbf{X}_n^k + h \sum_{i=1}^s a_{ji} \mathbf{k}_i \right) \end{aligned} \quad (2.114)$$

avec les coefficients c_j , b_j et les éléments matriciels a_{ji} définis par le tableau de Butcher [voir Tableau 5(A)] [206–209] et h le pas d'intégration. Notons que lorsque les éléments de la diagonale principale

Tableau 5: (A) : Forme générale du tableau de Butcher pour les méthodes de RK ; (B) tableau de Butcher pour la méthode classique de RK4.

(A)	c ₁	a_{11}	a_{12}	\dots	a_{1s}	;	(B)	0	0	0	0	0
	c ₂	a_{21}	a_{22}	\dots	a_{2s}			1/2	1/2	0	0	0
	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots			1/2	0	1/2	0	0
	c _s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	a_{ss}			1	0	0	1	0
		b ₁	b ₂	\dots	b _s				1/6	1/3	1/3	1/6

a_{ii} et/ou ceux situés au dessus de la diagonale principale sont non nuls, les méthodes de RK sont dites implicites, et explicites dans le cas contraire. Le tableau 5(B) est celui correspondant à la

méthode classique de Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4), transformant l'équation Eq. (2.114) en :

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \mathbf{0}h, \mathbf{X}_n^k \right), \\
\mathbf{k}_2 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}h, \mathbf{X}_n^k + \frac{h}{\mathbf{2}}\mathbf{k}_1 \right), \\
\mathbf{k}_3 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}h, \mathbf{X}_n^k + \frac{h}{\mathbf{2}}\mathbf{k}_2 \right), \\
\mathbf{k}_4 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \mathbf{1}h, \mathbf{X}_n^k + h\mathbf{k}_3 \right), \\
\mathbf{X}_n^{k+1} &= \mathbf{X}_n^k + h \left(\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{6}}\mathbf{k}_1 + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{3}}\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{3}}\mathbf{k}_3 + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{6}}\mathbf{k}_4 \right).
\end{aligned}$$

Tandis que la méthode de Runge-Kutta-Fehlberg (RKF) [211] et celle de Runge-Kutta d'ordre 5 (RK5) [212] sont donnés par les tableaux 6 et 7 :

Tableau 6: Tableau de Butcher pour la méthode de *Runge-Kutta-Fehlberg*. L'estimation de l'erreur est faite au moyen de la formule : $e_{k+1} = \mathbf{X}_{k+1} - \mathbf{X}_{k+1}^* = h \sum_{j=1}^s (b_j - b_j^*) \mathbf{k}_j$ [211].

0	0	0	0	0	0	0
1/4	1/4	0	0	0	0	0
3/8	3/32	9/32	0	0	0	0
12/13	1932/2197	-7200/2197	7296/2197	0	0	0
1	439/216	-8	3680/513	-845/4104	0	0
1/2	-8/27	2	-3544/2565	1859/4104	-11/40	0
	16/135	0	6656/12825	28561/56430	-9/50	2/55
	25/216	0	1408/2565	2197/4104	-1/5	0

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \mathbf{0}h, \mathbf{X}_n^k \right), \\
\mathbf{k}_2 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{4}}h, \mathbf{X}_n^k + h \left(\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{4}}\mathbf{k}_1 \right) \right), \\
\mathbf{k}_3 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \frac{\mathbf{3}}{\mathbf{8}}h, \mathbf{X}_n^k + h \left(\frac{\mathbf{3}}{\mathbf{32}}\mathbf{k}_1 + \frac{\mathbf{9}}{\mathbf{32}}\mathbf{k}_2 \right) \right), \\
\mathbf{k}_4 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \frac{\mathbf{12}}{\mathbf{13}}h, \mathbf{X}_n^k + h \left(\frac{\mathbf{1932}}{\mathbf{2197}}\mathbf{k}_1 - \frac{\mathbf{7200}}{\mathbf{2197}}\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{7296}}{\mathbf{2197}}\mathbf{k}_3 \right) \right), \\
\mathbf{k}_5 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \mathbf{1}h, \mathbf{X}_n^k + h \left(\frac{\mathbf{439}}{\mathbf{216}}\mathbf{k}_1 - \mathbf{8}\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{3680}}{\mathbf{513}}\mathbf{k}_3 - \frac{\mathbf{845}}{\mathbf{4104}}\mathbf{k}_4 \right) \right), \\
\mathbf{k}_6 &= \mathbf{F} \left(\tau^k + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}h, \mathbf{X}_n^k + h \left(-\frac{\mathbf{8}}{\mathbf{27}}\mathbf{k}_1 + \mathbf{2}\mathbf{k}_2 - \frac{\mathbf{3544}}{\mathbf{2565}}\mathbf{k}_3 + \frac{\mathbf{1859}}{\mathbf{4104}}\mathbf{k}_4 - \frac{\mathbf{11}}{\mathbf{40}}\mathbf{k}_5 \right) \right), \\
\mathbf{X}_n^{k+1} &= \mathbf{X}_n^k + h \left(\frac{\mathbf{16}}{\mathbf{135}}\mathbf{k}_1 + \mathbf{0}\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{6656}}{\mathbf{12825}}\mathbf{k}_3 + \frac{\mathbf{28561}}{\mathbf{56430}}\mathbf{k}_4 - \frac{\mathbf{9}}{\mathbf{50}}\mathbf{k}_5 + \frac{\mathbf{2}}{\mathbf{55}}\mathbf{k}_6 \right), \\
\mathbf{X}_{n,*}^{k+1} &= \mathbf{X}_{n,*}^k + h \left(\frac{\mathbf{25}}{\mathbf{216}}\mathbf{k}_1 + \mathbf{0}\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{1408}}{\mathbf{2565}}\mathbf{k}_3 + \frac{\mathbf{2197}}{\mathbf{4104}}\mathbf{k}_4 - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{5}}\mathbf{k}_5 + \mathbf{0}\mathbf{k}_6 \right), \\
e_n^{k+1} &= \mathbf{X}_n^{k+1} - \mathbf{X}_{n,*}^{k+1}, \\
\mathbf{X}_n^{k+1} &= \mathbf{X}_n^{k+1} + e_n^{k+1}.
\end{aligned}$$

Tableau 7: Tableau de Butcher pour la méthode de *Runge-Kutta-5* [212].

0	0	0	0	0	0	0	0
1/5	1/5	0	0	0	0	0	0
3/10	3/40	9/40	0	0	0	0	0
4/5	44/45	-56/15	32/9	0	0	0	0
8/9	19372/6561	-25360/2187	64448/6561	-212/729	0	0	0
1	9017/3168	-355/33	46732/5247	49/176	-5103/18656	0	0
1	35/384	0	500/1113	125/192	-2187/6784	11/84	0
	5179/57600	0	7571/16695	393/640	-92097/339200	187/2100	1/40

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_1 &= \mathbf{F}(\tau^k + \mathbf{0}h, \mathbf{X}_n^k), \\
 \mathbf{k}_2 &= \mathbf{F}\left(\tau^k + \frac{1}{5}h, \mathbf{X}_n^k + h\left(\frac{1}{5}\mathbf{k}_1\right)\right), \\
 \mathbf{k}_3 &= \mathbf{F}\left(\tau^k + \frac{3}{10}h, \mathbf{X}_n^k + h\left(\frac{3}{40}\mathbf{k}_1 + \frac{9}{40}\mathbf{k}_2\right)\right), \\
 \mathbf{k}_4 &= \mathbf{F}\left(\tau^k + \frac{4}{5}h, \mathbf{X}_n^k + h\left(\frac{44}{45}\mathbf{k}_1 - \frac{56}{15}\mathbf{k}_2 + \frac{32}{9}\mathbf{k}_3\right)\right), \\
 \mathbf{k}_5 &= \mathbf{F}\left(\tau^k + \frac{8}{9}h, \mathbf{X}_n^k + h\left(\frac{19372}{6561}\mathbf{k}_1 - \frac{25360}{2187}\mathbf{k}_2 + \frac{64448}{6561}\mathbf{k}_3 - \frac{212}{729}\mathbf{k}_4\right)\right), \\
 \mathbf{k}_6 &= \mathbf{F}\left(\tau^k + \mathbf{1}h, \mathbf{X}_n^k + h\left(\frac{9017}{3168}\mathbf{k}_1 - \frac{355}{33}\mathbf{k}_2 + \frac{46732}{5247}\mathbf{k}_3 + \frac{49}{173}\mathbf{k}_4 - \frac{5103}{18656}\mathbf{k}_5\right)\right), \\
 \mathbf{k}_7 &= \mathbf{F}\left(\tau^k + \mathbf{1}h, \mathbf{X}_n^k + h\left(\frac{35}{384}\mathbf{k}_1 + \mathbf{0}\mathbf{k}_2 + \frac{500}{1113}\mathbf{k}_3 + \frac{125}{192}\mathbf{k}_4 - \frac{2187}{6784}\mathbf{k}_5 + \frac{11}{84}\mathbf{k}_6\right)\right), \\
 \mathbf{X}_n^{k+1} &= \mathbf{X}_n^k + h\left(\frac{5179}{57600}\mathbf{k}_1 + \mathbf{0}\mathbf{k}_2 + \frac{7571}{16695}\mathbf{k}_3 + \frac{393}{640}\mathbf{k}_4 - \frac{92097}{339200}\mathbf{k}_5 + \frac{187}{2100}\mathbf{k}_6 + \frac{1}{40}\mathbf{k}_7\right).
 \end{aligned}$$

2.5.5 La méthode de Tir

La méthode de tir est une méthode destinée aux problèmes aux valeurs aux limites (PVL). En effet, on est souvent confronté en physique à des systèmes dont le comportement à l'une des extrémités du domaine est connu, et dont demeure inconnue une condition essentielle à sa résolution. On y rencontre également des problèmes avec intrication entre l'état initial (inconnu, dépendant de l'état final) et l'état final (inconnu dépendant de l'état initial), admettant des solutions particulières. Le but de la méthode de tir est de déterminer les bonnes conditions manquantes nécessaires à la résolution du problème posé. La détermination par exemple de la solution périodique de l'équation Eq. (2.113) requiert la résolution par la méthode de tir du PVL suivant :

$$\mathbf{R}[\mathbf{X}_n^0] = \mathbf{X}_n(\mathbf{T}_b) - \mathbf{X}_n^0 = \mathbf{0}, \quad (2.115)$$

avec $\mathbf{X}_n(\mathbf{T}_b)$ l'état du système au temps final obtenu après intégration du problème sur une période $\mathbf{T}_b = 2\pi/\omega_b$, \mathbf{X}_n^0 les conditions initiales inconnues à déterminer et $\mathbf{R}[\mathbf{X}_n^0]$ la fonction objective à minimiser. Le mot « tir » vient du fait que partant d'un profil initial \mathbf{X}_n^0 arbitraire, on teste plusieurs trajectoires [dont le point de chute est $\mathbf{X}_n(\mathbf{T}_b)$] jusqu'à l'obtention de la trajectoire recherchée. La méthode de NR qui est une bonne candidate à la résolution de l'équation Eq. (2.115) requiert par

ailleurs la différenciation matricielle suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{R}[\mathbf{X}_n^0]}{\partial \mathbf{X}_n^0} = \frac{\partial \mathbf{X}_n(\mathbf{T}_b)}{\partial \mathbf{X}_n^0} - \mathbf{I}_{2N}. \quad (2.116)$$

Notons qu'à chaque itération de la méthode de NR le profil initial de départ est modifié en conséquence. En pratique, la solution périodique est obtenue lorsque la norme Euclidienne de la fonction objective est inférieure ou égale à une précision *Tol* désirée.

2.5.6 Techniques numériques permettant de caractériser un système dynamique

Dans cette étude, nous avons mené des investigations sur des systèmes dont la dynamique pouvait exhiber un comportement régulier ou chaotique. Ces différents états peuvent certes être caractérisés par l'évolution temporelle/spatio-temporelle de la réponse du système, mais aussi par des méthodes telles que le diagramme de bifurcation, l'exposant de Lyapunov, la section de Poincaré, la réponse fréquentielle (au moyen de la transformée de Fourier et la puissance spectrale).

La séquence temporelle/spatio-temporelle

Encore appelée série chronologique, elle est l'un des outils essentiels pour identifier la dynamique temporelle ou spatiotemporelle d'un système dynamique. Cet outil trivial offre la possibilité de visualiser les différents comportements d'une cellule dynamique dans le temps.

L'espace des phases

L'espace des phases est un espace de représentation abstrait dans lequel chaque état possible d'un système dynamique peut être représenté avec un point unique. Pour un système possédant n degrés de liberté par exemple, l'espace des phases Γ du système possède n dimensions, de telle sorte que l'état complet $\mathbf{Y}(\tau) \in \Gamma$ du système à l'instant τ est généralement un vecteur à n composantes. Cette représentation à n dimensions de tous les états possibles du système dans l'espace des phases permet également de renseigner sur sa régularité ou non.

Le diagramme de bifurcation

C'est une technique utilisée dans l'étude des systèmes dynamiques non linéaires. Le diagramme de bifurcation permet de mettre en exergue le comportement asymptotique des points fixes, des orbites périodiques ou encore des attracteurs étranges en variant un (ou plusieurs) paramètre(s) du système. Le mot bifurcation signifie un changement qualitatif soudain dans la nature d'une solution lorsque le paramètre de bifurcation atteint une valeur critique. Le diagramme de bifurcation d'un système est obtenu en résolvant l'EDO par une méthode itérative d'intégration (par la méthode de RK4 ou de RKF par exemple) et en collectant les maximums et/ou les minimums de la position (ou de la vitesse) du système après que le régime transitoire soit passé.

Les exposants de Lyapunov

L'exposant de Lyapunov (EL) mesure la sensibilité dynamique d'un système suite à une petite variation de ses conditions initiales. C'est l'un des indicateurs par excellence de la présence du chaos dans un système. En effet, si d_i représente la distance entre le i^{eme} point de la trajectoire

perturbée au temps τ_i par rapport à la trajectoire de référence, et d_{0i} cette distance au temps τ_{0i} , alors l'exposant maximum de Lyapunov sera défini par [213, 214] :

$$\lambda_{max} = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{(\tau_i - \tau_{0i})} \ln \left| \frac{d_i}{d_{0i}} \right|. \quad (2.117)$$

Ainsi, un système dynamique sera qualifié de quasi-périodique, de périodique ou de chaotique lorsque λ_{max} sera nul, négatif ou positif. Notons qu'il est également possible de déterminer non pas seulement l'exposant de lyapunov maximum, mais tous les exposants de lyapunov présents dans un système dynamique. Ces ELs sont calculés au moyen de la méthode d'ortho-normalisation de Gram-Schmidt (MOGS) [215, 216]. Pour utiliser la MOGS, il faudrait compléter le problème donné par l'équation Eq. (2.113) en ajoutant la dynamique de son équation variationnelle tel que suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\mathbf{X}}_n(\tau) \\ \delta \dot{\mathbf{X}}_n(\tau) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}[\tau, \mathbf{X}_n(\tau)] \\ \mathbf{D}_{\mathbf{X}_j} \mathbf{F}[\tau, \mathbf{X}_n(\tau)] \cdot \delta \mathbf{X}_n(\tau) \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{X}_n(0) \\ \delta \mathbf{X}_n(0) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{X}_n^0 \\ \mathbf{I}_{2N} \end{array} \right\}, \quad (2.118)$$

où $\delta \mathbf{X}_n(\tau)$ représente l'évolution spatio-temporelle de la perturbation de la trajectoire $\mathbf{X}_n(\tau)$, $\mathbf{D}_{\mathbf{X}_j} \mathbf{F}[\tau, \mathbf{X}_n(\tau)]$ est la matrice jacobienne du système variationnel et \mathbf{I}_{2N} est la matrice identité. Partant des vecteurs (v_1, v_2, \dots, v_N) de l'équation variationnelle, les p exposants de lyapunov sont calculés par la formule [215, 216] :

$$\lambda_p = \lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{1}{k \delta \tau} \sum_{j=1}^k \ln (\|\omega_p^j\|) \quad , \quad 1 \leq p \leq N, \quad (2.119)$$

dont l'ensemble orthonormé $(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N)$ est obtenu par la procédure suivante :

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{v_1}{\|v_1\|}, \\ \omega_2 &= \frac{v_2 - \langle v_2, \omega_1 \rangle \omega_1}{\|v_2 - \langle v_2, \omega_1 \rangle \omega_1\|}, \\ &\vdots \\ \omega_n &= \frac{v_n - \sum_{k=1}^{n-1} \langle v_n, \omega_{n-k} \rangle \omega_{n-k}}{\|v_n - \sum_{k=1}^{n-1} \langle v_n, \omega_{n-k} \rangle \omega_{n-k}\|}, \end{aligned} \quad (2.120)$$

avec $\langle \cdot, \cdot \rangle$ signifiant le produit scalaire et $\|\cdot\|$ la norme euclidienne.

La section de Poincaré

C'est une technique utilisée pour caractériser un système dynamique quant à sa régularité ou non. Elle a été développée à la fin du XIX^e siècle par Henri Poincaré dans son étude sur le problème des trois corps ou planètes. La technique des sections de Poincaré permet entre autres de comprendre comment un système chaotique peut, tout en restant confiné dans une région bornée de l'espace des phases, être imprévisible. Elle consiste à simplifier la dynamique complexe du problème en ne s'intéressant qu'à l'intersection des trajectoires avec un plan (si l'on est dans un espace à 3 dimensions), ou une droite (si l'on est en 2 dimensions). Ainsi, le mouvement continu d'un point qui décrit la trajectoire est remplacé par une succession de points, obtenus à chaque fois que la trajectoire de la particule rencontre le plan. Le nombre de points distincts de la trajectoire de la

particule sur le plan caractérise de ce fait la dynamique (chaotique, quasi-périodique ou périodique) du système.

Numériquement, la section de Poincaré s’obtient en choisissant convenablement la localisation du plan d’une part, et en couplant la méthode d’intégration numérique (exemple de la méthode de RK4 pour résoudre l’équation différentielle) à la méthode de la recherche du point fixe d’autre part, que le système soit autonome ou pas. Une autre façon d’obtenir la section de Poincaré (uniquement valable pour les systèmes non autonomes) consiste à faire un enregistrement stroboscopique de la position et de la vitesse par période de la force excitatrice.

Réponse fréquentielle d’un signal

Pour faire ressortir des informations cachées de la réponse d’une EDO, on effectue communément une représentation dans le domaine des fréquences au moyen de la transformation de Fourier (TF). La TF est un outil mathématique qui permet d’explorer le comportement d’un système dynamique dans l’espace fréquentiel (et inversement). Elle trouve son application aussi bien en science informatique (à travers les algorithmes de traitement d’image et de fichiers audio), en ingénierie électronique qu’en physique. Les différentes formules mathématiques des transformations de Fourier discrètes aussi bien en dimension 1 [103, 145, 217] (TFD 1) qu’en dimension 2 (TFD 2) [174, 201] utilisées dans cette thèse sont respectivement :

$$S_p(t) = \sum_{n=0}^{N-1} y_n(t) e^{\frac{2i\pi pn}{N}}, \quad \text{avec } 0 \leq p \leq N/2, \quad (2.121a)$$

$$\tilde{Y}_q(\omega) = \sum_{p=0}^{\tau_p=\tau} Y_q(\tau_p) e^{-i\omega\tau_p}, \quad (2.121b)$$

$$\tilde{Y}(k_0, \omega) = \sum_{p=0}^{\tau_p=\tau} \sum_{q=0}^{N-1} Y_q(\tau_p) e^{-i(k_0 \ell x_q - \omega\tau_p)}, \quad (2.121c)$$

où ω , k_0 sont respectivement la fréquence et le vecteur d’onde, avec $Y_q(\tau_p)$ la variable caractérisant l’évolution temporelle (spatio-temporelle). Le résultat donné par la TF étant complexe, son module $S_q(\omega) = \left| \tilde{Y}_q(\omega) \right|$ ou encore sa densité de la puissance spectrale (DPS) est communément utilisée. En effet, la DPS met en exergue les différentes fréquences présentes dans le système différentiel, permettant de ce fait de renseigner sur la (non)régularité du système.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons donné la description mathématique de trois différents modèles d’ADN utilisés dans cette thèse. Nous y avons présenté les méthodes analytiques et numériques utilisées. Comme méthode analytique développée, nous avons l’approximation onde rotative (AOR), la limite anti-continue (LAC) couplée à la méthode de tir, l’analyse de la stabilité linéaire des solutions obtenues et l’approximation semi-discrète (ASD). Nous avons montré que l’utilisation de l’AOR conduisait à l’obtention d’une équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue (ESNLDE) tandis que l’utilisation de l’ASD donnait une équation de Schrödinger non linéaire (SNL) cubique continue. Ces méthodes analytiques nous ont permis d’approcher les solutions du système

non linéaire et d'étudier leurs stabilités. Dans le chapitre suivant, nous présenterons les différents résultats obtenus et ferons une discussion de ces résultats.

Chapitre 3

Résultats et discussions

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous appliquons les différentes méthodes analytiques et numériques développées au chapitre §2 dans l’optique de répondre aux différentes questions de notre thèse. Pour mener à bien cet objectif, nous organisons ce chapitre comme suit : Dans la première section, nous investiguons non seulement les conditions d’apparition des modes localisés (MLs) dans le réseau, mais également faisons une étude de leur stabilité aussi bien dynamique qu’orbitale. Cette première section s’achèvera par la réalisation de la mobilité de ces MLs. La deuxième section est consacrée principalement aux influences des effets combinés de la dissipation et de l’excitation externe sur la dynamique des breathers discrets (BDs). Une étude de l’influence d’un mode localisé suite à une impureté localisée ainsi que les effets de cette impureté sur la dynamique d’ensemble des paires de bases sera également faite dans cette deuxième section. Dans la troisième section, nous montrerons l’influence de l’interaction longue portée (ILP) sur l’existence des BDs issue de l’approximation semie-discrète (ASD), mais également sur le BD obtenu par la méthode de tir. La stabilité orbitale, la mobilité ainsi que la résonance de ces BDs avec les modes phonons seront également étudiés. Nous terminerons cette étude par une conclusion du chapitre.

3.2 Effets de la fréquence des phonons sur les coefficients de l’ESNLDE

Au regard de l’analyse faite à la section §2.2.1, il est essentiel de voir l’influence de la fréquence des phonons ω_b sur les coefficients η , P_1 , Q_2 , $P_1 \times Q_2$ de l’équation Eq. (2.9) dont les expressions sont données à l’équation Eq. (2.10). Ainsi, faisant usage des valeurs numériques des paramètres donnés au tableau 8, nous obtenons à la figure 24 les variations de ces coefficients en fonction de ω_b . Il est

Tableau 8: Valeurs numériques des paramètres de la molécule d’ADN [77, 78].

Paramètre	m	D	a	b	ΔH	K_b	C	d	ε_0
Valeur	300	0.04	4.45	0.10	0.44	10^{-5}	2	3.4	8.85
Unité	<i>uma</i>	<i>eV</i>	Å^{-1}	Å^{-2}	<i>eV</i>	<i>eV</i>	pas d’unité	Å	$pF.m^{-1}$

observé sur cette figure 24 [voir figure 24(b)] que le coefficient de dispersion P_1 est toujours négatif quelque soit la valeur de ω_b . Par contre, le comportement de Q_2 et du produit $P_1 \times Q_2$ en sont tout autre. En effet, les expressions de R_1 et de η révèlent l'existence de deux fréquences singulières $\omega_{b,1}$ et $\omega_{b,2}$ d'expression :

$$\begin{cases} \omega_{b,1} = \frac{\omega_g}{2}, \\ \omega_{b,2} = \omega_{b,1} \sqrt{1 - \frac{2\alpha^2\omega_g^2}{(3\beta-4\alpha^2)\omega_g^2-6k_4}}. \end{cases} \quad (3.1)$$

Lorsque $\omega_b \in]0, \omega_{b,1}[\cup]\omega_{b,2}, 1.6[$, $Q_2 < 0$, $P_1 \times Q_2 > 0$ [voir figures 24(c)-(d)] et lorsque $\omega_b \in]\omega_{b,1}, \omega_{b,2}[$ le phénomène inverse est observé, c'est-à-dire $Q_2 > 0$ et $P_1 \times Q_2 < 0$. La ligne en interrompus de couleur rouge [Figure 24(a)] et celle de couleur verte [Figure 24(c) et Figure 24(d)] délimitant la zone hachurée en gris sur les figures 24(c) et 24(d) indiquent les valeurs des fréquences de résonance $\omega_{b,1}$ et $\omega_{b,2}$ à éviter. Cette figure montre l'influence non négligeable de ω_b sur les types de solutions du système.

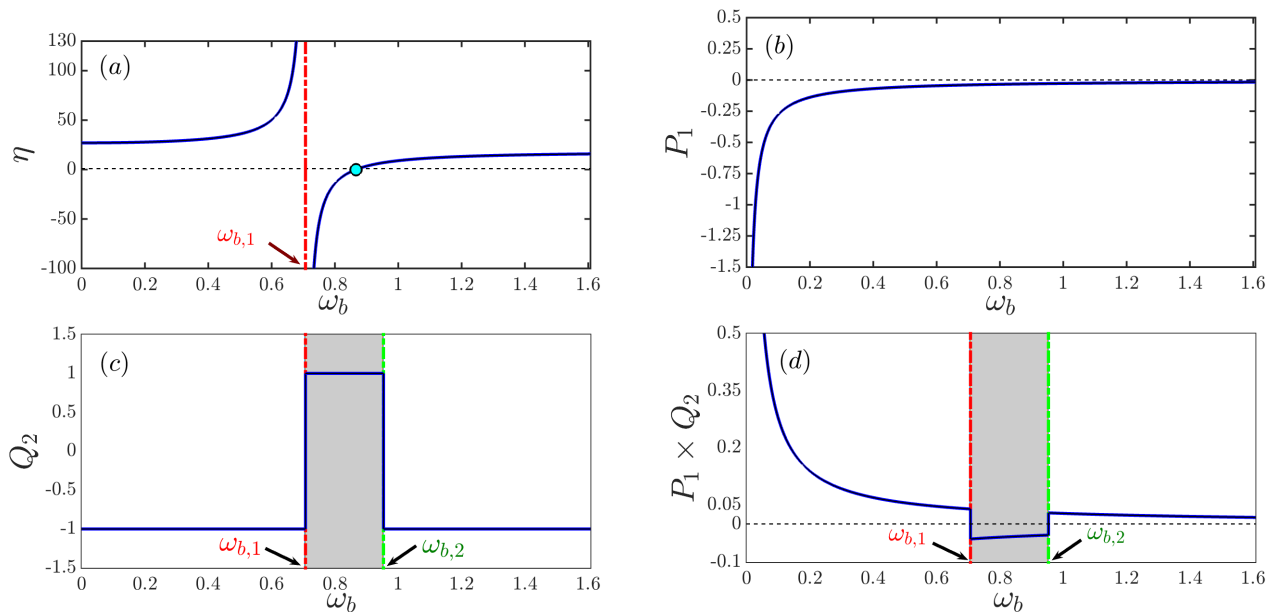


Figure 24: Variation des coefficients η , P_1 , Q_2 et du produit $P_1 \times Q_2$ de l'équation Eq. (2.10) en fonction de ω_b . Le cercle de couleur cyan du panel (a) indexe la valeur $\omega_{b,0} = \omega_{b,1} \sqrt{1 + \frac{\alpha^2\omega_g^2}{2\alpha^2\omega_g^2+3k_4}}$ pour laquelle $\eta \approx 0$. Les lignes en interrompus de couleur rouge et verte correspondent aux fréquences singulières $\omega_{b,1}$ et $\omega_{b,2}$, dont les expressions sont données à l'équation Eq. (3.1).

3.2.1 Analyse de l'instabilité modulationnelle

Tel que nous l'avons vu à la section §2.2.2 du chapitre §2, l'instabilité modulationnelle (IM) désigne qualitativement la capacité pour une excitation qui se propage à pouvoir se scinder en paquets d'énergie (pulses isolés) [145] et est d'un grand intérêt dans plusieurs domaines de la physique. Dans cette section, nous vérifions au moyen des méthodes numériques l'analyse théorique faite à la section §2.2.2 concernant l'IM discrète. Cependant, l'apparition de ce phénomène d'IM apparaît seulement lorsque certaines conditions (liant les vecteurs d'ondes de l'onde plane initiale q , de la perturbation Q et de l'amplitude critique $\psi_{0,cr}$) sont respectées. La figure 25 donne la représentation des variables donnant lieu à l'émergence du phénomène d'IM. Ces variables ont été étudiées à la section §2.2.2

et sont données par les équations Eq. (2.18), Eq. (2.19) et Eq. (2.20). La figure 25 montre les zones

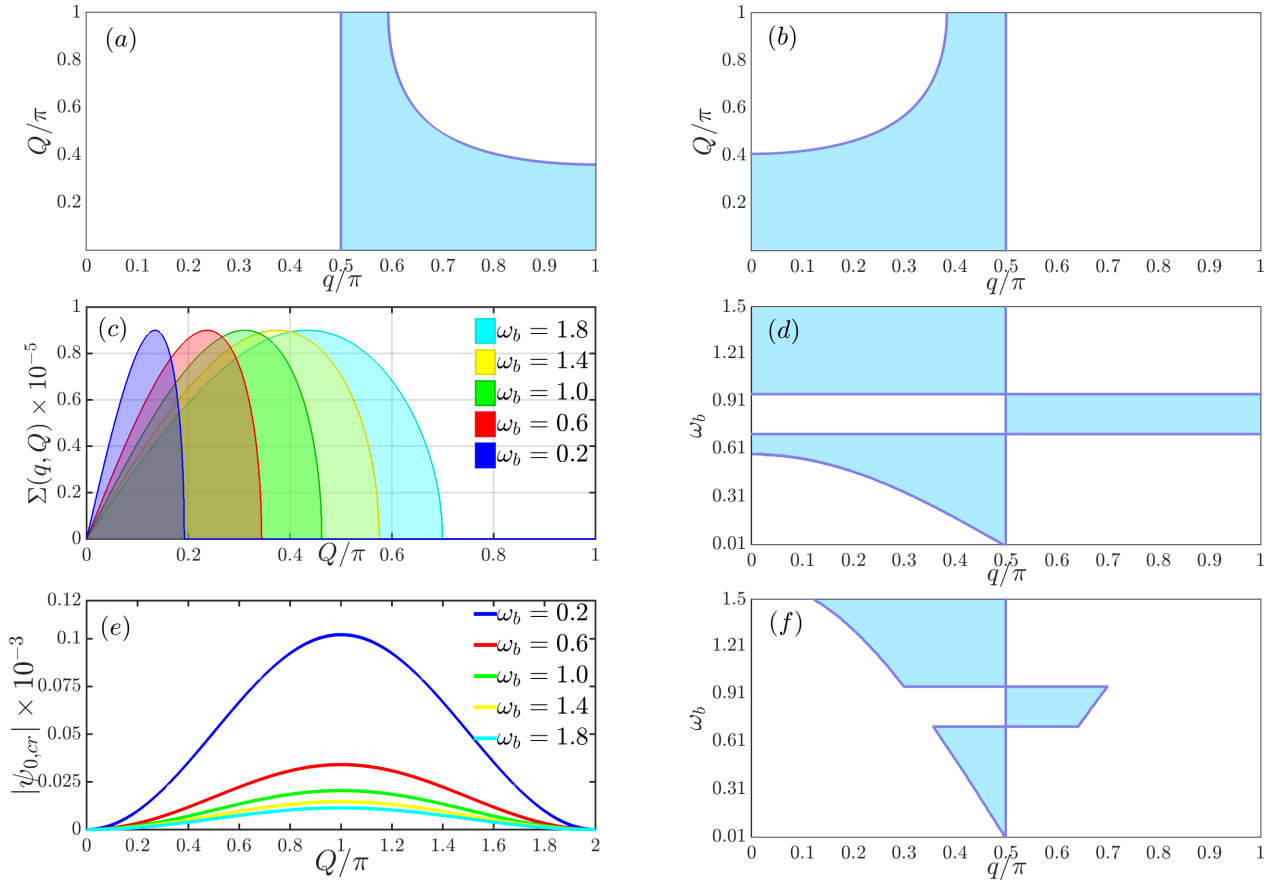


Figure 25: Diagramme de stabilité/instabilité (zone de couleur blanche/bleue) dans le plan (q, Q) pour $\omega_b = 0.8071$ [panel (a)], $\omega_b = 1$ [panel (b)]. Panel (c) : effet de Q sur $\Sigma(q, Q)$ pour différentes valeurs de ω_b et pour $q = 0.2\pi$. Panels (d) [$Q = 0.3\pi$] et (f) [$Q = 0.55\pi$] : zones de stabilité (hachurées en blanc) et d'instabilité (hachurées en bleue) dans le plan (q, ω_b) . Panel (e) : influence de ω_b sur $\psi_{0,cr}$ en fonction de Q , pour $q = 0.2\pi$. Lorsque cela était nécessaire, la valeur de $|\psi_0|$ a été fixée à $\psi_0 = 0.003 > \psi_{0,cr}$.

d'instabilité (zone colorée en cyan)/de stabilité (zone sans couleur) [panels (a) et (b)]. Ces deux panels confirment la forte influence de la fréquence des phonons ω_b du mode fondamental. Il est également observé sur le panel (c) de cette figure que le taux de divergence de l'onde plane $\Sigma(q, Q)$ dépend fortement de cette fréquence. En effet, l'augmentation de ω_b entraîne une augmentation de la zone d'instabilité, moyennant certaines valeurs de Q . Les panels (d) [avec $Q = 0.3\pi$] et (f) [avec $Q = 0.55\pi$] montrent également les zones d'instabilité/stabilité dans le plan (q, ω_b) tandis que le panel (e) exhibe la dépendance de l'amplitude critique $\psi_{0,cr}$ en fonction du vecteur d'onde de la perturbation pour ω_b variant, avec q fixé à 0.2π . Cette étude de l'IM prouve que la localisation de l'énergie est également possible dans l'ESNLDE du modèle d'ADN de JB.

Afin de vérifier cette possible localisation de l'énergie, nous résolvons numériquement l'équation Eq. (2.1) en lui assignant les conditions initiales suivantes :

$$\begin{cases} y_n(t=0) = \psi_0 [1 + \chi_0 \cos(Qn)] \cos(qn), \\ \dot{y}_n(t=0) = \omega(q)\psi_0 [1 + \chi_0 \cos(Qn)] \sin(qn). \end{cases} \quad (3.2)$$

Dans l'équation Eq. (3.2), $\omega(q)$ est la relation de dispersion obtenue à l'équation Eq. (2.61), χ_0 est

l'amplitude de la perturbation, ψ_0 est celle de l'onde plane, q et Q les vecteurs d'onde respectifs de l'onde plane et de la perturbation. L'intégration numérique est faite au moyen de la méthode de Runge-Kutta-Fehlberg (RKF) évoquée à la section §2.5.4, avec un pas d'intégration assez petit pour permettre la conservation de l'énergie du système. Au cours de cette intégration, le nombre de paires de bases azotées est fixé à $N = 200$ et les conditions aux limites périodiques sont utilisées ($y_0 = y_N, y_{N+1} = y_1$).

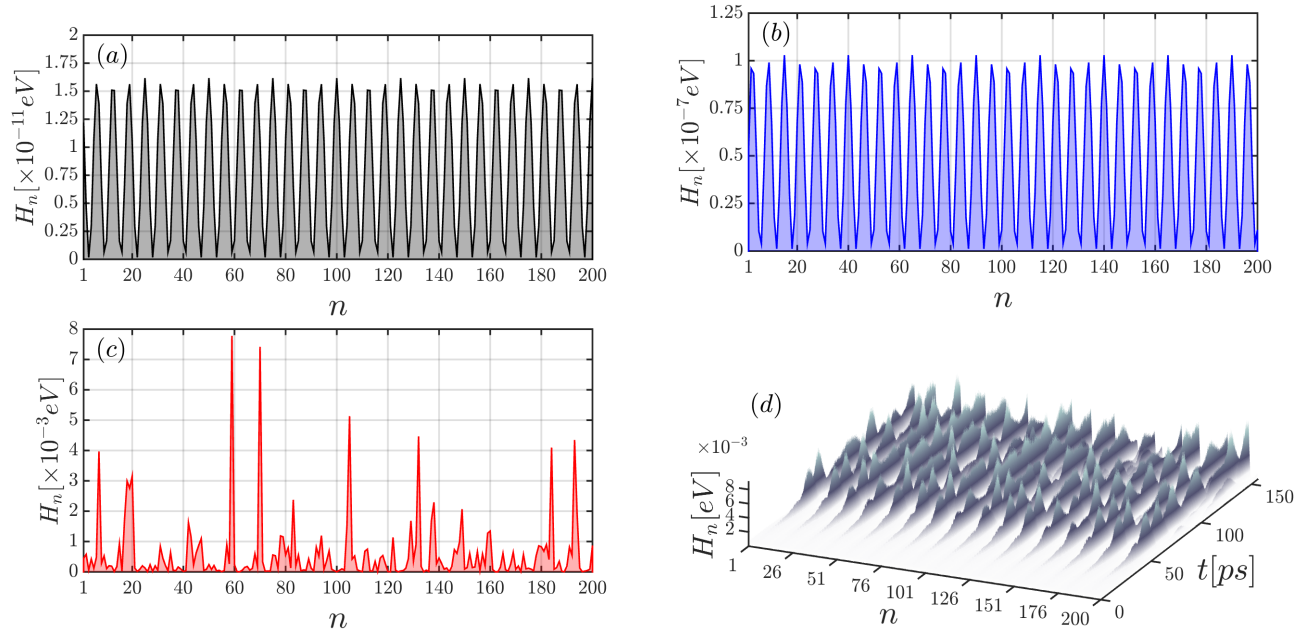


Figure 26: Évolution temporelle de la distribution de l'énergie $H_n(t)$ d'une onde plane perturbée avec un choix des paramètres n'induisant pas l'IM ($Q = 0.8\pi, q = 0.16\pi, \chi_0 = 0.005$ et $|\psi_0| = 2 \times 10^{-5}$) aux panels (a) et (b) obtenu pour $t = 0s$ et $t = 390,4ps$ respectivement. (c) : phénomène d'IM visualisé à l'instant $t = 390,4ps$ pour $Q = 0.205\pi, q = 0.16\pi, \chi_0 = 0.005$ et $|\psi_0| = 0.14$. Le panel (d) montre l'évolution spatio-temporelle de l'IM de l'énergie du système donnée par l'équation Eq. (1.37) pour des paramètres suivants : $\psi_0 = 0.135, q = 0.16\pi, Q = 0.205\pi, \chi_0 = 0.005$ ($\chi_0 \ll 1$).

La figure 26 montre le développement de l'IM avec le temps. Afin de vérifier la validité du critère d'IM établi à la section §2.2.2, nous représentons non seulement le profil initial de l'énergie issue de perturbation d'une onde plane [voir figure 26(a) pour $t = 0s$], mais aussi son évolution au cours du temps [voir figure 26(b) pour $t = 390.4ps$] pour des paramètres n'induisant pas l'instabilité modulationnelle du système : $Q = 0.8\pi, q = 0.16\pi, \chi_0 = 0.005$ et $|\psi_0| = 2 \times 10^{-5} < \psi_{0,cr}$. Lorsque $|\psi_0| = 0.14 > \psi_{0,cr}$ et $Q = 0.8\pi$ le phénomène d'instabilité modulationnelle devient de plus en plus important tel qu'observé à la figure 26(c) où on voit une fragmentation de l'onde plane initiale en des paquets d'ondes de grandes énergies fortement localisées en certains sites de la molécule. La figure 26(d) montre l'évolution spatio-temporelle de l'énergie $H_n(t)$ du système donnée par l'équation Eq. (1.37) pour des paramètres induisant l'IM ($\psi_0 = 0.135 > \psi_{0,cr}, q = 0.16\pi, Q = 0.205\pi, \psi_0 = 0.135$ et $\chi_0 = 0.005$). On y observe une augmentation substantielle de l'énergie due au phénomène d'IM à partir de $t > 50ps$. Ainsi, l'analyse numérique est en accord avec l'étude analytique menée à la section §2.2.2.

À cause des fortes non linéarités du système, l'onde initiale obtenue pour des vecteurs d'ondes q et

Q pourrait générer des modulations supplémentaires (notamment des vecteurs d'onde $2q, 3q, \dots, 2Q, 3Q, \dots$) ainsi que des modulations combinant ces vecteurs d'ondes ($q \pm Q, q \pm 2Q, \dots$). Pour mieux observer et scruter en profondeur le phénomène d'IM, on utilise communément la représentation du signal dans l'espace de Fourier [103, 145, 217]. Faisant usage de la formule donnée à l'équation Eq. (2.121a), nous avons représenté à la figure 27 l'évolution temporelle de toutes les composantes spatiales du spectre de Fourier $S_p(t)$ de l'onde résultante. Tel que nous pouvons observer à la figure 27, avant le phénomène d'IM, nous énumérons des vecteurs d'onde d'ordre supérieur issu des non linéarités du système. Il est également observé qu'une fois que l'IM a été substantiellement atteinte, le réseau regorge de plus en plus de vecteurs d'ondes différents les uns des autres, expliquant de ce fait la fragmentation de l'onde initiale en de multiples paquets d'ondes.

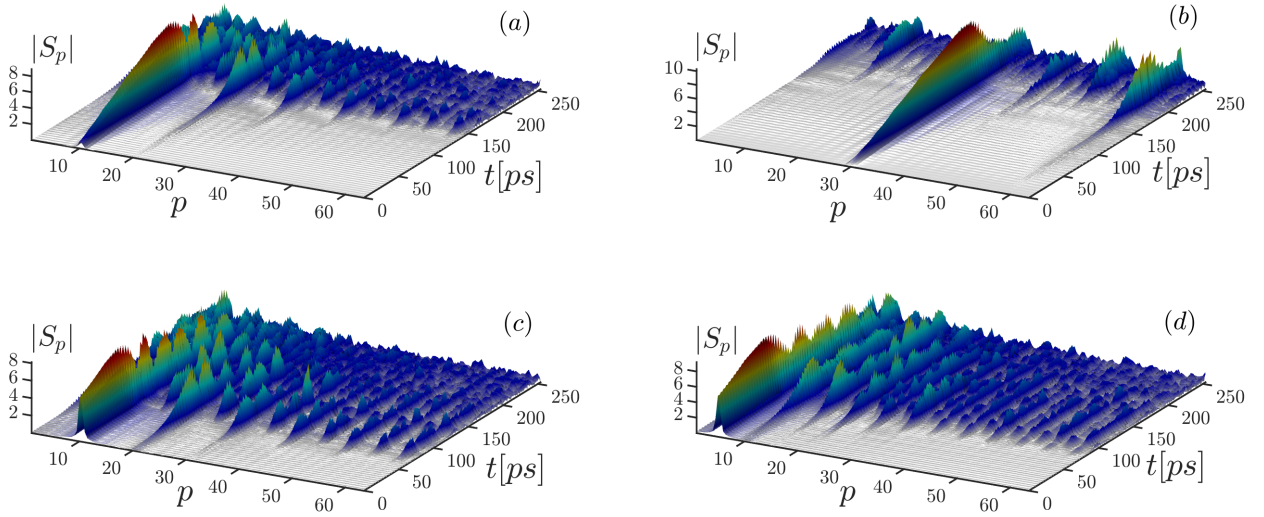


Figure 27: Évolution temporelle de toutes les composantes spatiales du spectre de Fourier, obtenu pour les paramètres suivants : (a) : $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.014$; (b) : $q = 0.46\pi$, $\psi_0 = 7 \times 10^{-5}$; (c) : $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.08$; (d) : $q = 0.08\pi$, $\psi_0 = 0.08$. Pour tous ces panels, $\chi_0 = 0.001$ et $Q = 0.205\pi$.

Une autre représentation permettant de mettre en exergue l'impact des vecteurs d'ondes d'ordre supérieurs, ainsi que les combinaisons d'entre-deux sur l'émergence plus ou moins rapide de l'instabilité modulationnelle dans le réseau discret consiste à faire une représentation temporelle de la grandeur $\ln(\max(|\mathbf{S}_p(\mathbf{t})|))$. Cette représentation est faite à la figure 28 où nous avons fixé $Q = 0.205\pi$ et $\chi_0 = 0.001$. Tel qu'il est observé à la figure 28(a) obtenue pour $q = 0.46\pi$, l'IM apparait de plus en plus rapidement dans le système lorsque ψ_0 prend des valeurs de plus en plus grandes. En ce qui concerne la figure 28(b) obtenue pour $q = 0.16\pi$ et $\psi_0 = 0.014$, nous observons que lorsque l'onde plane a un vecteur d'onde $q' = Q \pm 3q$, sa dynamique est relativement stable et constante tandis que lorsque $q' = 2q$ ou $q' = 3q$ l'IM est observé. Un constat similaire est observé à la figure 28(c) pour les cas $q' = q \pm Q; q \pm 2Q$ où seul le cas $q' = q + 2Q$ est relativement stable pour l'intervalle temporel considéré, avec $q = 0.16\pi$ et $\psi_0 = 0.08$. La figure 28(d) révèle quant à elle que les ondes planes ayant des vecteurs d'ondes $q' \geq 5q$ sont relativement plus stables que celles ayant des vecteurs d'ondes $q' < 5q$, avec $q = 0.08\pi$, $\psi_0 = 0.08$.

La représentation de Fourier vient ainsi apporter plus de clarté sur le phénomène d'IM étudié

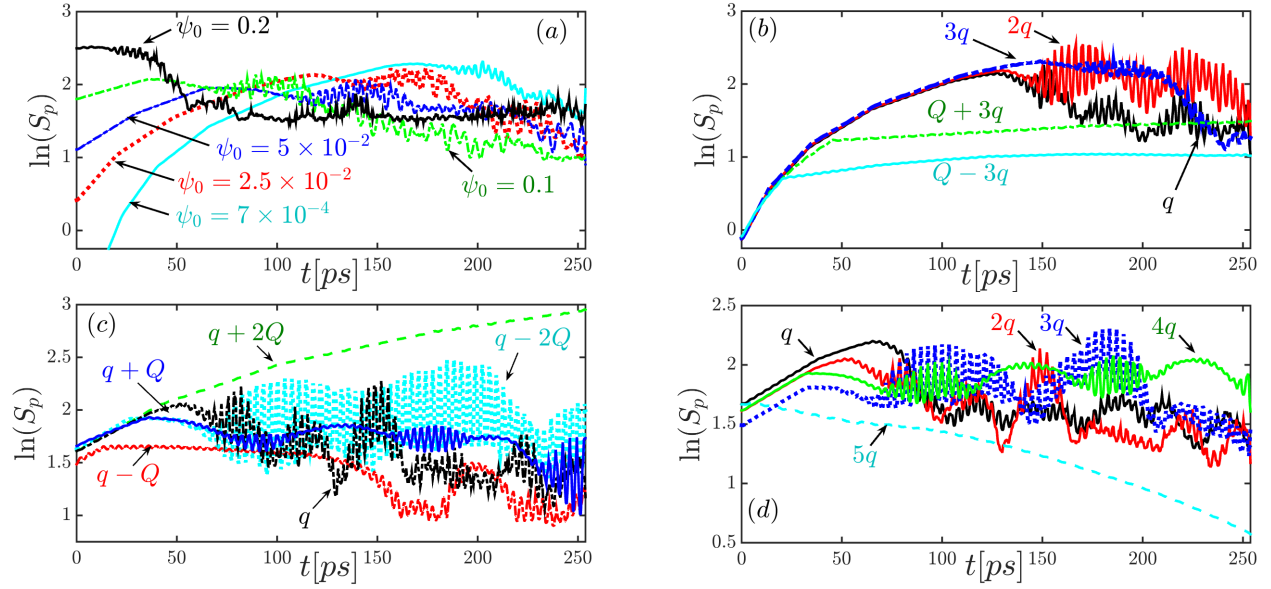


Figure 28: (a) : Évolution temporelle de la valeur maximale de l'amplitude du spectre de Fourier pour différentes valeurs de ψ_0 avec $q = 0.46\pi$. Les panels (b) et (c) obtenus respectivement pour $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.014$ et pour $q = 0.16\pi$, $\psi_0 = 0.08$ montrent l'influence des différents vecteurs d'ondes sur les amplitudes d'ondes modulées. Il en est du même du panel (d) obtenu pour $q = 0.08\pi$, $\psi_0 = 0.08$. Pour tous ces panels $\chi_0 = 0.001$ et $Q = 0.205\pi$.

analytiquement à la section §2.2.2 du chapitre 2.

3.2.2 Génération des breathers et multibreathers discrets et analyse de leurs stabilités

L'une des méthode permettant de générer directement les modes localisés (MLs) est la limite anti-continue dont le principe a été donné à la section §2.2.3. Dans cette section, nous étudions (comme cela fut le cas lors de l'étude du phénomène d'IM) l'effet de la fréquence ω_b sur le type de ML du système. Ainsi, partant de l'équation algébrique Eq. (2.22), nous obtenons la solution triviale $u_n^0 = \sqrt{-\mu/Q_2}$. Cette solution étant réelle, il devient dès lors primordial de déterminer le couple (μ, ω_b) qui rendra cela possible d'une part, et le type de solution obtenu par l'algorithme de Newton-Raphson d'autre part.

La figure 29 montre la carte d'existence de la solution triviale u_n^0 en fonction des paramètres μ et ω_b , ainsi que les différentes solutions obtenues en corrigeant u_n^0 par l'algorithme de NR. Au panel (a) de cette figure, les zones colorées en gris sont celles qui permettent l'existence de u_n tandis que celles colorées en blanc ne le permettent pas. Il est également observé sur cette figure qu'il existe deux types de profils, solution de l'équation Eq. (2.22) : le profil correspondant aux paires de bases voisines oscillant en phase [cas des panels (b) et (d) obtenus respectivement pour $(\mu, \omega_b) = (0.05996, 1)$ et $(\mu, \omega_b) = (0.0995, 0.631)$ issus des zones **B** et **C** du panel (a)], et le profil correspondant aux paires de bases voisines oscillant en opposition de phase [cas du panel (c) issu de la zone **A** du panel (a) et obtenu pour $(\mu, \omega_b) = (-0.0715, 0.8071)$].

Compte tenu du fait que le profil initial (itération $k=0$ de l'algorithme de NR) a été pris de la forme $u_n^0 = (0, \dots, 0, \sqrt{-\mu/Q_2}, 0, \dots, 0)$, la solution obtenue à la figure 29(c) paraît à première vue étrange car, elle est obtenue sans avoir opéré la transformation $[u_n \rightarrow (-1)^n u_n]$ comme c'est généralement le cas dans la littérature. Afin d'explorer en profondeur toutes ces solutions, il est

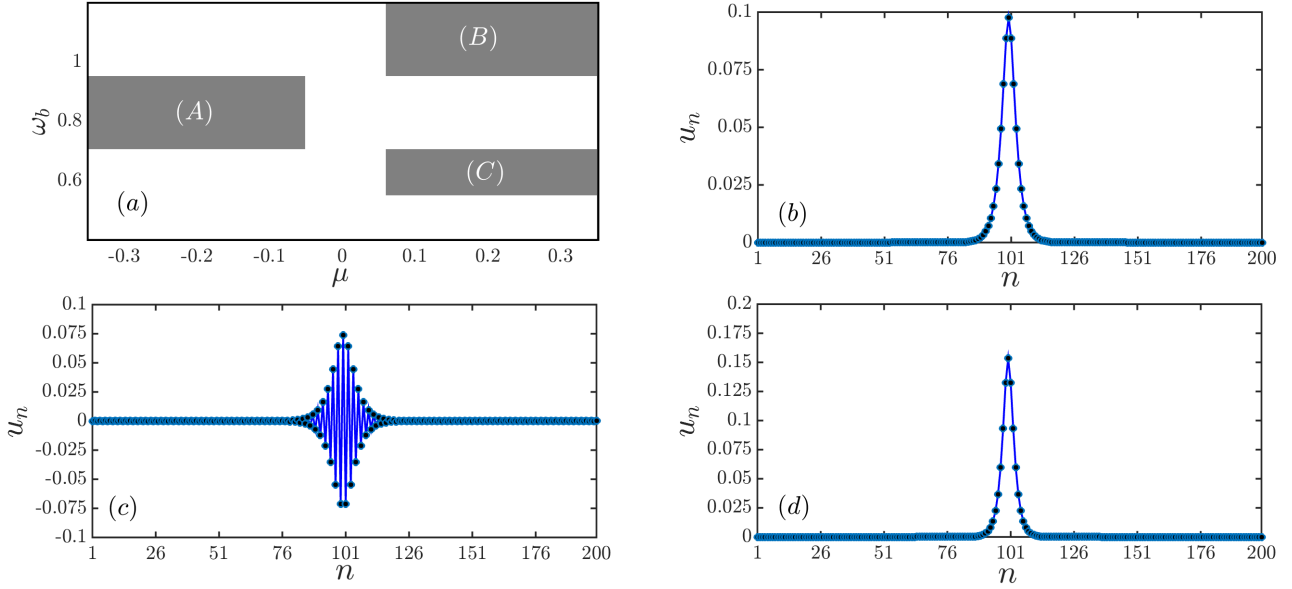


Figure 29: (a) : carte d'existence de la solution triviale u_n^0 en fonction des paramètres (μ, ω_b) et solution soliton u_n de l'équation algébrique Eq. (2.22) obtenue après correction par NR. Ces solutions viennent respectivement des zones **B** [panel (b) : $\mu = 0.05996$, $\omega_b = 1$], **A** [panel (c) : $\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$] et **C** [panel (d) : $\mu = 0.0995$, $\omega_b = 0.631$] du panel (a).

impératif d'effectuer leurs représentation dans l'espace (q, ω) de Fourier. Cette représentation dans l'espace fréquentielle nous permettra non seulement de connaître les vecteurs d'ondes q de ces MLs, mais aussi leurs fréquences ω vis-à-vis du mode des phonons.

Faisant usage des équations Eq. (2.121b–c), nous avons représenté à la figure 30 la transformation de Fourier en dimension 2 (TFD-2) et en dimension 1 (TFD-1) de ces modes localisés. Au regard de cette figure et pour le choix des paramètres ayant permis l'obtention de ces solutions, nous constatons que les MLs issus des zones **B** et **C** ($\mu > 0$) de la figure 29(a) ont leurs vecteurs d'ondes nuls ($q = 0$) et leurs fréquences localisées à la limite inférieure du mode des phonons [cas des figures 30(a) et 30(b)]. Par contre, la TFD-2 des solutions obtenues dans la zone **A** de la figure 29(a) ($\mu < 0$) révèle que ces MLs ont leurs vecteurs d'ondes localisés à la limite supérieure de la première zone de Brillouin ($q = \pi$) et leurs fréquences ω à la limite supérieure du mode des phonons [voir figure 30(c)]. La densité de puissance spectrale (DPS) de ces différents MLs calculée au moyen de la TFD-1 et représentée à la figure 30(d) (où la partie colorisée en gris représente le mode des phonons), vient corroborer les informations retournées par la TFD-2. Ainsi, au regard des différents panels que constituent cette figure, l'on comprend mieux l'origine des différences observées sur les MLs obtenus par l'algorithme de NR. Il est à noter que la courbe en interrompu des figures 30(a) – (c) est celle de la relation de dispersion donnée par l'équation Eq. (2.61).

L'origine de la différence entre les solutions ayant les paires de bases azoté oscillants en phase et celles oscillants en opposition de phase étant établi, il se pose alors la question de la stabilité dynamique de celles-ci. En effet, il est important de savoir parmi elles, celle qui résiste mieux à une perturbation infinitésimale car la molécule d'ADN est toujours sujette à des perturbations de toutes sortes. L'exploration de la stabilité dynamique de ces modes localisés a été faite à la section §2.2.3 et se résume à la recherche des valeurs propres du problème donné par l'équation Eq. (2.26). Il est

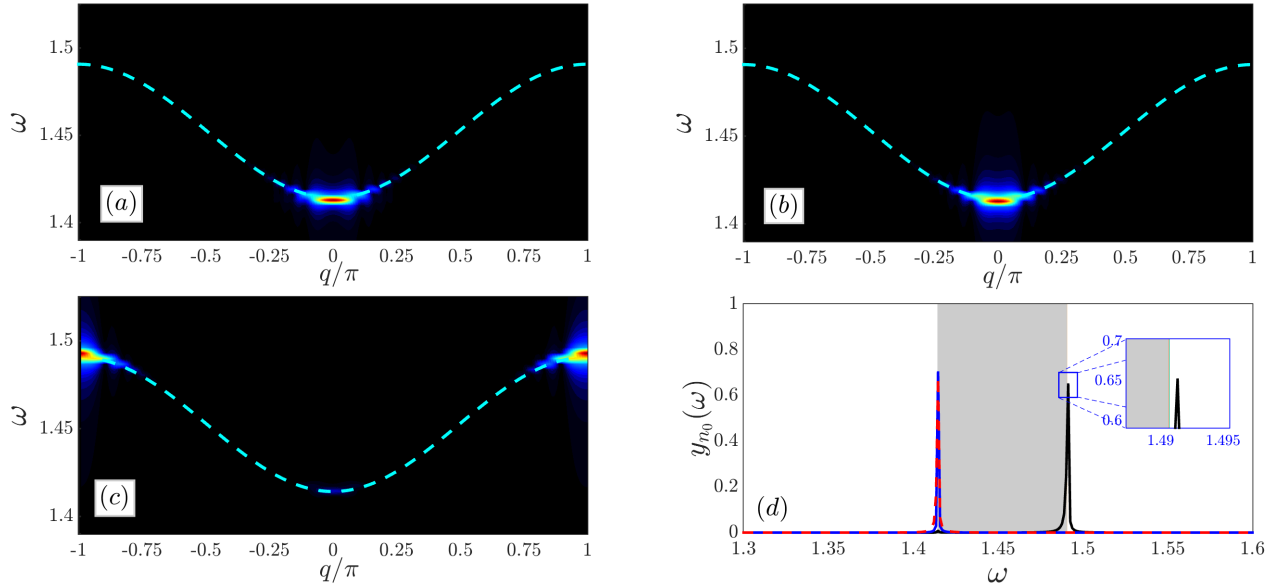


Figure 30: Représentation dans l'espace (q, ω) de Fourier des solutions obtenues par l'algorithme de NR : panel (a) : $(\mu = 0.0995, \omega_b = 0.631)$; panel (b) : $(\mu = 0.05996, \omega_b = 1)$; panel (c) : $(\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071)$. La courbe en interrompu de couleur cyan est celle de la relation de dispersion donnée par l'équation Eq. (2.61). Panel (d) : densité de puissance spectrale de la paire de base située au site $n_0 = N/2$ des solutions de la figure 29. La zone colorisée en gris représente le mode des phonons dont la valeur minimale est $\omega_{min} = \omega_g$ et la valeur maximale est $\omega_{max} = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2}$, tandis que la zone de couleur blanche représente les bandes interdites (inférieure avec $\omega < \omega_{min}$ et supérieure avec $\omega > \omega_{max}$) du système. Les courbes en bleu, rouge et noir sont obtenues respectivement pour $(\mu = 0.05996, \omega_b = 1)$, $(\mu = 0.0995, \omega_b = 0.631)$ et $(\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071)$.

observé à la figure 31 que tous ces modes localisés sont instables car il existe une valeur propre ayant sa partie réelle strictement positive. Toutefois, cette instabilité est plus prononcée dans le cas des solutions dont les paires de bases azotées oscillent en phase qu'en opposition de phase.

L'ADN est une macromolécule de très grande taille renfermant le code génétique nécessaire à la survie de l'espèce. Celle-ci, sollicitée lorsque le besoin en protéines de l'organisme se fait ressentir est transcrite en acide ribonucléique messenger (ARNm). Il est à noter qu'un même brin d'ADN peut être sollicité pour produire simultanément des protéines de natures différentes en synthétisant des ARN différents.

La figure 32 [5, 6] illustre bien ces multiples sites du processus de transcription de l'ADN. Cette figure montre un segment de la molécule d'ADN en train d'être transcrit en ARNm au moyen des enzymes ARN polymérase (ARN-pol) placés en des sites spécifiques. Tenant compte de ce fait et sachant qu'un site de transcription est modélisé physiquement par un mode localisé (un soliton), nous avons généré et étudié la stabilité dynamique des multisolitons dans ce modèle d'ADN de JB.

Les figures 33, 34 et 35 illustrent les différents types de solutions multisolitons obtenues en résolvant l'équation algébrique Eq. (2.22) par l'algorithme de Newton-Raphson. Ces figures sont en accord avec le fait qu'un même segment d'ADN puisse subir simultanément de multiples transcriptions en des sites différents [5, 6]. Contrairement au fait observé par Tchingang et *al.* [123], l'amplitude des multisolitons générés ne diminue pas avec le nombre de sites ouverts. Toutefois, le spectre des valeurs propres représentatif de la stabilité dynamique de ces multisolitons révèle qu'une molécule d'ADN sollicitée simultanément en plusieurs sites par des ARNms différents est plus instable que

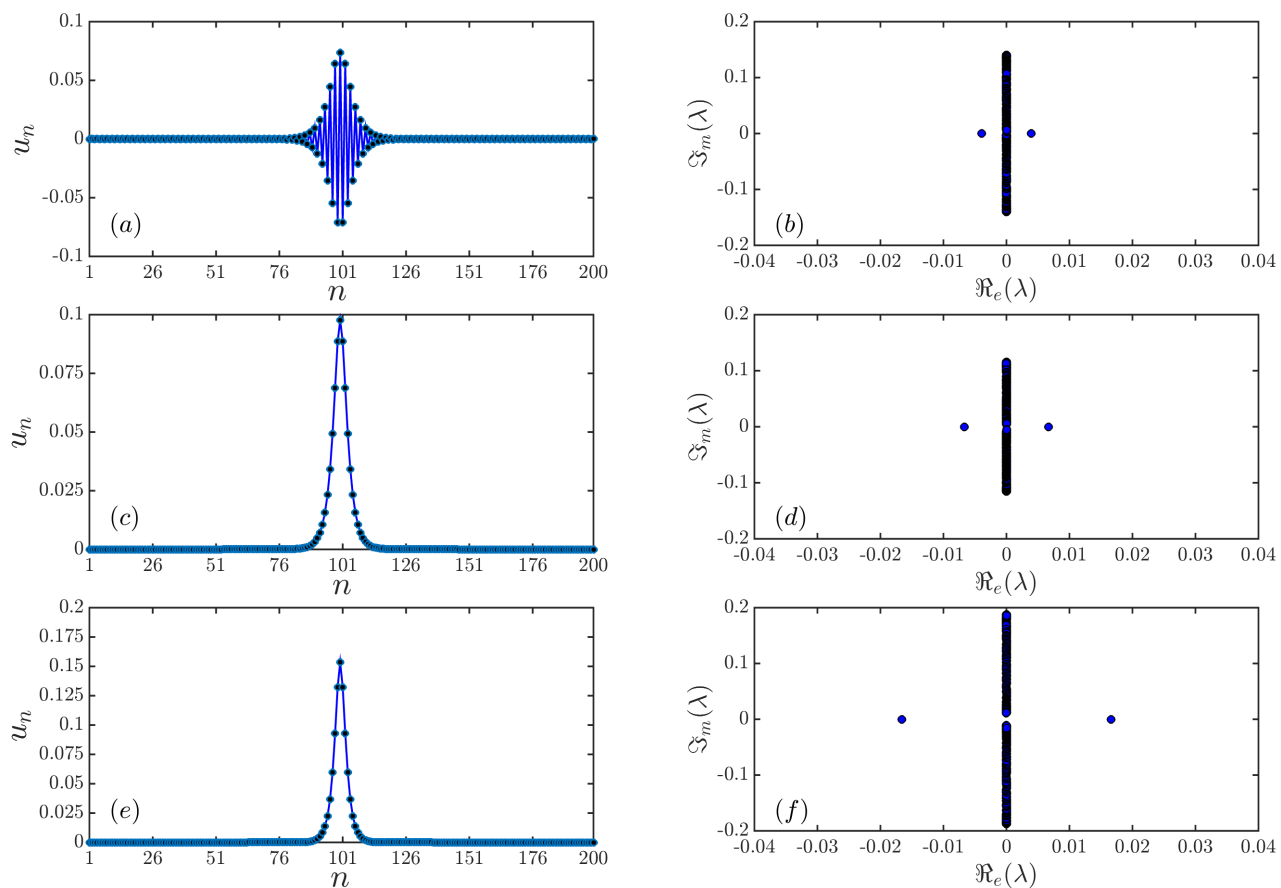


Figure 31: Stabilité dynamique [panels (b), (d) et (f)] des différents modes localisés [panels (a), (c) et (e)] issus respectivement des zones **A**, **B** et **C** de la figure 29(a). Les autres paramètres (μ, ω_b) sont ceux des panels (b), (c) et (d) de la figure 29.

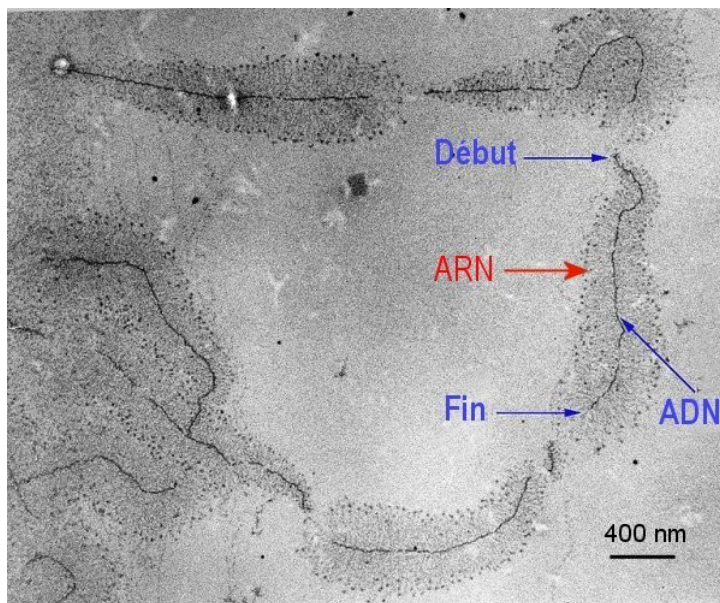


Figure 32: Croquis mettant en exergue le processus de transcription en plusieurs sites d'un même brin d'ADN [5, 6].

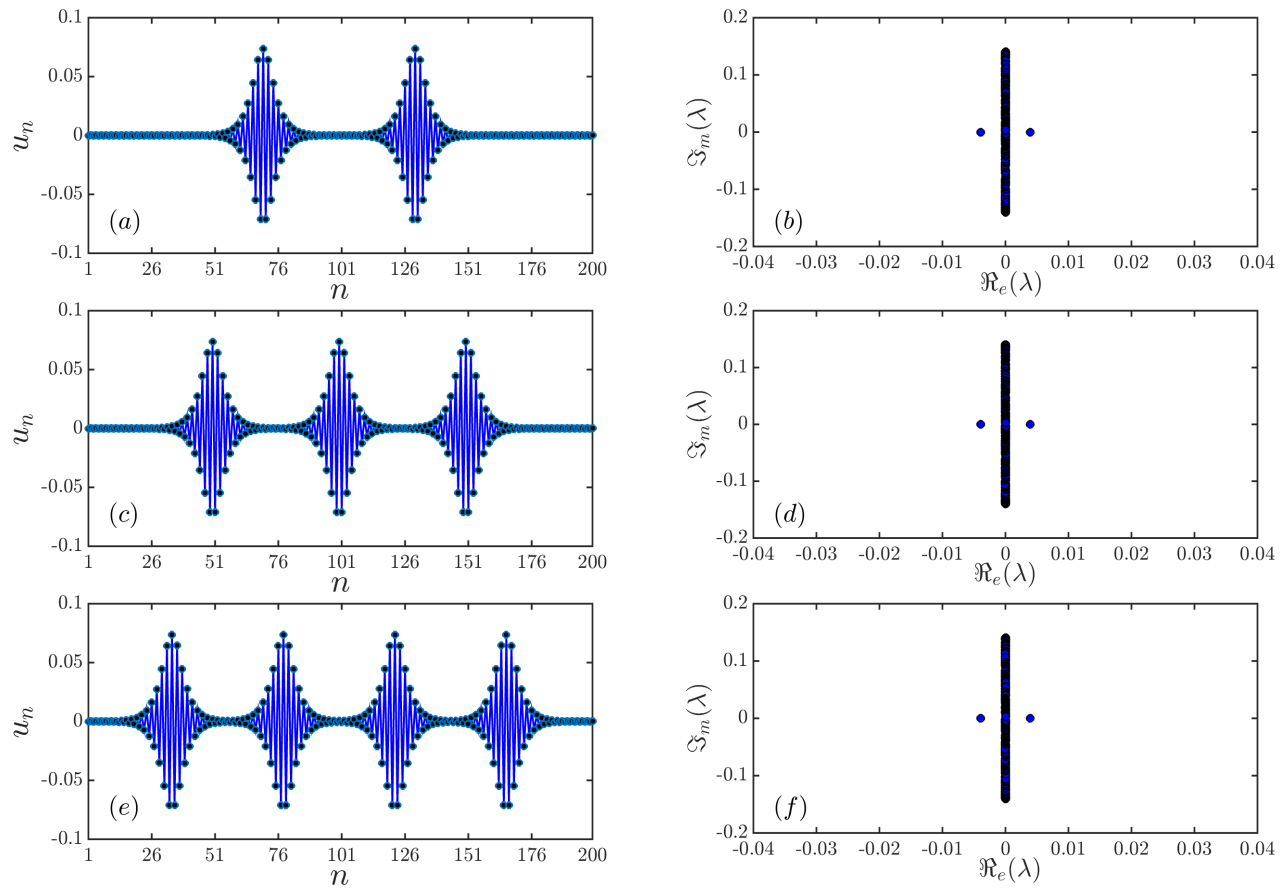


Figure 33: Multisolitons des paires de bases oscillants en opposition de phase, solution de l'équation algébrique Eq. (2.22) avec $\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$ [panels (a), (c) et (e)] ainsi que leurs stabilités dynamiques correspondantes [panels (b), (d) et (f)].

dans le cas d'un même type de décodage en plusieurs sites [voir les panels de droite des figures 33, 34 et 35].

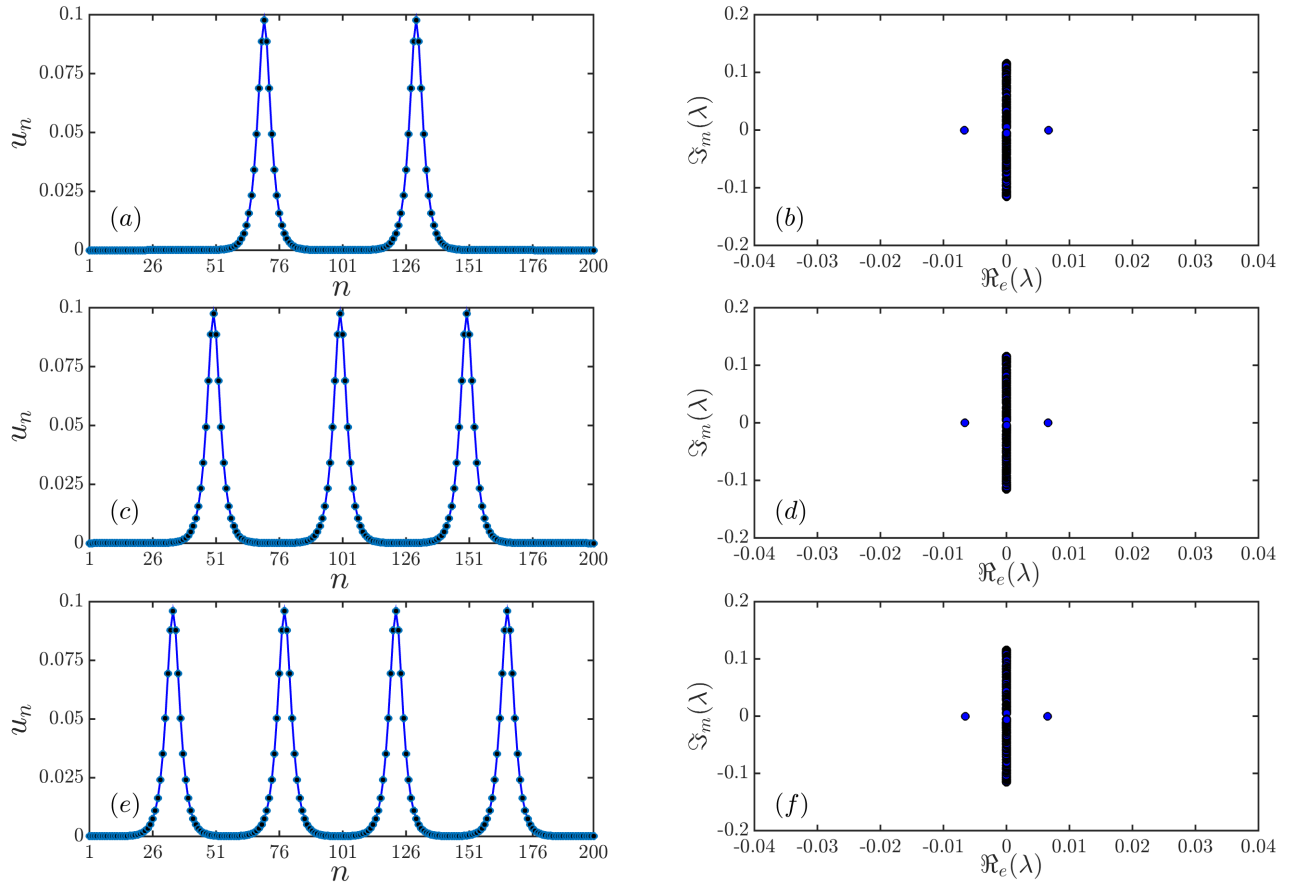


Figure 34: Multisolitons des paires de bases oscillants en phase, solution de l'équation algébrique Eq. (2.22) avec $\mu = 0.05996$, $\omega_b = 1$ [panels (a), (c) et (e)] ainsi que leurs stabilités dynamiques correspondantes [panels (b), (d) et (f)].

Notons au passage que La pseudo-largeur \mathcal{L} du ML, dont l'expression est donnée par l'équation Eq. (3.3) [202] décroît avec la fréquence μ comme le montre la figure 36(b), tandis que l'amplitude maximale de ces MLs est une fonction croissante de μ [voir figure 36(a)].

$$\mathcal{L} = \sqrt{\frac{\sum_n n^2 u_n^2}{\sum_n u_n^2} - \left(\frac{\sum_n n u_n^2}{\sum_n u_n^2}\right)^2}. \quad (3.3)$$

En effet, tel qu'il est observé à la figure 36(b), les valeurs de plus en plus croissantes de μ induisent progressivement une forte localisation de l'onde. C'est à partir de ce fait que nous avons également étudié l'influence de la fréquence μ sur la distance minimale ℓ_δ séparant deux breathers consécutifs lors de la génération des MBDs. Tel qu'il est observé aux panels (c) et (d) de la figure 36, la séparation minimale ℓ_δ entre les BDs consécutifs est une fonction décroissante de la fréquence μ . Ce qui rend ainsi possible la construction des multisolitons de plus en plus rapprochés les uns des autres.

Sachant que ces solutions sont des breathers discrets (multibreathers discrets), elles devraient se propager dans le temps tout en restant toujours localisées dans l'espace. Pour vérifier cette

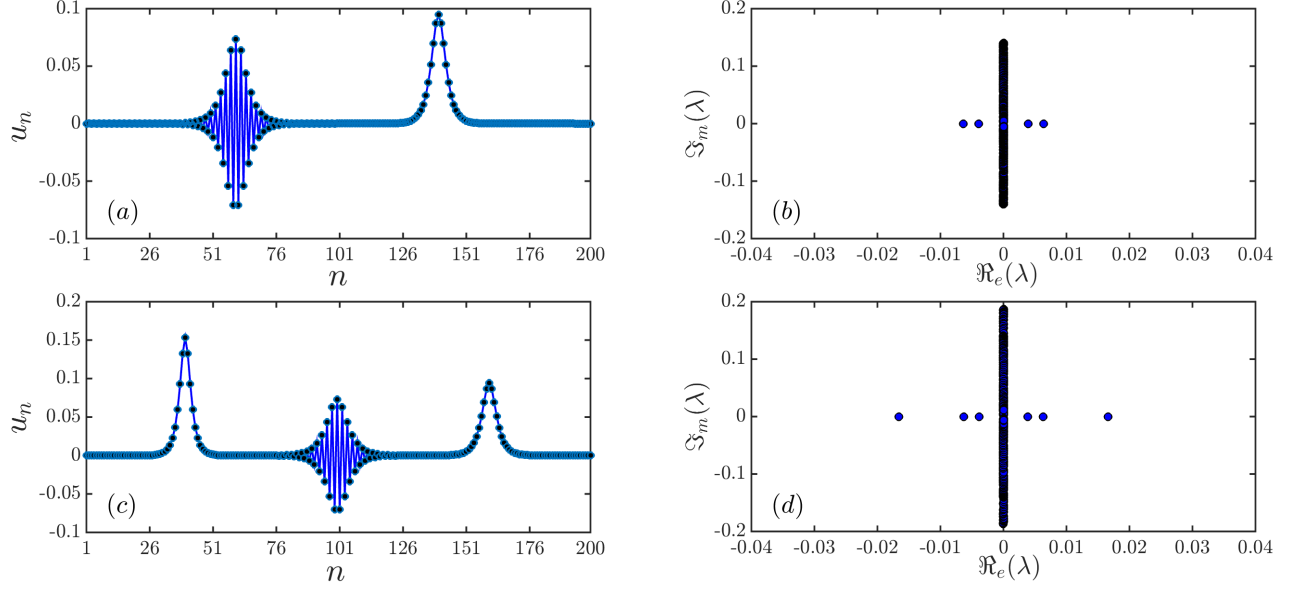


Figure 35: Multisolitons mixte des paires de bases, solution de l'équation algébrique Eq. (2.22). Les paramètres sont les suivants : panel (a) de la gauche vers la droite $(\mu_1, \omega_{b,1}) = (-0.0715, 0.8071), \forall n \in [1, n_0]$, $(\mu_2, \omega_{b,2}) = (0.05996, 1), \forall n \in [n_0, 2n_0]$ avec $n_0 = 100$; panel (c) de la gauche vers la droite $(\mu_1, \omega_{b,1}) = (0.0995, 0.631), \forall n \in [1, n_{0,1}]$, $(\mu_2, \omega_{b,2}) = (-0.0715, 0.8071), \forall n \in [n_{0,1}, n_{0,2}]$ et $(\mu_3, \omega_{b,3}) = (0.05996, 1), \forall n \in [n_{0,2}, N]$, avec $(n_{0,1}, n_{0,2}) = (67, 132)$. Le panel (b) [respectivement (d)] donne le spectre des valeurs propres du multisoliton mixte obtenu au panel (a) [respectivement (c)].

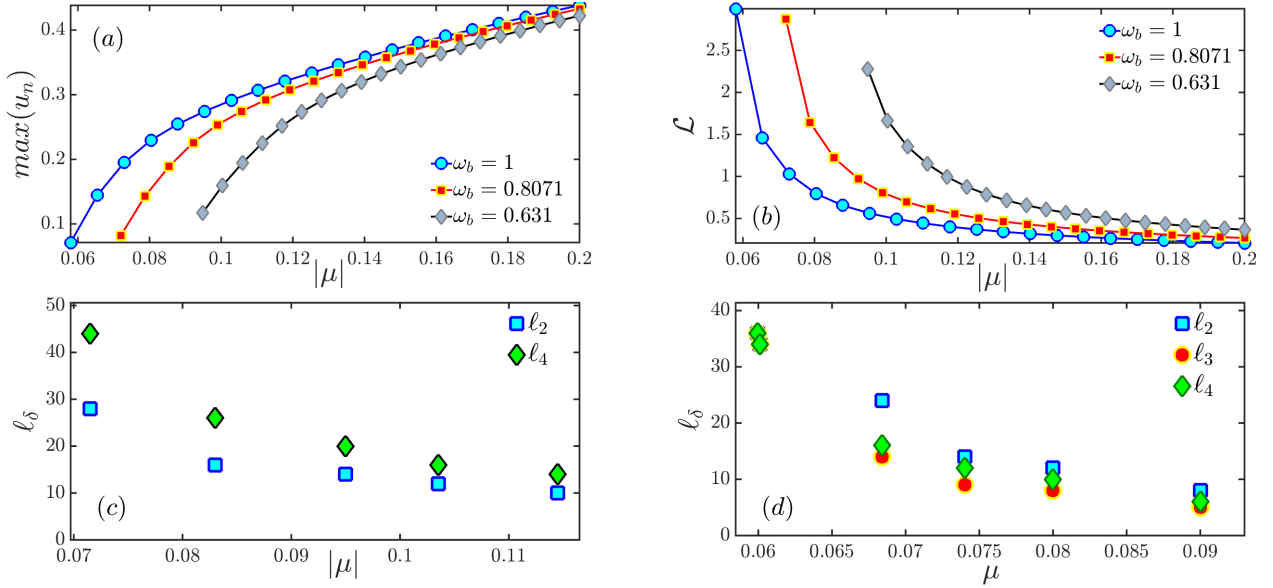


Figure 36: Variation de l'amplitude [panel (a)] et de la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (b)] du mode localisé en fonction de μ pour différentes valeurs de ω_b . Panels (c) [$\omega_b = 0.8071$] et (d) [$\omega_b = 0.05996$] : décroissance de la distance minimale l_δ entre pics consécutifs des différents solitons générés en fonction de la fréquence μ .

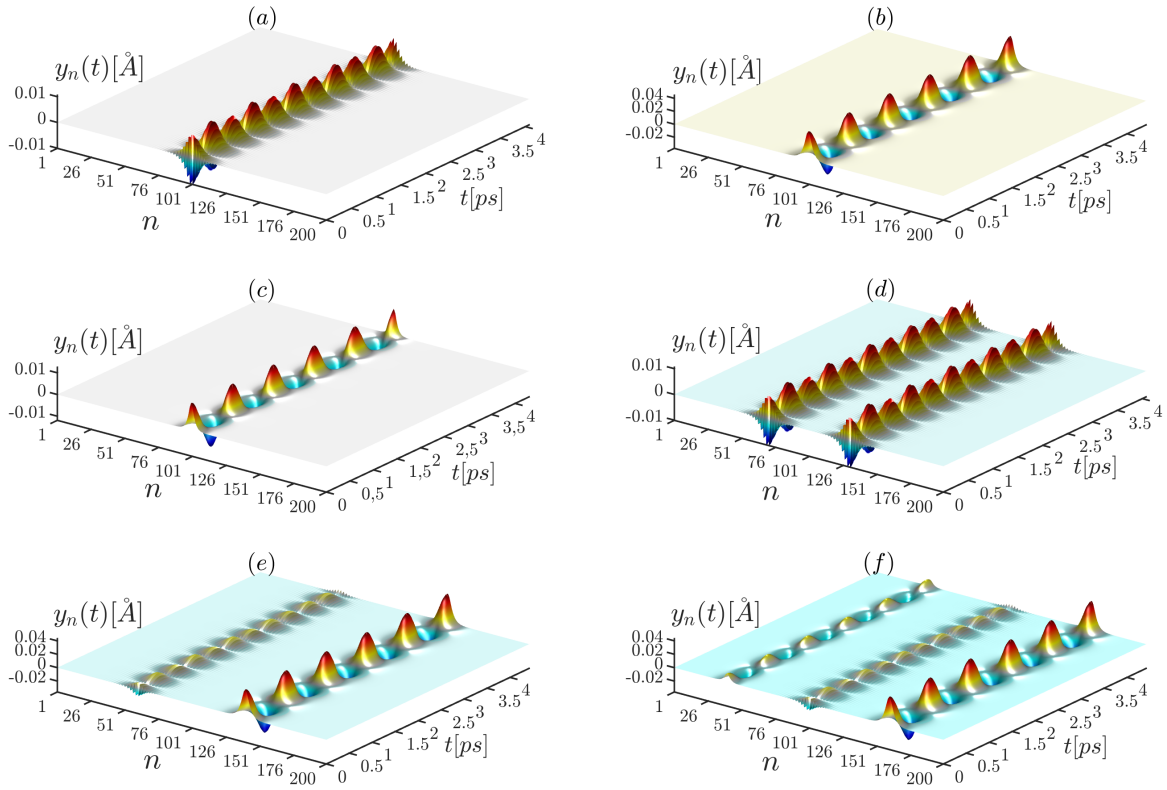


Figure 37: Propagation temporelle des solitons/multisolitons solutions de l'équation Eq. (2.1). Les paramètres (μ, ω_b) sont ceux des figures 35, 34 et 33.

propriété, nous avons résolu numériquement l'équation discrète Eq. (2.1) par la méthode de RKF moyennant l'usage des conditions aux limites périodiques. Les conditions initiales $[Y_n(\tau = 0), \dot{Y}_n(\tau = 0)]$ nécessaires pour cette résolution sont les suivantes :

$$\begin{cases} Y_n(\tau = 0) &= -\frac{4\alpha\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|} u_n^2 + \sqrt{\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}} u_n \cos(qn) - \frac{\alpha\omega_g^2}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2} \left(\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|} \right) u_n^2 \cos(2qn), \\ \dot{Y}_n(\tau = 0) &= (\omega_b + \vartheta - \mu) \left[\sqrt{\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}} u_n \sin(qn) - \frac{2\alpha\omega_g^2}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2} \left(\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|} \right) u_n^2 \sin(2qn) \right]. \end{cases} \quad (3.4)$$

Les relations de l'équation Eq. (3.4) sont obtenues à partir de l'équation Eq. (2.28), où u_n est la solution de l'équation Eq. (2.22). La figure 37 donne les résultats de cette intégration où il y est bien observé que ces modes localisés se propagent comme prévu dans le temps en restant localisés dans l'espace. Ces résultats montrent que les breathers et multibreathers obtenus sont des solutions périodiques respectant la relation $y_n(t) = y_n(t + T_b)$, où $T_b = 1/f_b$ est sa période dont l'expression est donnée à l'équation Eq. (2.29) et f_b sa fréquence. L'analyse de leurs stabilités est faite au moyen de la méthode de Floquet développée à la section §2.2.4. Tel qu'il est observé à la figure 38, les modes localisés dont les particules voisines oscillent en phase sont instables au sens de Floquet car on observe des valeurs propres qui sortent du cercle unité. À l'inverse, ceux dont les particules voisines oscillent en opposition de phase sont stables puisque leurs spectres de Floquet montrent que toutes les valeurs propres sont localisées sur le cercle unité.

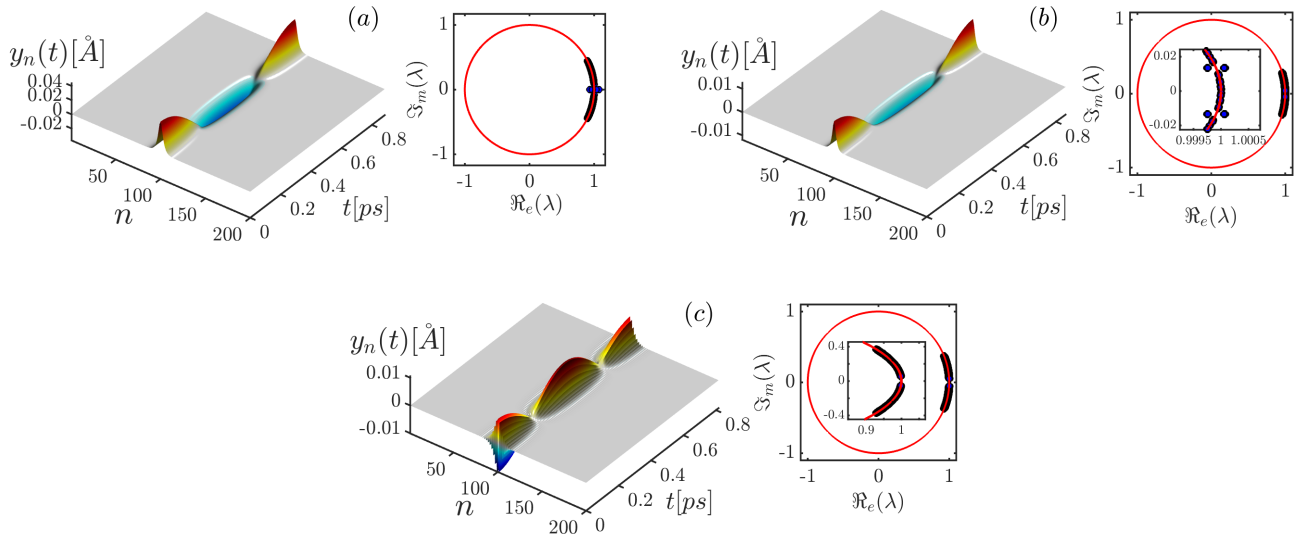


Figure 38: Propagation temporelle et stabilité orbitale sur une période $T_b = 1/f_b$ des solutions périodiques de l'équation Eq. (2.1). Panel (a) : $\mu = 0.05996$, $\omega_b = 1$, $f_b = 0.220858895706$; panel (b) : $\mu = 0.0995$, $\omega_b = 0.631$, $f_b = 0.226993865031$; panel (c) : $\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$, $f_b = 0.239263803681$.

3.2.3 Mobilité des breathers et multibreathers discrets

En réalité, les MLs investigués à la section §3.2.2 ont deux configurations possibles à savoir, celle localisée sur 1-site [voir figure 23(a)], et celle localisée sur 2-sites [voir figure 23(b)]. D'un point de vue simpliste, les extremums de l'énergie sont souvent placés symétriquement sur une seule particule, ou à mi-chemin entre deux particules voisines. Ces positions stationnaires correspondent respectivement au minimum local et au point selle de l'énergie potentielle. La différence d'énergie entre ces deux configurations détermine l'énergie minimale (barrière d'énergie) que le mode localisé devrait vaincre pour déplacer son centre de masse du site n au site $n' = n+1$. Cette barrière d'énergie est encore appelée barrière de Peierl-Nabarro (BPN) [ou encore potentiel de Peierl-Nabarro (PPN)] [115, 162–164]. Ainsi, afin d'effectuer la mobilité des breathers discrets construits, il est impératif d'étudier cette BPN en fonction des paramètres du système.

Partant de l'étude faite à la section §2.2.5 sur un nombre restreint de particules, nous avons tout d'abord évalué numériquement la norme [donnée par l'équation Eq. (2.11)] et l'énergie [donnée par l'équation Eq. (2.12)] pour chacun des modes [le mode A étant celui centré sur 1-site, tandis que le mode B est celui centré sur 2-sites], puis la différence d'énergie ΔE_{AB} entre les deux modes en fonction de la fréquence μ pour une valeur fixée de ω_b . La figure 39 montre l'influence de la fréquence μ sur la norme et l'énergie des modes A et B. Il y est observé que le mode A possède une norme \mathcal{P}_A plus petite que celui du mode B, tandis que son comportement énergétique est inverse [voir panel (b)]. Cette figure révèle également qu'il est possible de faire mouvoir les MLs pour des faibles valeurs de μ car l'énergie de Peierl-Nabarro est la plus faible possible [voir panels (c) et (d)]. Sachant que le mode A est plus stable que le mode B comme l'atteste la figure 40 [obtenue en résolvant numériquement l'équation discrète Eq. (2.9) par la méthode de RKF], la propagation de l'onde le long du réseau consistera donc à déplacer celle-ci consécutivement d'une configuration

stable à une configuration moins stable et vice-versa.

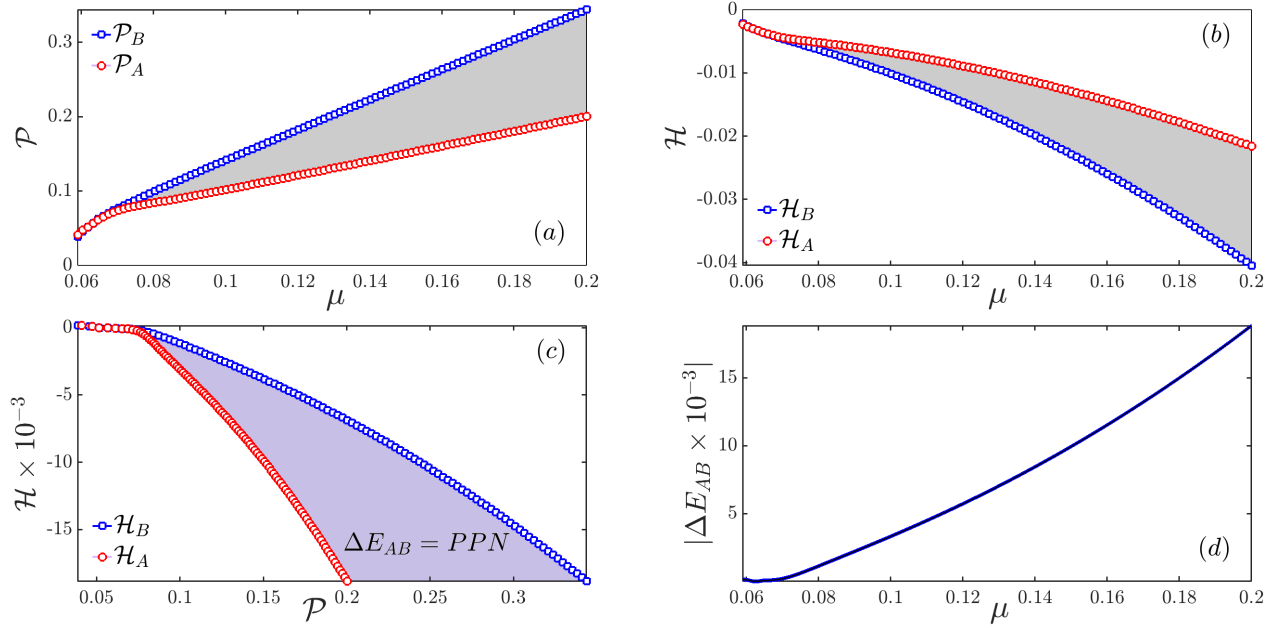


Figure 39: Variation de la norme [panel (a)] et de l'énergie [panel (b)] du mode localisé centré sur 1-site et sur 2-sites en fonction de la fréquence μ . Le panel (c) montre l'évolution de l'énergie du mode A et du mode B en fonction de la norme, tandis que le panel (d) donne la variation de la barrière de Peierl-Nabarro en fonction de μ . Pour tous ces panels, $\omega_b = 1$.

La gamme de fréquence minimisant la barrière de Peierl-Nabarro étant connue, la réalisation de la mobilité des breathers discrets est faite en perturbant le mode stationnaire respectivement par $\cos[\varpi(n - n_0)]$ et $\pm \sin[\varpi(n - n_0)]$ [166], où $n_0 = N/2$ et ϖ est le vecteur d'onde de perturbation encore appelé « kick ». Le véritable challenge réside sur le choix de ϖ . En effet, si ce choix n'est pas adéquat, il pourrait : soit juste contribuer à déplacer le centre de masse de l'onde sur quelques paires de bases avant qu'elle soit de nouveau piégée par le PPN ; soit détruire l'onde ; soit ne rien changer à la localisation de l'onde. Afin de voir l'impact de ϖ sur la dynamique du BD, nous avons représenté à la figure 41, l'évolution de la vitesse du centre de masse du ML en fonction de ce paramètre. Il apparaît sur cette figure que le maximum de vitesse est obtenu pour $\varpi \approx \pm 1.6$ aussi bien pour des modes localisés oscillants en phase qu'en opposition de phase. Il est toutefois à noter que si ϖ n'est pas bien choisi, l'onde va certes se propager, mais perdre sa localisation et sa cohérence. Le principe utilisé pour obtenir la figure 41 a consisté à faire la simulation numérique par RKF du système discret dans un premier temps, calculer numériquement l'évolution temporelle du centre de l'onde [voir Eq. (2.98b)] dans un second temps et, dans un troisième temps, une approximation linéaire de l'évolution du centre a été effectuée. Cette approximation linéaire nous a permis moyennant le coefficient directeur de la droite, d'obtenir pour chaque valeur de ϖ la vitesse de propagation de l'onde.

La figure 42 montre la propagation spatio-temporelle de l'énergie transportée par ces breathers et multibreathers discrets tout au long de la molécule d'ADN pour $\varpi = 1.3$ [panels (a), (c) et (e)] et pour $\varpi = -1.6$ [panels (b), (d) et (f)] correspondant respectivement aux modes localisés oscillant en phase et en opposition de phase.

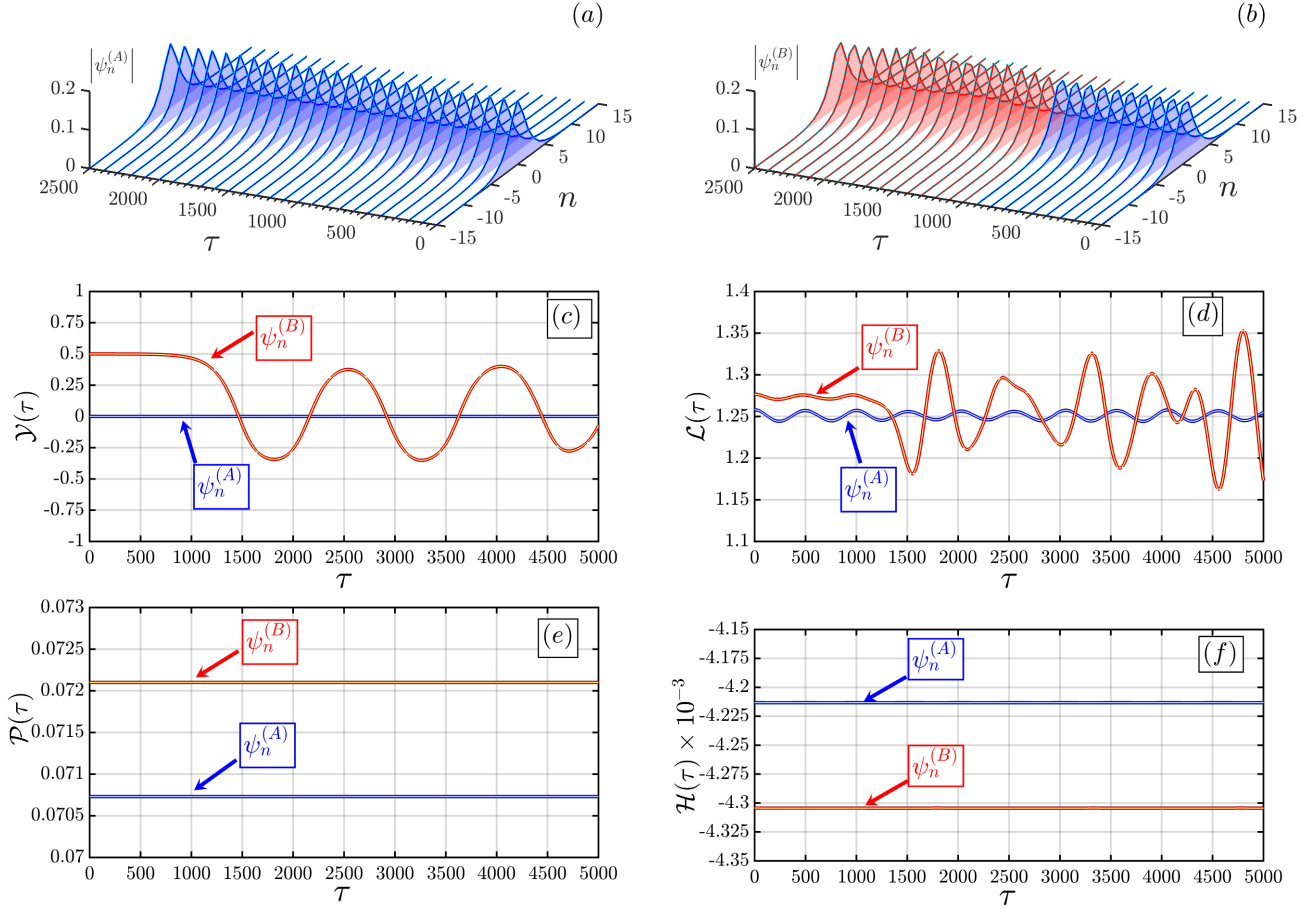


Figure 40: Propagation spatio-temporelle des modes A [panel (a)] et B [panel (b)], mettant en exergue le développement de l'instabilité du mode B après un temps $\tau \approx 1000$, tel que le montrent les ondes instables de couleur rose du panel (b). Les panels (c) et (d) illustrent respectivement l'évolution temporelle du centre de masse [donné par l'équation Eq. (2.98b)] et de la pseudo-largeur [donnée par l'équation Eq. (3.3)] des modes $\psi_n^{(A)}$ et $\psi_n^{(B)}$. L'évolution temporelle des grandeurs conservées telles que la norme [calculée à partir de l'équation Eq. (2.11)] et le hamiltonien [calculé à partir de l'équation Eq. (2.12)] est obtenue aux panels (e) et (f) respectivement. Pour tous ces panels, $\omega_b = 1$ et $\mu = 0.06839$.

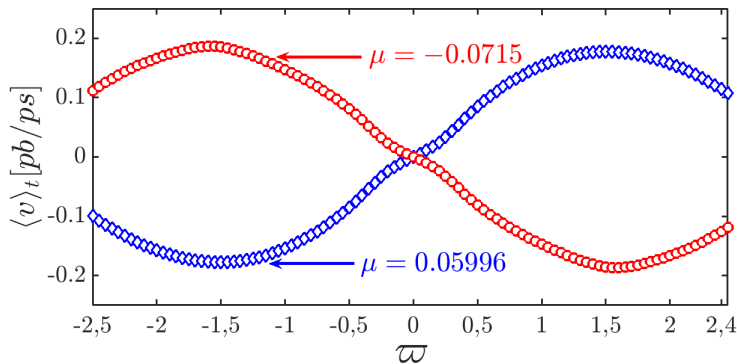


Figure 41: Vitesse moyenne du breather discret initialement localisé sur 1-site pour des bases azotées oscillants en opposition de phase ($\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$) et en phase ($\mu = 0.05996$, $\omega_b = 1.0$) en unité de paires de bases par picoseconde, en fonction du kick ϖ .

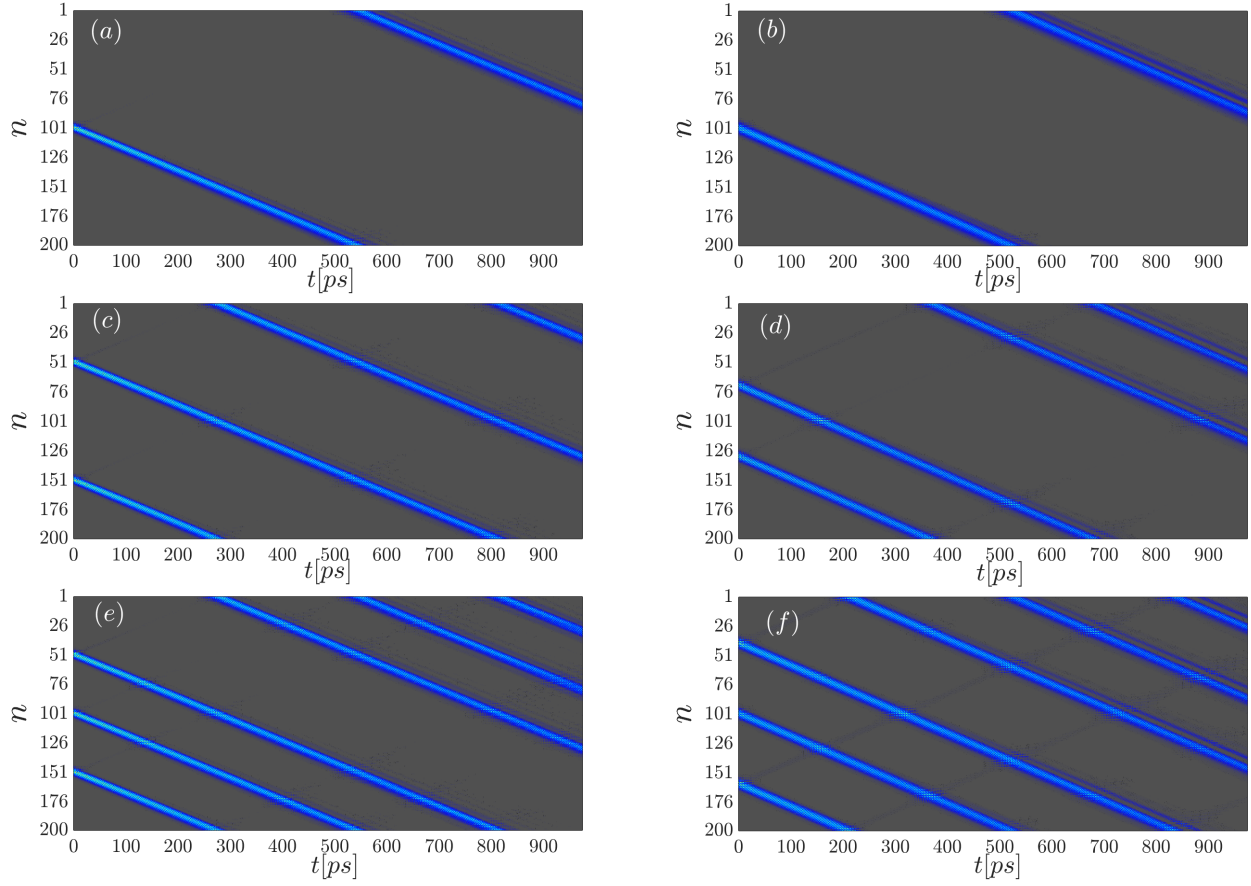


Figure 42: Propagation spatio-temporelle de l'énergie [donnée par l'équation Eq. (1.37)] des breathers et multibreathers discrets pour des paires de bases oscillant en phase [panels (a), (c) et (e) avec $\omega_b = 1$, $\mu = 0.05996$, $\tau = 1.3$] et pour celles oscillant en opposition de phase [panels (b), (d) et (f) avec $\omega_b = 0.8071$, $\mu = -0.0715$, $\tau = -1.6$].

Les propriétés fondamentales de ces breathers et multibreathers dynamiques sont mis en exergue à la figure 43 où nous observons qu’après la collision, ceux-ci émergent en gardant quasi-constantes leurs formes, localisations et vitesses.

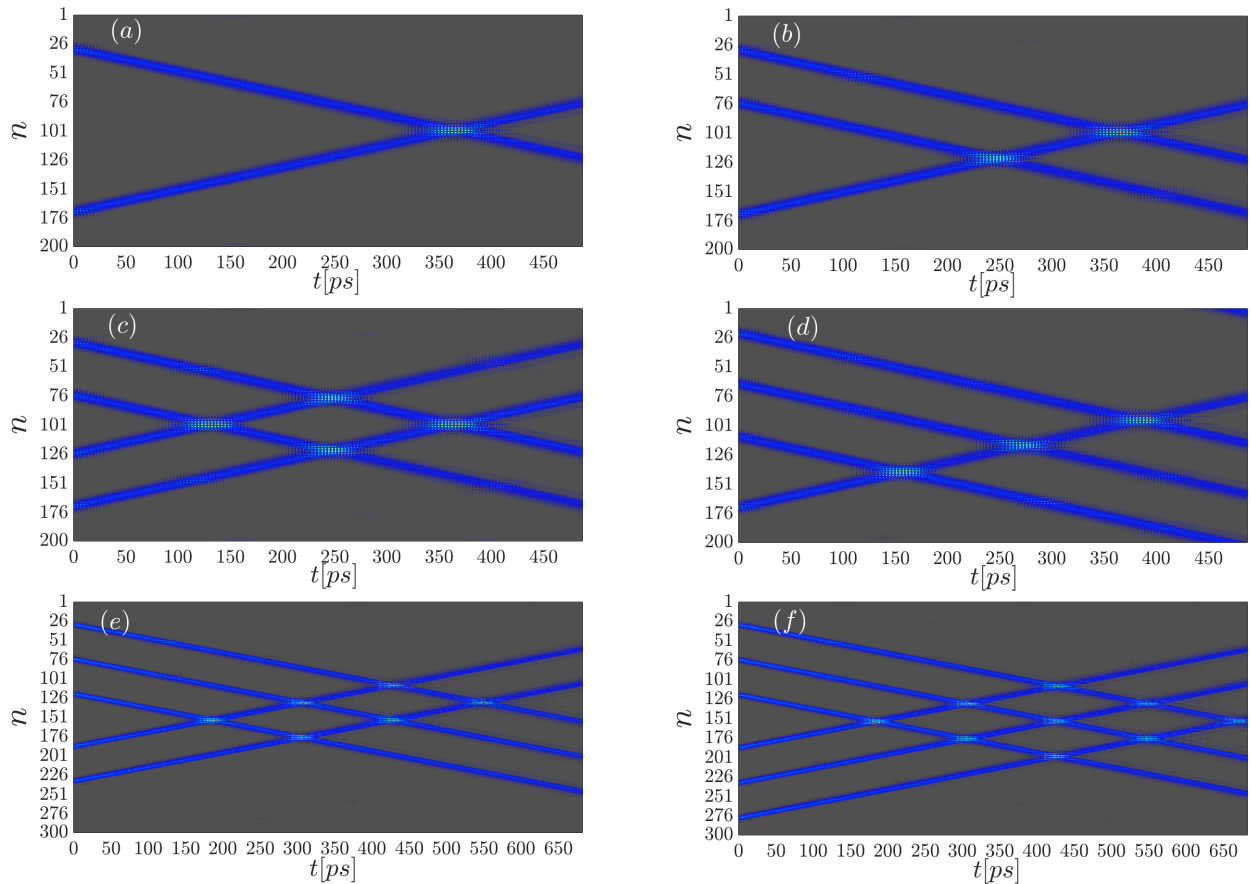


Figure 43: Propagation spatio-temporelle de l’énergie [donnée par l’équation Eq. (1.37)] montrant la collision entre breathers et multibreathers discrets se propageant en sens contraire pour $\omega_b = 0.8071$, $\mu = -0.0715$, $\tau = \pm 1.6$ [panels (a) – (d)] et pour $\omega_b = 1$, $\mu = 0.05996$, $\tau = \pm 1.3$ [panels (e) – (f)].

3.2.4 Discussion

La plupart des études consacrées à la compréhension de la dynamique de l’ADN consiste à transformer le système différentiel initial en une équation d’amplitude vérifiée par une équation de Schrödinger continue [84–88] ou discrète [62, 218, 219]. Cette simplification permet d’approcher une solution dans le domaine continue [85–88] ou de prédire le phénomène d’instabilité modulatoire [62, 218, 219] nécessaire à l’apparition des modes localisés. Dans cette étude, partant de l’approximation onde rotative, nous avons réduit l’équation de la dynamique de base en une équation d’amplitude vérifiée par une équation de Schrödinger non linéaire discrète étendue (ESNLDE). Cette équation nous a ainsi permis de générer aussi bien des breathers que des multibreathers discrets ayant des paires de bases azotées voisines oscillant aussi bien en phase qu’en opposition de phase. Notons qu’en utilisant l’approximation semi-discrète au modèle d’ADN de JB, Ndjoko et al [86] ont obtenus une équation semblable dans le domaine continu et y ont investigué la dynamique et la stabilité des compactons, ce qui n’est pas le cas de cette étude qui est essentiellement basée

sur le milieu discret.

Dans la littérature, l'existence des solutions pulses ayant des paires de bases azotées oscillant en phase ou en opposition de phase est conditionnée par le signe du produit $P \times Q$ entre coefficient de dispersion P et de non linéarité cubique Q de l'équation de Schrödinger cubique. Dans cette étude, les breathers discrets de ce modèle d'ADN ayant des particules voisines oscillant aussi bien en phase qu'en opposition de phase sont obtenus sans toutefois avoir opéré la transformation $u_n \rightarrow (-1)^n u_n$ comme dans les références [122, 220]. Une étude pareille n'avait pas encore été menée dans une ESNLDE. Cette étude met ainsi en exergue la richesse de l'approche discrète sur l'existence de ces types de modes localisés.

Dans une étude récente, Tchingang et *al.* [123] ont montré qu'il était possible de générer simultanément plusieurs modes localisés dans la protéine, mais que leur nombre était limité. En effet, dans leurs études, l'amplitude de ces multisolitons exhibait un comportement inversement proportionnel au nombre de multisolitons générés. Ce qui n'est pas le cas de cette étude basée sur la dynamique du modèle d'ADN de JB, qui montre clairement que le nombre de mode localisé n'est pas limité. Toutefois, il doit exister une distance minimale entre ces multibreathers pour qu'ils puissent exister. Ce résultat est en accord avec les observations biologiques car une portion d'ADN peut être sollicitée simultanément en plusieurs de ses sites par des enzymes d'ARN-polymérase.

Avant cette présente étude, l'instabilité modulationnelle discrète n'avait pas été étudiée dans le modèle d'ADN de JB [62, 218, 219]. Contrairement à l'étude du phénomène d'IM dans le modèle discret de Peyrard Bishop Dauxois (PBD) menée par Tabi et *al.* [62, 218, 219] sur une équation de Ginzburg-Landau complexe discrète et une équation de Salerno pour $\omega_b = 1$, nous avons montré dans cette étude que pour une gamme de valeur de cette fréquence, les structures localisées du modèle de JB apparaissaient plus ou moins rapidement dans le réseau.

3.3 Effets de l'environnement et de l'impureté sur le modèle d'ADN de JB

Dans cette section, nous présentons les résultats de l'étude menée à la section §2.3 du chapitre 2, portant sur l'impact de la dissipation, de l'excitation périodique et de l'impureté sur la dynamique globale de la molécule d'ADN.

3.3.1 Breather discret généré par séparation de la dynamique spatiale et temporelle

Nous utilisons ici une nouvelle approche pour générer les modes localisés. Contrairement à ce qui a été fait à la section §2.2 [où le mode localisé a été pris sous la forme de l'équation Eq. (2.5)] et dont les résultats sont présentés à la section §3.2, nous cherchons le breather discret sous la forme de l'équation Eq. (2.62). Après substitution de l'équation Eq. (2.62) dans l'équation Eq. (2.58) et moyennant les développements fait à la section §2.3.3, nous obtenons au moyen de l'équation algébrique non linéaire Eq. (2.68), une relation entre l'amplitude ϕ_0 et le coefficient multiplicateur k_0 des sites $\pm 1, \pm 2$.

Les solutions réelles de l'équation Eq. (2.68) obtenues par l'algorithme de Newton-Raphson sont représentées au panel (a) de la figure 44 en fonction des paramètres (k_0, ϕ_0) . Pour $k_0 \leq k_{0cr}^-$ il existe deux branches de valeurs de ϕ_0 qui sont des solutions de l'équation Eq. (2.68), à savoir les branches

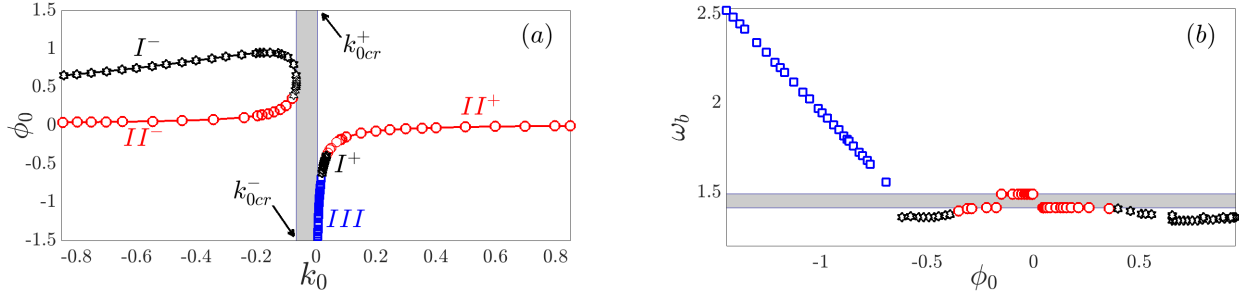


Figure 44: Panel (a) : Solutions réelles de l'équation algébrique Eq. (2.68) représentées dans le plan (k_0, ϕ_0) . Dans la zone hachurée en gris délimitée par $k_{0cr}^- = -0.0653$ et $k_{0cr}^+ = 0.0056$, cette équation n'admet pas de solution réelle. Le panel (b) montre la variation de la période du breather du ML des différentes zones I^\pm, III du panel (a) en fonction de ϕ_0 . La zone hachurée en gris dans ce panel (b) représente la localisation du mode des phonons.

supérieure et inférieure indexées respectivement par I^- (hexagones de couleur noire) et II^- (cercles de couleur rouge). Pour $k_0 \in [k_{0cr}^-, k_{0cr}^+]$ (zone hachurée en gris) cette équation algébrique n'admet pas de solution réelle. Lorsque $k_0 \geq k_{0cr}^+$ la figure 44(a) montre une seule branche de solution qui est cependant divisée en trois parties : III, I^+ et II^+ , représentées respectivement par les carrés, les hexagones et les cercles de couleur bleue, noire et rouge respectivement. Il est à noter que les modes localisés obtenus pour des très faibles valeurs de ϕ_0 (zones II^\pm) entrent en résonance avec le mode des phonons puisque leurs fréquences y sont localisées comme le montre la figure 44(b) (zone en cercle rouge). Les zones I^\pm quant à elles produisent les breathers discrets dont les fréquences dominantes sont localisées dans la bande interdite inférieure, proche de la limite inférieure du mode des phonons [voir les hexagones de couleur noir de la figure 44(b)], tandis que la zone III produit des MLs dont les fréquences sont dans la bande interdite supérieure [voir les carrés de couleur bleue de la figure 44(b)]. Ces breathers discrets avec des fréquences fondamentales dans la bande interdite (cas des zones I^\pm et III) sont enclins à interagir très peu avec les phonons et pourraient avoir la propension de garder leurs formes aussi longtemps que possible [96, 97]. À cet effet, il sera intéressant d'effectuer une analyse de leur stabilité orbitale afin de voir si de telles excitations conviennent à la localisation et au transfert de l'énergie dans l'ADN, dans un contexte où cette macromolécule est soumise au forçage périodique et à la viscosité de son environnement.

L'étude de la stabilité de ces MLs est faite au moyen de la méthode de Floquet développée à la section §2.2.4. En appelant $\hat{Y}(\tau)$ la solution périodique, sa stabilité repose sur les valeurs propres de la matrice de monodromie \mathcal{M} construite à partir de l'équation de la perturbation $\epsilon_n(\tau)$ donnée en l'absence de viscosité et du forçage périodique par :

$$\begin{aligned} \ddot{\epsilon}_n - k_2(\epsilon_{n+1} - 2\epsilon_n + \epsilon_{n-1}) - 3k_4[(\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n)^2(\epsilon_{n+1} - \epsilon_n) + (\hat{Y}_{n-1} - \hat{Y}_n)^2(\epsilon_{n-1} - \epsilon_n)] \\ + \omega_g^2(1 + 2\alpha\hat{Y}_n + 3\beta\hat{Y}_n^2)\epsilon_n = 0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Les résultats de l'étude de la stabilité orbitale [après une intégration par RKF sur cinq périodes ($\tau = 5T_b$ avec $T_b = 2\pi/\omega_b$)] de ces MLs dérivés de la figure 44(a) sont représentés à la figure 45. Sur cette figure, les panels de gauche [panels (a), (d) et (g)] montrent les profils des modes localisés, tandis que les panels du milieu [panels (b), (e) et (h)] nous renseignent sur la stabilité orbitale de ces solutions. Tel qu'il y est observé, les modes localisés issus des zones I^\pm sont instables car il existe au moins une valeur propre de la matrice de monodromie \mathcal{M} qui traverse le cercle unité. Cette

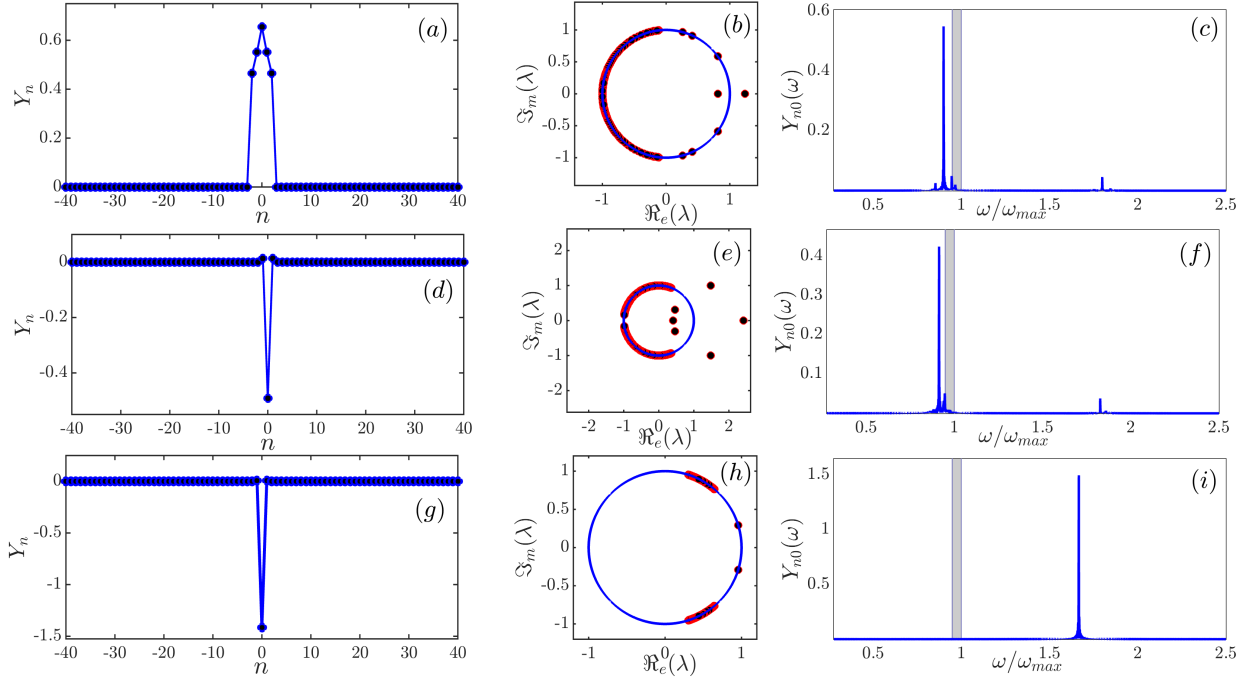


Figure 45: Profil du breather discret pris respectivement dans la branche I^- [panel (a), avec $k_0 = -0.8425$ et $\phi_0 = 0.6546$] et dans la branche I^+ [panel (d), avec $k_0 = 0.0267$ et $\phi_0 = -0.4915$], ainsi que leur stabilité de Floquet donnée respectivement aux panels (b) et (e). Les puissances spectrale de ces BDs sont représentées sur les panels (c) et (f) où la zone hachurée en gris est la localisation des modes phonons, avec $\omega_{max} = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2}$.

instabilité est confirmée sur les panels (c) et (f), où le spectre de puissance de ces MLs montrent des pics situés dans la bande permise des phonons, entraînant ainsi une résonance avec eux. Par contre, les solutions obtenues à la zone III sont stables car tous les multiplicateurs de Floquet sont contenus sur le cercle unité [voir figure 45(h)]. Cette stabilité est confirmée par le spectre de puissance donné au panel (i).

3.3.2 Breather discret généré par continuation de la limite anti-continue

À partir de l'analyse menée à la section §3.3.1 précédente, les BDs ont été estimés en l'absence de la viscosité et du forçage périodique pour des valeurs spécifiques des paramètres du système. Ainsi, dans cette section, prenant en compte ces effets, les MLs avec des fréquences arbitraires $f_b = \omega_b/2\pi$ sont générés au regard des restrictions imposées par les branches d'existence calculées précédemment. Sachant que les BDs sont des solutions localisées dans l'espace et périodique dans le temps, ils sont calculés en cherchant les points fixes de l'application donnée par l'équation Eq. (2.70) de la section §2.3.4. Une fois que l'équation Eq. (2.58) a été transformée en équation Eq. (2.112), trouver les points fixes de l'équation Eq. (2.70) revient à rechercher les bonnes valeurs du couple $(\gamma_1^n, \gamma_2^n)^T$ vérifiant l'équation algébrique :

$$\begin{cases} Y_n(\tau = \mathbf{T}_b, \omega_b, \varepsilon, \mathbf{F}_0, \mathbf{\Omega}, \gamma_1^n, \gamma_2^n) - Y_n(\tau = \mathbf{0}, \omega_b, \varepsilon, \mathbf{F}_0, \mathbf{\Omega}, \gamma_1^n, \gamma_2^n) = 0, \\ V_n(\tau = \mathbf{T}_b, \omega_b, \varepsilon, \mathbf{F}_0, \mathbf{\Omega}, \gamma_1^n, \gamma_2^n) - V_n(\tau = \mathbf{0}, \omega_b, \varepsilon, \mathbf{F}_0, \mathbf{\Omega}, \gamma_1^n, \gamma_2^n) = 0, \end{cases} \quad (3.6)$$

avec $T_b = 2\pi/\omega_b$ la période du BD, ε^1 un paramètre modélisant l'annulation ($\varepsilon = 0$) ou la présence ($\varepsilon = 1$) des couplages linéaire et non linéaire respectivement (k_2 et k_4). Les variables $\gamma_1^n = \mathbf{Y}_n(\mathbf{0}, \omega_b)$ et $\gamma_2^n = \mathbf{V}_n(\mathbf{0}, \omega_b)$ sont les conditions initiales à rechercher pour que le système donné par l'équation Eq. (3.6) soit vérifié. Par application du principe de la limite anti-continue donné à la section §2.3.4 sur le paramètre ε , les points fixes de cette application sont obtenus avec une précision Tol voulue.

La stabilité orbitale au sens de Floquet des solutions obtenues au moyen de l'équation Eq. (3.6) pour une gamme de valeurs de $\omega_b \in [0.75, 0.865]$ respectant la condition de non résonance ($z \times \omega_b \neq \omega_{phonons}$) est présentée au panel (a) de la figure 46. Cette figure 46(a) nous renseigne que tous les BDs dont ω_b appartient à l'intervalle $\omega_b \in [0.75, 0.7585]$ sont instables, car la valeur maximale du module des multiplicateurs de Floquet est supérieure à l'unité. Par ailleurs, pour $\omega_b > 0.7585$, il existe très peu de valeurs pour lesquelles ces BDs sont instables. Les panels (b) et (c) de cette figure 46 quant à eux montrent l'influence des paramètres de l'excitation périodique (F_0, Ω) sur la stabilité des breathers discrets construits. Les zones hachurées en bleu sont celles où les BDs sont stables tandis que celles hachurées en rouge correspondent aux BDs instables.

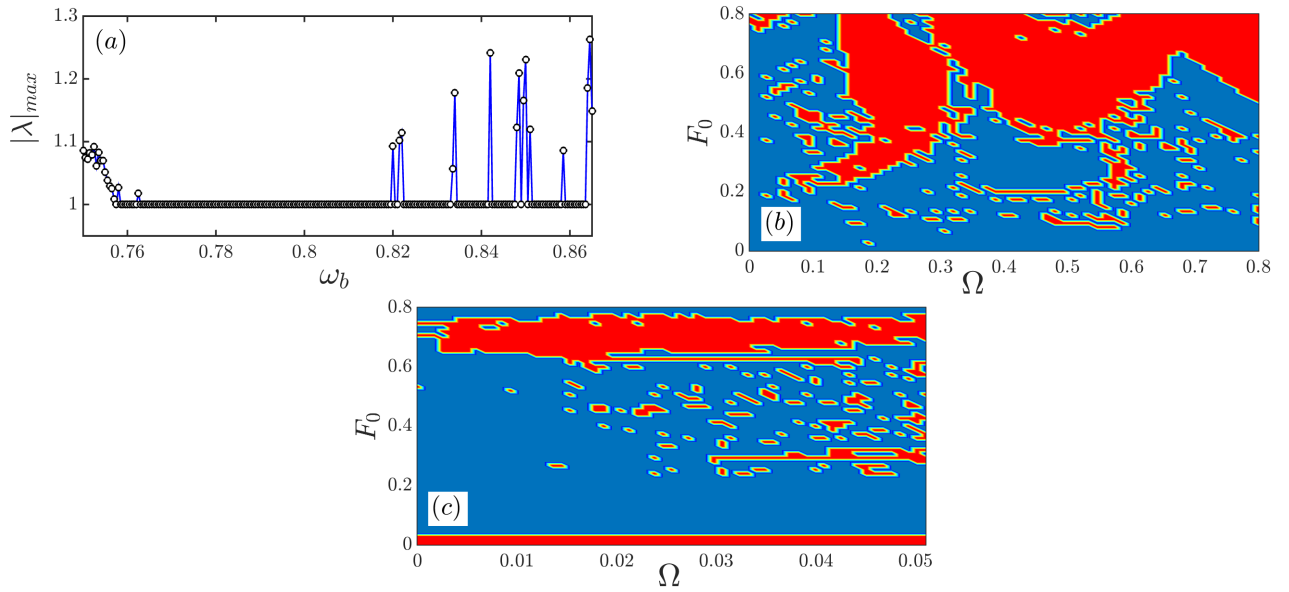


Figure 46: (a) : Évolution de la valeur maximale du module des multiplicateurs de Floquet λ en fonction de la fréquence ω_b du BD en l'absence de l'excitation externe. Carte de stabilité des BDs en fonction des paramètres F_0 et Ω du forçage périodique pour $\omega_b = 0.8$ [panel (b)] et $\omega_b = 0.757$ [panel (c)]. Les zones de couleur bleue sont celles des BDs stables tandis que celles de couleur rouge sont des zones où les BDs sont instables. $\Gamma = 0$ pour tous ces panels.

La figure 47 illustre deux types de solution dont les fréquences valent respectivement $\omega_b = 0.8$ [panel (a) : $F_0 = 0, \Gamma = 0$; panel (c) : $F_0 = 0.75, \Gamma = 0$] et $\omega_b = 0.75$ [panel (e) : $F_0 = 0, \Gamma = 0$; panel (g) : $F_0 = 0.75, \Gamma = 0$]. Ces solutions obtenues par la continuation de la limite anti-continue ont leurs multiplicateurs de Floquet projetés sur le cercle unité [voir les figures contenues dans celles des panels (a), (c), (d) et (f) respectivement], confirmant ainsi le schéma global de stabilité donné par la figure 46. Le spectre de puissance issu de la propagation spatio-temporelle sur $\tau = 250T_b$ de la paire de bases azotées située au site d'amplitude maximale [voir panels (b) et (f)] montrent que

1. Ce paramètre est ajouté au système différentiel en le multipliant avec les coefficients de couplage linéaire εk_2 et non linéaire εk_4 de l'équation Eq. (2.112). Ainsi, en posant $\varepsilon_0 = 0$, et $d\varepsilon$ un petit incrément, on a la relation $\varepsilon = \varepsilon_0 + d\varepsilon$.

ces breathers discrets ont leurs fréquences contenues dans la bande interdite supérieure du mode des phonons (zone de couleur grise).

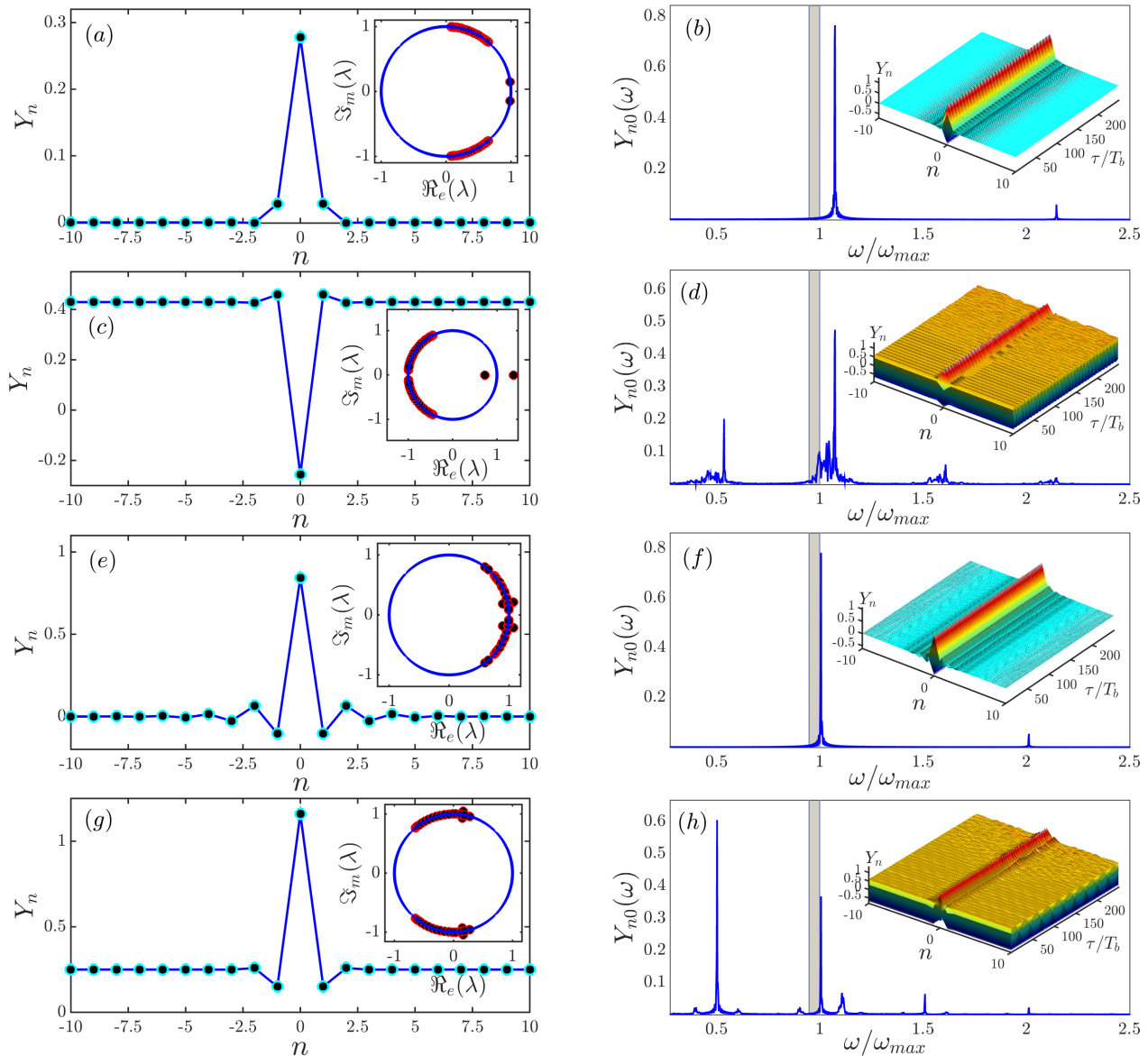


Figure 47: Profils des BDs obtenus (panels de gauche), ainsi que leurs évolutions spatio-temporelle suivi de leurs puissances spectrales (panels de droite), avec $\omega_b = 0.8$ [panels (a) et (b) : $F_0 = 0$; panels (c) et (d) : $F_0 = 0.75$] et $\omega_b = 0.75$ [panels (e) et (f) : $F_0 = 0$; panels (g) et (h) : $F_0 = 0.75$]. Pour tous ces panels, $\Gamma = 0$. Les figures à l'intérieur des panels (a), (c), (e) et (g) montrent les multiplicateurs de Floquet projetés sur le cercle unité.

Toutefois, comme il est observé au panel (e), l'instabilité de cette solution obtenue pour $\omega_b = 0.75$ est due à l'interaction des fréquences de moindre amplitude avec le mode des phonons comme le montre son spectre de puissance correspondant [panel (f)]. En tenant uniquement compte de l'excitation périodique avec une amplitude $F_0 = 0.75$, les modes localisés construits [voir panels (c) et (g)] sont instables comme le montrent leurs spectres de Floquet et leurs puissances spectrales correspondantes [voir panels (d) et (h)].

Pour un choix de la fréquence $\omega_b = 0.8$ (respectivement $\omega_b = 0.757$), les MLs ont été également générés en tenant compte simultanément de la viscosité du milieu et de la force externe. Ces breathers

discrets prennent forme pour des petites valeurs de Γ et de F_0 comme prédit dans la référence [186]. La figure 48(a) [respectivement la figure 48(d)] représente ce breather discret et, au regard de sa stabilité linéaire au sens de Floquet, celle-ci est stable (respectivement instable). Une fois que ces BDs ont été générés, leurs robustesse suite aux variations tour à tour de ν et de Ω a également été explorée et les résultats sont reportés dans les panels (b) et (c) [(e) et (f) respectivement]. Les figures 48(b) et (c) [respectivement les figures 48(e) et (f)] montrent l'influence de ces variables sur le module et sur l'argument des multiplicateurs de Floquet. Concernant la figure 48(b), la valeur critique de la viscosité au-delà de laquelle l'instabilité de la solution devient de plus en plus accentuée est $\nu_{cr} = 0.087 \text{ ps}^{-1}$, tandis qu'à la figure 48(e) la gamme de valeurs de ν donnant lieu à la stabilité est réduite. Il en est de même des panels (c) et (f) où très peu de valeurs de Ω conduisent aux solutions stables. Notons au passage que pour des valeurs de plus en plus croissantes de l'amplitude

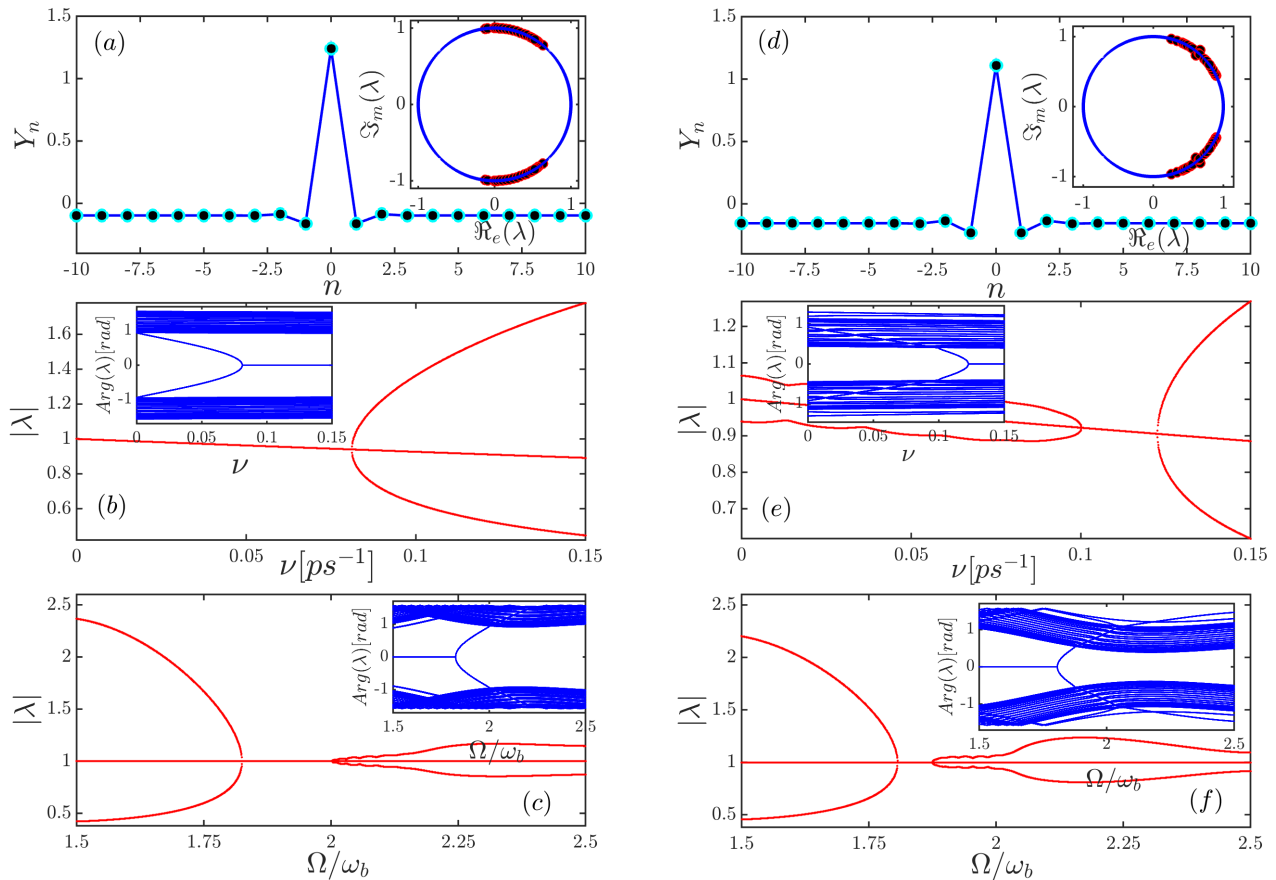


Figure 48: Profils des BDs ainsi que leurs stabilités orbitales, obtenus sous influence combinée de la dissipation et du forçage périodique [(a) : $\omega_b = 0.8$; (d) : $\omega_b = 0.757$]. Les panels (b), (c), (e) et (f) montrent l'influence du coefficient de viscosité ν et Ω sur la stabilité de ces MLs. Pour tous ces panels, $\Omega = 2\omega_b$, $F_0 = 0.06$, $\Gamma \approx 1.95 \times 10^{-4}$.

du forçage périodique F_0 sous influence de la viscosité ν fusse-t-elle minime, les MLs construits deviennent de plus en plus instables.

Dans la section suivante, nous verrons l'impact de ces paramètres (ν , F_0 et Ω) sur une impureté localisée et son implication sur la dynamique de l'ensemble de la macromolécule d'ADN.

3.3.3 Effets de l'impureté sur la dynamique de l'ADN

Dans cette section, nous étudions l'impact de l'impureté ponctuelle (c'est-à-dire localisée sur une seule paire de base) sur la molécule d'ADN. Conformément à l'analyse faite à la section §2.3.5 du chapitre 2, afin d'éviter toute résonance de la molécule avec le forçage périodique sous influence de la viscosité, il est nécessaire d'étudier la réponse fréquentielle d'une paire de bases complètement découplée au reste du réseau. Pour cette fin, nous faisons usage de la méthode d'équilibrage des harmoniques (MEH) pour rechercher une solution périodique à l'équation Eq. (2.71) sous la forme de l'équation Eq. (2.72). En prenant dans un premier temps la première harmonique (l'influence des autres harmoniques $H = 2, 3, \dots$ sera faite en intégrant directement par l'algorithme de Newton-Raphson les $(2H + 1)$ équations obtenues), l'équation Eq. (2.73) conduit au système algébrique non linéaire donnée par l'équation Eq. (2.74). La recherche des inconnues $B_{0,n}$, $C_{1,n}$ et $S_{1,n}$ permet d'avoir la réponse en amplitude de la paire de base en question en fonction de la fréquence Ω telle que donnée à l'équation Eq. (2.76).

Pour chaque valeur de $B_{0,n}$ solution de l'équation algébrique Eq. (2.75), il devient possible d'obtenir $C_{1,n}$ et $S_{1,n}$ [voir Eq. (C.2), et Eq. (C.3) de l'annexe C], et par conséquent, l'amplitude extrême \mathcal{A} au fur et à mesure que Ω varie. Ces résultats sont reportés à la figure 49 où le panel (a) met en exergue l'influence du nombre d'harmonique sur l'épine dorsale de la résonance. Ces courbes sont obtenues en résolvant les systèmes d'équations Eq. (2.74) [$H = 1$], Eq. (C.5) [$H = 2$], Eq. (C.6) [$H = 3$], Eq. (C.7) [$H = 4$], ainsi que celle correspondant à $H = 5$ pour $F_0 = 0$ et $\Gamma = 0$. Il est observé sur cette figure 49(a) qu'à partir de $H = 4$, l'épine dorsale de résonance reste quasi-identique. Ainsi, pour toutes les courbes de résonance à venir, nous fixons le nombre d'harmoniques à $H = 5$. Le panel (b) de cette figure 49 fait une comparaison entre la solution analytique (courbe en trait fort) prédite par la MEH, et la solution numérique (courbe en cercle) obtenue en résolvant directement l'équation Eq. (2.71) par la méthode de tir utilisant l'algorithme de Runge-Kutta d'ordre quatre (RK4), pour différentes valeurs de l'intensité de la force excitatrice. La courbe en gris des panels (a) et (b) correspond à la fréquence de résonance Ω_r de la paire de base [$\Omega_r = \sqrt{\alpha_1}$], tandis que la courbe en vert, obtenue en résolvant le système donné par la MEH avec $H = 5$ et pour $(\Gamma, F_0) = (0, 0)$ est l'épine dorsale de la courbe de résonance. Notons que le comportement de cette épine dorsale de résonance est dû à la compétition entre les termes non linéaires Y_n^2 et Y_n^3 . En effet, lorsque le terme quadratique (respectivement cubique) l'emporte sur le terme cubique (respectivement quadratique), l'épine dorsale de la résonance est déviée vers la gauche (respectivement vers la droite). Il est toutefois à noter que pour certaines valeurs de F_0 l'orbite périodique de cette paire de base est instable au sens de Floquet comme l'indiquent les panels (c) et (d) de la figure 49, où les courbes en rouge sont des amplitudes instables tandis celles en bleu sont des amplitudes stables. Les courbes à l'intérieur du panel (d) représentent la projection des valeurs propres de la matrice de Monodromie sur le cercle unité, confirmant ainsi les zones stables/instables de l'amplitude de résonance. Les panels (e) et (f) quant à eux donnent une comparaison des valeurs propres obtenues par la matrice de monodromie à celles obtenues au moyen de la matrice de Hill (voir annexe D pour détails de calculs), pour les paramètres suivants : panel (e) : $\Omega = 1.305$, $\mathcal{A} = 0.6624$; panel (f) : $\Omega = 1.394$, $\mathcal{A} = 0.973$. Ces panels confirment effectivement la convergence des valeurs propres de la matrice de Hill de celles de la matrice de monodromie.

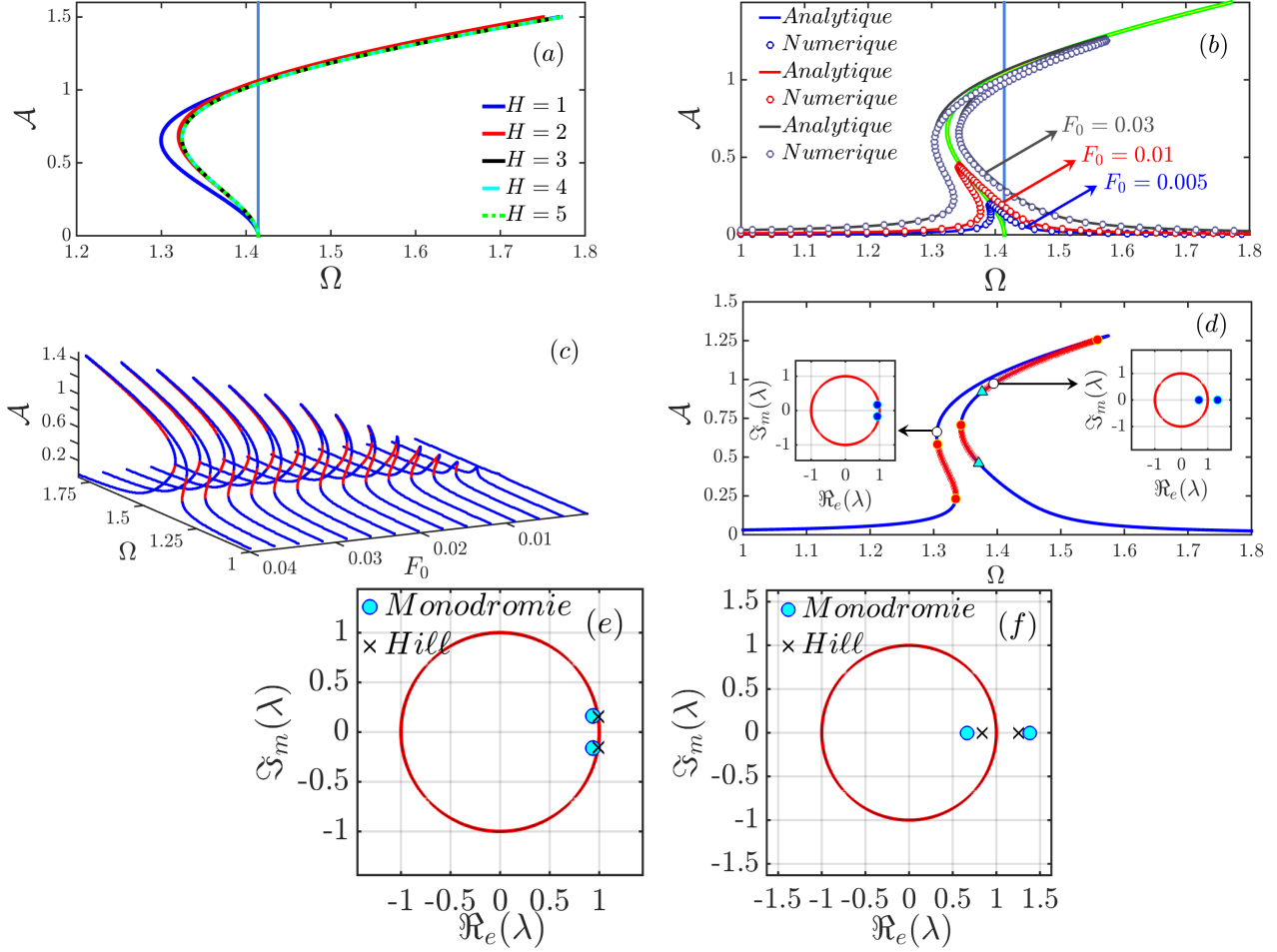


Figure 49: Panel (a) : influence du nombre d'harmoniques sur l'épine dorsale de résonance, (b) : amplitude extrême de la dynamique d'une paire de bases découplées en fonction de la fréquence Ω . Les courbes en traits correspondent aux solutions analytiques données par l'équation Eq. (2.76), tandis que celles en cercle sont obtenues en résolvant numériquement l'équation Eq. (2.71). Panel (c) : influence de F_0 sur les corubes de résonance et sur leurs stabilité orbitale, avec les zones de couleur bleue stables et celles de couleur rouge instables. Panel (d) : illustration des zones instables de l'amplitude de résonance par projection des valeurs propres de la matrice de monodromie sur le cercle unité. Panels (e) et (f) : convergences des valeurs propres issues de la matrice tronquée de Hill (voir équation Eq. (D.9) de l'annexe D) par rapport à celles obtenues au moyen de la matrice de monodromie.

Cette figure 49 est cruciale car elle permet de bien choisir la fréquence Ω de la force périodique qui n'induirait pas les phénomènes d'amplitudes extrêmes ainsi que des sauts d'amplitude survenant à la résonance. Ainsi, la valeur de Ω à considérer dans les développements à venir sera fixée à $\Omega = 1.2$ lorsque cela sera nécessaire.

Il est bien connu que tout système dynamique non linéaire dissipatif soumis à une excitation périodique peut exhiber un comportement régulier ou chaotique en fonction du choix des paramètres. Dès lors, il est question de savoir si la paire de bases découplée peut produire un comportement chaotique. Tenant compte du fait que F_0 influence considérablement la dynamique du système [voir panels (b) et (c) de la figure 49], il sera judicieux de voir son impact lorsque ses valeurs deviennent de plus en plus importantes.

La figure 50 donne la représentation du diagramme de bifurcation d'une paire de bases azotées découplée en fonction de l'amplitude de la force périodique F_0 [voir panel (a)] ainsi que ses exposants de Lyapunov λ_1 et λ_2 correspondant [panel (b)], calculés à partir de l'équation Eq. (2.119). Cette figure nous montre qu'il existe certaines valeurs de F_0 pour lesquelles la dynamique de la cellule unité sélectionnée exhibe un comportement périodique/chaotique. Cette assertion est confirmée tour à tour par l'exposant de Lyapunov λ_1 positif du panel (b), par le nombre de périodes élevé du panel (c) et par la densité des points interceptant le portrait de phase de façon stroboscopique à la période $\tau_n = 2\pi n/\Omega$ du panel (e), avec $F_0 = 7.4$. Le panel (d) quant à lui montre l'intersection du portrait de phase avec le plan de Poincaré \mathcal{P} (zone rectangulaire de couleur verte) localisé en $Y = 1$, où les courbes de couleurs bleue, rouge et rose sont obtenues respectivement pour $F_0 = 5.78(1T)$, $F_0 = 6.5(2T)$ et $F_0 = 6.87(4T)$. Le panel (f) donne de façon globale, le nombre de périodes caractérisant le comportement de la dynamique d'une paire de bases azotées, en fonction des variables F_0 et Ω .

Connaissant le comportement chaotique/périodique de la paire de bases azotées isolées, la prochaine étape consiste à explorer la dynamique du réseau tout entier lorsque cette paire de bases est ajoutée comme une impureté. Pour cela, les nouveaux coefficients du potentiel de Morse donnés par l'équation Eq. (2.77) sont utilisés, où n_0 est l'indice de localisation de l'impureté.

Pour toutes les simulations numériques à venir, la fréquence de l'excitation périodique sera fixée à $\Omega = 1.2$ et les conditions aux limites libres seront utilisées [$Y_0 - Y_1 = 0$; $Y_{N+1} - Y_N = 0$]. Tel qu'il est observé à la figure 50, les valeurs de $F_0 = 8.0$ et de $\Omega = 1.2$ sont celles pour lesquelles la paire de bases azotées découplées exhibe une dynamique chaotique. Afin de pouvoir détecter le type de comportement [périodique, quasi-périodique ou chaotique] de la molécule d'ADN toute entière soumise à l'influence d'une impureté ponctuelle, il est plus pratique de mesurer la vitesse moyenne $\sigma(jT)$, ainsi que la moyenne de l'exposant de Lyapunov maximale $\langle \lambda_{max} \rangle$ de ces paires de bases à des instants égaux aux multiples de la période $T = 2\pi/\Omega$ de la force excitatrice donnée par :

$$\begin{aligned} \sigma(jT) &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{n=N} \dot{Y}_n(jT), \\ \langle \lambda_{max} \rangle &= \frac{1}{n_p T} \sum_{j=1}^{n_p} \left\{ \ln \left[\sqrt{\sum_{n=1}^{n=N} \left(\delta \dot{Y}_n^2(jT) + \delta Y_n^2(jT) \right)} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

avec n_p comptant pour le nombre total de périodes, $\delta \dot{Y}_n(jT)$ et $\delta Y_n(jT)$ sont calculés au moyen de

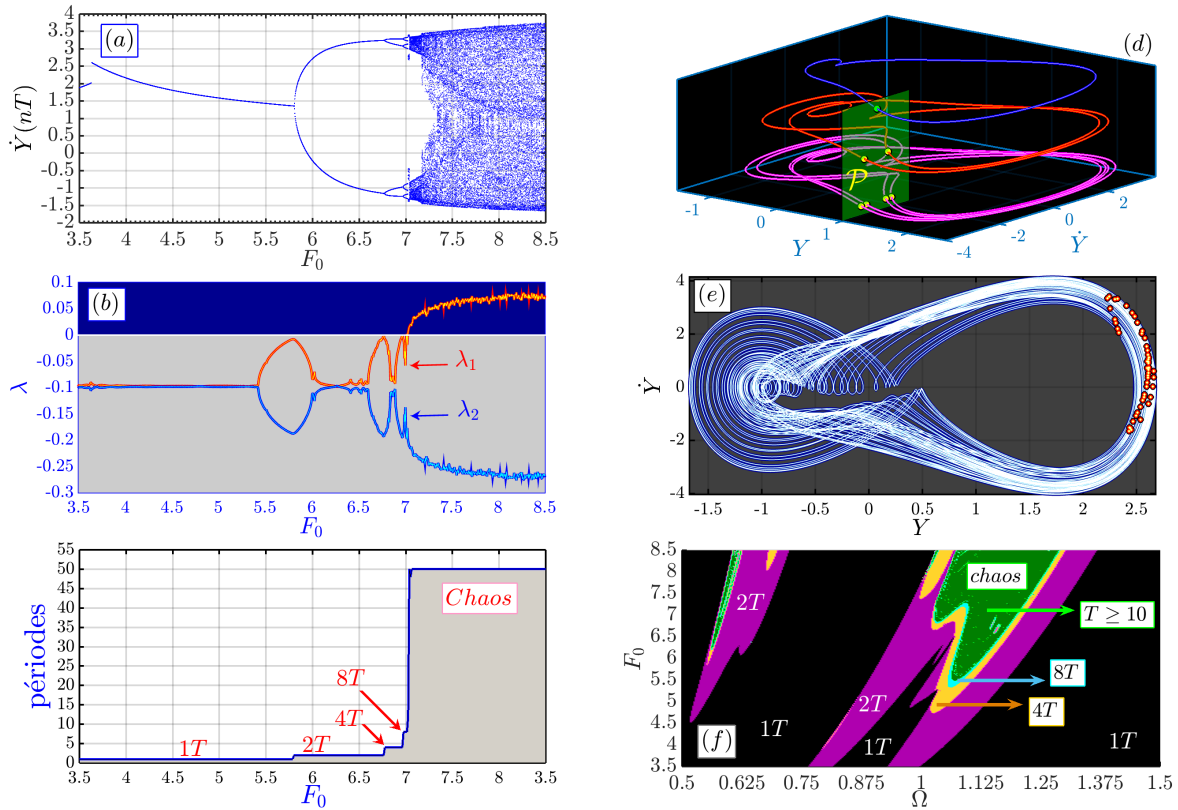


Figure 50: Diagramme de bifurcation d'une paire de bases découplées [panel (a)], ses exposants de Lyapunov correspondant [panel (b)] ainsi que l'influence du nombre de périodes de la réponse du système [panel (c)] en fonction de F_0 . Panels (d) : intersection des portraits de phase obtenus respectivement pour $F_0 = 5.78$ (courbe de couleur bleue de période $1T$), $F_0 = 6.5$ (courbe de couleur rouge de période $2T$), $F_0 = 6.87$ (courbe de couleur rose de période $4T$) avec le plan de Poincaré \mathcal{P} localisé en $Y = 1$ (zone rectangulaire de couleur verte). Panel (e) : illustration du comportement chaotique de la paire de bases azotées dans le portrait de phase, avec $F_0 = 7.4$. Panel (f) : carte 2D montrant la distribution du nombre de périodes du système en fonction de F_0 et Ω .

l'équation Eq. (2.118).

La figure 51 donne les résultats issus de la simulation numérique moyennant l'usage de l'algorithme de RK4 à l'équation Eq. (2.58) sur un échantillon de $N = 21$ paires de bases azotées. Le temps total de simulation est fixé à $\tau_f = 40T$ et les mesures sont effectuées après le régime transitoire $\tau_{trans} \approx 30T$. Les panels (a) et (d) de cette figure 51 représentent le bassin de stabilité dans le plan (F_0, μ) , localisant les zones où la chaîne exhibe un comportement périodique/chaotique. Ces panels correspondent respectivement aux cas où la paire de base azotée de l'impureté localisée au site n_0 est soumise à un potentiel de Morse à faible énergie de dissociation [(a) : $V_{M,1} = 0.8D(e^{-0.8ay_n} - 1)^2$], ou à forte énergie de dissociation [(b) : $V_{M,2} = 1.2D(e^{-1.2ay_n} - 1)^2$]. Le comportement périodique/chaotique est justifié car pour une valeur fixe de l'amplitude du forçage périodique ($F_0 = 8.0$), la vitesse moyenne $\sigma(jT)$ présente un diagramme de bifurcation typique des systèmes périodiques/chaotiques. En effet, pour le cas du potentiel $V_{M,1}$, il est clairement observé à la figure 51(b) que le couplage des paires de bases azotées n'inhibe pas le comportement chaotique de la paire de base azotée étudiée précédemment. Il est également observé que lorsque le potentiel de Morse n'est pas assez profond, la dynamique globale de la chaîne sous l'influence de l'impureté exhibe deux zones à réponse quasi-périodique [obtenues pour $0.399 \leq \mu \leq 0.921$ et $1.152 \leq \mu \leq 1.272$] ainsi que des zones chaotiques pour les autres valeurs de μ , tel que confirmé par l'exposant de Lyapunov de la figure 51(c). Par ailleurs, lorsque ce potentiel est assez profond, la chaîne a un comportement chaotique [voir figures 51(e) et (f)] pour $\mu \in \{[0.399, 0.623]; [0.783, 1.188]; [1.28, 1.44]\}$ et quasi-périodique pour tout autre valeurs de μ .

Afin de vérifier les résultats de la figure 51, nous avons représenté pour un choix convenable de μ , l'évolution spatio-temporelle du réseau à des instants $\tau_j = 2\pi j/\Omega$ ($j = 0, 1, 2, \dots, 120$), ainsi que les exposants de Lyapunov correspondants.

La figure 52 donne les différents résultats obtenus. Elle confirme l'impact d'une impureté ponctuelle localisée au site n_0 sur la dynamique globale de la molécule d'ADN. En effet, la représentation stroboscopique montre que l'impureté peut conduire à la formation d'un mode non intrinsèquement localisé stationnaire de type « dark » ou de type « pulse », conservant sa forme au cours du temps [voir panels (a) et (e) de la figure 52]. Ces modes localisés induisent un comportement régulier de la molécule puisque les exposant de Lyapunov calculés à partir de l'équation Eq. (2.119) sont en moyenne négatifs lorsque τ_j devient de plus en plus grand [voir panels (b) et (f) de la figure 52]. Toutefois, pour certaines valeurs de μ cette impureté induit une dynamique chaotique de toute la molécule tel qu'il est observé sur les panels (c) et (g) de la figure 52, confirmé par leurs exposant de Lyapunov qui sont en moyenne positif [voir panels (d) et (h) de la figure 52]. Notons que le comportement régulier ou irrégulier de la molécule d'ADN ne dépend pas de la position de l'impureté dans le réseau. Ce comportement dépend plutôt de la différence de densité des liaisons hydrogènes entre celle du potentiel de Morse de l'impureté et le reste du réseau car, une impureté placée en bout de chaîne conduit également à une dynamique régulière/chaotique de la macromolécule d'ADN.

3.3.4 Discussion

La plupart des études analytiques consacrées à la compréhension des systèmes discrets dissipatifs non linéaires, dont les BDs sont construit par séparation de la dynamique spatiale de celle temporelle, sont généralement menées sur des modèles comportant des potentiels anharmoniques à

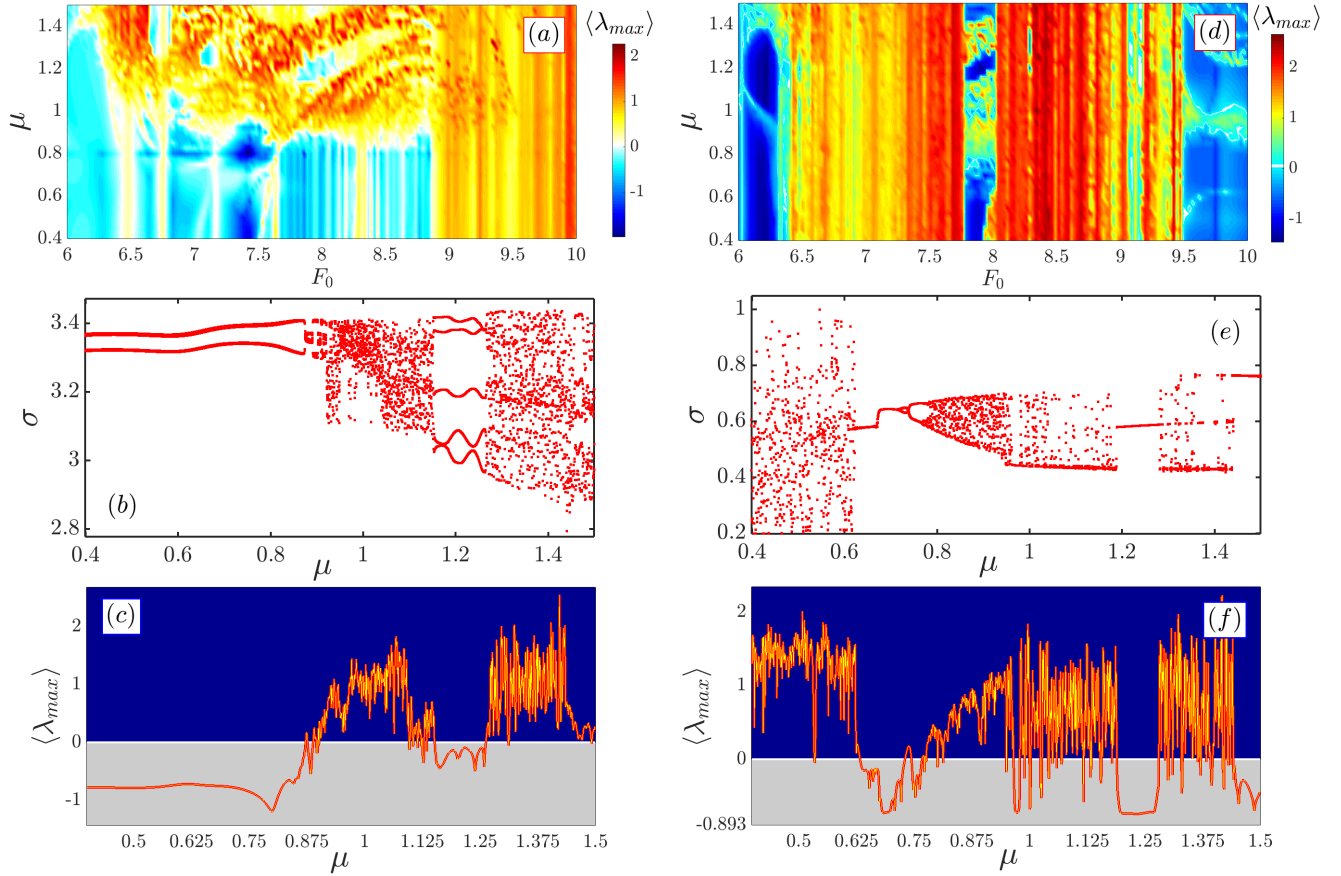


Figure 51: Bassins de stabilité dans le plan (F_0, μ) délimitant le comportement périodique/quasi-périodique ou chaotique du réseau lorsque l'impureté localisée en n_0 , a respectivement les potentiels de Morse $V_{M,1} = 0.8D(e^{-0.8ay_n} - 1)^2$ [panel (a)] et $V_{M,2} = 1.2D(e^{-1.2ay_n} - 1)^2$ [panel (d)]. Les panels (b) et (c) donnent respectivement le diagramme de bifurcation ainsi que l'exposant de Lyapunov correspondant donné par l'équation Eq. (3.7) en fonction de μ pour $F_0 = 8.0$ et $V_M = V_{M,1}$. Il en est de même des panels (e) et (f) obtenu pour $V_M = V_{M,2}$.

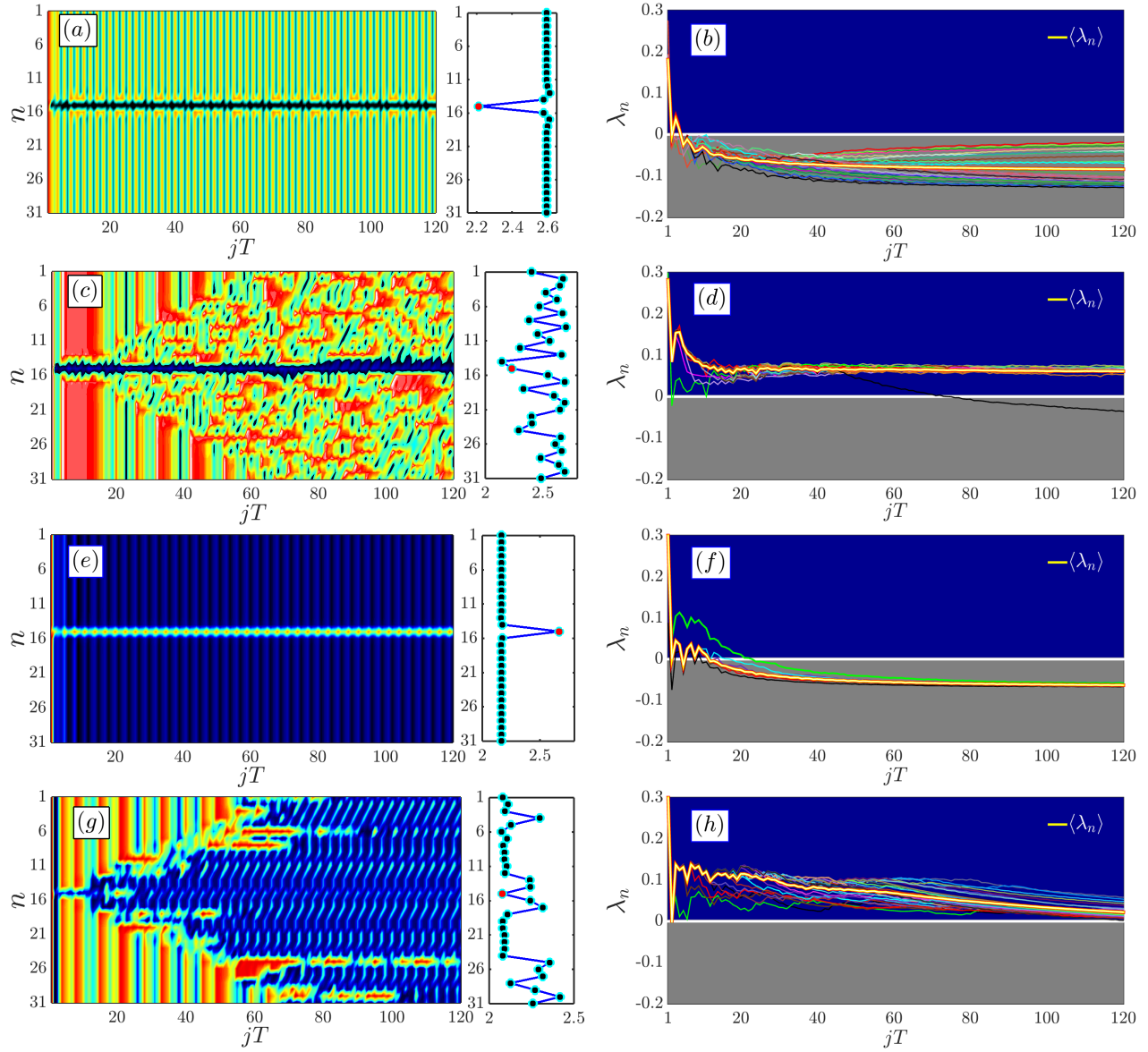


Figure 52: Évolution spatio-temporelle suivie des exposants de Lyapunov correspondants, montrant le comportement chaotique et régulier d'un réseau constitué de $N = 31$ paires de Bases azotées couplées entre-elles en présence d'une impureté. Panels (a) et (b) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 0.8(a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.215(a, D)$; panels (c) et (d) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = (a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.215(a, D)$; panels (e) et (f) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.2(a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 0.688(a, D)$; panels (g) et (h) : pour $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.378(a, D)$, pour $n = n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.2(a, D)$. Ces coefficients du potentiel de Morse sont pris à partir des figures 51(b) et 51(e).

faibles interactions, des potentiels de site non linéaires ou des potentiels induisant des dispersions non linéaires [179–184]. Faisant usage de la technique donnée à la référence [181], nous avons identifié plusieurs branches correspondant chacune à une configuration précise du mode localisé. Les MLs construits au moyen de cette technique ont des fréquences dominantes qui sont pour la plupart en dehors de la bande des phonons, telle que prévu par la théorie d’existence de ces types d’ondes [185, 186]. Il est à noter que cette technique de découplage de la dynamique temporelle de celle spatiale était généralement appliquée dans les systèmes discrets n’ayant pas dispersion linéaire, et donc pas de bande de phonon [179, 181]. Ce qui n’est pas le cas dans la présente étude. À côté de cette méthode de séparation des variables, les MLs discrets dans ce travail ont également été construits par la méthode de tir couplée à celle de la limite anti-continue. Cette méthode est purement numérique et a l’avantage de générer [lorsque cela est possible] les modes localisés du réseau discret originel avec une très grande précision. Généralement, la recherche des modes localisés dans le modèle de JB non dissipatifs est faite soit au moyen de l’approximation des milieux continus [86], soit par l’approximation onde rotative [89].

Il a été observé aussi bien dans la ligne électrique non linéaire dissipative [221, 222] que dans un réseau de pendules couplés [223, 224] soumis à une excitation périodique, que les impuretés peuvent permettre de contrôler les modes localisés. Ces imperfections dans le réseau modifient la réponse fréquentielle du système [225–227]. Comparativement aux travaux précédemment cités, nous démontrons dans le présent travail qu’une impureté ponctuelle localisée en un site peut produire soit des modes non intrinsèquement localisés, soit des motifs issus d’une désynchronisation spatio-temporelle du réseau provenant de son irrégularité. Ainsi, la présence combinée de l’impureté et de l’excitation périodique peut être utilisée comme paramètre de contrôle. Il est à noter que la réponse fréquentielle d’un réseau non linéaire homogène soumis à une excitation périodique et à la viscosité du milieu a été étudiée dans les références [228–231]. Toutefois, les ondes discrètes de ces études ne furent pas exponentiellement localisées, certainement à cause du phénomène de résonance avec le mode des phonons [201].

L’étude des MLs dans l’ADN sous influence de la viscosité et du forçage périodique a déjà été menée au moyen de l’approche des bifurcations et des simulations numériques dans le modèle anharmonique de Peyrard-Bishop-Dauxois (PBD) [129–132]. Cependant, ce modèle a été modifié par Joyeux et Buyukdagli (JB) afin de rendre finie l’énergie d’empilement entre les paires de bases azotée [77, 78], ce qui leur a permis d’améliorer la précision des courbes de dénaturation, en les rapprochant davantage des données expérimentales. Dès lors, il a été judicieux d’analyser l’existence et la stabilité des MLs dans ce nouveau modèle dans un environnement dissipatif et forcé, ainsi que le comportement de sa réponse fréquentielle. Il est bien connu que la présence d’une impureté dans l’ADN peut conduire au piégeage, à la réflexion ou à la transmission partielle d’un breather lors de sa propagation [165, 191]. Dans cette étude, nous démontrons qu’une impureté peut également être utilisée comme paramètre de contrôle dans une molécule d’ADN soumise à la viscosité du milieu et au forçage périodique venant du milieu externe car, elle peut inhiber ou induire une dynamique spatio-temporelle chaotique de la molécule d’ADN.

3.4 Effet de la longue portée sur la dynamique du modèle d'ADN de JB

Nous présentons dans cette section les résultats de l'analyse qui a été faite à la section §2.4 du chapitre 2. En effet, fort du constat selon lequel il puisse avoir déplacement des charges lors de la vibration des paires de bases azotés appartenant à des brins d'ADN différents, le Hamiltonien original proposé par JB [voir équation Eq. (1.37)] a été modifié [voir équation Eq. (2.78)] afin de prendre en compte ces phénomènes. Faisant usage des équations canonique de Hamilton, la dynamique de la macromolécule est régie par l'équation différentielle Eq. (2.79). Cette équation étant fortement non linéaire, elle est extrêmement difficile, voire quasi-impossible à résoudre analytiquement. Pour avoir accès à la réponse du système, nous avons procédé à des approximations relatives à l'amplitude de vibration des bases azotées au fond du potentiel de Morse, comme dans les sections §2.2 et §2.3, ce qui a permis de transformer l'équation Eq. (2.79) sous la forme Eq. (2.80). Il devient donc nécessaire d'explorer l'influence de l'interaction longue portée sur la dynamique de la molécule.

3.4.1 Analyse du mode linéaire

Cette analyse se base sur l'exclusion des termes non linéaires de l'équation Eq. (2.80), ce qui la rendra purement dispersive. La prochaine étape consiste dès lors à rechercher la condition pour qu'une onde plane puisse se propager dans ce milieu dispersif, en établissant la relation liant la fréquence de l'onde à son vecteur d'onde. En cherchant une solution onde plane sous la forme de l'équation Eq. (2.60) et en l'injectant dans l'équation linéarisée issue de l'équation Eq. (2.80), nous obtenons la relation entre la fréquence ω de cette onde plane et son vecteur d'onde k_0 tel que le montre l'équation Eq. (2.82).

La figure 53 montre l'influence du coefficient de longue portée \hat{J} sur la relation de dispersion ω du système. Sur cette figure [voir panels (a) à (e)], la courbe en interrompu est obtenue à partir de l'équation Eq. (2.82), tandis que la surface en filigrane [dont les couleurs vont du noir (valeur minimale) au rouge (valeur maximale) en passant par le bleu et le cyan] est celle obtenue en résolvant numériquement l'équation Eq. (2.79) avec les conditions initiales aléatoires de très faibles amplitudes dans un premier temps, et en effectuant la TFD-2 au moyen de l'équation Eq. (2.121c) de la solution obtenue dans un second temps. On peut remarquer sur cette figure 53 que la constante de couplage dipôle-dipôle façonne les régions des fréquences des bandes permises/interdites. En se limitant à la première zone de Brillouin ($k_0 \in [0, +\frac{\pi}{\ell}]$), on remarque que pour certaines valeurs de \hat{J} , la relation de dispersion a une pente positive [cas de la figure 53(a)], une pente négative [cas de la figure 53(e)] ou une alternance des pentes négatives et positives [cas des figures 53(b) – (d)]. Étant donné que la vitesse de groupe est intimement liée à la relation de dispersion, le signe de la pente de cette relation de dispersion renseigne sur le signe de la vitesse de groupe. L'équation Eq. (2.83) donne l'expression de la vitesse de groupe v_g du paquet d'ondes. Cette vitesse de groupe étant constituée de la différence de deux termes, elle pourrait être positive, négative ou nulle pour un choix convenable des paramètres du système. En effet, la variable v_g est nulle si $\hat{J} = \hat{J}_{cr}(k_0)$, positive si $\hat{J} < \hat{J}_{cr}(k_0)$ et négative si $\hat{J} > \hat{J}_{cr}(k_0)$, où $\hat{J}_{cr}(k_0)$ est la valeur critique du couplage dipôle-dipôle d'expression donnée par l'équation Eq. (2.84).

La variation de $\hat{J}_{cr}(k_0)$ dans le plan (k_0, \hat{J}) ainsi que les différents signes de la vitesse de groupe v_g sont représentés à la figure 54(a). Cette figure 54(a) confirme non seulement la prédiction faite à la figure 53(c) (notamment, pour $k_0\ell \in [0, 0.4\pi[$ la pente de la courbe est négative entraînant une vitesse de groupe négative, tandis que $v_g > 0$ pour $k_0\ell \in]0.4\pi, \pi]$ car la pente y est positive), mais aussi qu'il est possible d'avoir des ondes ayant une vitesse de groupe nulle lorsqu'on est hors du centre ($k_0\ell = 0$) et à la limite supérieure ($k_0\ell = \pi$) de la première zone de Brillouin.

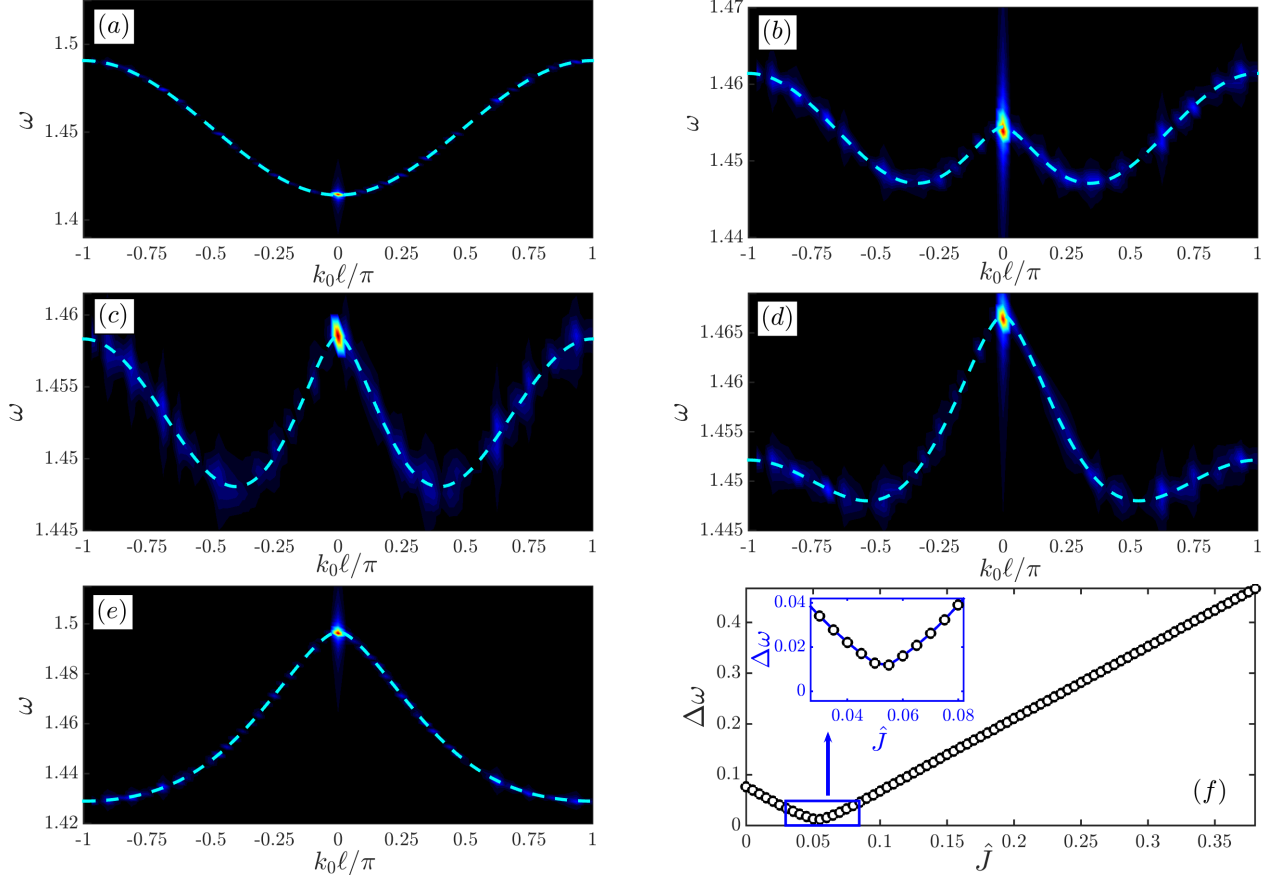


Figure 53: Relation de dispersion linéaire ω en fonction du vecteur d'onde $k_0 \in [-\frac{\pi}{\ell}, +\frac{\pi}{\ell}]$, pour différentes valeurs du coefficient de longue portée \hat{J} : (a) : $\hat{J} = 0$; (b) : $\hat{J} = 0.048$; (c) : $\hat{J} = 0.053$; (d) : $\hat{J} = 0.063$; (e) : $\hat{J} = 0.1$. Le panel (d) montre la variation de la bande des phonons en fonction de \hat{J} .

3.4.2 Analyse du mode non linéaire

L'équation Eq. (2.80) étant fortement non linéaire, elle est quasi-impossible à résoudre analytiquement. Cependant, une solution analytique peut être approchée au moyen de l'approximation semi-discrète [196–199]. En supposant que la solution de l'équation Eq. (2.80) est sous la forme donnée par l'équation Eq. (2.85) [ou sous la forme tronquée donnée par l'équation Eq. (2.86)], nous obtenons après insertion dans l'équation Eq. (2.80) et collecte des termes en $\varepsilon^j \mathbf{e}^{i\mathbf{k}\ell\mathbf{n}}$ [$\mathbf{j} = \mathbf{1}, \mathbf{2}; \mathbf{k} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}$], l'équation de Schrödinger non linéaire cubique donnée par l'équation Eq. (2.91). Les expressions des coefficients P et Q de cette équation sont données aux équation Eq. (2.92) et Eq. (2.93) respectivement. Ces coefficients sont très importants car leurs signes déterminent le type de solutions qui peuvent exister dans le système. En effet, il est bien connu que l'équation de SNL possède des

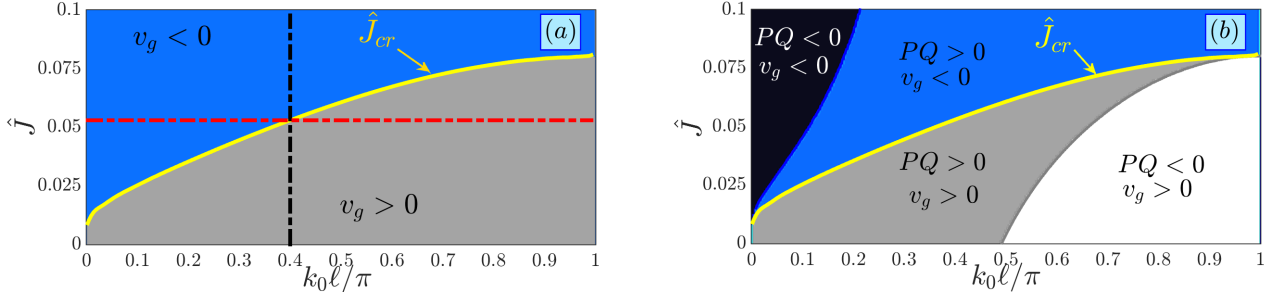


Figure 54: Carte donnant la variation du couplage dipôle-dipôle critique \hat{J}_{cr} en fonction de k_0 ainsi que les différents signes de la vitesse de groupe v_g [panel (a)] et du produit PQ [panel (b)].

solutions solitons dont les spécificités sont conditionnées par le signe du produit entre le coefficient de dispersion P et le coefficient de non linéarité Q . Particulièrement, si le produit $P \times Q > 0$, l'équation Eq. (2.91) admet pour solution les solitons de type pulses, tandis que lorsque le produit $P \times Q < 0$ elle admet des solutions de type dark [195, 196, 200]. La prise en compte de la longue portée montre que ces coefficients P et Q dépendent non seulement du vecteur d'onde k_0 mais également du coefficient \hat{J} .

Le signe du produit $P \times Q$ en fonction de k_0 et \hat{J} est présenté à la figure 54(b) où on peut y voir clairement que la constante de couplage dipôle-dipôle influence considérablement le type de solitons. Cette figure 54(b) montre qu'en l'absence, ou pour une très faible valeur de l'ILP ($\hat{J} \leq 0.01235$), le système comporte des solitons se propageant uniquement de la gauche vers la droite puisque $v_g > 0$. Lorsque $\hat{J} \in [0.01235, 0.08133]$, le système exhibe la propriété d'obtenir simultanément, moyennant la valeur du vecteur d'onde, les solitons pulses et dark se propagent aussi bien de la gauche vers la droite ($v_g > 0$) que de la droite vers la gauche ($v_g < 0$). Par contre, lorsque $\hat{J} > 0.08133$, seul les solitons se propageant uniquement de la droite vers la gauche existent dans le système. Ainsi, la longue portée enrichit la dynamique du système.

Tel que mentionné précédemment, le type de solution soliton de l'équation Eq. (2.91) dépend du signe du produit $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J})$. Lorsque $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) > 0$, l'équation Eq. (2.91) admet pour solution soliton :

$$F_1(\eta, \tau) = \sqrt{\frac{2P}{Q}} u_0 \operatorname{sech}[u_0(\eta - 2PL_0\tau)] e^{i[L_0\eta - P(L_0^2 - u_0^2)\tau]}, \quad (3.8)$$

où u_0 et L_0 sont des constantes d'intégration. En combinant les équations Eq. (3.8), Eq. (2.88), Eq. (2.87) et Eq. (2.86), la configuration du système est :

$$Y_n(\tau) = 2\varepsilon \sqrt{\frac{2P}{Q}} u_0 \operatorname{sech}[\varepsilon u_0(nl - (v_g + 2\varepsilon PL_0)\tau)] \times \left\{ \cos[(\varepsilon L_0 + k_0)nl - (\omega + \varepsilon L_0 v_g + \varepsilon^2 P(L_0^2 - u_0^2))\tau] \right. \\ \left. + 2\varepsilon^2 \left(\frac{2P}{Q} \right) u_0^2 \operatorname{sech}^2[\varepsilon u_0(nl - (v_g + 2\varepsilon PL_0)\tau)] \times \left\{ \frac{\mu}{2} + \delta \cos[2(\varepsilon L_0 + k_0)nl - 2(\omega + \varepsilon L_0 v_g + \varepsilon^2 P(L_0^2 - u_0^2))\tau] \right\} \right\}. \quad (3.9)$$

Par contre, lorsque $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) < 0$, l'équation Eq. (2.91) admet pour solution soliton :

$$F_1(\eta, \tau) = \sqrt{\frac{-2P}{Q}} u_0 \tanh[u_0(\eta - 2PL_0\tau)] e^{i[L_0\eta - P(L_0^2 + 2u_0^2)\tau]}, \quad (3.10)$$

et la solution du système est :

$$\begin{aligned}
Y_n(\tau) = & 2\varepsilon\sqrt{\frac{-2P}{Q}}u_0 \tanh[\varepsilon u_0(n\ell - (v_g + 2\varepsilon PL_0)\tau)] \times \{\cos[(\varepsilon L_0 + k_0)n\ell - (\omega + \varepsilon L_0 v_g + \varepsilon^2 P(L_0^2 + 2u_0^2))\tau]\} \\
& + 2\varepsilon^2\left(\frac{-2P}{Q}\right)u_0^2 \tanh^2[\varepsilon u_0(n\ell - (v_g + 2\varepsilon PL_0)\tau)] \times \left\{\frac{\mu}{2} + \delta \cos[2(\varepsilon L_0 + k_0)n\ell - 2(\omega + \varepsilon L_0 v_g + \varepsilon^2 P(L_0^2 + 2u_0^2))\tau]\right\}.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Afin de valider les solutions analytiques approchées précédentes, l'équation discrète Eq. (2.79) a été intégrée numériquement au moyen de l'algorithme de RK5 avec un pas temporel assez petit pour permettre la conservation de l'énergie totale du système. Les conditions aux limites périodiques ont été utilisées lors de cette résolution. Les conditions initiales $Y_n(\tau = 0)$ et $\dot{Y}_n(\tau = 0)$ sont obtenues au moyen des équations Eq. (3.9) [pour les solitons breathers] et Eq. (3.11) [pour les solitons dark]. Les autres paramètres nécessaires pour cette simulation numérique sont : $\varepsilon = 0.1$, $\ell = 1.0$, $u_0 = 1.0$ et $L_0 = 0$.

Les résultats de cette étude numérique sont reportés dans les figures 55 et 56. En ce qui concerne le cas de la figure 55, le coefficient de longue portée $\hat{J} = 0.02$ et le vecteur d'onde $k_0\ell = 0.735\pi$ conduisent à la formation d'un soliton dark se propageant de la gauche vers la droite [voir panel (a)] en suivant la ligne donnée par l'équation Eq. (2.97) [panel (d)] avec $\mathcal{V} \approx +0.0204$, $k_c = 0.735\pi$ et $\omega_c \approx 1.4695$. Les panels (b) et (c) comparent la solution analytique à la solution numérique aux instant $\tau = 2000$ et $\tau = 10000$ respectivement. L'analyse faite à la figure 55 peut être appliquée à la figure 56. Les coefficients $\hat{J} = 0.442$ et $k_0\ell = 0.3325\pi$ de cette figure induisent la formation d'un breather dark se propageant avec une vitesse de groupe négative [voir panel (a)] en suivant la ligne $\omega = \omega_c + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$ [voir panel (d)], avec $\mathcal{V} \approx -0.2541$, $k_c = 0.3325\pi$ et $\omega_c \approx 1.5531$. Les panels (b) et (c) de cette figure 56 comparent la solution analytique à la solution numérique aux instants $\tau = 300$ et $\tau = 600$ respectivement. Ces figures, obtenues lorsque $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) < 0$ valident l'expression analytique de la solution soliton de type dark donnée par l'équation Eq. (3.11).

Pour un choix convenable des paramètres \hat{J} et $k_0\ell$, il est possible que le signe du produit $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J})$ soit positif tel que prédit par la figure 54(b). Les figures 57 et 58 donnent les résultats obtenus lorsque $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) > 0$. Pour tous les panels de la figure 57, $\hat{J} = 0.02$, $k_0\ell = 0.45\pi$. Ces valeurs correspondent aux solitons pulses ayant des vitesses de groupe positives tel que prédit à la figure 54(b). Le panel (a) de cette figure 57 exhibe la propagation spatio-temporelle du breather dynamique tandis que le panel (b) compare la solution analytique et la solution numérique à l'instant $\tau = 1000$, montrant ainsi une bonne concordance entre les deux, validant une fois de plus la solution analytique donnée par l'équation Eq. (3.9). Cependant, étant donné que la condition initiale est issue d'une solution approximative, l'évolution spatio-temporelle du breather dynamique produira des ailes ou des queues d'oscillations [linéaires/non linéaires] de très faibles amplitudes [174]. Un zoom de la figure 57(b) permet d'observer les paquets d'ondes de très faibles amplitudes indexés par (1) et (2), se propageant en sens contraire du breather dynamique (3) [voir panel (c)]. Afin d'explorer en profondeur la nature [onde quasi-linéaire ou onde non linéaire] des signaux (1) et (2), nous avons effectué la TFD-2 du signal obtenu à la figure 57(a), car certaines informations cachées dans le domaine temporel (n, τ) peuvent être révélées dans le domaine fréquentiel de Fourier (k_0, ω) .

Il est bien connu qu'une onde dynamique évoluant dans l'espace réel (n, τ) se déplace dans l'espace de Fourier (k_0, ω) suivant la ligne donnée par l'équation Eq. (2.97) [201]. L'analyse de la figure 57(d)

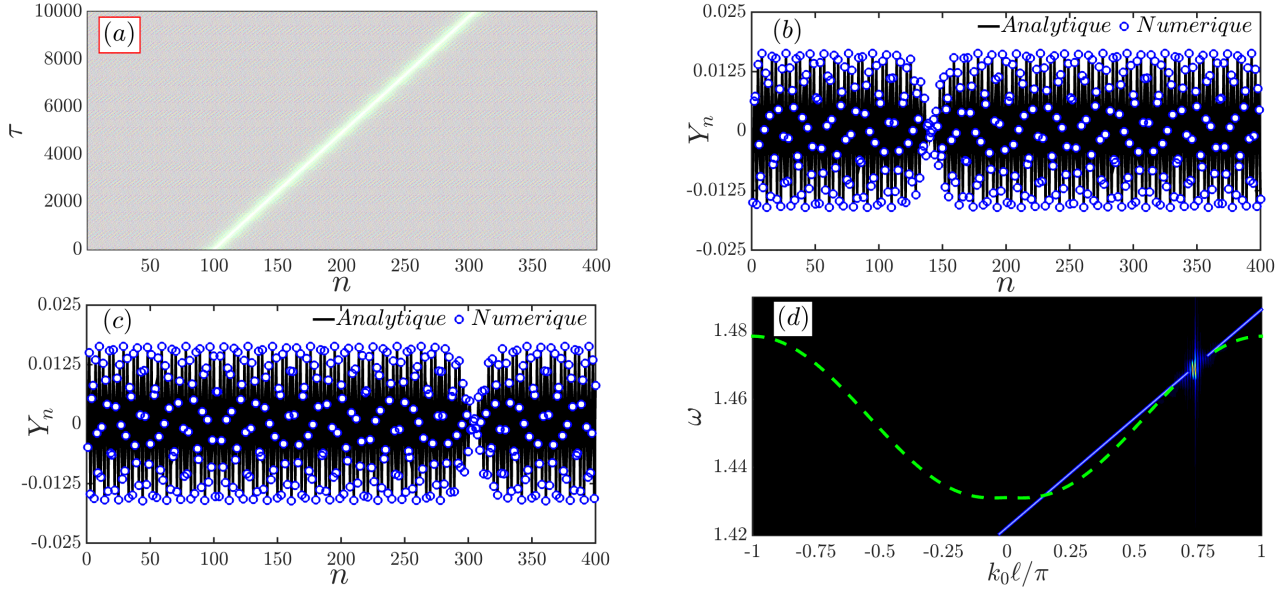


Figure 55: Évolution spatio-temporelle du breather dark se propageant avec une vitesse de groupe positive [panel (a)]. Panels (b) et (c) : comparaison entre la solution analytique [équation Eq. (3.11)] et la solution numérique [obtenue en résolvant l'équation Eq. (2.79) par RK5] à des instants $\tau = 2000$ et $\tau = 10000$ respectivement. Panel (d) : TFD-2 du signal obtenu au panel (a) dans l'espace (k_0, ω) où la courbe en trait interrompu de couleur verte est obtenue à partir de l'équation Eq. (2.82) et la ligne de couleur bleue est celle de l'équation Eq. (2.97), avec $\mathcal{V} \approx +0.0204$, $k_c = 0.735\pi$ et $\omega_c \approx 1.4695$. Pour tous ces panels, $\hat{J} = 0.02$.

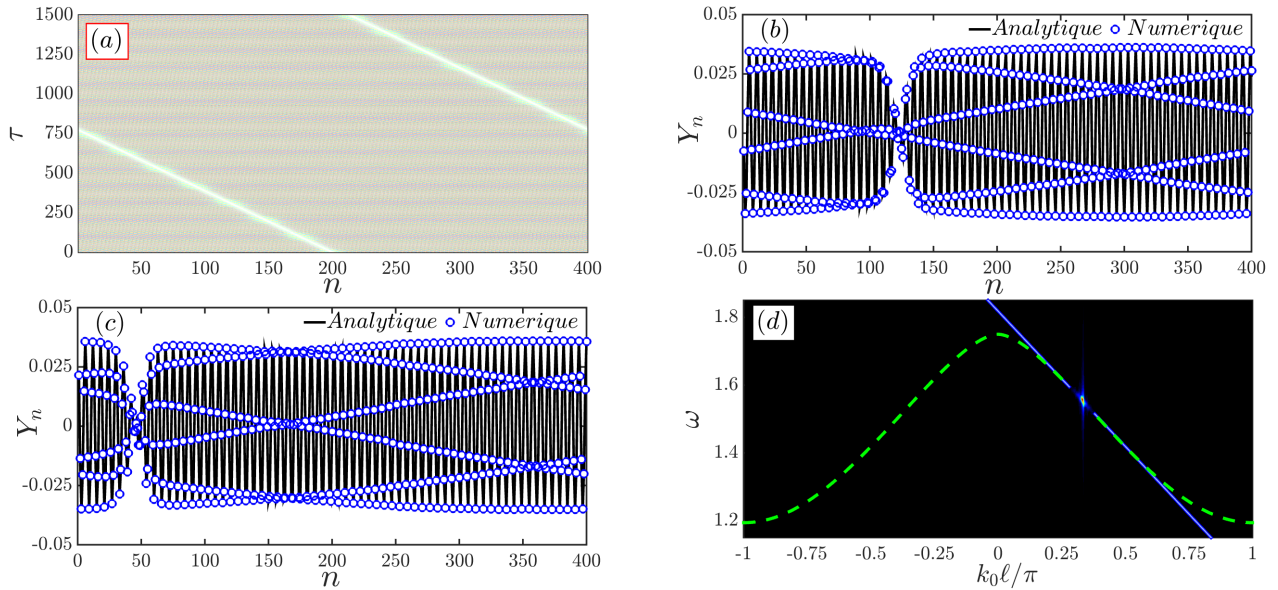


Figure 56: Évolution spatio-temporelle du breather dark se propageant avec une vitesse de groupe négative [panel (a)]. Panels (b) et (c) : comparaison entre la solution analytique [équation Eq. (3.11)] et la solution numérique [obtenue en résolvant l'équation Eq. (2.79) par RK5] à des instants $\tau = 300$ et $\tau = 600$ respectivement. Panel (d) : TFD-2 du signal obtenu au panel (a) dans l'espace (k_0, ω) où la courbe en trait interrompu de couleur verte est obtenue à partir de l'équation Eq. (2.82) et la ligne de couleur bleue est celle de l'équation Eq. (2.97), avec $\mathcal{V} \approx -0.2541$, $k_c = 0.3325\pi$ et $\omega_c \approx 1.5531$. Pour tous ces panels, $\hat{J} = 0.442$.

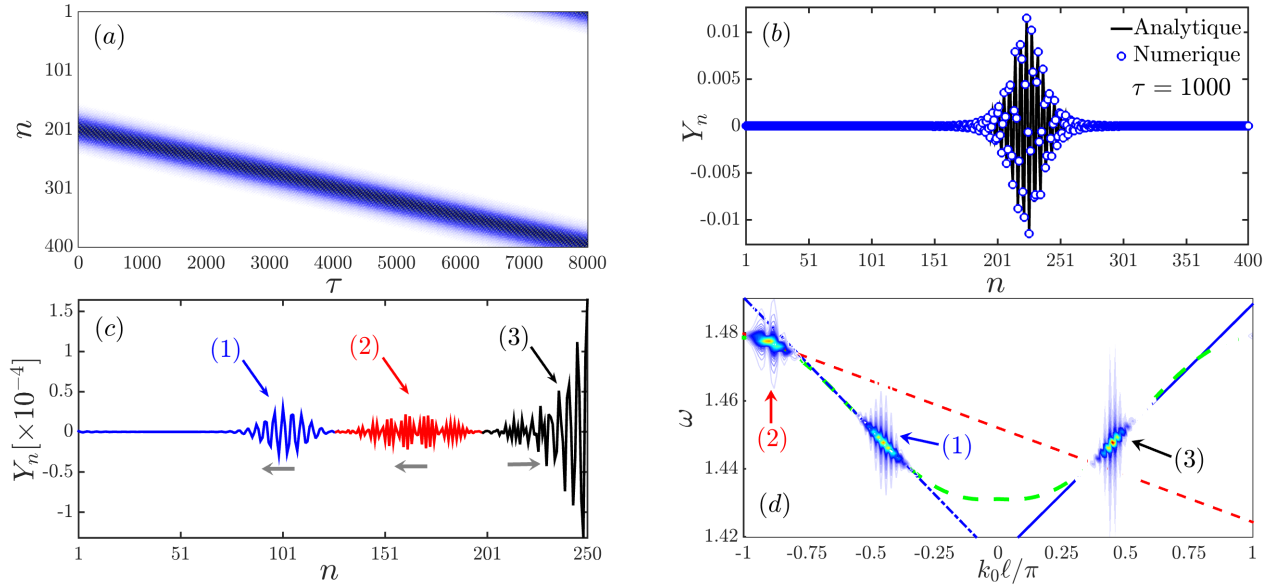


Figure 57: Évolution spatio-temporelle du breather [panel (a)] et comparaison entre la solution analytique et numérique [panel (b)] à l'instant $\tau = 1000$ pour $\hat{J} = 0.02$, $k_0 \ell = 0.45\pi$. Panel (c) : zoom de la solution numérique du panel (b) à l'instant $\tau = 4000$ et pour $n \in [1, 250]$. Les chiffres (1) et (2) du panel (c) indexent les ondes quasi-linéaires de très faibles amplitudes se propageant en sens contraire par rapport au breather indexé par le chiffre (3). Le panel (d) est la TFD-2 du signal dynamique obtenu au panel (a), où la courbe en vert est la relation de dispersion, tandis que les lignes sont obtenues par la formule $\omega^{(p)} = \omega_c^{(p)} + \mathcal{V}^{(p)}(k_0 - k_c^{(p)})$ [$p = 1, 2, 3$] avec $k_c^{(1)} = -0.45\pi$, $\omega_c^{(1)} \approx 1.448$, $\mathcal{V}^{(1)} \approx -2.4551 \times 10^{-2}$ [ligne interrompue de couleur bleue]; $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(2)} \approx 1.477$, $\mathcal{V}^{(2)} \approx -8.8176 \times 10^{-3}$ [ligne interrompue de couleur rouge]; $k_c^{(3)} = -k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(3)} = \omega_c^{(1)}$, $\mathcal{V}^{(3)} = -\mathcal{V}^{(1)}$ [ligne en trait fort de couleur bleue]. Afin d'observer clairement les ondes (1) et (2) au panel (d), elles ont été magnifiées par un facteur de 500.

montre que la vitesse du breather [$\mathcal{V}^{(3)} \approx 2.4551 \times 10^{-2}$] est quasiment identique à la vitesse de groupe [$v_g \approx 2.4603 \times 10^{-2}$] de l'onde donnée par l'équation Eq. (2.98a), et se propage suivant la ligne $\omega^{(3)} = \omega_c^{(3)} + \mathcal{V}^{(3)}(k_0 - k_c^{(3)})$ (voir ligne en trait fort de couleur bleue) avec $\omega_c^{(3)} \approx 1.448$ et $k_c^{(3)} = 0.45\pi$. Une analyse profonde de l'onde (1) de la figure 57(c) révèle qu'elle est une onde non linéaire de très faible amplitude se propageant symétriquement mais en sens contraire par rapport au breather (3). En effet, la TFD-2 du signal (1) montre qu'il suit la ligne $\omega^{(1)} = \omega_c^{(1)} + \mathcal{V}^{(1)}(k_0 - k_c^{(1)})$ [voir ligne en trait interrompu de couleur bleue] avec $\omega_c^{(1)} \approx 1.448$, $k_c^{(1)} = -0.45\pi$ et $\mathcal{V}^{(1)} \approx -2.4551 \times 10^{-2}$. En effectuant une analyse similaire au signal (2) nous observons qu'il s'agit d'une onde quasi-linéaire de très faible amplitude qui se propage suivant la ligne $\omega^{(2)} = \omega_c^{(2)} + \mathcal{V}^{(2)}(k_0 - k_c^{(2)})$ [voir ligne en trait interrompu de couleur rouge] avec $\omega_c^{(2)} \approx 1.477$, $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$ et $\mathcal{V}^{(2)} \approx -8.8176 \times 10^{-3}$. Il est à noter que le signal (1) se propage en gardant sa forme et sa vitesse quasi-constante tandis que l'onde (2) s'étale et disparaît pour le même temps. La même observation est faite à la figure 58(d),

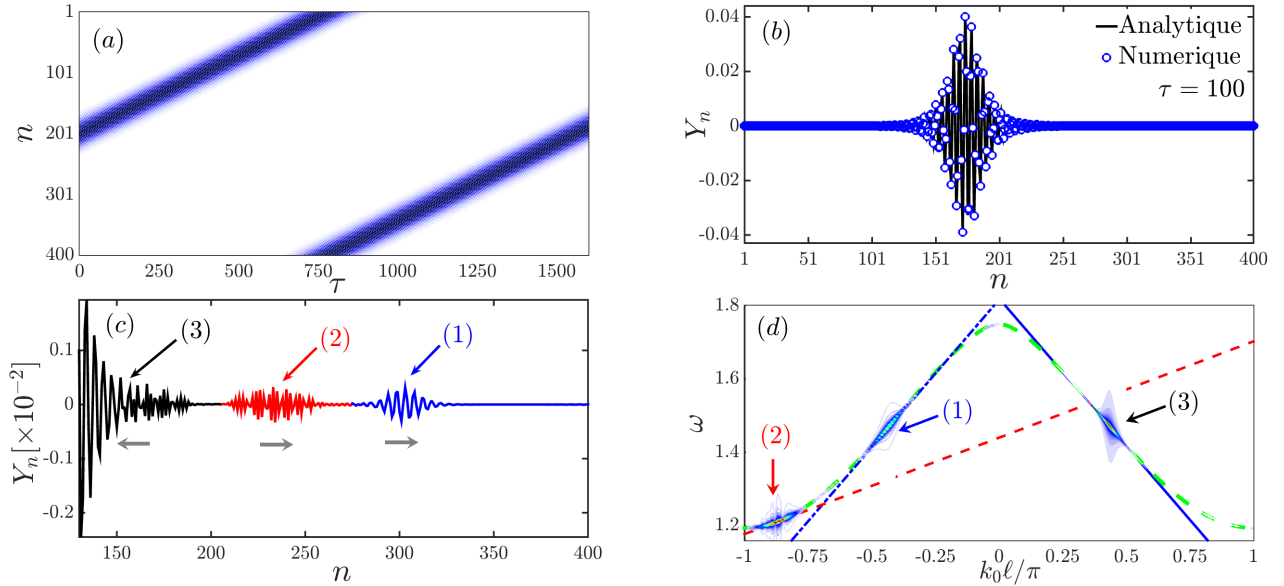


Figure 58: Évolution spatio-temporelle du breather [panel (a)] et comparaison entre la solution analytique et numérique [panel (b)] à l'instant $\hat{J} = 0.442$, $k_0 \ell = 0.4337\pi$. Panel (c) : zoom de la solution numérique du panel (b) à l'instant $\tau = 400$ et pour $n \in [130, 400]$. Les chiffres (1) et (2) du panel (c) indexent les ondes quasi-linéaires de très faibles amplitudes se propageant en sens contraire par rapport au breather indexé par le chiffre (3). Le panel (d) est la TFD-2 du signal dynamique obtenu au panel (a), où la courbe en vert est la relation de dispersion, tandis que les lignes sont obtenues par la formule $\omega^{(p)} = \omega_c^{(p)} + \mathcal{V}^{(p)}(k_0 - k_c^{(p)})$ [$p = 1, 2, 3$] avec $k_c^{(1)} = -0.4337\pi$, $\omega_c^{(1)} \approx 1.467$, $\mathcal{V}^{(1)} \approx +0.2562$ [ligne interrompue de couleur bleue]; $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(2)} \approx 1.212$, $\mathcal{V}^{(2)} \approx +8.3632 \times 10^{-2}$ [ligne interrompue de couleur rouge]; $k_c^{(3)} = -k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(3)} = \omega_c^{(1)}$, $\mathcal{V}^{(3)} = -\mathcal{V}^{(1)}$ [ligne en trait fort de couleur bleue]. Afin d'observer clairement les ondes (1) et (2) au panel (d), elles ont été magnifiées par un facteur de 75.

où la propagation du breather (3) suit la ligne $\omega^{(3)} = \omega_c^{(3)} + \mathcal{V}^{(3)}(k_0 - k_c^{(3)})$ (voir ligne en trait fort de couleur bleue) avec $\omega_c^{(3)} \approx 1.467$ et $k_c^{(3)} = 0.4337\pi$ et $\mathcal{V}^{(3)} \approx -0.2562$, tandis que $v_g \approx -0.2565$.

L'analyse effectuée à la figure 57(c) peut être transposée à la figure 58(c) où les paramètres de la direction de propagation de l'onde non linéaire (1) sont : $\omega_c^{(1)} \approx 1.467$, $k_c^{(1)} = -0.4337\pi$ et $\mathcal{V}^{(1)} \approx +0.2562$, tandis que ceux de l'onde quasi-linéaire (2) sont : $\omega_c^{(2)} \approx 1.212$, $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$ et $\mathcal{V}^{(2)} \approx +8.3632 \times 10^{-2}$. Notons qu'à cause de la différence d'amplitude entre les signaux (1) et (2) par rapport au signal (3), il est impossible de les observer directement dans le plan (k_0, ω) . Pour

remédier à cela, nous avons magnifié leurs amplitude par un facteur multiplicatif de 500 [cas de la figure 57(d)], et de 75 [cas de la figure 58(d)].

Il a également été observé que l'ILP influence la vitesse de propagation du breather. En effet, pour une valeur fixe du vecteur d'onde $k_0\ell = 0.4337\pi$, la vitesse du soliton dynamique décroît au fur et à mesure que $\hat{J} \rightarrow \hat{J}_{cr}(k_0)$ [voir figure 59(a)], tandis qu'elle croît pour $\hat{J} > \hat{J}_{cr}$ [voir figure 59(b)].

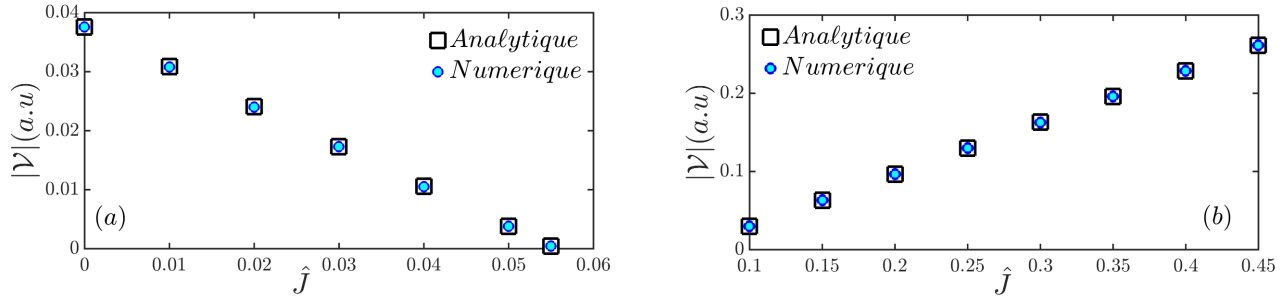


Figure 59: Variation de la vitesse \mathcal{V} du breather en fonction du coefficient de l'interaction longue portée \hat{J} . La vitesse analytique est la vitesse de groupe v_g [voir Eq. (2.83)], tandis que la vitesse numérique est obtenue au moyen de l'équation Eq. (2.98) après résolution de l'équation Eq. (2.79) par RK5. Panel (a) : $\hat{J} \in [0, \hat{J}_{cr}(k_0)]$, panel (b) : $\hat{J} \in [\hat{J}_{cr}(k_0), 0.45]$. Pour tous ces panels, $k_0\ell = 0.4337\pi$.

Tel qu'il a été mentionné à la section §2.4.4, la solution analytique donnée par l'équation Eq. (3.9) reproduit approximativement son profil à des instants $\tau' \approx \tau + qT_b$, mais translaté de sa position précédente de $n' \approx n \pm p$, où p, q sont des entiers et $T_b = 2\pi/\omega_b$ est sa période. Cette solution étant approximative, elle peut lors de sa propagation entrer en résonance avec la bande des phonons et produire des ailes ou des queues d'oscillations. Afin de vérifier si les ondes (1) et (2) des figures 57(c) et 58(c) se forment à partir d'un tel phénomène, nous supposons que la solution Eq. (3.9) obéit aux breathers (p/q) résonants [172] respectant l'équation Eq. (2.99). Cette résonance du breather avec l'onde plane permet d'obtenir après combinaison des équations Eq. (2.99) et Eq. (2.60) la relation donnée par l'équation Eq. (2.100), où m est un entier dont l'expression est établie à l'équation Eq. (2.101). Utilisant le couple de valeurs (k_0, ω) correspondant à la ligne de propagation du breather d'une part et la méthode d'approximation de Gauss-Newton d'autres part, il est possible d'avoir les entiers p, q et m associés au breather dynamique. Une fois que ces entiers ont été obtenus, il devient possible de déterminer [moyennant l'usage de l'équation Eq. (2.101)] toutes les autres valeurs de m issus de l'interaction du breather avec la bande des phonons.

La figure 60 met non seulement en exergue la TDF-2 des solutions dynamiques observées sur les figures 57(a) et 58(a), mais également les lignes d'intersections de la direction de propagation de ces breathers avec le mode des phonons. En s'intéressant au cas de la figure 60(a) par exemple, on constate que la direction du breather obtenue pour $m = -222$ [voir ligne de couleur blanche], intercepte la relation de dispersion pour $m = -232$ et $m = -242$ respectivement. Les points issus de cette intersection correspondent exactement aux coordonnées (k_0, ω) des ondes (1) [qui se propage en suivant la ligne de couleur jaune] et (2) [qui se propage en suivant la ligne en interrompue de couleur rouge] observées sur les figures 57(c) et 58(c). Ainsi, nous pouvons dire que ces ondes proviennent de la résonance du breather (3) avec le mode des phonons. A cause de la forte non linéarité du

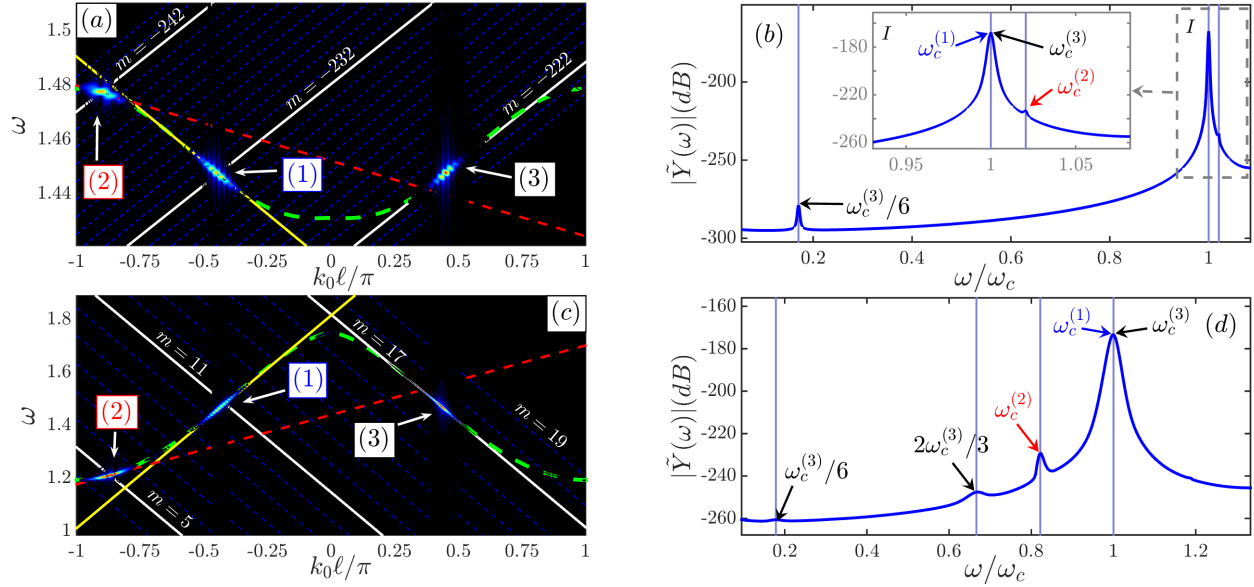


Figure 60: Panels (a) et (c) : transformation de Fourier [dans le plan (k_0, ω)] des ondes (1), (2) et (3) observée aux figures 57(c) et 58(c), combinée aux lignes d'intersections du breather (3) avec le mode des phonons. Les panels (b) et (d) sont des moyennes des résultats obtenus aux panels (a) et (c) dans la base des vecteurs d'ondes.

milieu de propagation, l'onde (3) lors de sa propagation va également générer des ondes ayant des fréquences égales à des multiples [ou à des fractions] de sa fréquence propre [voir figure 60(b) où on note la présence d'une onde de fréquence $\omega = \omega_c^{(3)}/6$ qui, vont à leurs tour résonner avec le mode des phonons [lignes en interrompu de couleur bleu]. L'analyse de la figure 60(a) s'applique également à la figure 60(c), où le breather (3) obtenu pour $m = 17$ entre en résonance avec le mode des phonons en $m = 11$ et $m = 5$ respectivement. Ce breather génère également lors de sa propagation des ondes de faibles amplitudes et de fréquences $\omega = \omega_c^{(3)}/6, 2\omega_c^{(3)}/3, \dots$ [voir figure 60(d)] interagissant avec le mode des phonons.

La carte obtenue à la figure 54(b) prédispose le système à une coexistence de solution soliton, ayant des caractéristiques antagonistes [soliton topologique ou non topologique] se propageant aussi bien avec des vitesses de groupes positives que négatives. En effet, pour $\hat{J} \in [0.01235, 0.08133]$, il est possible d'avoir simultanément des breathers pulses [ayant des vitesses de groupe positives, négatives ou nulles], ou des breathers dark de vitesses de groupe négatives/positives interagissant avec des pulses de vitesse de groupe négatives/positives. Afin de vérifier cela, nous avons simulé numériquement l'équation discrète Eq. (2.79) en prenant pour conditions initiales les solutions analytiques données par les équation Eq. (3.9) et Eq. (3.11).

Les résultats de cette simulation numérique sont présentés sur les figures 61 et 62. Ces figures confirment la prédiction donnée par la figure 54(b). En effet, il est observé à la figure 61 [qui concerne uniquement le cas $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) > 0$] la collision entre breather pulses se propageant respectivement avec des vitesses de groupe positives [panel (a)], des vitesses de groupe négatives [panel (b)] ou des vitesses de groupe de signes contraires [panel (c)]. Cette figure confirme également l'existence d'une onde stationnaire en dehors des limites de la première zone de Brillouin pour une valeur précise de $\hat{J}_{cr}(k_0)$. La figure 62, obtenue pour $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) < 0$ n'est pas du reste car confirme également l'existence simultanée de deux breathers de nature différentes se propageant soit

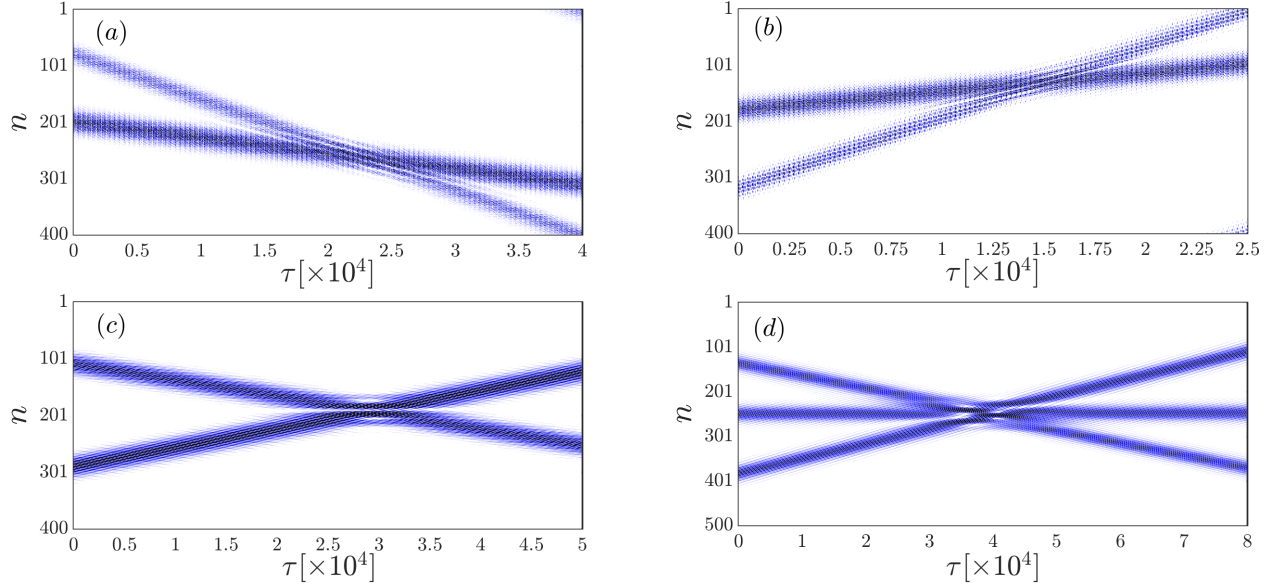


Figure 61: Propagation spatio-temporelle montrant la collision entre des breathers ayant des vitesses de groupe positives et/ou négatives. panel (a) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [obtenu pour $k_1^0 \ell = 0.620\pi$, $v_{g_1} = 8.072 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 8.327 \times 10^{-3}$] et le breather $Y_n^{(2)}(\tau)$ [obtenu pour $k_2^0 \ell = 0.454\pi$, $v_{g_2} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{max_2} = 1.602 \times 10^{-2}$]. Panel (b) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [$k_1^0 \ell = 0.344\pi$, $v_{g_1} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 1.788 \times 10^{-2}$.] et le breather $Y_n^{(2)}(\tau)$ [$k_2^0 \ell = 0.152\pi$, $v_{g_2} = -1.277 \times 10^{-2}$, $A_{max_2} = 1.035 \times 10^{-2}$]. Panel (c) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [$k_1^0 \ell = 0.454\pi$, $v_{g_1} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 1.602 \times 10^{-2}$] et le breather $Y_n^{(2)}(\tau)$ [$k_2^0 \ell = 0.344\pi$, $v_{g_2} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{max_2} = 1.788 \times 10^{-2}$]. Panel (d) : collision entre le breather $Y_n^{(1)}(\tau)$ [$k_1^0 \ell = 0.454\pi$, $v_{g_1} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{max_1} = 1.602 \times 10^{-2}$.], le $Y_n^{(2)}(\tau)$ [$k_2^0 \ell = 0.400\pi$, $v_{g_2} = 0$, $A_{max_2} = 1.721 \times 10^{-2}$] et le breather $Y_n^{(3)}(\tau)$ [$k_3^0 \ell = 0.344\pi$, $v_{g_2} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{max_2} = 1.788 \times 10^{-2}$]. Pour tous ces panels, la valeur du coefficient de longue portée est fixée à $\hat{J} = 0.053$ et il y a également concordance entre la solution analytique et la solution numérique.

dans le même sens [panel (a) et panel (b) où les deux breathers pulses et dark ont des vitesses de groupe positives et négatives respectivement], soit en sens contraire [panel (c)]. Il est à noter qu'il y a concordance entre les résultats de la simulation numérique et ceux de la solution analytique [panel (d)].

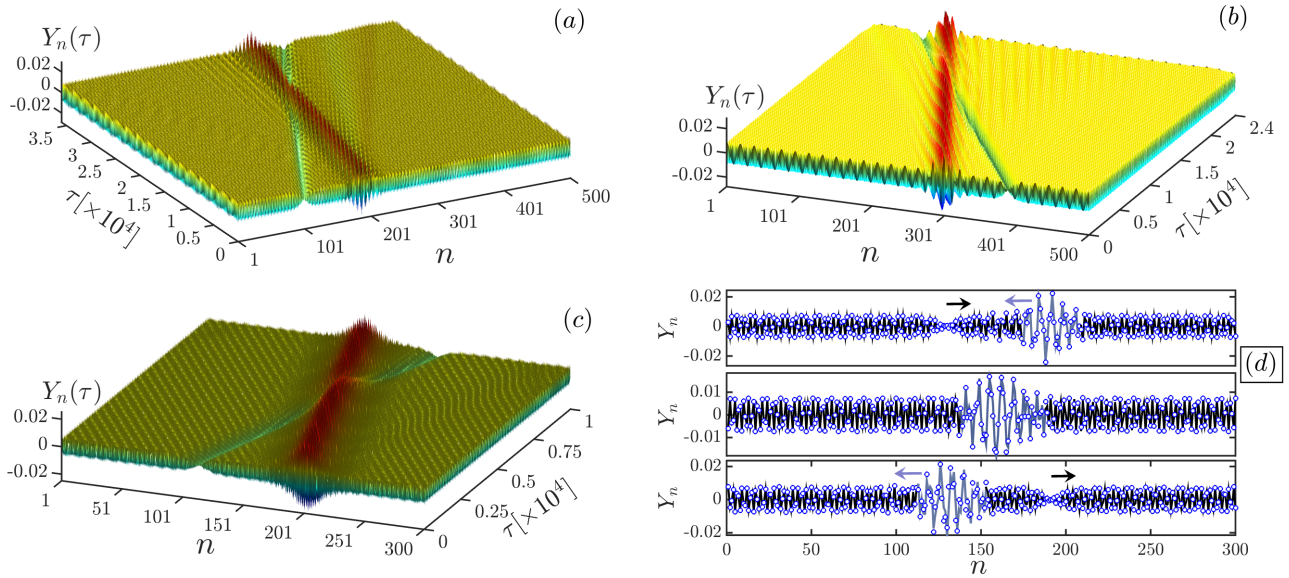


Figure 62: Propagation spatio-temporelle montrant la collision entre des breathers dark et pulse se propageant dans un même sens [panel (a) : de la gauche vers la droite, avec $k_1^0\ell = 0.466\pi$, $v_{g1} = 6.7 \times 10^{-3}$; $k_2^0\ell = 0.802\pi$, $v_{g2} = 3.0 \times 10^{-3}$]; [panel (b) : de la droite vers la gauche, avec $k_1^0\ell = 0.106\pi$, $v_{g1} = -8,6 \times 10^{-3}$; $k_2^0\ell = 0.27\pi$, $v_{g2} = -1.32 \times 10^{-2}$] ou en sens contraire [panel (c) : $k_1^0\ell = 0.735\pi$, $v_{g1} = 8.0 \times 10^{-3}$; $k_2^0\ell = 0.2887\pi$, $v_{g2} = -8.0 \times 10^{-3}$]. Le panel (d) montre la comparaison entre la solution analytique [courbe en trait de couleur noire] et la solution numérique [cercle de couleur bleue] de la courbe obtenue au panel (c) aux instants $\tau = 2000$, $\tau = 6000$ et $\tau = 10000$. Pour tous ces panels, $\hat{J} = 0.054$.

Les solitons breathers issus de l'équation Eq. (2.91) lorsque le produit $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) > 0$ sont celles qui modélisent le mieux l'ouverture locale de la molécule d'ADN lors des phénomènes de transcription ou de traduction [4, 194]. De ce fait, nous nous focaliserons dans la suite de cette thèse sur ces types de solitons.

3.4.3 Solution discrète exacte et analyse de la stabilité

Les solutions approchées données par les équations Eqs. (3.9) et (3.11) de l'équation non linéaire Eq. (2.80) ne correspondent pas exactement à la solution du problème discret donné par l'équation Eq. (2.79) car proviennent d'une méthode d'approximation. Toutefois, elles sont de bons candidats lorsqu'on recherche les solutions exactes du système différentiel originel. Il a été démontré que les solutions breathers de faibles amplitudes spatialement localisées décrivent le transfert de l'information dans l'ADN [4, 194]. Ainsi, les solutions solitons de faibles amplitudes estimées à la section §3.4.2 au moyen de l'approximation semi-discrète sont de bons profils initiaux que nous utiliserons pour rechercher les solutions exactes du réseau discret. Tel que mentionné précédemment, notre attention

sera focalisée sur la recherche des breathers discrets à profils non topologiques vérifiant l'équation :

$$Y_n(\tau) = Y_n \left(\tau + \frac{2\pi}{\omega_b} \right), \quad (3.12)$$

$$\lim_{|n| \rightarrow \infty} Y_n(\tau) \rightarrow 0,$$

où ω_b et $T_b = 2\pi/\omega_b$ représentent respectivement la fréquence et la période du breather. Notons que ces solutions doivent vérifier la condition de non résonance évoquée à la section §2.3.4, notamment $z \times \omega_b \neq \omega(k_0, \hat{J})$ [96, 97, 185], avec z un entier et $\omega(k_0, \hat{J})$ obtenue à partir de l'équation Eq. (2.82). Plusieurs méthodes permettant de rechercher les breathers discrets, solution de l'équation Eq. (2.79) existent dans la littérature. Dans cette section, nous utilisons l'une d'elle à savoir la méthode de Newton-Raphson couplée avec la méthode de tir [121]. Cette méthode est très efficace et permet d'obtenir des solutions très précises moyennant un choix adéquat du profil initial. Afin d'éviter la divergence de l'algorithme, la solution obtenue par l'ASD et donnée par l'équation Eq. (3.9) est utilisée comme profil initial, profil qui sera corrigé au fur et à mesure que $\tau \rightarrow T_b$.

Étant donné que les solutions de l'équation Eq. (3.12) sont stationnaires, le vecteur d'onde k_0 et le coefficient de longue portée \hat{J} doivent être choisis de manière à vérifier l'équation $v_g = 0$, où v_g est la vitesse de groupe donnée par l'équation Eq. (2.83). De plus, les solutions recherchées étant localisées avec des amplitudes exponentiellement décroissantes, les vecteurs d'ondes doivent avoir pour valeur $k_0\ell = 0$, $k_0\ell = \pi$ ou $k_0\ell \in \hat{J}_{cr}$, moyennant le produit $P(k_0, \hat{J}) \times Q(k_0, \hat{J}) > 0$. Tel que nous pouvons observer à la figure 53(f), l'interaction longue portée de type dipôle-dipôle impacte considérablement la bande des phonons. Par conséquent, \hat{J} devrait être choisi avec beaucoup d'attention afin d'éviter la résonance du BD avec ce mode des phonons.

Pour remplir la condition de non résonance, la fréquence ω_b du breather discret est choisie de telle sorte que l'harmonique d'ordre supérieure $2 \times \omega_b$ issue des non linéarités du système se trouve au-delà de $\omega_{max}(k_0, \hat{J})$, avec $\omega_{max}(k_0, \hat{J})$ la valeur maximale de la relation de dispersion pour k_0 et \hat{J} considéré. Une fois que la solution localisée dans l'espace et périodique dans le temps $\hat{Y}_n(\tau)$ a été construite, la prochaine étape consiste à étudier sa stabilité orbitale au sens de Floquet. À cette fin, une perturbation infinitésimale $\chi_n(\tau)$ est ajoutée à $\hat{Y}_n(\tau)$, ce qui permet d'avoir après linéarisation autour de $\chi_n(\tau)$, l'équation Eq. (2.94). Ces breathers discrets seront stables si toutes les valeurs propres de la matrice de monodromie \mathcal{M} , obtenue à partir de l'équation Eq. (2.95), sont contenues à l'intérieur ou situées sur le cercle unité. Dans le cas contraire, ces BDs construits seront considérés comme instables. La recherche de ces breathers discrets stationnaires s'est faite avec l'usage des conditions aux limites périodiques appliquées sur un échantillon de $N = 50$ paires de bases azotées. Les paramètres u_0 et ℓ utilisés pour le profil initial restent inchangés, tandis que $\varepsilon = 0.8$.

La figure 63 donne la représentation des solutions obtenues en utilisant l'équation Eq. (3.9) comme condition initiale. Les paramètres utilisés pour obtenir les figures 63(a) et 63(b) sont $k_0\ell = 0.0$ [(a) : $\omega_b = 1.40$, $\hat{J} = 0.0$, (b) : $\omega_b = 1.40763$, $\hat{J} = 0.011115$]. Les figures 63(c) et 63(d) sont obtenues pour $k_0\ell = \pi$ [(c) : $\omega_b = 1.417$, $\hat{J} = 0.1$, (d) : $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$]; tandis que la figure 63(e) est obtenue pour $k_0\ell = 0.0275\pi$, $\omega_b = 1.426$, $\hat{J} = 0.0161$ et la figure 63(f) est obtenue pour $k_0\ell = 0.474\pi$, $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J} = 0.05874$. L'analyse de la stabilité orbitale de ces breathers discrets montre qu'excepté le cas obtenue pour $\hat{J}_{cr} = 0.05874$ [qui est instable], ils sont tous stables.

Cette stabilité/instabilité est confirmée à la figure 64. En effet, le breather discret obtenue à

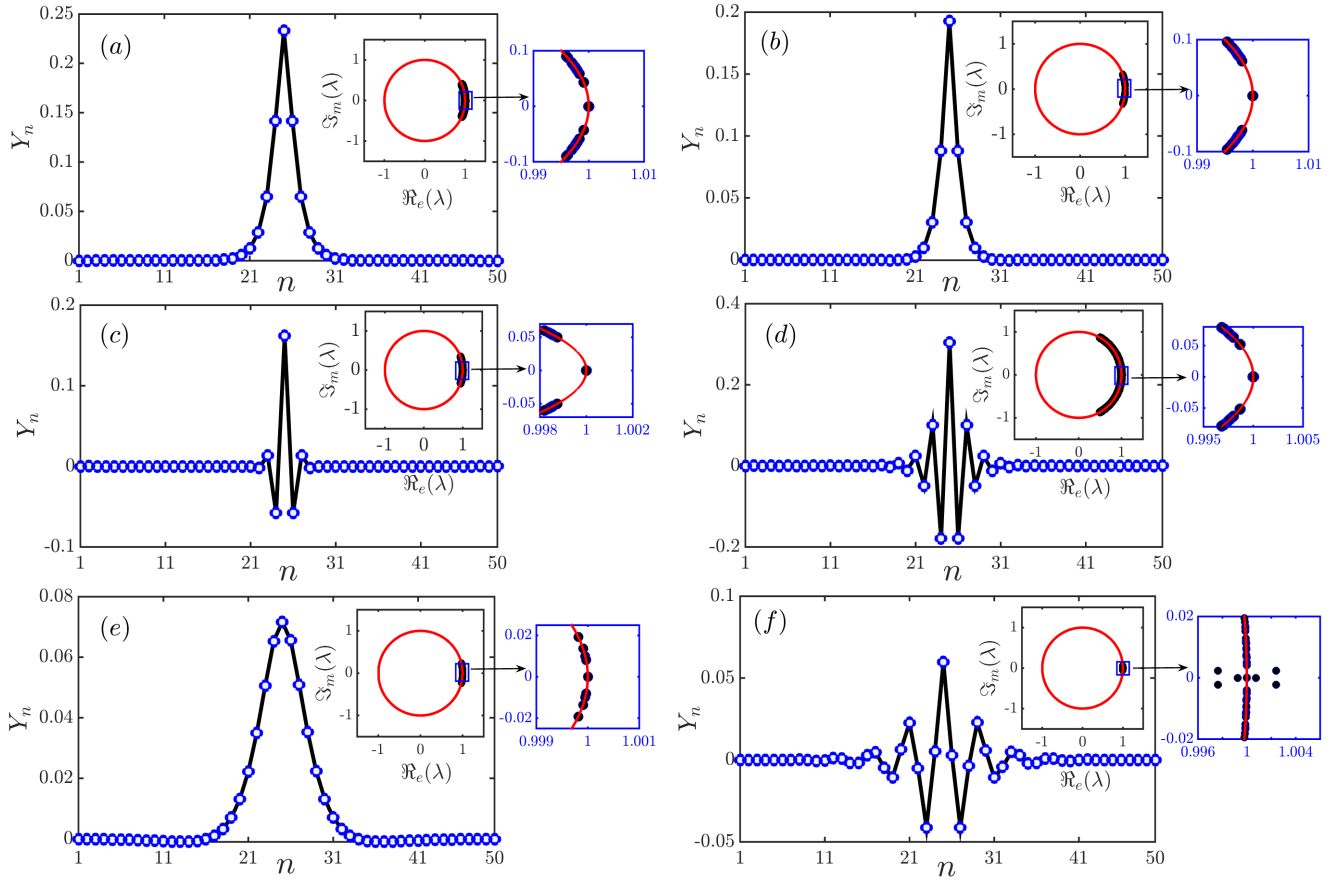


Figure 63: Breathers discrets corrigés ainsi que leurs spectres de Floquet projetés sur le cercle unité, obtenus pour $k_0\ell = 0$ [(a) : $\omega_b = 1.40$, $\hat{J} = 0$, (b) : $\omega_b = 1.40763$, $\hat{J} = 0.011115$], pour $k_0\ell = \pi$ [(c) : $\omega_b = 1.417$, $\hat{J} = 0.1$, (d) : $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$], pour $k_0\ell = 0.0275\pi$ [(e) : $\omega_b = 1.426$, $\hat{J}_{cr} = 0.0161$, (d) : $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$] et pour $k_0\ell = 0.474\pi$ [(f) : $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J}_{cr} = 0.05874$].

la figure 63(e) étant stable au sens de Floquet, la propagation spatio-temporelle de son énergie [calculée à partir de l'équation Eq. (2.78)] reste localisée et constante dans le temps comme le montre la figure 64(a) ainsi que sa TFD-2 correspondante donnée à la figure 64(b). À l'inverse, la figure 64(c) [obtenue pour la solution instable du panel (f) de la figure 63] montre une délocalisation de l'énergie et une transformation de celle-ci en une structure non cohérente à partir d'un temps $\tau \approx 4000T_b$. L'instabilité de cette figure 64(c) provient de l'interaction du breather discret résultant avec le mode phonon tel que confirmé par sa TFD-2 donnée à la figure 64(d). Il est à noter que les solutions stables des figures 63(a)– 63(d) exhibent une dynamique semblable que la solution stable de la figure 64(a). La TFD-2 de la figure 64(b) montre une séparation claire entre la relation de dispersion ω et la localisation de la fréquence du breather ω_b en $k_0 = k_c$. Cette séparation est due au choix de ω_b dans la bande interdite inférieure lors de la construction de la solution périodique.

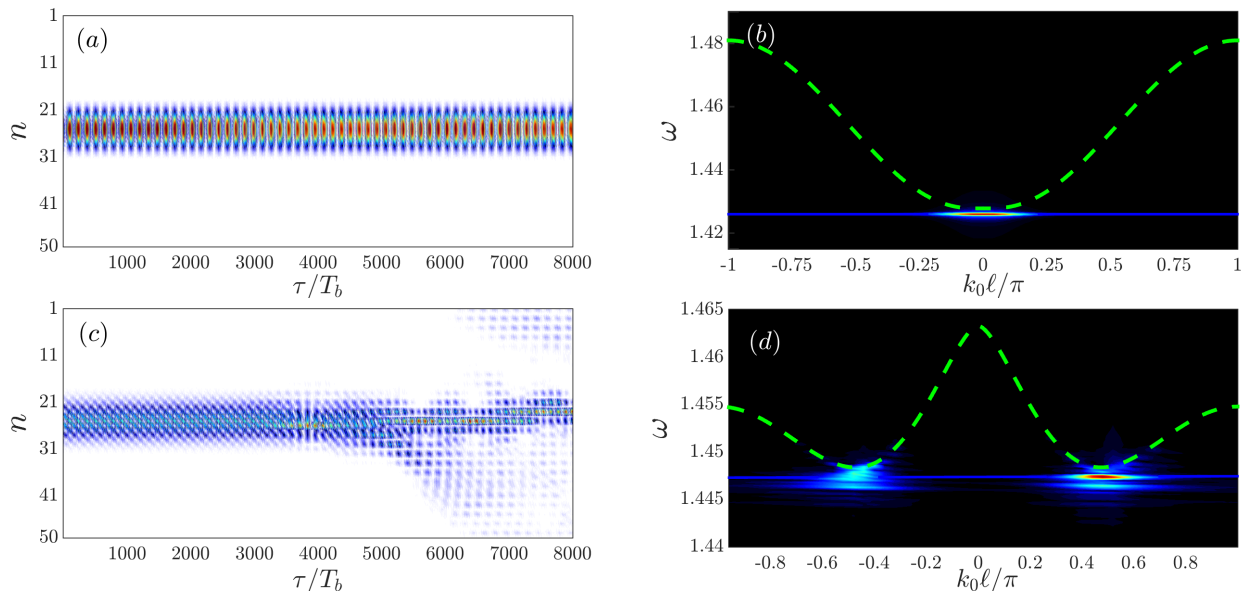


Figure 64: Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret stable [panel (a) : $\omega_b = 1.426$, $\hat{J}_{cr} = 0.0161$, $k_0\ell = 0.0275\pi$] et du breather discret instable [panel (c) : $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J}_{cr} = 0.05874$, $k_0\ell = 0.474\pi$] obtenu respectivement aux figures 63(e) et 63(f). Les panels (b) et (d) montrent la TFD-2 des solutions $Y_n(\tau)$ des panels (a) et (c), où la ligne en trait fort de couleur bleue est obtenue pour $\omega = \omega_b$ tandis que celle en interrompu de couleur verte est la relation de dispersion ω de l'équation Eq. (2.82).

Afin d'explorer les caractéristiques de ces modes localisés vis-à-vis de l'interaction longue portée, nous avons représenté les familles de solutions corrigées pour des gammes de valeurs de \hat{J} correspondant aux vecteurs d'ondes appropriés. Les résultats sont reportés sur les figures 65, 66 et 67. En ce qui concerne la figure 65 obtenue pour $k_0\ell = 0$ et $\hat{J} \in [0, 0.01235]$, l'analyse des solutions du panel (a) nous renseigne qu'elles sont toutes stables au sens de la théorie de Floquet [voir panel (b) où la valeur maximale du module des multiplicateurs de Floquet est égale à 1]. Toutefois, les amplitudes ainsi que la pseudo-largeur \mathcal{L} de ces BDs décroissent en moyenne avec \hat{J} [voir figure 65(c)]. Par ailleurs, la variation de l'énergie de ces solutions révèle qu'elle est une fonction croissante lorsque $\hat{J} \in [0, 0.001235]$ et décroissante ailleurs [voir panel (d)]. Il est tout aussi important de noter que la fréquence ω_b de ces MLs varie non linéairement avec \hat{J} . Cette fréquence peut être approximée sous la forme $\omega_b^{app} = A\hat{J}^r$, où les constantes $A = 1.4185563$ et $r = 0.0019635172$ sont déterminées au

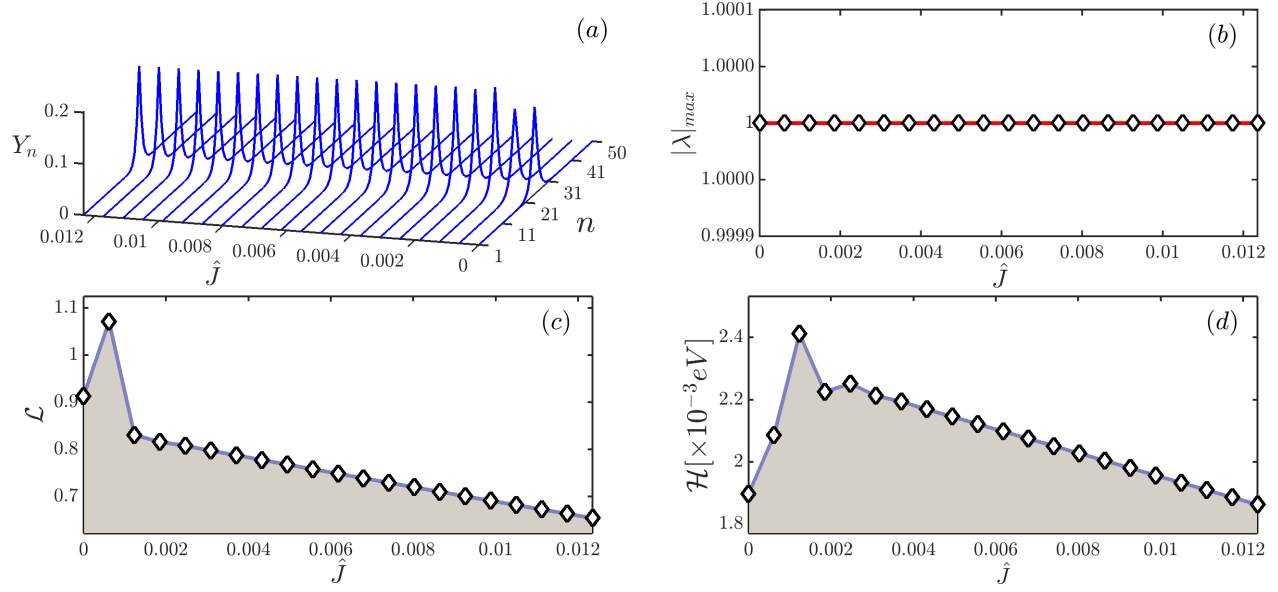


Figure 65: (a) : Familles de breathers discrets corrigés en fonction de \hat{J} , obtenues pour $k_0\ell = 0$. Panel (b) : stabilité de Floquet des solutions obtenues au panel (a). Influence du coefficient de longue portée \hat{J} sur la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (c)] et sur l'énergie calculée à partir de l'équation Eq. (2.78) [panel (d)].

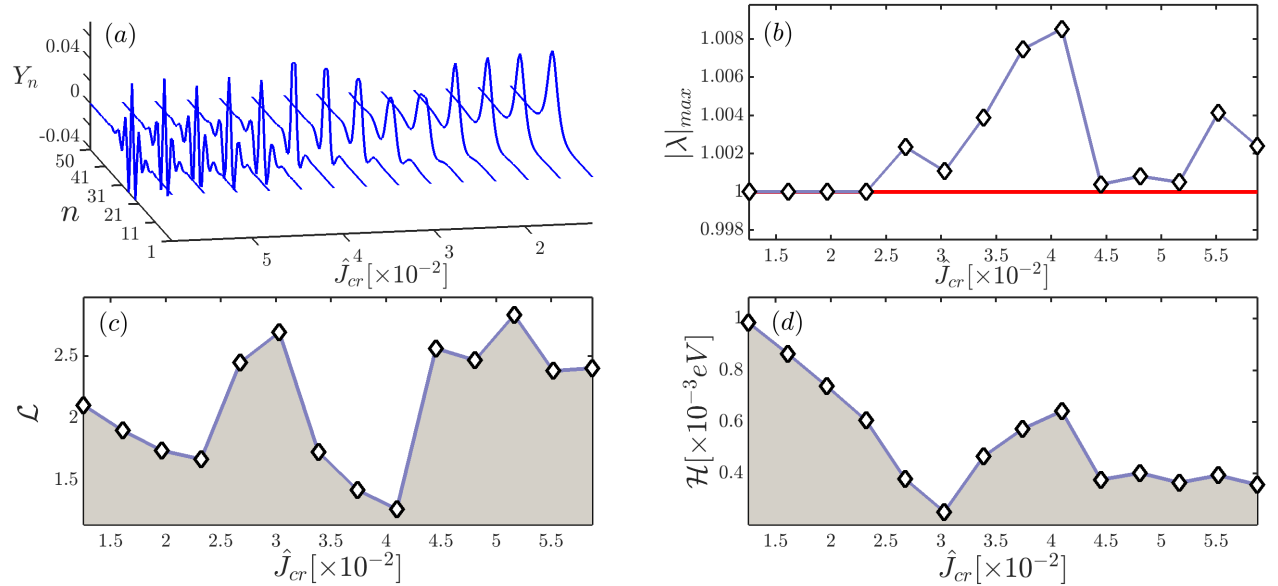


Figure 66: (a) : Familles de breathers discrets corrigés en fonction de \hat{J}_{cr} , obtenues pour $k_0 \in k_{0,cr}$. Panel (b) : stabilité de Floquet des solutions obtenues au panel (a). Influence du coefficient de longue portée \hat{J} sur la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (c)] et sur l'énergie calculée à partir de l'équation Eq. (2.78) [panel (d)].

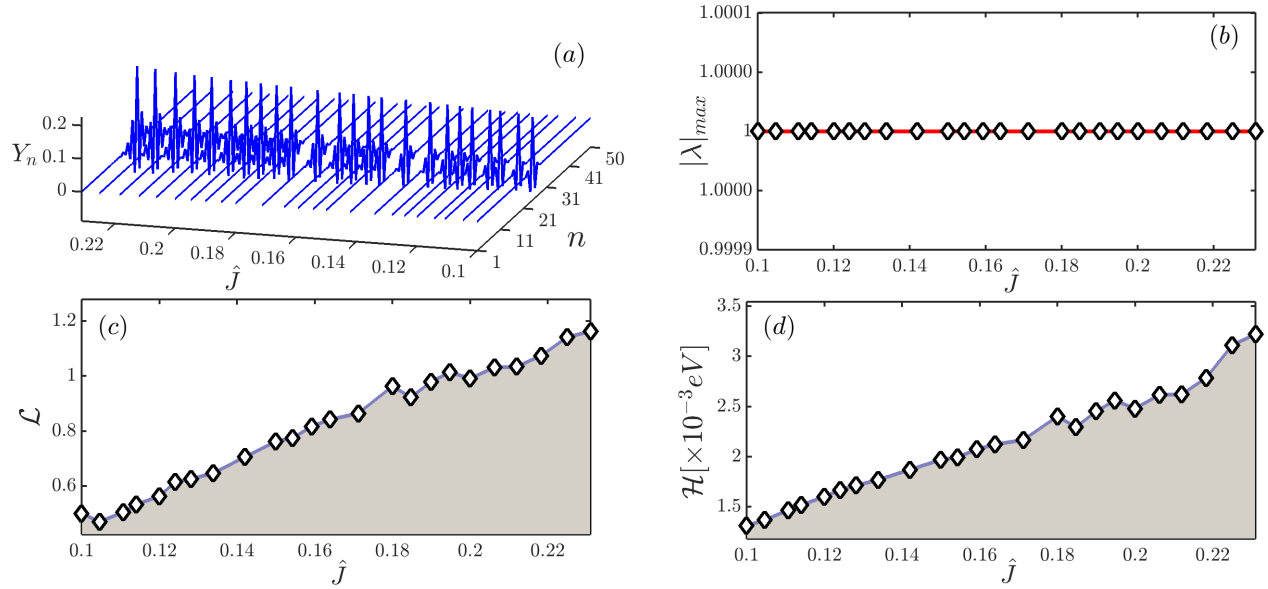


Figure 67: (a) : Familles de breathers discrets corrigés en fonction de \hat{J} , obtenues pour $k_0\ell = \pi$. Panel (b) : stabilité de Floquet des solutions obtenues au panel (a). Influence du coefficient de longue portée \hat{J} sur la pseudo-largeur \mathcal{L} [panel (c)] et sur l'énergie calculée à partir de l'équation Eq. (2.78) [panel (d)].

moyen de l'approximation par les moindres carrés donnée par l'équation Eq. (2.104).

La figure 66 est obtenue pour les valeurs de $\hat{J} \in \hat{J}_{cr}(k_0)$. Il est observé en son panel (a) qu'à partir d'une certaine valeur du couple $[k_{0,cr}, \hat{J}_{cr}]$, les solutions obtenues ont des paires de bases voisines qui oscillent en opposition de phase, contrairement au cas de la figure 65(a) où les paires de bases voisines oscillaient toutes en phase. Cette famille de solution est stable pour tout $\hat{J}_{cr}(k_0) \leq \hat{J}_{cr1}$ (avec $\hat{J}_{cr1} = 0.023212$), tandis qu'elle devient instable pour $\hat{J}_{cr}(k_0) > \hat{J}_{cr1}$ [voir panel (b)]. Pour certaines valeurs de \hat{J}_{cr} la pseudo-largeur [respectivement l'énergie] de ces solutions décroît, pour d'autres elle croît ou est constante [voir figures 66(c) et 66(d)]. Tout comme le cas de la figure 65, la fréquence de cette famille de breathers discrets varie suivant la loi non linéaire $\omega_b^{app} = A\hat{J}^r$, avec $A = 1.4975743$ et $r = 0.007233644$.

La famille de solutions obtenue au panel (a) de la figure 67 pour $k_0\ell = \pi$ est également stable [voir panel (b)]. Toutefois, la pseudo-largeur [voir panel (c)] ainsi que l'énergie de cette famille [voir panel (d)] sont des fonction croissantes du coefficient de longue portée \hat{J} . La fréquence ω_b de ces solutions varie également non linéairement en respectant la loi $\omega_b^{app} = A\hat{J}^r$, où $A = 1.1603652$ et $r = -0.090687018$.

3.4.4 Mobilité des breathers discrets construits

La solution périodique stationnaire étant construite, il est question de voir dans quelle mesure celle-ci peut se mouvoir dans le réseau. En effet, afin de répondre à la demande en protéine d'un organisme vivant, la molécule d'ADN doit être transcrite. Pour cela, elle s'ouvre localement en un site spécifique et une bulle de transcription se forme et se propage sur le segment codant pour la molécule recherchée. D'où la nécessité de la propagation de ces solution stationnaires. Pour réaliser la mobilité de ces BDs, nous utilisons la méthode développée par Alvarez et *al.* [166]. Cette méthode consiste à apporter un « kick » au breather discret stationnaire sous la forme de l'équation Eq. (2.96).

Les résultats de cette mobilité sont reportés sur les figures 68, 69 et 70.

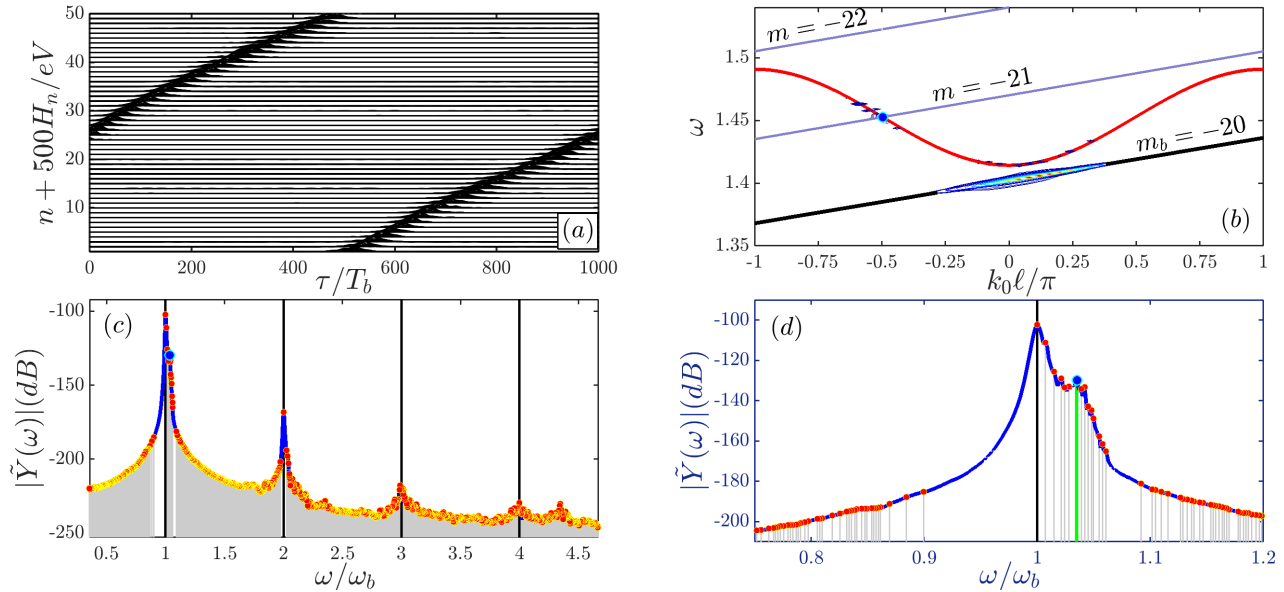


Figure 68: (a) : Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret dynamique obtenue par perturbation du breather discret stationnaire ayant des paramètres $k_0\ell = 0$, $\hat{J} = 0$, $\omega_b = 1.40$, avec $\nu = 0.56$. (b) : TFD-2 dans le plan (k_0, ω) de la solution $Y_n(\tau)$ du BDD, où la courbe de couleur rouge est la relation de dispersion, la ligne de couleur noire correspond à $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, avec $\omega_b = 1.40$, $k_c = 0$ et $\mathcal{V} \approx 1.084 \times 10^{-2}$. Les lignes de couleur grises sont obtenues au moyen des équations Eq. (2.100) et (2.101). Le panel (c) [respectivement (d)] est la projection de la TFD-2 dans la base ω .

Le panel (a) de la figure 68 montre la propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret dynamique obtenu avec les paramètres $k_0\ell = 0$, $\hat{J} = 0$, $\omega_b = 1.40$ et $\nu = 0.56$. Cette énergie se propage en passant de la paire de base n à la paire de bases $n' = n + 1$ après chaque q -période(s) ($q = 20$), soit avec une vitesse moyenne $\mathcal{V} \approx +1.084 \times 10^{-2}$. Le choix du signe (+) au détriment du signe (-) lors de la perturbation de la condition initiale [voir Eq. (2.96)] est motivé par la figure 54(b), car celle-ci prévoit l'existence des modes localisés ayant une vitesse de propagation [vitesse de groupe] positive lorsque $(k_0\ell, \hat{J}) = (0, 0)$. Notons cependant que lors de cette propagation, le BDD résonne avec la relation de dispersion tel que le montre le panel (b) de la figure 68, où il y est représenté la TFD-2 du BDD. Cette TFD-2 nous montre que le BDD suit la ligne d'équation $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$ obtenue pour $m_b = -20$ [ligne en trait fort de couleur noire]. Cette ligne intercepte ω [pour $m = -21$] en une valeur négative du vecteur d'onde k_0 , induisant ainsi une onde quasi-linéaire qui se propage en sens contraire. La présence des autres tâches aussi bien pour des valeurs positives que négatives du vecteur d'onde sur la relation de dispersion [courbe de couleur rouge] montre que la propagation du breather discret dynamique génère également des phonons de très faibles amplitudes ayant des vitesses positives que négatives. Ceci est confirmé à la figure 68(c) qui représente la puissance spectrale du BDD. La figure 68(d) est un agrandissement de la figure 68(c). Sur cet agrandissement, les lignes de couleur grises représentent les fréquences de ces phonons, tandis que celle de couleur verte correspond à la fréquence de l'onde quasi-linéaire indexée plus haut.

L'analyse de la figure 68 peut s'appliquer à la figure 69 [obtenue pour $k_0\ell = 0.474\pi$, $\hat{J}_{cr}(k_0) =$

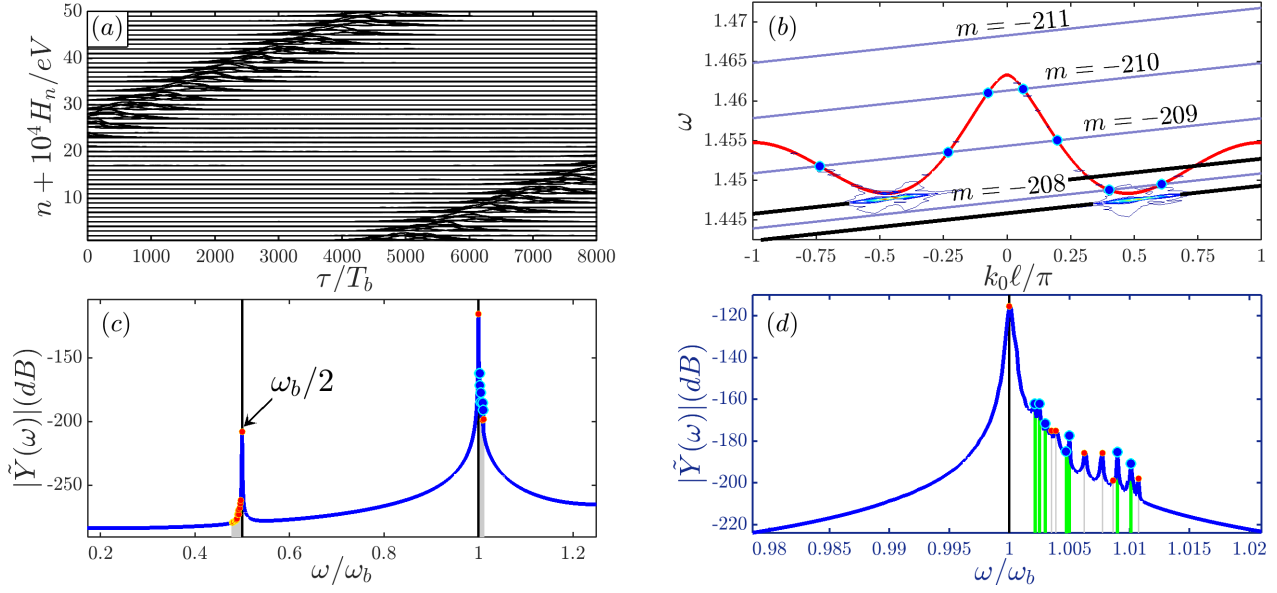


Figure 69: (a) : Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret dynamique obtenue par perturbation du breather discret stationnaire ayant des paramètres $k_0 \ell = 0.474\pi$, $\hat{J}_{cr}(k_0) = 0.05874$, $\omega_b = 1.4474$, avec $\nu = 0.14474$. (b) : TFD-2 dans le plan (k_0, ω) de la solution $Y_n(\tau)$ du BDD, où la courbe de couleur rouge est la relation de dispersion, la ligne de couleur noire correspond à $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, avec $\omega_b = 1.4474$, $k_c^{(\pm)} = \pm 0.474\pi$ et $\mathcal{V} \approx 1.105 \times 10^{-3}$. Les lignes de couleur grise sont obtenues au moyen des équations Eq. (2.100) et (2.101). Le panel (c) [respectivement (d)] est la projection de la TFD-2 dans la base ω .

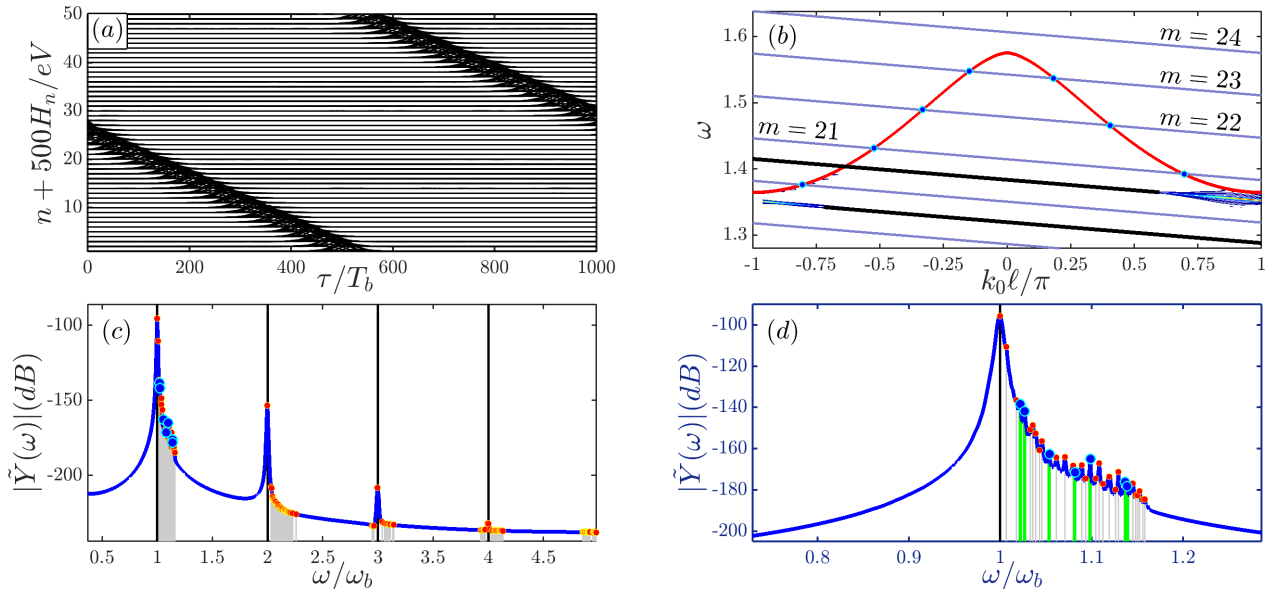


Figure 70: (a) : Propagation spatio-temporelle de l'énergie du breather discret dynamique obtenue par perturbation du breather discret stationnaire ayant des paramètres $k_0 \ell = \pi$, $\hat{J} = 0.2$, $\omega_b = 1.35$, avec $\nu = 0.27$. (b) : TFD-2 dans le plan (k_0, ω) de la solution $Y_n(\tau)$ du BDD, où la courbe de couleur rouge est la relation de dispersion, la ligne de couleur noire correspond à $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, avec $\omega_b = 1.35$, $k_c = \pi$ et $\mathcal{V} \approx -1.01 \times 10^{-2}$. Les lignes de couleur grise sont obtenues au moyen des équations Eq. (2.100) et (2.101). Le panel (c) [respectivement (d)] est la projection de la TFD-2 dans la base ω .

0.05874, $\omega_b = 1.4474$, $\nu = 0.14474$] et à la figure 70 [obtenue pour $k_0\ell = \pi$, $\hat{J} = 0.2$, $\omega_b = 1.35$, $\nu = 0.27$]. Toutefois, à la différence du BDD de la figure 70 qui passe d'un site à l'autre après 20 périodes comme le cas de la figure 68, le BDD de la figure 69 va d'une paire de bases à une autre après environs 208 périodes. Néanmoins, ces solutions résonnent également avec le mode des phonons comme le confirment les panels (b), (c) et (d) des figures 69 et 70. Notons cependant que le breather discret obtenu pour $\hat{J} = \hat{J}_{cr}$ peut se propager de la gauche vers la droite [ou inversement], tandis que celui obtenu pour $k_0\ell = \pi$ ne peut uniquement se propager que de la droite vers la gauche tel que prédit par la figure 54(b).

3.4.5 Discussion

Le fait que le breather discret vibre dans la bande interdite impose avant toute chose de savoir comment varie la relation de dispersion aux limites de la première zone de Brillouin, afin d'éviter les phénomènes de résonance avec le mode des phonons [96, 97, 185, 186]. Les résultats obtenus montrent que cette analyse est capitale, car elle permet une bonne compréhension de la propagation des ondes non linéaires dans le milieu. Il est bien connu que lorsque le signe du produit de la vitesse de groupe (v_g) à la vitesse de phase ($v_{ph} = \omega/k_0$) est supérieur à zéro [respectivement inférieur à zéro], l'onde non linéaire se propage de la gauche vers la droite [respectivement de la droite vers la gauche]. La propagation des ondes respectant $v_g \times v_{ph} < 0$ sont fréquemment rencontrées dans les méta-matériaux « main gauche » [232–235]. Curieusement, la plupart des études incluant une interaction longue portée menées aussi bien dans l'ADN que dans d'autres systèmes n'ont pas exploré le système sous cet angle [136, 139–142, 181, 236–240], à savoir l'observation du comportement « caméléon » mis en exergue par Togue et *al.* [143]. Plus intéressant encore, les breathers discrets ont été établis dans ce travail en dehors des limites communément utilisées de la première zone de Brillouin pour des valeurs spécifiques du coefficient de longue portée \hat{J} , ce qui n'avait jamais été fait dans la littérature [136, 139–142, 181, 236–240].

Il a été démontré dans un réseau de guides d'ondes optiques que les solitons pulses et darks peuvent coexister dans un même milieu, moyennant une variation infime de la condition initiale dans le réseau [241]. Tout comme une possible alternance entre les solitons pulses et darks a été longtemps mis en exergue dans un réseau monoatomique/diatomique sous influence d'une longue portée [242, 243], nous montrons qu'elle est également possible dans la molécule d'ADN. Plusieurs travaux dans la littérature ont montré qu'il est possible d'avoir séparément ou non, les breathers quasi discrets se propageant aussi bien de la gauche vers la droite [ou réciproquement] sous contrôle des paramètres du système [143, 202, 244]. Nous montrons ici que ce phénomène peut également exister pour des breathers discrets obtenus pour des valeurs spécifiques de l'ILP. Toutefois, ces solutions dynamiques obtenues par une procédure de perturbation du breather discret stationnaire, entraînent tout au long de leurs propagations des ailes et/ou des queues d'oscillations de très faibles amplitudes issues de la résonance de celles-ci avec le mode des phonons, impactant de ce fait leur durée de vie [96, 97]. Une solution visant à considérablement réduire ces radiations consiste à rechercher directement au moyen de l'algorithme de Newton-Raphson le breather discret dynamique [172, 174]. Toutefois, cette approche fait intervenir les conditions d'incommensurabilité entre la vitesse et la fréquence du BDD, ce qui est une tâche ardue.

Cuevas et *al.* ont démontré dans leurs articles [139–142] que l’interaction longue portée peut influencer la vitesse et la stabilité orbitale des breathers discrets construits se propageant vers des indices croissants. Cependant, leur procédé de construction numérique du breather discret requiert une sélection précise de la condition initiale, sélection qui n’est pas évidente. Afin de surmonter cette difficulté, nous utilisons dans ce travail la solution obtenue dans l’approximation semi-discrète comme profil de départ et la corrigeons numériquement au moyen de l’algorithme de Newton-Raphson. La recherche d’une solution purement discrète est motivée par le fait que celle obtenue par l’approximation semi discrète émet des radiations lorsqu’elle se propage dans le milieu discret. Ces radiations viennent du fait que la solution semi discrète n’est pas la solution du réseau discret et essaie par conséquent de s’en approcher en s’adaptant au système. Ainsi donc, l’approximation des milieux continus et l’approximation semi discrète produisent des breathers dont la fréquence est assez proche de la bande des phonons [96, 97, 185, 186]. Ces breathers sont moins stables que leurs analogues construits dans le milieu discret.

L’existence des breathers discrets a été démontrée dans le modèle d’ADN de Peyrard-Bishop (PB) [4, 194], et sont des précurseurs des bulles qui apparaissent lors du phénomène de transcription où des grandes fluctuations d’énergies sont observées. Ce modèle a été modifié plus tard avec une incorporation des interactions longue portée [136, 139–142, 239]. Ces interactions ont révélé une influence considérable sur la forme, la vitesse et la stabilité des breathers discrets [136, 139–142, 239]. Inspiré du modèle anharmonique de PB, Joyeux et Buyukdagli (JB) ont proposé un nouveau model basé sur la finitude de l’énergie d’empilement, ce qui leur a permis d’avoir des résultats encore plus proches des modèles statistiques [77, 78]. La présente étude incluant l’ILP dans le modèle de JB s’est basée sur les références [136, 139–142, 239], mais avec une mise en lumière de l’existence des breathers discrets dynamiques avec des vitesses de groupe positives/négatives ainsi que l’analyse de leur stabilité orbitale.

La modélisation des modes de respiration observé dans la molécule d’ADN a été faite dans les modèles de Peyrard et de Bishop. Ces modes peuvent être amplifiés et se déplacer sous forme d’une bulle sur une portion d’ADN lors des processus de transcription [194]. Notons que les solutions obtenues dans ces modèles ne peuvent se mouvoir qu’avec des vitesses de groupe positives. Or il est bien connu que la lecture de l’information contenue dans l’ADN peut se faire dans les deux sens [245] : de la droite vers la gauche d’un brin, ou de la gauche vers la droite du brin complémentaire. La prise en compte de la longue portée nous montre que les solutions obtenues rendent compte de ces sens de propagation observés.

3.5 Conclusion

En résumé, la présente étude a démontré que le mécanisme de formation des modes localisés ayant leurs proches voisins oscillant en phase qu’en opposition de phase est spontané et dépend fortement de la fréquence de l’onde. Elle a également montré que breathers et multibreathers ont non seulement même stabilité dynamique et orbitale, mais que ceux ayant leurs amplitudes oscillantes sont moins instables que leurs analogues. En exploitant la notion de barrière de Peierls-Nabarro et celle du « kick », il a été possible de faire mouvoir ces modes localisés.

Il a également été investigué dans ce travail la formation et la stabilité au sens de Floquet des

modes localisés dans le modèle d'ADN de JB, soumis à la viscosité du milieu et au forçage périodique. Ces MLs ont été construits non seulement à partir de la méthode de séparation des variables donnant lieu à des différentes branches d'existence, mais aussi par la méthode de tir combinée à celle de la limite anti-continue. L'influence d'une impureté ponctuelle sur la dynamique spatio-temporelle de la macromolécule a également été étudiée et, il en ressort qu'elle peut contrôler la dynamique du réseau.

La prise en compte de l'interaction du type longue portée dans la molécule d'ADN a non seulement rendu possible la propagation de l'information dans les deux sens de la molécule, mais aussi l'existence des ondes stationnaires en dehors de la limite de la première zone de Brillouin. À la différence de la plupart des travaux consistant juste à vérifier la robustesse et la propagation des breathers obtenus, nous avons poussé la recherche plus loin. En effet, les solutions breathers discrets exactes ont été construites sous le contrôle des paramètres tels que le vecteur d'onde et le coefficient de l'ILP. Bien plus, leurs stabilités orbitales ont révélés qu'ils sont plus stables que ceux obtenus par l'approximation semi-discrète [ou des milieux continus]. Cependant, lors de leur propagation dans le réseau, ils résonnent avec la bande des phonons en émettant des ondes quasi linéaires ou non linéaires de très faibles amplitudes.

Conclusion générale

Contributions

Nous avons étudié dans cette thèse les conditions d'existence des structures localisées dans la molécule d'ADN, ainsi que la propagation de ces modes localisés. Cette étude s'inscrit dans la compréhension du fonctionnement de cette molécule lors des processus tels que la réplication ou de transcription-traduction, dont l'importance capitale pour un organisme n'est plus à démontrer. Le modèle Hamiltonien choisi pour mener à bien cette thèse a été celui de Joyeux et Buyukdagli, compte tenu de sa proximité énergétique avec des modèles statistiques d'une part, et des résultats théoriques obtenus proches de ceux expérimentaux d'autre part. Avant de clôturer avec cette thèse, résumons les principaux résultats obtenus.

Dans premier chapitre, Nous avons présenté l'ADN tel que vu par le biologiste, en faisant ressortir sa structure statique et dynamique. Par la suite, nous avons présenté cette molécule d'ADN telle que vue par le Physicien, ce qui a conduit à l'énumération des différents modèles statistiques/Hamiltonien dont ceux-ci ont fait usage pour pouvoir reproduire de façon simplifiée les phénomènes complexes observés dans l'ADN. Parmi ces modèles Hamiltonien, nous avons sélectionné celui qui se rapproche le plus des modèles statistiques et ainsi que de la réalité physique pour mener à bien cette thèse. Ce chapitre s'est achevé par une problématique accompagnée des différentes questions qui ont été la feuille de route de cette thèse.

Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté les différentes modifications du modèle Hamiltonien sur lesquels notre recherche s'est focalisée. Ce chapitre a été subdivisé en trois parties : Dans la première partie, nous avons étudié l'influence de la fréquence fondamentale de l'onde plane sur les conditions d'émergence des structures localisées dans le réseau via le processus d'instabilité modulationnelle. S'en est ensuite suivi le développement de la méthode de la limite anti-continue, qui est une méthode plus directe de génération des-dites structures localisées au regard des contraintes imposées par l'instabilité modulationnelle. En exploitant la notion de barrière de Peierls-Nabarro, les conditions nécessaires pour la mobilité de ces breathers discrets ont également été explorées. Pour ce qui est de la deuxième partie, nous avons rendu le modèle plus réaliste en incorporant les effets de la viscosité du milieu dans lequel se trouve la molécule d'ADN, ainsi que l'influence du milieu externe au moyen d'une excitation périodique. En utilisant aussi bien la méthode de la séparation des variables que celle du tir, nous avons étudié d'une part les conditions d'existences de ces breathers discrets dans un tel environnement, et d'autre part leurs stabilités orbitales au sens de Floquet. L'effet d'une impureté localisée a également été étudié dans cette deuxième partie et, il en ressort qu'elle peut induire un comportement chaotique/périodique de toute la chaîne. La troisième

partie de ce deuxième chapitre a été consacrée à l'étude de l'influence des moments dipolaires effectifs dans la dynamique des nucléotides. Pour cette fin, le Hamiltonien original de JB a de nouveau été modifié pour la circonstance. Il en ressort que ces moments dipolaires issus des charges partielles produisent une interaction à longue portée de type dipôle-dipôle dans la molécule. Plus intéressant encore, ces moments dipolaires induisent l'existence des paquets d'énergies pouvant se propager dans les deux sens de la molécule d'ADN. Faisant usage de l'approximation semi-discrète, une équation d'amplitude vérifiant celle de Schrödinger non linéaire cubique a été obtenue et, partant d'elle, des solutions approchées obtenues ont été utilisées pour déterminer les breathers discrets exacts du milieu, ainsi que leurs stabilités de Floquet. Les méthodes numériques telles celles de Runge-Kutta, de Newton-Raphson, des moindres carrés, de tir ont également été énumérés dans ce chapitre. Il en est de même des techniques de caractérisation des systèmes dynamiques telles que le diagramme de bifurcation, les exposants de Lyapunov, la section de Poincaré, les transformations de Fourier en dimension 1 et 2, les spectres de puissance.

Le troisième chapitre de cette thèse est consacré à la présentation des différents résultats obtenus à partir de l'étude théorique du chapitre deux. Ces résultats sont accompagnés à chaque fois d'une discussion.

- ➔ Pour ce qui est de l'impact de la variation d'une fréquence du mode fondamental sur la dynamique de l'ADN, nous avons montré au moyen du critère d'instabilité modulationnelle appliqué à une équation d'amplitude discrète, qu'elle influence considérablement les zones d'existence des modes localisés intrinsèques. L'usage d'une technique plus directe telle que la limite anti-continue, concourant à la recherche des structures localisées nous a permis d'obtenir deux types de structures localisées dans la molécule d'ADN : l'une ayant des nucléotides voisins oscillant en phase, et l'autre des nucléotides en opposition de phase. Toutefois, au regard de l'étude de leurs stabilités tant bien dynamique qu'orbitale, les structures localisées dont les nucléotides oscillent en opposition de phase sont plus robustes face aux perturbations infinitésimales que leurs analogues oscillant en phase. La mobilité des énergies localisées aussi bien en un site qu'en plusieurs sites dans la molécule a été réalisée moyennant l'usage du concept de la barrière de Peierls-Nabarro. Cette barrière constituant une énergie que la structure localisée doit vaincre pour se mouvoir dans le réseau.
- ➔ L'étude des effets combinés de la viscosité du milieu nucléaire où baigne la molécule d'ADN, et du champ électromagnétique provenant du milieu externe a également été explorée. Il en ressort que ces facteurs n'empêchent pas, à faible intensité, l'apparition sur cette molécule des zones de haute localisation de l'énergie aussi bien stables qu'instables. Toutefois, à forte intensité, ces énergies localisées deviennent de plus en plus instables. Notons que la localisation de ces énergies dans la molécule d'ADN est faite dans cette thèse moyennant l'usage d'une technique mathématique telle que la séparation des variables et d'une technique numérique telle que la recherche du point fixe. La dynamique d'une paire de bases azotées dont les caractéristiques sont différentes des autres bases azotées de la chaîne a été explorée sous l'effet de ces paramètres extérieurs. Il en ressort que cette paire de bases azotées peut imposer à toutes les autres, une dynamique d'ensemble ordonnée ou désordonnée, comme l'ont confirmées les méthodes d'analyses numériques telles que la bifurcation et les exposants de Lyapunov.
- ➔ La prise en compte d'une énergie supplémentaire dans le modèle originel de Joyeux et Buyukda-

gli, modélisant l'interaction à longue portée a également été étudiée. Cette interaction provenant du moment dipolaire entre bases azotées appartenant à différents brins de la molécule d'ADN a concourue à enrichir davantage la dynamique de cette macromolécule. En effet, sous son influence, nous avons montré qu'il était possible d'avoir simultanément dans le réseau, des structures localisées intrinsèques stationnaires, mais également dynamiques avec une propagation aussi bien dans le sens des indices croissants que décroissants. Ce double sens de propagation de l'énergie dans l'ADN, en plus d'être en accord avec les observations faites par les biologistes, est l'un des points saillant de notre étude comparée à celles de la littérature. Les solutions exactes du réseau discret ont été obtenues au moyen de la recherche des points fixes d'une application non linéaire. L'analyse de la stabilité orbitale de ces solutions exactes révèle qu'elles peuvent être aussi stables qu'instables quel que soit l'intensité de cette interaction à longue portée acceptable pour la molécule. Néanmoins, la réalisation de la mobilité de ces structures localisées induit une résonance avec le mode des phonons, créant ainsi des ondes quasi linéaires/non linéaires de très faibles amplitudes se propageant en sens contraire au paquet d'énergie initial.

Perspectives

Bien que les résultats obtenus dans cette thèse soient très intéressants et contribuent substantiellement à la compréhension de la dynamique de l'ADN, il n'en reste pas moins que certains aspects de cette molécule devraient être pris en compte dans les études à venir.

- L'inhomogénéité dans cette thèse a été prise au niveau des liaisons hydrogène. Or les bases azotées ont des compositions chimiques différentes, et donc des masses différentes. Il serait judicieux de voir l'influence de ces inhomogénéités dues aux masses dans le processus de génération des structures localisées.
- L'importante résonance des breathers discrets dynamiques avec le mode des phonons observée dans cette thèse provient de la méthode utilisée pour réaliser cette mobilité. Cependant, des nouvelles techniques ont récemment été développées dans la littérature pour obtenir directement au moyen de la recherche des points fixes, des breathers discrets dynamiques avec une interaction quasi-nulle avec ces modes de phonons. Il serait ainsi intéressant d'appliquer ces techniques à l'ADN pour rendre la propagation de l'énergie en son sein aussi réaliste que possible.
- Lors de la prise en compte des effets du moment dipolaire dans cette thèse, nous avons supposé qu'ils sont non seulement tous parallèles entre eux, mais qu'en plus leurs vecteurs pointent tous vers la même direction. Ce qui n'est toujours pas le cas dans une molécule d'ADN hyper dynamique et en constante interaction avec son milieu environnemental proche comme éloigné. De ce fait, la prise en compte des différentes orientations de ces moments dipolaires ne pourra qu'enrichir l'étude de cette macromolécule.

Annexe A

Étapes intermédiaires pour l'obtention de l'ESNLDE

Nous donnons ici quelques étapes intermédiaires nécessaires pour l'obtention de l'Eq. (2.9). En prenant $L = 2$ dans l'Eq. (2.6), nous obtenons après développement les relations en $e^{i0\omega_b\tau}$, $e^{i\omega_b\tau}$ et $e^{2i\omega_b\tau}$ suivantes :

$$\begin{aligned} \exp(i0\omega_b\tau) : \ddot{a}_n^{(0)} - k_2 \left(a_{n+1}^{(0)} - 2a_n^{(0)} + a_{n-1}^{(0)} \right) + \omega_g^2 \left\{ 1 + \alpha a_n^{(0)} + \beta \left[\left(a_n^{(0)} \right)^2 + 3 \left| a_n^{(0)} \right|^2 + 6 \left| a_n^{(1)} \right|^2 + 6 \left| a_n^{(2)} \right|^2 \right] \right\} a_n^{(0)} \\ + 2\alpha\omega_g^2 \left(\left| a_n^{(0)} \right|^2 + \left| a_n^{(1)} \right|^2 + \left| a_n^{(2)} \right|^2 \right) + k_4 \left\{ 6 \left[\left| a_{n+1}^{(2)} - a_n^{(2)} \right|^2 + \left| a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right|^2 \right] \left(a_{n+1}^{(0)} - a_n^{(0)} \right) \right\} \\ - k_4 \left\{ 6 \left[\left| a_n^{(2)} - a_{n-1}^{(2)} \right|^2 + \left| a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right|^2 \right] \left(a_n^{(0)} - a_{n-1}^{(0)} \right) + \left(a_n^{(0)} - a_{n-1}^{(0)} \right)^3 - \left(a_{n+1}^{(0)} - a_n^{(0)} \right)^3 \right\} = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} \exp(i\omega_b\tau) : \ddot{a}_n^{(1)} + 2i\omega_b\dot{a}_n^{(1)} - \omega_b^2 a_n^{(1)} - k_2 \left(a_{n+1}^{(1)} - 2a_n^{(1)} + a_{n-1}^{(1)} \right) + 2\alpha\omega_g^2 \left(a_n^{(2)} a_n^{(1)*} + a_n^{(0)} a_n^{(1)} \right) + 6\beta\omega_g^2 a_n^{(0)} a_n^{(2)} a_n^{(1)*} \\ + 6k_4 \left\{ \left(a_{n+1}^{(0)} - a_n^{(0)} \right) \left(a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right) \left(a_{n+1}^{(2)} - a_n^{(2)} \right) - \left(a_n^{(0)} - a_{n-1}^{(0)} \right) \left(a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right) \left(a_n^{(2)} - a_{n-1}^{(2)} \right) \right\} \\ + 3k_4 \left\{ \left| a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right|^2 \left(a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right) - \left| a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right|^2 \left(a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right) + 2 \left| a_{n+1}^{(2)} - a_n^{(2)} \right|^2 \left(a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right) \right\} \\ + \omega_g^2 \left\{ 1 + 3\beta \left(a_n^{(0)} \right)^2 + 6\beta \left| a_n^{(2)} \right|^2 \right\} a_n^{(1)} + 3k_4 \left\{ \left(a_{n+1}^{(0)} - a_n^{(0)} \right)^2 \left(a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right) \right\} \\ - 3k_4 \left\{ \left(a_n^{(0)} - a_{n-1}^{(0)} \right)^2 \left(a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right) + 2 \left| a_n^{(2)} - a_{n-1}^{(2)} \right|^2 \left(a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right) \right\} = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \exp(2i\omega_b\tau) : \ddot{a}_n^{(2)} + 4i\omega_b\dot{a}_n^{(2)} - 4\omega_b^2 a_n^{(2)} - k_2 \left(a_{n+1}^{(2)} - 2a_n^{(2)} + a_{n-1}^{(2)} \right) + \omega_g^2 \left\{ 1 + 2\alpha a_n^{(0)} + 3\beta \left| a_n^{(2)} \right|^2 + 3\beta \left(a_n^{(0)} \right)^2 \right\} a_n^{(2)} \\ + \omega_g^2 \left\{ \alpha \left(a_n^{(1)} \right)^2 + 6\beta \left| a_n^{(1)} \right|^2 a_n^{(2)} \right\} + 3k_4 \left\{ \left(a_{n+1}^{(0)} - a_n^{(0)} \right) \left(a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right)^2 + \left(a_{n+1}^{(0)} - a_n^{(0)} \right)^2 \left(a_{n+1}^{(2)} - a_n^{(2)} \right) \right\} \\ + 3k_4 \left\{ \left| a_{n+1}^{(2)} - a_n^{(2)} \right|^2 \left(a_{n+1}^{(2)} - a_n^{(2)} \right) + 2 \left| a_{n+1}^{(1)} - a_n^{(1)} \right|^2 \left(a_{n+1}^{(2)} - a_n^{(2)} \right) - \left(a_n^{(0)} - a_{n-1}^{(0)} \right) \left(a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right)^2 \right\} \\ - 3k_4 \left\{ \left(a_n^{(0)} - a_{n-1}^{(0)} \right)^2 \left(a_n^{(2)} - a_{n-1}^{(2)} \right) + \left| a_n^{(2)} - a_{n-1}^{(2)} \right|^2 \left(a_n^{(2)} - a_{n-1}^{(2)} \right) + 2 \left| a_n^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right|^2 \left(a_n^{(2)} - a_{n-1}^{(2)} \right) \right\} \\ + 3\beta\omega_g^2 a_n^{(0)} \left(a_n^{(1)} \right)^2 = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Sachant que les coefficients de Fourier varient lentement dans le temps, nous avons

$$\begin{aligned} \dot{a}_n^{(p)} \sim \epsilon^2 \dot{a}_n^{(p)}, \quad \ddot{a}_n^{(p)} \sim \epsilon^4 \ddot{a}_n^{(p)}, \quad a_n^{(p)} \sim \epsilon^p, \quad a_n^{(0)} \sim \epsilon^2, \quad a_n^{(1)} \sim \epsilon, \quad a_n^{(2)} \sim \epsilon^2, \quad \dot{a}_n^{(1)} \sim \epsilon^2 \dot{a}_n^{(1)} \sim \epsilon^3, \\ \ddot{a}_n^{(1)} \sim \epsilon^4 \ddot{a}_n^{(1)} \sim \epsilon^6, \quad \dot{a}_n^{(2)} \sim \epsilon^2 \dot{a}_n^{(2)} \sim \epsilon^4, \quad \ddot{a}_n^{(2)} \sim \epsilon^4 \ddot{a}_n^{(2)} \sim \epsilon^6. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Le couplage linéaire étant supposé faible ($k_2 \sim \epsilon^2$) et tenant compte des relations (A.4), les équations (A.1), (A.2) et (A.3) deviennent :

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \exp(i0\omega_b\tau) : \omega_g^2 a_n^{(0)} + 2\alpha\omega_g^2 \left| a_n^{(1)} \right|^2 = 0; \\ \implies a_n^{(0)} = -2\alpha \left| a_n^{(1)} \right|^2 + O(\epsilon^4), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned}
\epsilon^2 \exp(2i\omega_b \tau) : (\omega_g^2 - 4\omega_b^2) a_n^{(2)} + \alpha \omega_g^2 (a_n^{(1)})^2 &= 0; \\
\implies a_n^{(2)} &= -\frac{\alpha \omega_g^2}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2} (a_n^{(1)})^2 + O(\epsilon^4),
\end{aligned} \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon^3 \exp(i\omega_b \tau) : 2i\omega_b \dot{a}_n^{(1)} - k_2 (a_{n+1}^{(1)} - 2a_n^{(1)} + a_{n-1}^{(1)}) + (\omega_g^2 - \omega_b^2) a_n^{(1)} + 2\alpha \omega_g^2 (a_n^{(0)} a_n^{(1)} + a_n^{(2)} a_n^{(1)*}) + 3k_4 |a_{n+1}^{(1)}|^2 a_{n+1}^{(1)} \\
+ (3\beta \omega_g^2 - 6k_4) |a_n^{(1)}|^2 a_n^{(1)} + 6k_4 (a_{n+1}^{(1)} + a_{n-1}^{(1)}) |a_n^{(1)}|^2 - 3k_4 \left((a_{n+1}^{(1)})^2 + (a_{n-1}^{(1)})^2 \right) a_n^{(1)*} \\
+ 3k_4 |a_{n-1}^{(1)}|^2 a_{n-1}^{(1)} - 6k_4 |a_{n-1}^{(1)}|^2 a_n^{(1)} + 3k_4 (a_{n+1}^{(1)*} + a_{n-1}^{(1)*}) (a_n^{(1)})^2 - 6k_4 |a_{n+1}^{(1)}|^2 a_n^{(1)} = 0 + O(\epsilon^5).
\end{aligned} \tag{A.7}$$

L'équation Eq. (2.7) de la section §2.2.1 est obtenue après insertion des relations (A.5) et (A.6) dans (A.7).

Annexe B

Norme et Hamiltonien de l'ESNLDE

Tel que nous l'avons mentionné à la section Sec. §2.2, l'ESNLDE admet tout comme l'ESNLD cubique, des grandeurs conservées telles que la norme et le Hamiltonien. Ce présent annexe donne les détails de calcul de ces grandeurs.

B.1 Calcul de la norme

L'équation Eq. (2.9) ainsi que son complexe conjugué sont :

$$i\dot{\psi}_n + (P_1 + Q_1 |\psi_n|^2) (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + Q_2 |\psi_n|^2 \psi_n + R_1 (\psi_{n+1} - 2\psi_n) |\psi_{n+1}|^2 + R_1 (\psi_{n-1} - 2\psi_n) |\psi_{n-1}|^2 + R_1 \{(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \psi_n^2 - (\psi_{n+1}^2 + \psi_{n-1}^2) \psi_n^*\} = 0, \quad (\text{B.1})$$

$$-i\dot{\psi}_n^* + (P_1 + Q_1 |\psi_n|^2) (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) + Q_2 |\psi_n|^2 \psi_n^* + R_1 (\psi_{n+1}^* - 2\psi_n^*) |\psi_{n+1}|^2 + R_1 (\psi_{n-1}^* - 2\psi_n^*) |\psi_{n-1}|^2 + R_1 \{(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \psi_n^{*2} - (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2}) \psi_n\} = 0, \quad (\text{B.2})$$

où les variables étoilées représentent le complexe conjugué. En multipliant (B.1) par ψ_n^* et (B.2) par ψ_n d'une part, et en effectuant la différence [(B.1) ψ_n^* - (B.2) ψ_n] d'autre part, on obtient en sommant sur toutes les particules :

$$i \sum_n (\dot{\psi}_n \psi_n^* + \dot{\psi}_n^* \psi_n) = i \frac{d}{d\tau} \left(\sum_n |\psi_n|^2 \right) = - \sum_n \{ (P_1 + Q_1 |\psi_n|^2) [(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \psi_n^* - (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \psi_n] \} - R_1 \sum_n \{ (\psi_{n+1} \psi_n^* - \psi_{n+1}^* \psi_n) |\psi_{n+1}|^2 + (\psi_{n-1} \psi_n^* - \psi_{n-1}^* \psi_n) |\psi_{n-1}|^2 \} - R_1 \sum_n \{ (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \psi_n - (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \psi_n^* \} |\psi_n|^2 - R_1 \sum_n \{ (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2}) \psi_n^2 - (\psi_{n+1}^2 + \psi_{n-1}^2) \psi_n^{*2} \}. \quad (\text{B.3})$$

Notons que n est un nombre qui représente la position de la paire de base dans la molécule d'ADN et peut par conséquent prendre n'importe quelle valeur (notamment $n = 0, 1, 2, \dots, +\infty$ ou encore $n = -\infty, \dots, +\infty$). En attribuant juste quelques valeurs à n nous constatons que la somme de tous les termes de droite de l'équation (B.3) est nulle, d'où l'obtention de l'équation Eq. (2.11) de la section §2.2.1

$$\frac{d}{d\tau} \left(\sum_n |\psi_n|^2 \right) = 0, \quad \implies \quad \mathcal{P} = \sum_n |\psi_n|^2 = \text{constante}, \quad \forall \tau. \quad (\text{B.4})$$

B.2 Calcul du Hamiltonien

Multiplions cette fois-ci (B.1) par $\dot{\psi}_n^*$ et (B.2) par $\dot{\psi}_n$, puis en sommant la quantité [(B.1) $\dot{\psi}_n^*$ + (B.2) $\dot{\psi}_n$] sur les n particules, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
& P_1 \sum_n \left[(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \dot{\psi}_n^* + (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \dot{\psi}_n \right] + Q_2 \sum_n \left(\psi_n \dot{\psi}_n^* + \psi_n^* \dot{\psi}_n \right) |\psi_n|^2 \\
& - 2R_1 \sum_n \left\{ (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \psi_n \dot{\psi}_n^* + (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \psi_n^* \dot{\psi}_n \right\} \\
& - R_1 \sum_n \left\{ (\psi_{n+1}^2 + \psi_{n-1}^2) \psi_n^* \dot{\psi}_n^* + (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2}) \psi_n \dot{\psi}_n \right\} \\
& + 2R_1 \sum_n \left\{ (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \dot{\psi}_n^* + (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \dot{\psi}_n \right\} |\psi_n|^2 \\
& + R_1 \sum_n \left\{ (\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \dot{\psi}_n^* \psi_n^2 + (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \dot{\psi}_n \psi_n^{*2} \right\} \\
& + R_1 \sum_n \left\{ (\psi_{n+1} \dot{\psi}_n^* + \psi_{n+1}^* \dot{\psi}_n) |\psi_{n+1}|^2 + (\psi_{n-1} \dot{\psi}_n^* + \psi_{n-1}^* \dot{\psi}_n) |\psi_{n-1}|^2 \right\} = 0.
\end{aligned} \tag{B.5}$$

□ Simplification du premier terme de l'équation (B.5)

Posons $\Delta\psi_n = \psi_{n+1} + \psi_{n-1}$ et $\Delta\psi_n^* = \psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*$, la différentielle de la quantité $\Delta\psi_n \psi_n^*$ par rapport à τ permet d'obtenir le résultat suivant : $\Delta\psi_n \dot{\psi}_n^* = \frac{d}{d\tau} [\Delta\psi_n \psi_n^*] - \Delta\dot{\psi}_n \psi_n^*$. L'insertion de ce résultat dans le premier terme de l'équation (B.5) permet d'avoir :

$$P_1 \sum_n \left[\Delta\psi_n \dot{\psi}_n^* + \Delta\psi_n^* \dot{\psi}_n \right] = P_1 \sum_n \left\{ \frac{d}{d\tau} [\Delta\psi_n \psi_n^*] \right\} + P_1 \sum_n \left(\Delta\psi_n^* \dot{\psi}_n - \Delta\dot{\psi}_n \psi_n^* \right) = P_1 \sum_n \left\{ \frac{d}{d\tau} [\Delta\psi_n \psi_n^*] \right\}, \tag{B.6}$$

car $\sum_n \left(\Delta\psi_n^* \dot{\psi}_n - \Delta\dot{\psi}_n \psi_n^* \right) = 0, \forall \tau$.

□ Simplification du deuxième terme de l'équation (B.5)

Sachant que $\frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2 = \dot{\psi}_n \psi_n^* + \dot{\psi}_n^* \psi_n$, et que $|\psi_n|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2 = \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^4$, le second terme de l'équation (B.5) donne :

$$Q_2 \sum_n \left(\psi_n \dot{\psi}_n^* + \psi_n^* \dot{\psi}_n \right) |\psi_n|^2 = Q_2 \sum_n \left[\frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^4 \right]. \tag{B.7}$$

□ Simplification du troisième terme de l'équation (B.5)

Le troisième terme de l'équation (B.5) peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned}
-2R_1 \sum_n \left\{ (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \psi_n \dot{\psi}_n^* + (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \psi_n^* \dot{\psi}_n \right\} &= -2R_1 \sum_n \left\{ (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \left(\psi_n \dot{\psi}_n^* + \dot{\psi}_n \psi_n^* \right) \right\} \\
&= -2R_1 \sum_n \left\{ (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{B.8}$$

De plus, la dérivée temporelle du terme $|\psi_n|^2 |\psi_{n+1}|^2$ permet d'avoir la quantité $|\psi_{n+1}|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2$ telle que :

$$|\psi_{n+1}|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2 = \frac{d}{d\tau} [|\psi_n|^2 |\psi_{n+1}|^2] - |\psi_n|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_{n+1}|^2. \tag{B.9}$$

En remplaçant l'expression de l'équation(B.9) dans l'équation (B.8) nous obtenons :

$$\begin{aligned}
-2R_1 \sum_n \left\{ (|\psi_{n+1}|^2 + |\psi_{n-1}|^2) \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2 \right\} &= -2R_1 \sum_n \left\{ \frac{d}{d\tau} [|\psi_n|^2 |\psi_{n+1}|^2] \right\} \\
&- 2R_1 \sum_n \left\{ [|\psi_{n-1}|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2 - |\psi_n|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_{n+1}|^2] \right\}, \\
&= -2R_1 \sum_n \left\{ \frac{d}{d\tau} [|\psi_n|^2 |\psi_{n+1}|^2] \right\},
\end{aligned} \tag{B.10}$$

car $\sum_n \left\{ [|\psi_{n-1}|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_n|^2 - |\psi_n|^2 \frac{d}{d\tau} |\psi_{n+1}|^2] \right\} = 0$.

□ Simplification du quatrième terme de l'équation (B.5)

Faisant usage des expressions $\frac{d}{d\tau} [\psi_n^2 \psi_{n+1}^{*2}] = 2\dot{\psi}_n \psi_n \psi_{n+1}^{*2} + 2\psi_n^2 \dot{\psi}_{n+1}^* \psi_{n+1}^*$ et $\frac{d}{d\tau} [\psi_n^2 \psi_{n-1}^{*2}] = 2\dot{\psi}_n \psi_n \psi_{n-1}^{*2} + 2\psi_n^2 \dot{\psi}_{n-1}^* \psi_{n-1}^*$, nous avons :

$$\begin{aligned}\dot{\psi}_n \psi_n \psi_{n+1}^{*2} &= \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} [\psi_n^2 \psi_{n+1}^{*2}] - \psi_n^2 \dot{\psi}_{n+1}^* \psi_{n+1}^*, \\ \dot{\psi}_n \psi_n \psi_{n-1}^{*2} &= \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} [\psi_n^2 \psi_{n-1}^{*2}] - \psi_n^2 \dot{\psi}_{n-1}^* \psi_{n-1}^*,\end{aligned}\tag{B.11}$$

Introduisons les relations de l'équation (B.11) dans le quatrième terme de l'équation (B.5) et après développement, nous obtenons :

$$\begin{aligned}-R_1 \sum_n \left\{ (\psi_{n+1}^2 + \psi_{n-1}^2) \psi_n^* \dot{\psi}_n + (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2}) \psi_n \dot{\psi}_n \right\} \\ = -R_1 \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} [\psi_n^2 (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2})] \right\} - R_1 \sum_n \left\{ \psi_{n+1}^2 \psi_n^* \dot{\psi}_n - \psi_n^2 \psi_{n-1}^* \dot{\psi}_{n-1}^* \right\} \\ - R_1 \sum_n \left\{ \psi_{n-1}^2 \psi_n^* \dot{\psi}_n - \psi_n^2 \psi_{n+1}^* \dot{\psi}_{n+1}^* \right\}.\end{aligned}\tag{B.12}$$

Notons que le deuxième et le troisième termes de droite de l'équation (B.12) sont toujours nuls, ce qui réduit le quatrième terme de l'équation (B.5) à :

$$-R_1 \sum_n \left\{ (\psi_{n+1}^2 + \psi_{n-1}^2) \psi_n^* \dot{\psi}_n + (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2}) \psi_n \dot{\psi}_n \right\} = -R_1 \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} [\psi_n^2 (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2})] \right\}.\tag{B.13}$$

□ **Simplification des trois derniers termes de l'équation (B.5)**

Soit \mathcal{S} la somme des trois derniers termes de l'équation (B.5) et soit \mathcal{R} la quantité définie comme suit :

$$\mathcal{R} = R_1 \sum_n \left\{ \psi_n \psi_{n+1} (\psi_n^{*2} + \psi_{n+1}^{*2}) + \psi_n^* \psi_{n+1}^* (\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2) \right\}.\tag{B.14}$$

La dérivée temporelle de \mathcal{R} donne :

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{R}}{d\tau} &= R_1 \sum_n \left\{ [\dot{\psi}_n \psi_{n+1} + \psi_n \dot{\psi}_{n+1}] (\psi_n^{*2} + \psi_{n+1}^{*2}) + [\dot{\psi}_n^* \psi_{n+1}^* + \psi_n^* \dot{\psi}_{n+1}^*] (\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2) \right\} \\ &+ 2R_1 \sum_n \left\{ \psi_n \psi_{n+1} (\dot{\psi}_n^* \psi_n^* + \dot{\psi}_{n+1}^* \psi_{n+1}^*) + \psi_n^* \psi_{n+1}^* (\dot{\psi}_n \psi_n + \dot{\psi}_{n+1} \psi_{n+1}) \right\}, \\ &= R_1 \sum_n \left\{ 2|\psi_n|^2 (\psi_{n+1} \dot{\psi}_n^* + \psi_{n+1}^* \dot{\psi}_n) + |\psi_{n+1}|^2 (\psi_{n+1}^* \dot{\psi}_n + \psi_{n+1} \dot{\psi}_n^*) + \psi_{n+1}^2 \dot{\psi}_n^* \psi_n^* + \psi_{n+1} \psi_n^{*2} \dot{\psi}_n \right\} \\ &+ R_1 \sum_n \left\{ 2|\psi_{n+1}|^2 (\psi_n^* \dot{\psi}_{n+1} + \psi_n \dot{\psi}_{n+1}^*) + |\psi_n|^2 (\psi_{n+1}^* \dot{\psi}_{n+1} + \psi_{n+1} \dot{\psi}_{n+1}^*) + \psi_{n+1}^2 \psi_n \dot{\psi}_{n+1} \right\} + R_1 \sum_n \left\{ \psi_{n+1}^2 \psi_n^* \dot{\psi}_{n+1}^* \right\}.\end{aligned}\tag{B.15}$$

En développant \mathcal{S} , nous constatons qu'elle peut encore se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= R_1 \sum_n \left\{ 2|\psi_n|^2 (\psi_{n+1} \dot{\psi}_n^* + \psi_{n+1}^* \dot{\psi}_n) + |\psi_{n+1}|^2 (\psi_{n+1}^* \dot{\psi}_n + \psi_{n+1} \dot{\psi}_n^*) + \psi_{n+1}^2 \dot{\psi}_n^* \psi_n^* + \psi_{n+1} \psi_n^{*2} \dot{\psi}_n \right\} \\ &+ R_1 \sum_n \left\{ 2|\psi_n|^2 (\psi_{n-1} \dot{\psi}_n^* + \psi_{n-1}^* \dot{\psi}_n) + |\psi_{n-1}|^2 (\psi_{n-1}^* \dot{\psi}_n + \psi_{n-1} \dot{\psi}_n^*) + \psi_{n-1}^2 \dot{\psi}_n^* \psi_n^* + \psi_{n-1} \psi_n^{*2} \dot{\psi}_n \right\}.\end{aligned}\tag{B.16}$$

Force est de constater que la première sommation de l'équation (B.16) est rigoureusement égale à la première sommation de l'équation (B.15). Compte tenu de cela, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \frac{d\mathcal{R}}{d\tau} - 2R_1 \left\{ \sum_n \left[(|\psi_{n+1}|^2 \psi_n \dot{\psi}_{n+1}^* - |\psi_n|^2 \psi_{n-1} \dot{\psi}_n^*) + (|\psi_{n+1}|^2 \psi_n^* \dot{\psi}_{n+1} - |\psi_n|^2 \psi_{n-1}^* \dot{\psi}_n) \right] \right\} \\ &- R_1 \left\{ \sum_n \left[(|\psi_n|^2 \psi_n \dot{\psi}_{n+1}^* - |\psi_{n-1}|^2 \psi_{n-1} \dot{\psi}_n^*) + (|\psi_n|^2 \psi_n^* \dot{\psi}_{n+1} - |\psi_{n-1}|^2 \psi_{n-1}^* \dot{\psi}_n) \right] \right\} \\ &- R_1 \left\{ \sum_n \left[(\psi_{n+1}^{*2} \psi_n \dot{\psi}_{n+1} - \psi_n^{*2} \psi_{n-1} \dot{\psi}_n) + (\psi_{n+1}^2 \psi_n^* \dot{\psi}_{n+1}^* - \psi_n^2 \psi_{n-1}^* \dot{\psi}_n) \right] \right\}.\end{aligned}\tag{B.17}$$

Étant donné que les termes contenant la somme s'annulent les uns par rapport aux autres dans l'équation (B.17), nous obtenons finalement pour les trois derniers termes de l'équation (B.5) la quantité :

$$\mathcal{S} = R_1 \sum_n \left\{ \frac{d}{d\tau} \mathcal{R} \right\} = R_1 \sum_n \left\{ \frac{d}{d\tau} [\psi_n \psi_{n+1} (\psi_n^{*2} + \psi_{n+1}^{*2}) + \psi_n^* \psi_{n+1}^* (\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2)] \right\}.\tag{B.18}$$

En introduisant les équations (B.18), (B.13), (B.10), (B.7), (B.6) dans l'équation (B.5), nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\tau} \left\{ \sum_n \left[P_1(\psi_{n+1} + \psi_{n-1})\psi_n^* + \frac{1}{2}Q_2|\psi_n|^4 - 2R_1|\psi_n|^2|\psi_{n+1}|^2 - \frac{1}{2}R_1\psi_n^2(\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2}) \right] \right\} \\ & + \frac{d}{d\tau} \left\{ \sum_n R_1 [\psi_n\psi_{n+1}(\psi_n^{*2} + \psi_{n+1}^{*2}) + \psi_n^*\psi_{n+1}^*(\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2)] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Intégrons par la suite l'équation (B.19) par rapport au temps τ puis, moyennant les relations suivantes,

$$\begin{aligned} \sum_n (\psi_{n+1} + \psi_{n-1})\psi_n^* &\equiv \sum_n (\psi_n^*\psi_{n+1} + \psi_n\psi_{n+1}^*), \\ \sum_n (\psi_{n+1}^{*2} + \psi_{n-1}^{*2})\psi_n^2 &\equiv \sum_n (\psi_n^2\psi_{n+1}^{*2} + \psi_n^{*2}\psi_{n+1}^2), \end{aligned}$$

nous déduisons finalement la grandeur conservée \mathcal{H} donnée par l'équation Eq. (2.12) de la section Sec. §2.2.1.

Annexe C

Détails des calculs sur la MEH

C.1 Équation algébrique vérifiée par $B_{0,n}$ pour $H = 1$

En résolvant dans un premier temps l'équation Eq. (2.74c) par rapport à A^2 , puis dans un second temps les équations Eq. (2.74a) et (2.74b) par rapport à $C_{1,n}$ et $S_{1,n}$, nous obtenons les expressions suivantes :

$$A^2 = -\frac{2(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_{0,n})(\alpha_1 + \alpha_2 B_{0,n} + \alpha_3 B_{0,n}^2)B_{0,n}}{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_{0,n})^2}, \quad (\text{C.1})$$

$$C_{1,n} = \frac{4(12\alpha_3 B_{0,n}^2 + 3\alpha_3 A^2 + 4\alpha_1 - 4\Omega^2 + 8\alpha_2 B_{0,n})F_0}{9\alpha_3^2 A^4 + 6[12\alpha_3^2 B_{0,n}^2 + 8\alpha_3 \alpha_2 B_{0,n} + 4\alpha_3(\alpha_1 - \Omega^2)]A^2 + 16[\Omega^2 + \Gamma^2 - 2(\alpha_1 + 2\alpha_2 B_{0,n} + 3\alpha_3 B_{0,n}^2)] + \mathcal{F}(B_{0,n})}, \quad (\text{C.2})$$

$$S_{1,n} = \frac{16\Gamma\Omega F_0}{9\alpha_3^2 A^4 + 6[12\alpha_3^2 B_{0,n}^2 + 8\alpha_3 \alpha_2 B_{0,n} + 4\alpha_3(\alpha_1 - \Omega^2)]A^2 + 16[\Omega^2 + \Gamma^2 - 2(\alpha_1 + 2\alpha_2 B_{0,n} + 3\alpha_3 B_{0,n}^2)] + \mathcal{F}(B_{0,n})}, \quad (\text{C.3})$$

avec $\mathcal{F}(B_{0,n}) = 16[\alpha_1^2 + 2(\alpha_1 + \alpha_2 B_{0,n})(2\alpha_2 + 3\alpha_3 B_{0,n})B_{0,n} + 9\alpha_3^2 B_{0,n}^4]$. Substituons par la suite la valeur de A^2 obtenue à l'équation Eq. (C.1) dans les équations Eq. (C.2) et Eq. (C.3) d'une part et, en effectuant l'opération $(C_{1,n}^2 + S_{1,n}^2) - A^2 = 0$ d'autre part, nous obtenons après simplification et collecte des termes en $B_{0,n}$ l'équation algébrique non linéaire donnée par l'équation Eq. (2.75) de la section §2.3.5, où les coefficients sont respectivement :

$$\begin{aligned} e_0 &= 2F_0^2 \alpha_3^2, \\ e_1 &= 4\alpha_1 \alpha_2 \left[(\Omega^2 - \alpha_1)^2 + \Omega^2 \Gamma^2 + \frac{9F_0^2 \alpha_3}{2\alpha_1} \right], \\ e_2 &= 4\alpha_2 (\alpha_2^2 + 6\alpha_1 \alpha_3) \Omega^4 + 4\alpha_2 [(\Gamma^2 - 6\alpha_1) \alpha_2^2 + 3\alpha_1 \alpha_3 (\Gamma^2 - 3\alpha_1)] \Omega^2 + 4\alpha_2 \left[5\alpha_1^2 \alpha_2^2 + 3\alpha_1^3 \alpha_3 + \frac{27}{2} F_0^2 \alpha_3^2 \right], \\ e_3 &= 4\alpha_3 (9\alpha_1 \alpha_3 + 7\alpha_2^2) \Omega^4 + 4\alpha_3 \left[9\alpha_1 \alpha_3 (\Gamma^2 - \alpha_1) + (7\Gamma^2 - 38\alpha_1) \alpha_2 - 4\frac{\alpha_2^4}{\alpha_3} \right] \Omega^2 + 32\alpha_1 \alpha_2^4 + 54\alpha_3^3 F_0^2 \\ &\quad + 9\alpha_3^2 \alpha_1^3 + 100\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3, \\ e_4 &= 60\alpha_2 \alpha_3^2 \Omega^4 + 4\alpha_2 \alpha_3 [3\alpha_3 (5\Gamma^2 - 26\alpha_1) - 31\alpha_2^2] \Omega^2 + 16\alpha_2^5 + 171\alpha_1^2 \alpha_3^2 \alpha_2 + 220\alpha_1 \alpha_3 \alpha_2^3, \\ e_5 &= 36\alpha_3^3 \Omega^4 + 12\alpha_3^2 [3\alpha_3 (\Gamma^2 - 6\alpha_1) - 29\alpha_2^2] \Omega^2 + 99\alpha_1^2 \alpha_3^3 + 136\alpha_3 \alpha_2^4 + 579\alpha_1 \alpha_2^2 \alpha_3^2, \\ e_6 &= 5\alpha_2 \alpha_3^2 [-84\alpha_3 \Omega^2 + 93\alpha_2^2 + 138\alpha_1 \alpha_3], \\ e_7 &= -180\alpha_3^4 \Omega^2 + 15\alpha_3^3 (21\alpha_1 \alpha_3 + 53\alpha_2^2), \\ e_8 &= 675\alpha_2 \alpha_3^4, \\ e_9 &= 225\alpha_3^5. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

C.2 Systèmes d'équations obtenus par la MEH pour $H > 1$

La prise en compte des harmoniques d'ordre supérieur ($H = 2, H = 3, \dots$) dans l'équation Eq. (2.72) conduit à un système algébrique non linéaire de $(2\mathbf{H} + 1)$ équations à $(2\mathbf{H} + 1)$ inconnues comme l'attestent les équations Eq. (C.5), (C.6) et Eq. (C.7) obtenues respectivement pour $H = 2, H = 3$ et $H = 4$.

❖ Système algébrique obtenu pour $H = 2$:

$$\left\{ \begin{array}{l} 4(\alpha_1 - 0\Omega^2) \mathbf{B}_{0,n} + 2(\mathcal{A}_1^2 + \mathcal{A}_2^2 + 2B_{0,n}^2) \alpha_2 + [6B_{0,n}(\mathcal{A}_1^2 + \mathcal{A}_2^2) + 3(C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2) C_{2,n} + 6S_{1,n}S_{2,n}C_{1,n}] \alpha_3 \\ + 4\alpha_3 B_{0,n}^3 = 0, \\ 4(\alpha_1 - \Omega^2) \mathbf{C}_{1,n} + 4(S_{1,n}S_{2,n} + C_{1,n}C_{2,n} + 2B_{0,n}C_{1,n}) \alpha_2 + 4\Gamma\Omega S_{1,n} - 4F_0 + 3[\mathcal{A}_1^2 + 2\mathcal{A}_2^2 + 4B_{0,n}^2] \alpha_3 C_{1,n} \\ + 12(S_{1,n}S_{2,n} + C_{1,n}C_{2,n}) \alpha_3 B_{0,n} = 0, \\ 4(\alpha_1 - 4\Omega^2) \mathbf{C}_{2,n} + 2(C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2 + 4B_{0,n}C_{2,n}) \alpha_2 + 3[(\mathcal{A}_2^2 + 2\mathcal{A}_1^2 + 4B_{0,n}^2) C_{2,n} + 2(C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2) B_{0,n}] \alpha_3 \\ + 8\Gamma\Omega S_{2,n} = 0, \\ 4(\alpha_1 - \Omega^2) \mathbf{S}_{1,n} + 4(C_{1,n}S_{2,n} - S_{1,n}C_{2,n} + 2B_{0,n}S_{1,n}) \alpha_2 + 3(\mathcal{A}_1^2 + 2\mathcal{A}_2^2 + 4B_{0,n}^2) \alpha_3 S_{1,n} - 4\Gamma\Omega C_{1,n} \\ + 12(C_{1,n}S_{2,n} - S_{1,n}C_{2,n}) \alpha_3 B_{0,n} = 0, \\ 4(\alpha_1 - 4\Omega^2) \mathbf{S}_{2,n} + 4(C_{1,n}S_{1,n} + 2B_{0,n}S_{2,n}) \alpha_2 + 3[(\mathcal{A}_2^2 + 2\mathcal{A}_1^2 + 4B_{0,n}^2) S_{2,n} + 4B_{0,n}C_{1,n}S_{1,n}] \alpha_3 \\ - 8\Gamma\Omega C_{2,n} = 0. \end{array} \right. \quad (\text{C.5})$$

❖ Système algébrique obtenu pour $H = 3$:

$$\left\{ \begin{array}{l} 4(\alpha_1 - 0\Omega^2) \mathbf{B}_{0,n} + 2(\sum_{k=1}^3 \mathcal{A}_k^2 + 2B_{0,n}^2) \alpha_2 + [6B_{0,n} \sum_{k=1}^2 \mathcal{A}_k^2 + 3C_{2,n} (C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2) + 2B_{0,n} (3S_{3,n}^2 + 2B_{0,n}^2)] \alpha_3 \\ + 6[C_{1,n} (\sum_{k=1}^2 S_{k,n}S_{k+1,n} + C_{2,n}C_{3,n}) + S_{1,n} (C_{2,n}S_{3,n} - S_{2,n}C_{3,n})] \alpha_3 = 0, \\ 4(\alpha_1 - \Omega^2) \mathbf{C}_{1,n} + 4[\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + 2B_{0,n}C_{1,n}] \alpha_2 - 4F_0 + 4\Gamma\Omega S_{1,n} \\ + [12B_{0,n} \sum_{k=1}^2 (C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + 3C_{1,n} (\mathcal{A}_1^2 + 2\mathcal{A}_2^2 + 2C_{3,n}^2 + 4B_{0,n}^2 + C_{1,n}C_{3,n} + 2S_{1,n}S_{3,n})] \alpha_3 \\ + 3[C_{3,n} (C_{2,n}^2 - S_{1,n}^2 - S_{2,n}^2) + 2C_{2,n}S_{2,n}S_{3,n}] \alpha_3 = 0, \\ 4(\alpha_1 - 4\Omega^2) \mathbf{C}_{2,n} + 8\Gamma\Omega S_{2,n} + 2[C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2 + 2C_{1,n}C_{3,n} + 2S_{1,n}S_{3,n} + 4B_{0,n}C_{2,n}] \alpha_2 + 6B_{0,n} (C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2) \alpha_3 \\ + [12B_{0,n} (C_{1,n}C_{3,n} + S_{1,n}S_{3,n} + B_{0,n}C_{2,n}) + 3C_{2,n} (2\mathcal{A}_1^2 + \mathcal{A}_2^2 + 2\mathcal{A}_3^2) + 6C_{3,n} (S_{1,n}S_{2,n} + C_{1,n}C_{2,n})] \alpha_3 \\ + 6\alpha_3 S_{3,n} (C_{1,n}S_{2,n} - S_{1,n}C_{2,n}) = 0, \\ 4(\alpha_1 - 9\Omega^2) \mathbf{C}_{3,n} + 4(C_{1,n}C_{2,n} - S_{1,n}S_{2,n} + 2B_{0,n}C_{3,n}) \alpha_2 + 12\Gamma\Omega S_{3,n} + 3C_{3,n} \alpha_3 (\mathcal{A}_3^2 + 2\mathcal{A}_1^2 + 2\mathcal{A}_2^2) \\ [12B_{0,n} (C_{1,n}C_{2,n} - S_{1,n}S_{2,n} + B_{0,n}C_{3,n}) + 3C_{1,n} (C_{2,n}^2 + S_{2,n}^2) + 6S_{1,n}S_{2,n}C_{2,n} + C_{1,n} (C_{1,n}^2 - 3S_{1,n}^2)] \alpha_3 = 0, \\ 4(\alpha_1 - \Omega^2) \mathbf{S}_{1,n} - 4\Gamma\Omega C_{1,n} + [4\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}S_{k+1,n} - S_{k,n}C_{k+1,n}) + 2B_{0,n}S_{1,n}] \alpha_2 + 6C_{3,n} \alpha_3 (S_{2,n}C_{2,n} - S_{1,n}C_{1,n}) \\ + \{12B_{0,n} [\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}S_{k+1,n} - S_{k,n}C_{k+1,n}) + B_{0,n}S_{1,n}] + 3S_{3,n} (C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2 + S_{2,n}^2 - C_{2,n}^2)\} \alpha_3 \\ + 3\alpha_3 S_{1,n} (2\mathcal{A}_2^2 + 2\mathcal{A}_3^2 + \mathcal{A}_1^2) = 0, \\ 4(\alpha_1 - 4\Omega^2) \mathbf{S}_{2,n} - 8\Gamma\Omega C_{2,n} + 4(C_{1,n}S_{1,n} + C_{1,n}S_{3,n} - S_{1,n}C_{3,n} + 2B_{0,n}S_{2,n}) \alpha_2 + 3\alpha_3 S_{2,n} \sum_{k=1}^3 \mathcal{A}_k^2 \\ + [12B_{0,n} (S_{1,n}C_{1,n} + S_{3,n}C_{1,n} - S_{1,n}C_{3,n} + B_{0,n}S_{2,n}) + 6S_{3,n} (C_{1,n}C_{2,n} + S_{1,n}S_{2,n})] \alpha_3 \\ + 6\alpha_3 C_{3,n} (S_{1,n}C_{2,n} - S_{2,n}C_{1,n}) = 0, \\ 4(\alpha_1 - 9\Omega^2) \mathbf{S}_{3,n} - 12\Gamma\Omega C_{3,n} + 4(S_{1,n}C_{2,n} + C_{1,n}S_{2,n} + 2B_{0,n}S_{3,n}) \alpha_2 + 3\alpha_3 S_{3,n} (2\mathcal{A}_1^2 + 2\mathcal{A}_2^2 + \mathcal{A}_3^2) - \alpha_3 S_{1,n}^3 \\ + 3[S_{1,n} (C_{1,n}^2 + S_{2,n}^2 - C_{2,n}^2) + 4B_{0,n} (S_{1,n}C_{2,n} + C_{1,n}S_{2,n} + B_{0,n}S_{3,n})] \alpha_3 = 0. \end{array} \right. \quad (\text{C.6})$$

❖ **Système algébrique obtenu pour $H = 4$:**

$$\begin{aligned}
& 4(\alpha_1 - 0\Omega^2)\mathbf{B}_{0,n} + 2\left(\sum_{k=1}^4 \mathcal{A}_k^2 + 2B_{0,n}^2\right)\alpha_2 + [6B_{0,n}\sum_{k=1}^2 \mathcal{A}_k^2 + 3C_{2,n}(C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2) + 3C_{4,n}(C_{2,n}^2 - S_{2,n}^2)]\alpha_3 \\
& + 4\alpha_3 B_{0,n}^3 + 6C_{2,n}S_{2,n}S_{4,n}\alpha_3 + \sum_{k=2}^3 [C_{1,n}(C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + S_{1,n}(C_{k,n}S_{k+1,n} - S_{k,n}C_{k+1,n})]\alpha_3 = 0, \\
& 4(\alpha_1 - \Omega^2)\mathbf{C}_{1,n} + 4\Gamma\Omega S_{1,n} + 4\left[\sum_{k=1}^3 (C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + 2B_{0,n}C_{1,n}\right]\alpha_2 - 4F_0 \\
& + [12B_{0,n}\sum_{k=1}^3 (C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + 3C_{3,n}\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}^2 - S_{k,n}^2) + 3C_{1,n}(\mathcal{A}_1^2 + 4B_{0,n}^2) + 6C_{1,n}\sum_{k=2}^4 \mathcal{A}_k^2]\alpha_3 \\
& + 6\alpha_3 \sum_{k=1}^2 [(C_{1,n}S_{k,n} + C_{2,n}S_{k+1,n})S_{k+2,n} + C_{4,n}(C_{k,n}C_{k+1,n} - S_{k,n}S_{k+1,n}) + S_{4,n}S_{k,n}C_{k+1,n}] = 0, \\
& 4(\alpha_1 - 4\Omega^2)\mathbf{C}_{2,n} + 8\Gamma\Omega S_{2,n} + 2[C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2 + 4B_{0,n}C_{2,n} + 2\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}C_{k+2,n} + S_{k,n}S_{k+2,n})]\alpha_2 \\
& + 6\{B_{0,n}(C_{1,n}^2 - S_{1,n}^2) + C_{2,n}\sum_{k=1}^4 \mathcal{A}_k^2 - C_{2,n}\mathcal{A}_2^2 + \frac{1}{2}[C_{2,n}\mathcal{A}_2^2 + C_{4,n}\sum_{k=1}^3 (C_{k,n}^2 - S_{k,n}^2) - C_{4,n}(C_{2,n}^2 - S_{2,n}^2)]\}\alpha_3 \\
& + 12\alpha_3 B_{0,n}\left[\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}C_{k+2,n} + S_{k,n}S_{k+2,n}) + B_{0,n}C_{2,n}\right] + 6\alpha_3 [S_{4,n}\sum_{k=1}^3 C_{k,n}S_{k,n} - S_{4,n}C_{2,n}S_{2,n}] \\
& + 6\alpha_3 \left\{\sum_{k=2}^3 [C_{1,n}(C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + S_{1,n}(S_{k,n}C_{k+1,n} - C_{k,n}S_{k+1,n})]\right\} = 0, \\
& 4(\alpha_1 - 9\Omega^2)\mathbf{C}_{3,n} + 12\Gamma\Omega S_{3,n} + 4[C_{1,n}(C_{2,n} + C_{4,n}) + S_{1,n}(S_{4,n} - S_{2,n}) + 2B_{0,n}C_{3,n}]\alpha_2 + [C_{1,n}^3 + 3C_{3,n}\mathcal{A}_3^2]\alpha_3 \\
& + 6\{C_{3,n}[\sum_{k=1}^4 \mathcal{A}_k^2 - \mathcal{A}_3^2] + 2B_{0,n}[C_{1,n}(C_{2,n} + C_{4,n}) + S_{1,n}(S_{4,n} - S_{2,n}) + B_{0,n}C_{3,n}] + S_{1,n}S_{2,n}C_{2,n}\}\alpha_3 \\
& + 6\left\{\sum_{k=1}^2 [C_{4,n}(C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + S_{4,n}(C_{k,n}S_{k+1,n} - S_{k,n}C_{k+1,n})] + \frac{1}{2}C_{1,n}(C_{2,n}^2 - S_{1,n}^2 - S_{2,n}^2)\right\}\alpha_3 = 0, \\
& 4(\alpha_1 - 16\Omega^2)\mathbf{C}_{4,n} + 16\Gamma\Omega S_{4,n} + 2(C_{2,n}^2 - S_{2,n}^2 - 2S_{1,n}S_{3,n} + 2C_{1,n}C_{3,n} + 4B_{0,n}C_{4,n})\alpha_2 + 3\alpha_3 C_{4,n}\mathcal{A}_4^2 \\
& + 6\{C_{4,n}\sum_{k=1}^3 \mathcal{A}_k^2 + \sum_{k=1}^2 [S_{3,n}S_{k,n}C_{k+1,n} - C_{1,n}S_{k,n}S_{k+1,n}] + C_{3,n}(S_{1,n}S_{2,n} + C_{1,n}C_{2,n}) + B_{0,n}(C_{2,n}^2 - S_{2,n}^2)\}\alpha_3 \\
& + 3[C_{2,n}(C_{1,n}^2 + C_{3,n}^2 - S_{1,n}^2 - S_{3,n}^2) + 4B_{0,n}(C_{1,n}C_{3,n} - S_{1,n}S_{3,n} + B_{0,n}C_{4,n})]\alpha_3 = 0, \\
& 4(\alpha_1 - \Omega^2)\mathbf{S}_{1,n} - 4\Gamma\Omega C_{1,n} + 4\left[\sum_{k=1}^3 (C_{k,n}S_{k+1,n} - S_{k,n}C_{k+1,n}) + 2B_{0,n}S_{1,n}\right]\alpha_2 + 6\alpha_3 S_{1,n}\sum_{k=2}^4 \mathcal{A}_k^2 \\
& + 6\left\{\sum_{k=1}^2 (-1)^k [S_{4,n}(S_{k,n}S_{k+1,n} - C_{k,n}C_{k+1,n}) + C_{4,n}(C_{k,n}S_{k+1,n} + S_{k,n}C_{k+1,n})] + 2B_{0,n}^2 S_{1,n} + \frac{1}{2}S_{1,n}\mathcal{A}_1^2\right\}\alpha_3 \\
& + 3[S_{3,n}\sum_{k=1}^2 (-1)^k (S_{k,n}^2 - C_{k,n}^2) + 2C_{3,n}(C_{2,n}S_{2,n} - C_{1,n}S_{1,n}) + 2B_{0,n}\sum_{k=1}^3 (C_{k,n}S_{k+1,n} - S_{k,n}C_{k+1,n})]\alpha_3 = 0, \\
& 4(\alpha_1 - 4\Omega^2)\mathbf{S}_{2,n} - 8\Gamma\Omega C_{2,n} + 4\left[\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}S_{k+2,n} - S_{k,n}C_{k+2,n}) + C_{1,n}S_{1,n} + 2B_{0,n}S_{2,n}\right]\alpha_2 - 6\alpha_3 S_{2,n}\mathcal{A}_2^2 \\
& + 6\{S_{2,n}\sum_{k=1}^4 \mathcal{A}_k^2 + \sum_{k=2}^3 [S_{1,n}(C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + C_{1,n}(C_{k,n}S_{k+1,n} - S_{k,n}C_{k+1,n})] + 2B_{0,n}^2 S_{2,n}\}\alpha_3 \\
& + 3[S_{2,n}\mathcal{A}_2^2 + 2C_{4,n}(C_{3,n}S_{3,n} - C_{1,n}S_{1,n}) + S_{4,n}(C_{1,n}^2 + S_{3,n}^2 - S_{1,n}^2 - C_{3,n}^2) + 4B_{0,n}C_{1,n}S_{1,n}]\alpha_3 \\
& + 12\alpha_3 B_{0,n}\sum_{k=1}^2 (C_{k,n}S_{k+2,n} - S_{k,n}C_{k+2,n}) = 0, \\
& 4(\alpha_1 - 9\Omega^2)\mathbf{S}_{3,n} - 12\Gamma\Omega C_{3,n} + 4[S_{1,n}C_{2,n} + C_{1,n}S_{2,n} + C_{4,n}(C_{1,n} - S_{1,n}) + 2B_{0,n}S_{3,n}]\alpha_2 - 6\alpha_3 S_{3,n}\mathcal{A}_3^2 \\
& + 6\{S_{3,n}\sum_{k=1}^4 \mathcal{A}_k^2 + \sum_{k=1}^2 [S_{4,n}(C_{k,n}C_{k+1,n} + S_{k,n}S_{k+1,n}) + C_{4,n}(S_{k,n}C_{k+1,n} - C_{k,n}S_{k+1,n})] + C_{1,n}C_{2,n}S_{2,n}\}\alpha_3 \\
& + 3\{S_{3,n}\mathcal{A}_3^2 + S_{1,n}(C_{1,n}^2 + S_{1,n}^2 - C_{2,n}^2 - \frac{1}{3}S_{1,n}^2) + 4B_{0,n}[C_{1,n}(S_{2,n} + S_{4,n}) + S_{1,n}(C_{2,n} - C_{4,n})]\}\alpha_3 \\
& + 12\alpha_3 B_{0,n}^2 S_{3,n} = 0, \\
& 4(\alpha_1 - 16\Omega^2)\mathbf{S}_{4,n} - 16\Gamma\Omega C_{4,n} + 4\left[\sum_{k=1}^2 C_{k,n}S_{4-k,n} + S_{1,n}C_{3,n} + 2B_{0,n}S_{4,n}\right]\alpha_2 + 3S_{4,n}[\mathcal{A}_4^2 + 2\sum_{k=1}^3 \mathcal{A}_k^2]\alpha_3 \\
& + 3\{S_{2,n}[S_{3,n}^2 - C_{3,n}^2 - S_{1,n}^2 + C_{1,n}^2] + 4B_{0,n}[\sum_{k=1}^2 C_{k,n}S_{4-k,n} + S_{1,n}C_{3,n} + B_{0,n}S_{4,n}]\}\alpha_3 \\
& + 6\left[\sum_{k=1}^2 (S_{3,n}C_{k,n} + C_{1,n}S_{k,n})C_{k+1,n} + S_{1,n}(S_{2,n}S_{3,n} - C_{2,n}C_{3,n})\right]\alpha_3 = 0.
\end{aligned} \tag{C.7}$$

Avec $\mathcal{A}_1^2 = S_{1,n}^2 + C_{1,n}^2$, $\mathcal{A}_2^2 = S_{2,n}^2 + C_{2,n}^2$, $\mathcal{A}_3^2 = S_{3,n}^2 + C_{3,n}^2$ et $\mathcal{A}_4^2 = S_{4,n}^2 + C_{4,n}^2$.

Annexe D

Expression de la matrice tronquée de Hill de l'équation Eq. (2.71)

Afin d'étudier au moyen de la matrice de Hill la stabilité de la solution périodique de l'équation Eq. (2.71), nous cherchons une solution de cette équation sous la forme :

$$Y_n(\tau) = y_0(\tau) + \varepsilon(\tau), \quad (\text{D.1})$$

où $y_0(\tau)$ est la solution périodique et $\varepsilon(\tau)$ est une perturbation infinitésimale de cette solution périodique. Pour des raisons de simplicité d'écriture, nous avons omis l'indice n . L'introduction de l'équation Eq. (D.1) dans l'équation Eq. (2.71) conduit à l'équation linéarisée dite de Hill suivante :

$$\frac{d^2 v(\tau)}{d\tau^2} + \left(\alpha_1 - \frac{1}{4}\Gamma + 2\alpha_2 y_0(\tau) + 3\alpha_3 y_0^2(\tau) \right) v(\tau) = 0, \quad (\text{D.2})$$

où nous avons posé $\varepsilon(\tau) = v(\tau)e^{-\frac{\Gamma}{2}\tau}$. Tenant compte du fait que la solution périodique de l'équation Eq. (2.71) est de la forme [voir équation Eq. (2.72)] :

$$y_0(\tau) = B_0 + A \cos(\Omega\tau - \phi), \quad (\text{D.3})$$

cherchons une solution de l'équation Eq. (D.2) sous la forme :

$$v(\tau) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n e^{a_n \tau}, \quad (\text{D.4})$$

où ρ_n est un vecteur complexe et $a_n = \theta_1 + in\Omega$ un complexe, avec $i = \sqrt{-1}$. L'introduction des équations Eq. (D.4) et Eq. (D.3) dans l'équation Eq. (D.2) permet d'obtenir l'équation :

$$\begin{aligned} & \frac{3}{4}\alpha_3 A^2 \left(e^{-2i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n e^{a_{n+2}\tau} + e^{2i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n e^{a_{n-2}\tau} \right) + (\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A \left(e^{-i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n e^{a_{n+1}\tau} + e^{i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n e^{a_{n-1}\tau} \right) \\ & + \left[\alpha_1 - \frac{\Gamma}{4} + 2\alpha_2 B_0 + 3\alpha_3 \left(B_0^2 + \frac{A^2}{2} \right) \right] \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n e^{a_n \tau} + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n a_n^2 e^{a_n \tau} = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Posons par la suite les changements d'indices suivants : $n = n_1 - 2$, $n = n_2 + 2$, $n = n_3 - 1$, $n = n_4 + 1$. Sachant que les sommes sont infinies, lorsque $n \rightarrow \pm\infty$, $n_k \rightarrow \pm\infty$ pour $k = 1, 2, 3$ et 4 , l'équation Eq. (D.5) devient :

$$\begin{aligned} & \frac{3}{4}\alpha_3 A^2 \left(e^{-2i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_{n-2} e^{a_n \tau} + e^{2i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_{n+2} e^{a_n \tau} \right) + (\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A \left(e^{-i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_{n-1} e^{a_n \tau} + e^{i\phi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_{n+1} e^{a_n \tau} \right) \\ & + \left[\alpha_1 - \frac{\Gamma}{4} + 2\alpha_2 B_0 + 3\alpha_3 \left(B_0^2 + \frac{A^2}{2} \right) \right] \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n e^{a_n \tau} + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \rho_n a_n^2 e^{a_n \tau} = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

L'équation Eq. (D.6) peut encore se mettre sous la forme :

$$\frac{3}{4}\alpha_3 e^{-2i\phi} A^2 \rho_{n-2} + (\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) e^{-i\phi} A \rho_{n-1} + [\delta + (\theta_1 + in\Omega)^2] \rho_n + (\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) e^{i\phi} A \rho_{n+1} + \frac{3}{4}\alpha_3 e^{2i\phi} A^2 \rho_{n+2} = 0, \quad (D.7)$$

$$n = -\infty, \dots, +\infty,$$

où nous avons posé $\delta = \alpha_1 - \frac{\Gamma}{4} + 2\alpha_2 B_0 + 3\alpha_3 \left(B_0^2 + \frac{A^2}{2} \right)$. Compte tenu du fait que la matrice de Hill soit infinie, il est primordial de diviser toute l'équation Eq. (D.7) par le terme $\delta - 4n^2$ pour raison de convergence, ce qui permet d'avoir :

$$\frac{3}{4} \frac{\alpha_3 e^{-2i\phi} A^2}{\delta - 4n^2} \rho_{n-2} + \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) e^{-i\phi} A}{\delta - 4n^2} \rho_{n-1} + \frac{[\delta + (\theta_1 + in\Omega)^2]}{\delta - 4n^2} \rho_n + \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) e^{i\phi} A}{\delta - 4n^2} \rho_{n+1} + \frac{\frac{3}{4}\alpha_3 e^{2i\phi} A^2}{\delta - 4n^2} \rho_{n+2} = 0,$$

$$n = -\infty, \dots, +\infty. \quad (D.8)$$

L'attribution des valeurs à n , notamment $n = -2, -1, 0, +1, +2$ dans l'équation Eq. (D.8), permet d'avoir la matrice tronquée H d'ordre 5 de Hill dont l'expression est donnée par :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\delta + (\theta_1 - 2i\Omega)^2}{\delta - 16} & \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{i\phi}}{\delta - 16} & \frac{\frac{3}{4}\alpha_3 A^2 e^{2i\phi}}{\delta - 16} & 0 & 0 \\ \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{-i\phi}}{\delta - 4} & \frac{\delta + (\theta_1 - i\Omega)^2}{\delta - 4} & \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{i\phi}}{\delta - 4} & \frac{\frac{3}{4}\alpha_3 A^2 e^{2i\phi}}{\delta - 4} & 0 \\ \frac{\frac{3}{4}\alpha_3 A^2 e^{-2i\phi}}{\delta} & \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{-i\phi}}{\delta} & \frac{\delta + \theta_1^2}{\delta} & \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{i\phi}}{\delta} & \frac{\frac{3}{4}\alpha_3 A^2 e^{2i\phi}}{\delta} \\ 0 & \frac{\frac{3}{4}\alpha_3 A^2 e^{-2i\phi}}{\delta - 4} & \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{-i\phi}}{\delta - 4} & \frac{\delta + (\theta_1 + i\Omega)^2}{\delta - 4} & \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{i\phi}}{\delta - 4} \\ 0 & 0 & \frac{\frac{3}{4}\alpha_3 A^2 e^{-2i\phi}}{\delta - 16} & \frac{(\alpha_2 + 3\alpha_3 B_0) A e^{-i\phi}}{\delta - 16} & \frac{\delta + (\theta_1 + 2i\Omega)^2}{\delta - 16} \end{pmatrix}. \quad (D.9)$$

Les valeurs propre de cette matrice tronquée d'ordre 5 renseignent sur la stabilité de la solution périodique $y_0(\tau)$, tel que le montrent les panels (e) et (f) de la figure 49.

Annexe E

Étapes permettant l'obtention de l'équation de SNL cubique

Le but de cette section est de détailler les étapes intermédiaires qui ont abouti à l'obtention de l'équation de Schrödinger non linéaire cubique.

En insérant l'équation Eq. (2.86) dans l'équation Eq. (2.80), nous obtenons :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon \left\{ \ddot{F}_{1,n} - 2i\omega \dot{F}_{1,n} - \omega^2 F_{1,n} \right\} e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 \ddot{F}_{0,n} + \varepsilon^2 \left\{ \ddot{F}_{2,n} - 4i\omega \dot{F}_{2,n} - 4\omega^2 F_{2,n} \right\} e^{2i\theta_n} + \varepsilon^2 [F_{0,n+1} - 2F_{0,n} + F_{0,n-1}] \\
& - k_2 \left\{ \varepsilon \left[e^{ik_0\ell} F_{1,n+1} - 2F_{1,n} + e^{-ik_0\ell} F_{1,n-1} \right] e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 \left[e^{2ik_0\ell} F_{2,n+1} - 2F_{2,n} + e^{-2ik_0\ell} F_{2,n-1} \right] e^{2i\theta_n} \right\} \\
& + \varepsilon \left\{ j \sum_m \frac{e^{ik_0 m \ell} F_{1,n+m} + e^{-ik_0 m \ell} F_{1,n-m}}{m^3} \right\} e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 \left\{ j \sum_m \frac{e^{2ik_0 m \ell} F_{2,n+m} + e^{-2ik_0 m \ell} F_{2,n-m}}{m^3} \right\} e^{2i\theta_n} \\
& + \varepsilon^2 \left\{ j \sum_m \frac{F_{0,n+m} + F_{0,n-m}}{m^3} \right\} + \omega_g^2 \left\{ \varepsilon^2 F_{2,n} e^{2i\theta_n} - \alpha^2 \left[2\varepsilon^2 |F_{1,n}|^2 + 2\varepsilon^3 (F_{1,n}^* F_{2,n} + F_{1,n} F_{0,n}) e^{i\theta_n} \right] \right\} \\
& + \omega_g^2 \left\{ \varepsilon F_{1,n} e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 F_{0,n} + \varepsilon^2 F_{1,n}^2 e^{2i\theta_n} + 3\beta \varepsilon^3 |F_{1,n}|^2 F_{1,n} e^{i\theta_n} \right\} + 3\varepsilon^3 k_4 \left\{ 2 \left(F_{1,n+1} e^{ik_0\ell} + F_{1,n-1} e^{-ik_0\ell} \right) |F_{1,n}|^2 \right\} e^{i\theta_n} \\
& + 3\varepsilon^3 k_4 \left\{ - \left(F_{1,n+1}^2 e^{2ik_0\ell} + F_{1,n-1}^2 e^{-2ik_0\ell} \right) F_{1,n} - 2 |F_{1,n}|^2 F_{1,n} + |F_{1,n+1}|^2 F_{1,n+1} e^{ik_0\ell} \right\} e^{i\theta_n} \\
& + 3\varepsilon^3 k_4 \left\{ |F_{1,n-1}|^2 F_{1,n-1} e^{-k_0\ell} - 2 \left(|F_{1,n+1}|^2 + |F_{1,n-1}|^2 \right) F_{1,n} + \left(F_{1,n+1}^* e^{-ik_0\ell} + F_{1,n-1}^* e^{ik_0\ell} \right) F_{1,n}^2 \right\} \\
& \times e^{i\theta_n} + CC = 0,
\end{aligned} \tag{E.1}$$

où $F_{j,n} = F_j(\varepsilon n \ell, \varepsilon \tau)$, $F_{j,n \pm m} = F_j(\varepsilon(n \pm m)\ell, \varepsilon \tau)$, $j = 0, 1, 2$; $m = 1, 2, \dots$. L'enveloppe de l'onde variant lentement dans le temps, elle est traitée dans le domaine continu. Pour cela, nous posons $\varepsilon n \ell \rightarrow Z$, $\varepsilon \tau \rightarrow T$ pour les fonctions F_i de telle sorte qu'on ait en général pour le développement de Taylor des fonctions $F_{j,n \pm 1}$, $F_{j,n \pm m}$:

$$F_j[\varepsilon(n \pm m)\ell, \varepsilon \tau] = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \left(\pm \varepsilon m \ell \frac{\partial}{\partial Z} \right)^r F_j(Z, T), \quad j = 0, 1, 2, \tag{E.2}$$

soit donc

$$F_{j,n \pm 1} \approx F_j(Z, T) \pm \frac{1}{1!} \varepsilon \ell \frac{\partial}{\partial Z} F_j(Z, T) + \frac{1}{2!} \varepsilon^2 \ell^2 \frac{\partial^2}{\partial Z^2} F_j(Z, T) \pm \frac{1}{3!} \varepsilon^3 \ell^3 \frac{\partial^3}{\partial Z^3} F_j(Z, T) + \dots, \tag{E.3a}$$

$$F_{j,n \pm m} \approx F_j(Z, T) \pm \frac{1}{1!} m \varepsilon \ell \frac{\partial}{\partial Z} F_j(Z, T) + \frac{1}{2!} m^2 \varepsilon^2 \ell^2 \frac{\partial^2}{\partial Z^2} F_j(Z, T) \pm \frac{1}{3!} m^3 \varepsilon^3 \ell^3 \frac{\partial^3}{\partial Z^3} F_j(Z, T) + \dots, \tag{E.3b}$$

avec $j = 0, 1, 2$. La substitution des équations Eq. (E.3a) et Eq. (E.3b) (après avoir remplacé j par 0, 1, 2) dans l'équation Eq.

(E.1) permet d'avoir :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon \left\{ \varepsilon^2 \frac{\partial^2 F_1}{\partial T^2} - 2i\varepsilon\omega \frac{\partial F_1}{\partial T} - \omega^2 F_1 \right\} e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 \left\{ \varepsilon^2 \frac{\partial^2 F_0}{\partial T^2} \right\} + \varepsilon^2 \left\{ \varepsilon^2 \frac{\partial^2 F_2}{\partial T^2} - 4i\omega\varepsilon \frac{\partial F_2}{\partial T} - 4\omega^2 F_2 \right\} e^{2i\theta_n} \\
& - k_2 \left\{ \varepsilon \left[-4 \sin^2 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right) \right] F_1 + \varepsilon^2 \left[2i\ell \sin(k_0 \ell) \frac{\partial F_1}{\partial Z} \right] + \varepsilon^3 \left[\ell^2 \cos(k_0 \ell) \frac{\partial^2 F_1}{\partial Z^2} \right] \right\} e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 \{ \omega_g^2 (F_0 - 2\alpha |F_1|^2) \} \\
& - k_2 \left\{ \varepsilon^2 [-4 \sin^2(k_0 \ell) F_2] + \varepsilon^3 \left[2i\ell \sin(2k_0 \ell) \frac{\partial F_2}{\partial Z} \right] \right\} e^{2i\theta_n} + \varepsilon \{ \omega_g^2 F_1 \} e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 \{ \omega_g^2 (F_2 - \alpha F_1^2) \} e^{2i\theta_n} \\
& + \varepsilon^3 \{ -2\alpha (F_1^* F_2 + F_0 F_1) + 3\beta |F_1|^2 F_1 \} e^{i\theta_n} + \varepsilon^3 \left\{ -48k_4 \sin^4 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right) |F_1|^2 F_1 \right\} e^{i\theta_n} + \varepsilon^2 \left\{ \hat{J} \sum_m \frac{2F_0}{m^3} \right\} \\
& + \hat{J} \left\{ \varepsilon \sum_m \frac{2 \cos(k_0 \ell m)}{m^3} F_1 + \varepsilon^2 \sum_m \frac{2i\ell m \sin(k_0 \ell m)}{m^3} \frac{\partial F_1}{\partial Z} + \varepsilon^3 \sum_m \frac{m^2 \ell^2 \cos(k_0 \ell m)}{m^3} \frac{\partial^2 F_1}{\partial Z^2} \right\} e^{i\theta_n} \\
& + \hat{J} \left\{ \varepsilon^2 \sum_m \frac{2 \cos(2k_0 \ell m)}{m^3} F_2 + \varepsilon^3 \sum_m \frac{2i\ell m \sin(2k_0 \ell m)}{m^3} \frac{\partial F_2}{\partial Z} \right\} e^{2i\theta_n} + \mathcal{O}(\varepsilon^5) = 0.
\end{aligned} \tag{E.4}$$

Puisque les fonctions F_0 et F_2 peuvent s'exprimer en fonction de F_1 , il devient dès lors primordial de rechercher l'équation vérifiée par F_1 . Faisant usage de nouveau des coordonnées $\eta = Z - v_g T, \tau = \varepsilon T$, les transformations suivantes sont obtenues :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial Z} \longrightarrow \frac{\partial}{\partial \eta} & ; \quad \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \longrightarrow \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}, \\ \frac{\partial}{\partial T} \longrightarrow \varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau} - v_g \frac{\partial}{\partial \eta} & ; \quad \frac{\partial^2}{\partial T^2} \longrightarrow \varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - 2\varepsilon v_g \frac{\partial^2}{\partial \tau \partial \eta} + v_g^2 \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}. \end{array} \right. \tag{E.5}$$

L'insertion des relations de l'équation Eq. (E.5) dans l'équation Eq. (E.4) donne :

$$\begin{aligned}
& \left\{ \left(\omega_g^2 + 2\hat{J} \sum_m \frac{1}{m^3} \right) F_0 - 2\alpha \omega_g^2 |F_1|^2 \right\} \varepsilon^2 + \left\{ 2i \left[2\omega v_g - k_2 \ell \sin(2k_0 \ell) + \hat{J} \ell \sum_m \frac{\sin(2k_0 \ell m)}{m^2} \right] \frac{\partial F_2}{\partial \eta} \right\} \varepsilon^3 e^{2i\theta_n} \\
& + \left\{ \left[\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2(k_0 \ell) - 4\omega^2 + 2\hat{J} \sum_m \frac{\cos(2k_0 \ell m)}{m^3} \right] F_2 - \alpha \omega_g^2 F_1^2 \right\} \varepsilon^2 e^{2i\theta_n} + \omega_g^2 [3\beta |F_1|^2 F_1 - 2\alpha (F_1 F_0 + F_2 F_1^*)] \varepsilon^3 e^{i\theta_n} \\
& + \left\{ -2i\omega \frac{\partial F_1}{\partial \tau} + \left[v_g^2 + \hat{J} \ell^2 \sum_m \frac{\cos(k_0 \ell m)}{m} - k_2 \ell^2 \cos(k_0 \ell) \right] \frac{\partial^2 F_1}{\partial \eta^2} - 48k_4 |F_1|^2 F_1 \sin^4 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right) \right\} \varepsilon^3 e^{i\theta_n} \\
& + \left\{ 2i \left[\omega v_g + \hat{J} \ell \sum_m \frac{\sin(k_0 \ell m)}{m^2} - k_2 \ell \sin(k_0 \ell) \right] \varepsilon^2 \frac{\partial F_1}{\partial \eta} + \left[\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right) + 2\hat{J} \sum_m \frac{\cos(k_0 \ell m)}{m^3} - \omega^2 \right] \varepsilon F_1 \right\} e^{i\theta_n} \\
& + \mathcal{O}(\varepsilon^4) = 0.
\end{aligned} \tag{E.6}$$

La collecte des termes en $\varepsilon e^{i\theta_n}$, $\varepsilon^2 e^{2i\theta_n}$, $\varepsilon^2 e^{0i\theta_n}$, $\varepsilon^2 e^{i\theta_n}$ et $\varepsilon^3 e^{i\theta_n}$ dans l'équation Eq. (E.6) conduit à l'équation de Schrödinger cubique obtenue à l'équation Eq. (2.91) de la section §2.4.2.

Bibliographie

- [1] J. D. Watson, F. H. Crick, 'Molecular structure of Nucleic Acids '. *Nature* **171**, 737 (1953).
- [2] A. Kenneth. Mason, Jonathan B. Losos, Susan R. Singer, 'Biology '. *The MCGraw-Hill Companies*, (2010).
- [3] F. Robert. Weaver, 'Molecular Biology-Fifth Edition '. *The MCGraw-Hill Companies*, (2012).
- [4] W. K. Olson, 'Nucleic acid structural principles ', http://128.6.69.24/1notes/BioPhysChem_week5.pdf.
- [5] B. A. Hamkalo, O. L. Miller, 'Electronmicroscopy of genetic activity '. *Ann. Rev. Biochem* **42**, 379 (1973).
- [6] L. Yakusevich, 'Nonlinear Physics of DNA ', *Wiley series in nonlinear sciences* (John Wiley & sons, Weinheim, 2004).
- [7] Timothy J. Richmond and Curt A. Davey, 'the structure of DNA in the nucleosome core ', *Nature* **423**, 145 (2003).
- [8] Arnott, S. et al. Cold Spring Harb. *Symp. quant. Biol.* **47**, 53 (1983).
- [9] Charlotte Rieux. 'Etude des ADN glycosylases de la superfamille structurale Fpg/Nei par modélisation moléculaire, de nouvelles cibles thérapeutiques potentielles dans les stratégies anti-cancer ', Thèse de Doctorat, Université d'Orléans (2017).
- [10] V. S. MALL, R. P. OJHA, R. K. TIWARI. 'Recombinant Triplex formed by PNA-TFO : A Molecular Dynamics Simulation Study ', *Orient. J. Chem* **34**, 2440 (2018).
- [11] Sangkee Rhee, Zong-Jin Han, Keliang Liu, H. Todd Miles et David R. Davies, 'Structure of a Triple Helical DNA with a Triplex-Duplex Junction ', *Biochemistry* **38**, 16 810 (1999).
- [12] Thierry DAUXOIS, 'Dynamique non linéaire et mécanique statistique d'un modèle d'ADN ', Thèse de Doctorat, Université de Bourgogne (1988).
- [13] Sahin BUYUKDAGLI, 'Étude de la dynamique et de la physique statistique de modèles d'ADN non-linéaires à la dénaturation thermique ', Thèse de Doctorat, Université Joseph FOURIER-GRENOBLE I (2007).
- [14] M. Guéron, M. Kochoyan, J. L. Leroy, 'A single mode of DNA base-pair opening drives imino proton exchange ', *Nature* **328**, 89 (1987).
- [15] P. H. Bolton, T. L. James, 'Fast and slow conformational fluctuations of RNA and DNA. Subnanosecond internal motion correlation times determined by phosphorus-31 NMR ', *Journal of American Chemical Society* **102**, 25 (1980).
- [16] M. E. Hogan, O. Jardetzky, 'Internal motions in deoxyribonucleic acid II ', *Biochemistry* **19**, 3460 (1980).
- [17] D. P. Millar, R. J. Robbins, A. H. Zewail, 'Direct observation of the torsional dynamics of DNA and RNA by picosecond spectroscopy ', *Proc. Natl. Acad. Sci* **77**, 5593 (1980).
- [18] P. C. Painter, L. Mosher, C. Rhoads, 'Low-frequency modes in the raman spectrum of DNA ', *Biopolymers* **20**, 243 (1981).
- [19] H. Urabe, Y. Tominaga, 'Low-lying collective modes of DNA double helix by Raman spectroscopy ', *Biopolymers* **21**, 2477 (1982).
- [20] E. W. Prohofsky, K. C. Lu, L. L. Van Zandt, B. F. Putnam, 'Breathing modes and induced resonant melting of the double helix ', *Phys. Lett. A* **70**, 492 (1979).

- [21] B. F. Putnam, L. L. Van Zandt, E. W. Prohofsky, W. N. Mei, 'Resonant and localized breathing modes in terminal regions of the DNA double helix ', *Biophysical Journal* **35**, 271 (1981).
- [22] D. Poland, H. A. Scheraga, 'Phase transitions in one dimension and the helix-coil transition in polyamino acids ', *J. Chem. Phys* **45**, 1456 (1966).
- [23] D. Poland, H. A. Scheraga, 'Occurrence of a phase transition in nucleic acid models ', *J. Chem. Phys* **45**, 1464 (1966).
- [24] M. E. Fisher, 'Effet of excluded volume on phase transitions in biopolymers ', *J. Chem. Phys* **45**, 1469 (1966).
- [25] R. Blossey, E. Carlon, 'Reparametrizing the loop entropy weights : effect on DNA melting curves ', *Phys. Rev. E* **68**, 061911 (2003).
- [26] C. Richard, A. J. Guttmann, 'Poland-Scheraga models and the DNA denaturation transition ', *J. Stat. Phys* **115**, 943 (2004).
- [27] A. C. Scott, 'A nonlinear Klein-Gordon equation ', *Am. J. Phys* **37**, 52 (1969).
- [28] S. W. Englander, N. R. Kallenbach, A. J. Heeger, J. A. Krumhansl, S. Litwin, 'Nature of the open state in long polynucleotide double helices : Possibility of soliton excitations ', *Proc. Nat. Acad. Sci.* **77**, 7222 (1980).
- [29] M. D. Barkley, B. H. Zimm, 'Theory of twisting and bending of chain macromolecules; analysis of the fluorescence depolarization of DNA ', *J. Chem. Phys* **70**, 2991 (1979).
- [30] S. Yomosa, 'Soliton excitations in deoxyribonucleic acid (DNA) double helices ', *Phys. Rev. A* **27**, 2120 (1983).
- [31] S. Yomosa, 'Solitary excitations in deoxyribonucleic acid (DNA) double helices ', *Phys. Rev. A* **30**, 474 (1984).
- [32] L. V. Yakushevich, 'Nonlinear DNA dynamics : a new model ', *Phys. Lett. A* **136**, 413 (1989).
- [33] L. V. Yakushevich, 'Nonlinear DNA dynamics : hierarchy of the models ', *Physica D* **79**, 77 (1994).
- [34] G. Gaeta, 'On a model of DNA torsion dynamics ', *Phys. Lett. A* **143**, 227 (1990).
- [35] G. Gaeta, 'Solitons in planar and helicoidal Yakushevich model of DNA dynamics ', *Phys. Lett. A* **168**, 383 (1992).
- [36] G. Gaeta, C. Reiss, M. Peyrard, T. Dauxois 'Simple models of nonlinear DNA dynamics ', *Rev. Nuovo Cimento* **17**, 1 (1994).
- [37] M. Cadoni, R. De Leo, G. Gaeta, 'A composite model for DNA torsion dynamics ', *Phys. Rev. E* **75**, 021919 (2007).
- [38] M. Cadoni, R. De Leo, S. Demeleo, G. Gaeta, 'Twist solitons in complex macromolecules : from DNA to polyethylene ', *Int. J. Non-Linear. Mech* **43**, 1094 (2008).
- [39] R. De Leo, S. Demelio, 'Numerical analysis of solitons profiles in a composite model for DNA torsion dynamics ', *Int. J. Non-Linear. Mech* **43**, 1029 (2008).
- [40] Y. Gao, K. V. Devi-Prasad, E. W. Prohofsky, 'A selfconsistent microscopic theory of hydrogen bond melting with application to poly(dG)•poly(dC) ', *J. Chem. Phys* **80**, 6291 (1984).
- [41] Y. Gao, E. W. Prohofsky, 'A modified selfconsistent phonon theory of hydrogen bond melting ', *J. Chem. Phys* **80**, 2242 (1984).
- [42] M. Techera, L. L. Daemen, E. W. Prohofsky, 'Nonlinear model of the DNA molecule ', *Phys. Rev. A* **40**, 6636 (1989).
- [43] M. Techera, L. L. Daemen, E. W. Prohofsky, 'Nonlinear model of the DNA molecule ', *Phys. Rev. A* **41**, 4543 (1990).
- [44] M. Peyrard, A. R. Bishop, 'Statistical Mechanics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation ', *Phys. Rev. Lett* **62**, 2755 (1989).
- [45] T. Dauxois, M. Peyrard, A. R. Bishop, 'Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation', *Phys. Rev. E* **47**, 684 (1993).

- [46] T. Dauxois, M. Peyrard, A. R. Bishop, ‘Thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation’, *Physica D* **66**, 35 (1993).
- [47] P. Maniadis, G. Kalosakas, K. Ø. Rasmussen, A. R. Bishop, ‘ac conductivity in a DNA charge transport model’, *Phys. Rev. E* **72**, 021912 (2005).
- [48] S. Komineas, G. Kalosakas, A. R. Bishop, ‘Effect of intrinsic base-pair fluctuations on charge transport in DNA’, *Phys. Rev. E* **65**, 061905 (2002).
- [49] Z. G. Yu, X. Song, ‘Variable range hopping and electrical conductivity along the DNA double helix’, *Phys. Rev. Lett* **86**, 6018 (2001).
- [50] S. S. Alexandre, E. Artacho, J. M. Soler, H. Chacham, ‘Small polarons in dry DNA’, *Phys. Rev. Lett* **91**, 108105 (2003).
- [51] G. Kalosakas, K. L. Ngai, S. Flach, ‘Breather-induced anomalous charge diffusion’, *Phys. Rev. E* **71**, 061901 (2005).
- [52] A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno, M. G. Velarde, ‘Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires’, *Phys. Rev. E* **100**, 052203 (2019).
- [53] P. Maniadis, G. Kalosakas, K. Ø. Rasmussen, A. R. Bishop, ‘Polaron normal modes in the Peyrard-Bishop-Holstein model’, *Phys. Rev. B* **68**, 174304 (2003).
- [54] T. Holstein, ‘Studies of polaron motion : Part I : the molecular-crystal model ’, *Annals of Physics* **8**, 325 (1959).
- [55] G. Kalosakas, S. Aubrey, G. P. Tsironis, ‘Polaron solutions and normal-mode analysis in the semiclassical Holstein model ’, *Phys. Rev. B* **58**, 3094 (1998).
- [56] Thierry. Dauxois, ‘Dynamics of breather modes in a nonlinear “helical” model of DNA’, *Phys. Lett. A* **159**, 390 (1991).
- [57] Michael SANREY, ‘Dynamique non linéaire : des molécules triatomiques à l’ADN’, Thèse de Doctorat, Université Joseph FOURIER-GRENOBLE I (2008).
- [58] T. Dauxois, M. Peyrard, A. R. Bishop, ‘Entropy-driven DNA denaturation’, *Phys. Rev. E* **47**, R44 (1993).
- [59] T. Dauxois, M. Peyrard, ‘Entropy-driven transition in one-dimensional system’, *Phys. Rev. E* **51**, 4027 (1995).
- [60] T. S. van Erp, S. Cuesta-López, M. Peyrard, ‘Bubbles and denaturation in DNA’, *Eur. Phys. J. E* **20**, 421 (2006).
- [61] G. Weber, ‘Sharp DNA denaturation due to solvent interaction’, *Europhys. Lett* **75**, 806 (2006).
- [62] C. B. Tabi, A. Mohamadou, T. C. Kofane, ‘Modulational instability in the anharmonic Peyrard-Bishop model of DNA’, *Eur. Phys. J. B* **74**, 151 (2010).
- [63] M. Zoli, ‘Stacking interactions in denaturation of DNA fragments’, *Eur. Phys. J. E* **34**, 68 (2011).
- [64] S. Behnia, A. Akhshani, M. Panahi, A. Mobaraki, M. Ghaderian, ‘Multifractal analysis of thermal denaturation based on the Peyrard-Bishop-Dauxois model’, *Phys. Rev. E* **84**, 031918 (2011).
- [65] D. X. Macedo, I. Guedes, E. L. Albuquerque, ‘Thermal properties of a DNA denaturation with solvent interaction’, *Physica A* **404**, 234 (2014).
- [66] M. Zoli, ‘Twist versus nonlinear stacking in short DNA molecules’, *J. Theor. Biol* **354**, 95 (2014).
- [67] M. Hillebrand, G. Kalosakas, A. Schwellnus, C. Skokos, ‘Heterogeneity and chaos in the Peyrard-Bishop-Dauxois DNA model’, *Phys. Rev. E* **99**, 022213 (2019).
- [68] A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno, M. G. Velarde, ‘Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires’, *Phys. Rev. E* **100**, 052203 (2019).
- [69] I. V. Likhachev, V. D. Lakhno, ‘The direct investigation of DNA denaturation in Peyrard-Bishop-Dauxois model by molecular dynamics method’, *Chem. Phys. Lett* **727**, 55 (2019).
- [70] M. Barbi, S. Cocco, M. Peyrard, ‘Helicoidal model for DNA opening’, *Phys. Lett. A* **253**, 358 (1999).

- [71] M. Barbi, S. Cocco, M. Peyrard, S. Ruffo, ‘A Twist Opening Model for DNA’, *J. Biol. Phys* **24**, 97 (1999).
- [72] A. Campa, ‘Bubble propagation in a helicoidal molecular chain’, *Phys. Rev. E* **63**, 021901 (2001).
- [73] S. Cocco, R. Monasson, ‘Statistical Mechanics or Torque Induced Denaturation of DNA’, *Phys. Rev. Lett* **83**, 5178 (1999).
- [74] M. Barbi, S. Cocco, M. Peyrard, ‘Thermal denaturation of an helicoidal DNA model’, *Phys. Rev. E* **68**, 061909 (2003).
- [75] C. B. Tabi, A. Mohamadou, T. C. Kofane, ‘Modulational instability and exact soliton solutions for a twist-opening model of DNA dynamics’, *Phys. Lett. A* **373**, 2476 (2009).
- [76] A. S. Nikitiuk, E. A. Korznikova, S. D. Dmitriev, O. B. Naimark, ‘Nonlinear dynamics of DNA with topological constraints’, *Lett. Mater* **8**, 489 (2018).
- [77] M. Joyeux, S. Buyukdagli, ‘Dynamical model based on finite stacking enthalpies for homogeneous and inhomogeneous DNA thermal denaturation’, *Phys. Rev. E* **72**, 051902 (2005).
- [78] S. Buyukdagli, M. Joyeux, ‘On scaling laws at the phase transition of systems with divergent order parameter and/or internal length : the example of DNA denaturation’, *Phys. Rev. E* **73**, 051910 (2006).
- [79] S. Buyukdagli, M. Joyeux, ‘Theoretical investigation of finite size effects at DNA melting’, *Phys. Rev. E* **76**, 021917 (2007).
- [80] S. Buyukdagli, M. Joyeux, ‘Statistical physics of the melting on inhomogeneous DNA’, *Phys. Rev. E* **77**, 031903 (2008).
- [81] M. Joyeux, A.-M. Florescu, ‘Dynamical versus statistical mesoscopic models for DNA denaturation’, *J. Phys. : Condens. Matter* **21**, 34101 (2009).
- [82] D. Poland, H. A. Scheraga, ‘Phase transitions in one dimension and the helix-coil transition in polyamino acids’, *J. Chem. Phys* **45**, 1456 (1966).
- [83] R. D. Blake, J. W. Bizzaro, J. D. Blake, G. R. Day, S. G. Delcourt, J. Knowles, K. A. Marx, J. SantaLucia, ‘Statistical mechanical simulation of polymeric DNA melting with MELTSIM’, *Bioinformatics* **15**, 370 (1999).
- [84] D. Toko, C. B. Tabi, A. Mohamadou, T. C. Kofane, ‘Coherent modes and parameter selection in DNA models with finite stacking enthalpy’, *J. Comput. Theor. Nanosci* **9**, 97 (2012).
- [85] C. B. Tabi, A. Mohamadou, T. C. Kofane, ‘Modulated waves in the DNA double helix with finite stacking enthalpy interaction’, *J. Bionanosci* **3**, 110 (2009).
- [86] P. B. Ndjoko, J. M. Bilbault, S. Binczak, T. C. Kofane, ‘Compact-envelope bright solitary wave in a DNA double strand’, *Phys. Rev. E* **85**, 011916 (2012).
- [87] J. B. Okaly, A. Mvogo, C. B. Tabi, H. P. E. Fouda, T. C. Kofane, ‘Base pair opening in a damped helicoidal Joyeux-Buyukdagli model of DNA in an external force field’, *Phys. Rev. E* **102**, 062402 (2020).
- [88] A. Mvogo, T. C. Kofane, ‘Fractional formalism to DNA chain and impact of the fractional order on breather dynamics’, *Chaos* **26**, 123120 (2016).
- [89] C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, C. Tchawoua, ‘Discrete breathers dynamic in a model for DNA chain with a finite stacking enthalpy’, *Chaos* **28**, 043105 (2018).
- [90] C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, C. Tchawoua, ‘Taming intrinsic localized modes in a DNA lattice with damping, external force, and inhomogeneity’, *Phys. Rev. E* **99**, 052210 (2019).
- [91] C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, C. Tchawoua, ‘Forward and backward propagating breathers in a DNA model with dipole-dipole long-range interactions’, *Phys. Rev. E* **102**, 052212 (2020).
- [92] J. Maddox, ‘Physicists about to hi-jack DNA ?’, *Nature* **324**, 11 (1986).
- [93] M. Frank-Kamenetskii, ‘Physicists retreat again’, *Nature* **328**, 108 (1987).

- [94] C. Gabriel, E. H. Grant, R. Tata, P. R. Brown, B. Gestblom, E. Noreland, ‘Microwave absorption in aqueous solutions of DNA’, *Nature* **328**, 145 (1987).
- [95] J. Maddox, ‘Towards the calculation of DNA’, *Nature* **339**, 577 (1989).
- [96] S. Flach, C. R. Willis, ‘Discrete breathers’, *Phys. Rep* **295**, 181 (1998).
- [97] S. Flach, A. V. Gorbach, ‘Discrete breathers-advances in theory and applications’, *Phys. Rep* **467**, 1 (2008).
- [98] A. J. Sievers, S. Takeno, ‘Intrinsic localized modes in anharmonic crystals’, *Phys. Rev. Lett* **61**, 970 (1988).
- [99] S. Takeno, K. Kisoda, A. J. Sievers, ‘Intrinsic localized vibrational modes in anharmonic crystals’, *Prog. Theor. Phys. Suppl* **94**, 242 (1988).
- [100] S. Takeno, ‘P-like stationary self-localized modes in pure one-dimensional lattice with quartic lattice anharmonicity’, *J. Phys. Soc. Japan* **59**, 3861 (1990).
- [101] S. Takeno, K. Hori, ‘Self-localized modes in a pure one-dimensional lattice with cubic and quartic lattice anharmonicity’, *J. Phys. Soc. Japan* **60**, 947 (1991).
- [102] S. Takeno, ‘Theory of stationary anharmonic localized modes in solids’, *J. Phys. Soc. Japan* **61**, 2821 (1992).
- [103] Y. S. Kivshar, M. Peyrard, ‘Modulational instabilities in discrete lattices’, *Phys. Rev. A* **46**, 3198 (1992).
- [104] Y. S. Kivshar, ‘Creation of nonlinear localized modes in discrete lattices’, *Phys. Rev. E* **48**, 4132 (1993).
- [105] Y. S. Kivshar, ‘Localized modes in a chain with nonlinear on-site potential’, *Phys. Lett. A* **173**, 172 (1993).
- [106] S. Wang, ‘Localized vibrational modes in an anharmonic chain’, *Phys. Lett. A* **182**, 105 (1993).
- [107] A. M. Morgante, M. Johansson, G. Kopidakis, S. Aubry, ‘Standing wave instabilities in a chain of nonlinear coupled oscillators’, *Physica D* **162**, 53 (2002).
- [108] A. Mohamadou, D. Toko, Alim, C. B. Tabi, T. C. Kofane, ‘Modulational instability and energy localization of twisted DNA with solvent interaction’, *Int. J. Mod. Phys. B* **29**, 1550049 (2015).
- [109] K. Kundu, ‘Perturbative study of classical Ablowitz-Ladik type soliton dynamics in relation to energy transport in α -helical proteins’, *Phys. Rev. E* **61**, 5839 (2000).
- [110] M. Öster, M. Johansson, A. Eriksson, ‘Enhanced mobility of strongly localized modes in waveguide arrays by inversion of stability’, *Phys. Rev. E* **67**, 056606 (2003).
- [111] P. G. Kevrekidis, V. V. Konotop, ‘Bright compact breathers’, *Phys. Rev. E* **65**, 056606 (2002).
- [112] C. Claude, Y. S. Kivshar, O. Kluth, K. H. Spatschek, ‘Moving localized modes in nonlinear lattices’, *Phys. Rev. B* **47**, 14228 (1993).
- [113] F. K. Abdullaev, Y. V. Bludov, S. V. Dmitriev, P. G. Kevrekidis, V. V. Konotop, ‘Generalized neighbor-interaction models induced by nonlinear lattices’, *Phys. Rev. E* **77**, 016604 (2008).
- [114] C. Menotti, A. Smerzi, A. Trombettoni, ‘Superfluid dynamics of Bose-Einstein condensate in a periodic potential’, *New J. Phys* **5**, 112 (2003).
- [115] M. Johansson, J. E. Prilepsky, S. A. Derevyanko, ‘Strongly localized moving discrete dissipative breather-solitons in Kerr nonlinear media supported by intrinsic gain’, *Phys. Rev. E* **89**, 042912 (2014).
- [116] M. Salerno, ‘Quantum deformations of discrete nonlinear Schrödinger equation’, *Phys. Rev. A* **46**, 6856 (1992).
- [117] T. R. O. Melvin, A. R. Champneys, D. E. Pelinovsky, ‘Discrete traveling solitons in the Salerno model’, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst* **8**, 689 (2009).
- [118] T. Mithun, A. Maluckov, B. M. Manda, C. Skokos, A. Bishop, A. Saxena, A. Khare, P. G. Kevrekidis, ‘Thermalization in the one-dimensional Salerno model lattice’, *Phys. Rev. E* **103**, 032211 (2021).

- [119] S. Aubry, G. Abramovici, ‘Chaotic trajectories in the standard map : the concept of anti-integrability’, *Physica D* **43** 199 (1990).
- [120] J. A. Sepulchre, R. S. MacKay, ‘Localized oscillations in conservative or dissipative networks of weakly coupled autonomous oscillators’, *Nonlinearity* **10**, 679 (1991).
- [121] J. L. Marin, S. Aubry, ‘Breathers in nonlinear lattices : numerical calculation from the anti-continuous limit’, *Nonlinearity* **9**, 1501 (1996).
- [122] P. G. Kevrekidis, ‘The Discrete Nonlinear Schrödinger Equation’ *Springer, Berlin, Heidelberg*, (2009).
- [123] J. D. T. Tchameu, A. B. T. Motcheyo, C. Tchawoua, ‘Mobility of discrete multibreathers in the exciton dynamics of the Davydov model with saturable nonlinearities’, *Phys. Rev. E* **90**, 43203 (2014).
- [124] V. Koukouloyannis, S. Ichtiaroglou, ‘Existence of multibreathers in chains of coupled one-dimensional Hamiltonian oscillators’, *Phys. Rev. E* **66**, 066602 (2002).
- [125] V. Koukouloyannis, P. G. Kevrekidis, J. Cuevas, V. Rothos, ‘Multibreathers in Klein-Gordon chains with interactions beyond nearest neighbors’, *Physica D* **242**, 16 (2013).
- [126] A. B. T. Motcheyo, C. Tchawoua, M. S. Siewe, J. D. T. Tchameu, ‘Multisolitons and stability of two hump solitons of upper cutoff mode in discrete electrical transmission line’, *Phys. Lett. A* **375**, 1104 (2011).
- [127] V. Vasumathi, M. Daniel, ‘Base-pair opening and bubble transport in a DNA double helix induced by a protein molecule in a viscous medium’, *Phys. Rev. E* **80**, 061904 (2009).
- [128] S. Zdravkovic, ‘Helicoidal Peyrard-Bishop model of DNA dynamics’, *J. Nonl. Math. Phys* **18**, 463 (2011).
- [129] B. S. Alexandrov, V. Gelev, A. R. Bishop, A. Usheva, K. Ø. Rasmussen, ‘DNA breathing dynamics in the presence of a terahertz field’, *Phys. Lett. A* **374**, 1214 (2010).
- [130] P. Maniadis, B. S. Alexandrov, A. R. Bishop, K. Ø. Rasmussen, ‘Feigenbaum cascade of discrete breathers in a model of DNA’, *Phys. Rev. E* **83**, 011904 (2011).
- [131] A. Sulaiman, F. P. Zen, H. Alatas, L. T. Handoko, ‘Dynamics of DNA breathing in the Peyrard-Bishop model with damping and external force’, *Physica D* **241**, 1640 (2012).
- [132] E. S. Swanson, ‘Modeling DNA response to terahertz radiation’, *Phys. Rev. E* **83**, 040901(R) (2011).
- [133] C. R. Calladine, H. R. Drew, B. F. Luisi, A. A. Travers, ‘Understanding DNA’, *Academic Press, New York*, (1992).
- [134] Eric Schoentgen, ‘Morphologie, structure et propriétés thermodynamiques des auto-assemblages nucléolipides/acides nucléiques’, *Université de Bordeaux*, (2015).
- [135] Pang Xiao Feng, ‘Transition of B-DNA to A-DNA and its Denaturation Features’, *J. Bioinform. Genomics. Proteomics* **2**, 1017 (2017).
- [136] S. F. Mingaleev, P. L. Christiansen, Y. B. Gaididei, M. Johansson, K. Rasmussen, ‘Models for energy and charge transport and storage in biomolecules’, *J. Biol. Phys* **25**, 41 (1999).
- [137] U. Dahlborg, A. Rupprecht, ‘Hydratation of DNA : a neutron scattering study of oriented NaDNA’, *Biopolymers* **10**, 849 (1971).
- [138] G. Corongiu, E. Clementi, ‘Simulations of the solvent structure for macromolecules. II. Structure of water solvating Na⁺-B-DNA at 300 K and a model for conformational transitions induced by solvent variations’, *Biopolymers* **10**, 2427 (1981).
- [139] J. Cuevas, F. Palmero, J. F. Archilla, F. Romero, ‘Moving breathers in a bent DNA model’, *Phys. Lett. A* **299**, 221 (2002).
- [140] J. Cuevas, J. F. R. Archilla, Y. B. Gaididei, F. R. Romero, ‘Moving breathers in a DNA model with competing short-and long-range dispersive interactions’, *Physica D* **163**, 106 (2002).

- [141] J. Cuevas, E. B. Starikov, J. F. R. Archilla, D. Henning, ‘Moving breathers in bent DNA with realistic parameters’, *Mod. Phys. Lett. B* **18**, 1319 (2004).
- [142] A. Alvarez, F. R. Romero, J. F. R. Archilla, J. Cuevas, P. V. Larsen, ‘Breather trapping and breather transmission in a DNA model with an interface’, *Eur. Phys. J. B* **51**, 119 (2006).
- [143] A. B. Togueu Motcheyo, J. D. Tchingang Tchameu, S. I. Fewo, C. Tchawoua, T. C. Kofane, ‘Chameleon’s behavior of modulable nonlinear electrical transmission line’, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul* **53**, 22 (2017).
- [144] L. Brillouin, ‘Periodic Structure : Electronic Filters and Crystal Lattices’, *1st ed. (McGraw-Hill, New York)*, (1946).
- [145] I. Daumont, T. Dauxois, M. Peyrard, ‘Modulational instability : first step towards energy localization in nonlinear lattices’, *Nonlinearity* **10**, 617 (1997).
- [146] A. Alvarez, F. R. Romero, J. Cuevas, J. F. R. Archilla, ‘Moving breather collisions in the Peyrard-Bishop DNA model’, in *International Conference on Complex Sciences, Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social Informatics and Telecommunications Engineering*, edited by J. Zhou, Springer, Berlin, Heidelberg, 411 (2009).
- [147] G. Floquet, ‘Sur la théorie des équations différentielles linéaires’, *Annales Scientifiques de l’École Normale Supérieure* **8**, 3 (1879).
- [148] G. Floquet, ‘Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques’, *Annales Scientifiques de l’École Normale Supérieure* **12**, 47 (1883).
- [149] G. Floquet, ‘Sur les équations différentielles linéaires à coefficients doublement périodiques’, *Annales Scientifiques de l’École Normale Supérieure* **1**, 181 (1884).
- [150] G. Floquet, ‘Sur la classe d’équations différentielles linéaires non homogènes’, *Annales Scientifiques de l’École Normale Supérieure* **4**, 111 (1887).
- [151] A. Lazarus, O. Thomas. ‘A harmonic-based method for computing the stability of periodic solutions of dynamical systems’, *Comptes Rendus Mécanique, Elsevier Masson* **338**, 510 (2010).
- [152] O. Thomas, A. Lazarus, ‘Une méthode fréquentielle pour le calcul de la stabilité de vibrations périodiques’, *10e colloque national en calcul des structures*, (2011).
- [153] Lihan XIE, ‘Suivi numérique des bifurcations pour l’analyse paramétrique de la dynamique non-linéaire des rotors’, *THÈSE de DOCTORAT DE L’UNIVERSITÉ DE LYON* (2016).
- [154] M. Gustafsson, ‘Coherent waves in DNA within the Peyrard-Bishop model’, *Master thesis, Linköpings Universitet* (2003).
- [155] P. Vigué, ‘Solutions périodiques et quasi-périodiques de systèmes dynamiques d’ordre entier ou fractionnaire : Applications à la corde frottée’, *Thèse de Doctorat, AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ* (2017).
- [156] J. Cuevas-Maraver, P. G. Kevrekidis. ‘Discrete breathers in ϕ^4 and related model’, *Springer International Publishing, Cham*, 137 (2019).
- [157] V. Marinca, N. Herisanu, ‘Nonlinear Dynamical Systems in Engineering’, *Springer, Berlin*, (2011).
- [158] G. V. Groll, D. J. Ewins, ‘The harmonic balance method with arc-length continuation in rotor/stator contact problems’, *J. Sound. Vib* **241**, 223 (2001).
- [159] M. Krack, J. Gross, ‘Harmonic Balance for Nonlinear Vibration Problems’, *Cham : Springer International Publishing*, (2019).
- [160] B. Cochelin, C. Vergez, ‘A high order purely frequency-based harmonic balance formulation for continuation of periodic solutions’, *J. Sound Vib* **324**, 243 (2009).
- [161] L. Peletan, S. Baguet, M. Torkhani, G. Jacquet-Richardet, ‘A comparison of stability computational methods for periodic solution of nonlinear problems with application to rotordynamics’, *Nonlinear Dynamics* **72**, 671 (2013).

- [162] Y. S. Kivshar, D. K. Campbell ‘Peierls-Nabarro potential barrier for highly localized nonlinear modes’, *Phys. Rev. E* **48**, 3077-3081 (1993).
- [163] L. Hadžievski, A. Maluckov, M. Stepić, D. Kip, ‘Power controlled soliton stability and steering in lattices with saturable nonlinearity’, *Phys. Rev. Lett* **93**, 033901 (2004).
- [164] R. Morandotti, U. Peschel, J. S. Aitchison, H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, ‘Dynamics of discrete solitons in optical waveguide arrays’, *Phys. Rev. Lett* **83**, 2726 (1999).
- [165] T. Dauxois, M. Peyrard, C. R. Willis, ‘Discreteness effects on the formation and propagation of breathers in nonlinear Klein-Gordon equation’, *Phys. Rev. E* **48**, 4768 (1993).
- [166] A. Alvarez, F. R. Romero, J. Cuevas, J. F. R. Archilla, ‘Discrete moving breather collisions in a Klein-Gordon chain of oscillators’, *Phys. Lett. A* **372**, 1256 (2008).
- [167] D. Chen, S. Aubry, G. P. Tsironis, ‘Breather mobility in discrete ϕ^4 nonlinear lattices’, *Phys. Rev. Lett* **77**, 4776 (1996).
- [168] J. F. R. Archilla, Y. B. Gaididei, P. L. Christiansen, J. Cuevas, ‘Stationary and moving breathers in a simplified model of curved alpha-helix proteins’, *J. Phys. A : Math. Gen* **35**, 8885 (2002).
- [169] J. Cuevas, P. G. Kevrekidis, ‘Breather statics and dynamics in Klein-Gordon Chains with a Bend’, *Phys. Rev. E* **69**, 056609 (2004).
- [170] H. Cortez, E. D. Filho, J. R. Ruggiero, ‘Breather Stability in One Dimensional Lattices with a Symmetric Morse Potential’, *TEMA Tend. Mat. Apl. Comput* **9**, 205 (2008).
- [171] M. I. Fakhretdinov, F. K. Zakir’yanov, ‘Discrete breathers in the Peyrard-Bishop model of DNA’, *Technical Physics* **58**, 931 (2013).
- [172] J. Gómez-Gardeñes, F. Falo, L. M. Floría, ‘Mobile localization in nonlinear Schrödinger lattices’, *Phys. Lett. A* **332**, 213 (2004).
- [173] K. Yoshimura, Yusuke Doi, ‘Moving discrete breathers in nonlinear lattice : Resonance and stability’, *Wave Motion* , 83 (2007).
- [174] J. F. R. Archilla, Y. Doi, M. Kimura, ‘Pterobreaters in a model for a layered crystal with realistic potentials : Exact moving breathers in a moving frame’, *Phys. Rev. E* **100**, 022206 (2019).
- [175] C. I. Um, K. H. Yeon, T. F. George, ‘The quantum damped harmonic oscillator’, *Phys. Rep* **362** 63 (2002).
- [176] A. Sulaiman, F. P. Zen, H. Alatas, L. T. Handoko, ‘Dynamics of DNA breathing in the Peyrard-Bishop model with damping and external force’, *Physica D* **241**, 1640 (2012).
- [177] G. J. Wilmsink, J. E. Grundt, ‘Invited review article : Current state of research on biological effects of terahertz radiation’, *J. Infr. Millim. Terahertz Waves* **32**, 1074 (2011).
- [178] X. Yang, X. Zhao, K. Yang, Y. Liu, Y. Liu, W. Fu, Y. Luo, ‘Biomedical applications of terahertz spectroscopy and imaging’, *Trends Biotechnol* **34**, 810 (2016).
- [179] P. Maniadis, T. Bountis, ‘Quasiperiodic and chaotic discrete breathers in a parametrically driven system without linear dispersion’, *Phys. Rev. E* **73**, 046211 (2006).
- [180] Y. S. Kivshar, ‘Intrinsic localized modes as solitons with a compact support’, *Phys. Rev. E* **48**, R43 (1993).
- [181] A. V. Gorbach, S. Flach, ‘Compactlike discrete breathers in systems with nonlinear and nonlocal dispersive terms’, *Phys. Rev. E* **72**, 056607 (2005).
- [182] S. Flach, ‘Conditions on the existence of localized excitations in nonlinear discrete systems’, *Phys. Rev. E* **50**, 3134 (1994).
- [183] G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, E. A. Mehonoshina, ‘Quasibreaters as a generalization of the concept of discrete breathers’, *Phys. Rev. E* **74**, 036608 (2006).

- [184] T. Bountis, T. Manos, H. Christodoulidi, ‘Application of the GALI method to localization dynamics in nonlinear systems’, *J. Comput. Appl. Math* **227**, 17 (2009).
- [185] D. K. Campbell, S. Flach, Y. S. Kivshar, ‘Localizing energy through nonlinearity and discreteness’, *Phys. Today* **57**, 43 (2004).
- [186] D. K. Campbell, ‘Fresh breather’, *Nature* **432**, 455 (2004).
- [187] J. L. Marín, S. Aubry, L. M. Floría, ‘Intrinsic localized modes : Discrete breathers. Existence and linear stability’, *Physica D* **113**, 283 (1998).
- [188] G. G. Slade, E. D. Filho, J. R. Ruggiero, ‘Stability of breathers in simple mechanical models for DNA’, *J. Phys. : Conf. Ser* **246**, 012039 (2010).
- [189] K. Yoshimura, Y. Doi, M. Kimura, ‘Localized Modes in Nonlinear Discrete Systems’, (*Springer International Publishing, Cham*), 119 (2015).
- [190] M. Peyrard, S. C. López, D. Angelov, ‘Fluctuations in the DNA double helix’, *Eur. Phys. J. Special Topics* **147**, 173 (2007).
- [191] M. Hisakado, ‘Breather trapping mechanism in piecewise homogeneous DNA’, *Phys. Lett. A* **227**, 87 (1997).
- [192] A. E. Bergues-Pupo, J. M. Bergues, F. Falo, ‘Modeling the interaction of DNA with alternating fields’, *Phys. Rev. E* **87**, 022703 (2013).
- [193] S. Zdravković, M. V. Sataric, ‘Transverse interaction in DNA molecule’, *BioSystems* **105**, 10 (2011).
- [194] M. Peyrard, ‘Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA’, *Nonlinearity* **17**, R1 (2004).
- [195] M. Remoissenet, ‘Low-amplitude breather and envelope solitons in quasi-one-dimensional physical models’, *Phys. Rev. B* **33**, 2386 (1986).
- [196] M. Remoissenet, ‘Waves Called Solitons’, (*Springer, Berlin, 1994*).
- [197] T. Taniuti, C. C. Wei, ‘Reductive perturbation method in nonlinear wave propagation’, *J. Phys. Soc. Jpn* **24**, 941 (1968).
- [198] T. Taniuti, ‘Reductive perturbation method and far fields of wave equations’, *Supp. Prog. Theor. Phys* **55**, 1 (1974).
- [199] P. Marquie, J. M. Bilbault, M. Remoissenet, ‘Generation of envelope and hole solitons in an experimental transmission line’, *Phys. Rev. E* **49**, 828 (1994).
- [200] G. Fibich, ‘The Nonlinear Schrödinger Equation’(Springer International, Cham, 2015).
- [201] M. Sato, T. Nakaguchi, T. Ishikawa, S. Shige, Y. Soga, Y. Doi, A. J. Sievers, ‘Supertransmission channel for an intrinsic localized mode in a one-dimensional nonlinear physical lattice’, *Chaos* **25**, 103122 (2015).
- [202] G. P. Veldes, J. Cuevas, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, ‘Coupled backward-and forward-propagating solitons in a composite right-and left-handed transmission line’, *Phys. Rev. E* **88**, 013203 (2013).
- [203] Åke Björck, ‘Numerical methods for least squares problems’, *SIAM* (1996).
- [204] C. Runge, ‘Über die numerische auflösung von differentialgleichungen’, *Math. Ann* **46**, 167 (1895).
- [205] W. Kutta, ‘Beitrag zur näherungsweise integration totaler differentialgleichungen’, *Z. Math. Phys* **46**, 435 (1901).
- [206] J. C. Butcher, ‘Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes’, *J. Australian Math. Soc* **3**, 185 (1963).
- [207] J. C. Butcher, ‘Implicit Runge-Kutta processes’, *Math. Comp* **18**, 50 (1964).
- [208] J. C. Butcher, ‘The numerical analysis of ordinary differential equations : Runge-Kutta and general linear methods’, *Wiley,Chichester*, (1987).

- [209] J. C. Butcher, 'A history of Runge-Kutta methods', *App. Numer. Math* **20**, 247 (1996).
- [210] J. H. E. Cartwright, O. Piro, 'The dynamics of Runge-Kutta methods', *Int. J. Bifurc. Chaos* **2**, 427 (1992).
- [211] E. Fehlberg, 'New high-order Runge-Kutta formulas with stepsize control for systems of first and second-order differential equations', *Z. Angew. Math. Mech* **44**, T17 (1964).
- [212] M. S. Mechee, Y. Rajihy, 'Generalized rk integrators for solving ordinary differential equations : A survey & comparison study', *Global Journal of Pure and Applied Mathematics* **13**, 2923 (2017).
- [213] R. L. V. Taylor, 'Attractors : Nonstrange to Chaotic', *Society for Ind Appl Math* **4**, 72 (2011).
- [214] Ch. Skokos, 'The Lyapunov characteristic exponents and their computation', in *Lect. Notes Phys., Berlin Springer Verlag* **790**, 63 (2010).
- [215] A. Wolf, J. Swift, H. L. Swinney, J. Vastano, 'Determining Lyapunov exponents from a time series', *Physica D* **16**, 285 (1985).
- [216] M. Sandri, 'Numerical calculation of Lyapunov exponents', *Mathematica. J* **6**, 78 (1996).
- [217] A. Mohamadou, B. E. Ayissi, T. C. Kofane, 'Instability criteria and pattern formation in the complex Ginzburg-Landau equation with higher-order terms', *Phys. Rev. E* **74**, 046604 (2006).
- [218] C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofane, 'Formation of localized structures in the Peyrard-Bishop-Dauxois model', *J. Phys. : Condens. Matter* **20**, 415104 (2008).
- [219] C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofane, 'Modulated wave packets in DNA and impact of viscosity', *Chin. Phys. Lett* **26**, 068703 (2009).
- [220] J. Cuevas, N. I. Karachalios, F. Palmero, 'Energy thresholds for the existence of breather solutions and travelling waves on lattices', *Appl. Anal* **89**, 1351 (2010).
- [221] L. Q. English, F. Palmero, A. J. Sievers, P. G. Kevrekidis, D. H. Barnak, 'Traveling and stationary intrinsic localized modes and their spatial control in electrical lattices', *Phys. Rev. E* **81**, 046605 (2010).
- [222] F. Palmero, L. Q. English, J. Cuevas, R. Carretero-Gonzalez, P. G. Kevrekidis, 'Discrete breathers in a nonlinear electric line : Modeling, computation, and experiment', *Phys. Rev. E* **84**, 026605 (2011).
- [223] M. Weiss, T. Kottos, T. Geisel, 'Taming chaos by impurities in two-dimensional oscillator arrays', *Phys. Rev. E* **63**, 056211 (2001).
- [224] A. Gavrielides, T. Kottos, V. Kovanis, G. P. Tsironis, 'Spatiotemporal organization of coupled nonlinear pendula through impurities', *Phys. Rev. E* **58**, 5529 (1998).
- [225] T. Ikeda, Y. Harata, K. Nishimura, 'Intrinsic localized modes of harmonic oscillations in pendulum arrays subjected to horizontal excitation', *J. Comput. Nonlin. Dyn* **10**, 021007 (2015).
- [226] T. Ikeda, Y. Harata, K. Nishimura, 'Intrinsic localized modes of harmonic oscillations in nonlinear oscillator arrays', *J. Comput. Nonlin. Dyn* **8**, 041009 (2013).
- [227] T. Ikeda, Y. Harata, R. Hiraoka, 'Intrinsic localized modes of 1/2-order subharmonic oscillations in nonlinear oscillator arrays', *Nonlin. Dyn* **81**, 1759 (2015).
- [228] M. E. King, A. F. Vakakis, 'A very complicated structure of resonances in a nonlinear system with cyclic symmetry : Nonlinear forced localization', *Nonlin. Dyn* **7**, 85 (1995).
- [229] S. Gutschmidt, O. Gottlieb, 'Nonlinear dynamic behavior of a microbeam array subject to parametric actuation at low, medium and large DC-voltages', *Nonlin. Dyn* **67**, 1 (2012).
- [230] A. J. Dick, B. Balachandran, C. D. Mote, 'Intrinsic localized modes in microresonator arrays and their relationship to nonlinear vibration modes', *Nonlin. Dyn* **54**, 13 (2008).

- [231] D. Bitar, N. Kacem, N. Bouhaddi, M. Collet, ‘Collective dynamics of periodic nonlinear oscillators under simultaneous parametric and external excitations’, *Nonlin. Dyn* **82**, 749 (2015).
- [232] V. Koukoulouyannis, P. G. Kevrekidis, G. P. Veldes, D. J. Frantzeskakis, D. DiMarzio, X. Lan, V. Radisic, ‘Bright breathers in nonlinear left-handed metamaterial lattices’, *Phys. Scr* **93**, 025202 (2018).
- [233] S. Abdoukary, L. Q. English, A. Mohamadou, ‘Envelope solitons in a left-handed nonlinear transmission line with Josephson junction’, *Chaos Solitons Fractals* **85**, 44 (2016).
- [234] Y. Shen, P. G. Kevrekidis, G. P. Veldes, D. J. Frantzeskakis, D. DiMarzio, X. Lan, V. Radisic, ‘From solitons to rogue waves in nonlinear left-handed metamaterials’, *Phys. Rev. E* **95**, 032223 (2017).
- [235] G. P. Veldes, J. Cuevas, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, ‘Quasidiscrete microwave solitons in a split-ringresonator-based left-handed coplanar waveguide’, *Phys. Rev. E* **83**, 046608 (2011).
- [236] G. Miloshevich, J. P. Nguenang, T. Dauxois, R. Khomeriki, S. Ruffo, ‘Traveling solitons in long-range oscillator chains’, *J. Phys. A* **50**, 12LT02 (2017).
- [237] J. E. Macias-Diaz, A. Bountis, ‘Supratransmission in β -Fermi-Pasta-Ulam chains with different ranges of interactions’, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul* **63**, 307 (2018).
- [238] Y. Y. Yamaguchi, Y. Doi, ‘Low-frequency discrete breathers in long-range systems without on-site potential’, *Phys. Rev. E* **97**, 062218 (2018).
- [239] J. B. Okaly, A. Mvogo, R. L. Woulaché, T. C. Kofane, ‘Nonlinear dynamics of damped DNA systems with long-range interactions’, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul* **55**, 183 (2018).
- [240] S. Flach, ‘Breathers on lattices with long range interaction’, *Phys. Rev. E* **58**, R4116 (1998).
- [241] R. Morandotti, H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, M. Sorel, J. S. Aitchison, ‘Self-Focusing and Defocusing in Waveguide Arrays’, *Phys. Rev. Lett* **86**, 3296 (2001).
- [242] C. Tchawoua, T. C. Kofane, A. S. Bocosah, ‘Dynamics of solitary waves in diatomic chains with long-range Kac-Baker interactions’, *J. Phys. A* **26**, 6477 (1993).
- [243] M. Remoissenet, N. Flytzanis, ‘Solitons in anharmonic chains with long-range interactions’, *J. Phys. C* **18**, 1573 (1985).
- [244] T. Yoshinaga, N. Sugimoto, T. Kakutani, ‘Nonlinear wave interactions on a discrete transmission line’, *J. Phys. Soc. Jpn* **50**, 2122 (1981).
- [245] M. Salerno, ‘Discrete model for DNA-promoter dynamics’, *Phys. Rev. A* **44**, 5292 (1991).

Liste des travaux

✓ Travaux de cette thèse :

1. **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Frank Thomas Ndjomatchoua and Clément Tchawoua, ‘Discrete breathers dynamic in a model for DNA chain with a finite stacking enthalpy ’, *Chaos* **28**, 043105 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5009147> .
2. **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Frank Thomas Ndjomatchoua and Clément Tchawoua, ‘Taming intrinsic localized modes in a DNA lattice with damping, external force, and inhomogeneity ’, *Phys. Rev. E* **99**, 052210 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.052210>.
3. **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Frank Thomas Ndjomatchoua and Clément Tchawoua, ‘Forward and backward propagating breathers in a DNA model with dipole-dipole long-range interactions ’, *Phys. Rev. E* **102**, 052212 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.052212> .

✓ Autres Travaux :

1. Michael Mekontchou Foudjio, Frank Thomas Ndjomatchoua, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, and Clément Tchawoua, ‘Collective escape and supratransmission phenomena in a non-linear oscillators chain ’, *Chaos* **30**, 123122 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0023070> .
2. M. F. Kepnang Pebeu, Frank. T. Ndjomatchoua, T. L. M. Djomo Mbong, **Carlos. L. Gninzanlong**, C. B. Tabi, T. C. Kofane, ‘Orbital stability and homoclinic bifurcation in a parametrized deformable double-well potential ’, *Chaos Solitons and Fractals* **130**, 109411 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2019.1094119> .
3. Florent Feudjio Kemwoue, Jean Marie Dongo, Rose NGONO Mballa, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Marcel Wouapi Kemayou, Bouchra Mokhtari, Frederick Biya-Motto, Jacques Atangana, ‘Bifurcation, multistability in the dynamics of tumor growth and electronic simulations by the use of Pspice ’, *Chaos Solitons and Fractals* **134**, 109689 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.109689> .
4. D. C. Bitang A Ziem, **C. L. Gninzanlong**, C. B. Tabi, T. C. Kofané, ‘Dynamics and pattern formation of a diffusive predator-prey model in the subdiffusive regime in presence of toxicity ’, *Chaos Solitons and Fractals* **151**, 111238 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.1112389> .

5. Florent Feudjio Kemwoue, Vandi Deli, H el ene Carole Edima, Joseph Marie Mendimi, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Mireille Mbou Dedzo, Jules Fossi Tagne, Jacques Atangana , ‘Effects of delay in a biological environment subject to tumor dynamics ’, *Chaos Solitons and Fractals* **158**, 112022 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2022.112022> .
6. Michael Mekontchou Foudjio, Frank Thomas Ndjomatchoua, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Cl ement Tchawoua, ‘Collective escape and homoclinic bifurcation phenomena in a nonlinear oscillators chain ’, *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat* **114**, 106690 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2022.106690> .
7. T. H. Tchinda, K. M. Wouapi, Z. Tabekoueng Njitacke, T. Fozin Fonzin, **C. L. Gninzanlong**, H. B. Fotsin, ‘Hopf Bifurcation, Multistability and its Control in a Satellite System ’, *J. Vib. Eng. Technol*, 1-19 (2022). <https://doi.org/10.1007/s42417-022-00567-z> .
8. Frank T. Ndjomatchoua, Thierry L. Djomo, Florent F. Kenwoue, **Carlos L. Gninzanlong**, Maxime P. Kepnang, Martin S. Siewe, Cl ement Tchawoua, Sansao A. Pedro, and Timoleon C. Kofane, ‘Amplitude response, Melnikov’s criteria, and chaos occurrence in a Duffing’s system subjected to an external periodic excitation with a variable shape ’, *Chaos* **32**, 083144 (2022). <https://doi.org/10.1063/5.0082235> .
9. Florent Feudjio Kemwoue, Vandi Deli, Joseph Marie Mendimi, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Jules Fossi Tagne, Jacques Atangana , ‘Dynamics of cancerous tumors under the effect of delayed information : mathematical and electronic study ’, *Int. J. Dynam. Control* (2022). <https://doi.org/10.1007/s40435-022-01031-2> .
10. Frank Thomas Ndjomatchoua, Byliole S. Djouda, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Thierry Landry Michel Mbong Djomo, Maxime Fabrice Kepnang Pebeu, and Cl ement Tchawoua, ‘Using coupling imperfection to control amplitude death ’, *Phys. Rev. E* **107**, 054207 (2023). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.107.054207> .
11. Frank Thomas Ndjomatchoua, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Thierry Landry Michel Mbong Djomo, Maxime Fabrice Kepnang Pebeu, and Cl ement Tchawoua, ‘Enhanced signal response in globally coupled networks of bistable oscillators : Effects of mean field density and signal shape ’, *Phys. Rev. E* **107**, 064208 (2023). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.107.064208> .
12. Frank Thomas Ndjomatchoua, **Carlos Lawrence Gninzanlong**, Thierry Landry Michel Mbong Djomo, Maxime Fabrice Kepnang Pebeu, and Cl ement Tchawoua, ‘Diversity-Enhanced Stability ’, *Accept e le 11/Juillet/2023 pour publication   Phys. Rev. E*.

Discrete breathers dynamic in a model for DNA chain with a finite stacking enthalpy

Carlos Lawrence Gninzanlong, Frank Thomas Ndjomatchoua, and Clément Tchawoua

Citation: *Chaos* **28**, 043105 (2018); doi: 10.1063/1.5009147

View online: <https://doi.org/10.1063/1.5009147>

View Table of Contents: <http://aip.scitation.org/toc/cha/28/4>

Published by the [American Institute of Physics](#)



Welcome to a
Smarter Search 

**PHYSICS
TODAY**

with the redesigned
Physics Today Buyer's Guide

Find the tools you're looking for today!

Discrete breathers dynamic in a model for DNA chain with a finite stacking enthalpy

Carlos Lawrence Gninzanlong,^{a)} Frank Thomas Ndjomatchoua,^{b)} and Clément Tchawoua^{c)}
Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaoundé 1, P.O. Box 812, Yaoundé, Cameroon

(Received 13 October 2017; accepted 19 March 2018; published online 6 April 2018)

The nonlinear dynamics of a homogeneous DNA chain based on site-dependent finite stacking and pairing enthalpies is studied. A new variant of extended discrete nonlinear Schrödinger equation describing the dynamics of modulated wave is derived. The regions of discrete modulational instability of plane carrier waves are studied, and it appears that these zones depend strongly on the phonon frequency of Fourier's mode. The staggered/unstaggered discrete breather (SDB/USDB) is obtained straightforwardly without the staggering transformation, and it is demonstrated that SDBs are less unstable than USDB. The instability of discrete multi-humped SDB/USDB solution does not depend on the number of peaks of the discrete breather (DB). By using the concept of Peierls-Nabarro energy barrier, it appears that the low-frequency DBs are more mobile. *Published by AIP Publishing.* <https://doi.org/10.1063/1.5009147>

The DNA is a double-stranded macromolecule in the form of a double helix. It is only found in the nucleus of cell of living organisms. The DNA not only supports genetic information but also allows the transmission of genetic information from cells to cells and from one generation to another via replication and transcription processes. In the present paper, a nonlinear model for DNA dynamics including finite stacking enthalpy energy is used to demonstrate the existence, the stability, and the mobility of highly localized modes, namely, discrete breathers (DBs). This study offers the plausible way to fill the gap in understanding the mechanism responsible for the existence of the non-overlapping during DNA transcription by several RNA messengers at distinct sites.

I. INTRODUCTION

The understanding of DNA's physics is a considerable issue, and simple models of this biological molecule can be useful to investigate what are the key characteristics that are primordial to generate its noteworthy properties.¹ Because of its large amplitude motions participating in numerous biological processes, DNA is a worthy contextual framework for nonlinear physics in which models can be used to simplify some aspects of reality and to analyze some of its biological properties.¹ Hence, in order to study the nonlinear dynamics and statistical mechanics of DNA of these mechanisms and to mimic biological, chemical, and physical processes in which DNA molecule are involved, numerous theoretical models have been suggested during the past decades.^{1–12} The previously mentioned pioneering models were able to replicate some observed phenomena such as DNA thermal denaturation, formation, and propagation of oscillating bubbles during

DNA transcription and local opening/closing of the double DNA chain.^{1–12} The Dauxois-Peyrard-Bishop (DPB) model for DNA is renowned, incorporates stacking interactions, and is able to replicate denaturation curves observed by the Raman spectroscopy.⁹ Stacking interactions between neighbor bases along the DNA axis stabilize the secondary DNA structure; they hold one base over the next one and form a stack of bases.¹ The DPB model takes into consideration this stacking interaction but does not incorporate any characteristic energy associated with it.⁹

Inspired by the anharmonic model suggested by DPB, Joyeux and Buyukdagli (JB) proposed a new model based on site-specific enthalpy and closer to the statistical models.^{10,11} This model takes into account the fact that this energy must be finite in contradiction with the DPB model in which it is infinite.^{10,11} This modification yielded phase transition curves in agreement with experimental observations and ensured a sharp melting transition.^{10,11} Therefore, the JB model was selected as the core model in this study.

The nonlinear wave dynamics in the JB model has been further analyzed by numerous authors.^{13–16} They were able to show the existence of nonlinear coherent structures, modulational instability (MI), breathers, compactons, and fractional breathers.^{13–16} Although the JB model is purely discrete, these authors have mainly used the semi-discrete/continuous approximation in order to derive the continuous nonlinear Schrödinger equations (NLSEs) to study the modulated wave and to estimate the analytical solution for the DNA base-pair vibrations.^{13–16} However, a study of solutions of nonlinear lattice models kept under their discrete form called discrete breather (DB) also named intrinsic localized modes (ILMs) appears in various contexts of physics and biology.^{17,18} The DB has a bell-shaped form, while ones possessing an arbitrary number of extrema are called multibreather.^{17,18} In contrary to previous investigations,^{13–16} the current study surveyed purely discrete ILMs using an extended discrete nonlinear Schrödinger equation (EDNLSE) derived from the discrete JB model.

^{a)}gcarloslawrence@yahoo.fr

^{b)}ftndjomatchoua@gmail.com

^{c)}Author to whom correspondence should be addressed: ctchawa@yahoo.fr

It must be emphasized that numerous variants of EDNLSE are found in various contexts such as the biological energy transport in α -helical protein,¹⁹ the electrical field in an array of coupled optical waveguide embedded in a material with Kerr nonlinearities,^{20,21} Fermi-Pasta-Ulam system,²² superfluid dynamics of a Bose-Einstein condensate,²⁴ and in Kerr nonlinear media supported by intrinsic gain.²⁵ The authors have mainly studied stability and mobility of DBs and the existence of compact DBs.^{19–25} According to the best of our knowledge, the exploration of discrete multi-breather (DMB) in EDNLSE is yet to be done. It should be further mentioned that studies of DBs in DNA reported in the literature are restricted to the movement, trapping, and collision of single-hump ILMs based on DPB or Klein-Gordon equations incorporating short/long range interaction.^{26–31} However, the multi-hump analog of the DB has been investigated in the discrete nonlinear Schrödinger equation (DNLSE) with cubic nonlinearity,³² saturable nonlinearity,³³ Klein-Gordon chain,^{34,35} and discrete electrical transmission lines;³⁶ they have been observed experimentally.³⁷ In spite of the fact that discrete multi-hump solitons have been observed in many physical systems, up until now, they are yet to be investigated in DNA. Discrete multi-humped localized excitation is investigated in the derived EDNLSE, modelling the dynamics of modulated waves in DNA in this study; in addition to that, the present study aimed to explore the possible existence of DBs and discrete multibreathers (DMBs), their stability, and their mobility in DNA.

The main objective of this study is to analyze the properties of purely discrete ILMs in the EDNLSE describing the modulated wave propagation through DNA lattice with time. Following Sec. I, the rest of the present paper is structured as follows: In Sec. II, the JB model is derived. In Sec. III, using the rotative wave approximation (RWA) applied in the JB model, it is shown that the dynamic of modulated waves is reduced to an EDNLSE. In Sec. IV, the discrete modulational instability criterion is subsequently estimated. In Sec. V, the existence and stability of discrete localized modes are investigated. In Sec. VI, the mobility of ILMs in EDNLSE is analyzed. Section VII is devoted to the discussion of the obtained results regarding what was observed in the literature. This study is ended by Sec. VIII where the major achievements are summarized, conclusions are provided, and the prospect for future extensions is given.

II. THE JOYEUX AND BUYUKDAGLI MODEL FOR DNA

Let us consider the Peyrard-Bishop-Dauxois (PBD) model which describes DNA as a one-dimensional chain and takes only transversal interaction at the n th nucleotides.^{5–9,26} This interaction is modelled by Morse potential which represents hydrogen bonds and repulsive interactions of the phosphate and surrounding solvent. The Hamiltonian of DNA chain is^{5–9,26}

$$H = \sum_n \left[\frac{m}{2} \dot{y}_n^2 + W(y_n, y_{n-1}) + V(y_n) \right], \quad (1)$$

where y_n denotes the transverse stretching of the nucleotide pair at site n and $V(y_n)$ is the intra-pair potential given by $V(y_n) = D[1 - \exp(-ay_n)]^2$, where D is the dissociation energy and a is the spatial scale factor. The anharmonic stacking interaction $W(y_n, y_{n-1})$ is defined as

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{K}{2} (y_n - y_{n-1})^2 [1 + \rho e^{-b(y_n + y_{n-1})}], \quad (2)$$

where K is the stacking coupling constant and ρ is the amplitude of the anharmonic stacking interaction.^{5,6} However, the interaction potential Eq. (2) does not take into account the fact that the stacking interaction is necessarily finite.^{10,11} The Joyeux-Buyukdagli potential, considered in the following, which does so, contains a more physical exponential switching function, and a small term which models the stiffness of the sugar/phosphate backbones.^{10,11} It is given by

$$W(y_n, y_{n-1}) = \frac{\Delta H}{C} [1 - e^{-b(y_n - y_{n-1})}]^2 + K_b (y_n - y_{n-1})^2, \quad (3)$$

where the first term is the finite stacking interaction with ΔH the finite stacking energy. The second term is the stiffness of the sugar/phosphate backbones with a much smaller elastic constant K_b . The corresponding equation of motion is written as

$$m\ddot{y}_n - 2K_b(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) - 2aD(e^{-ay_n} - 1)e^{-ay_n} + \frac{2\Delta Hb}{C}(y_n - y_{n-1})e^{-b(y_n - y_{n-1})^2} - \frac{2\Delta Hb}{C}(y_{n+1} - y_n)e^{-b(y_{n+1} - y_n)^2} = 0. \quad (4)$$

The used parameters are $m = 300$ amu, $D = 0.04$ eV, $a = 4.45 \text{ \AA}^{-1}$, $b = 0.10 \text{ \AA}^{-2}$, $\Delta H = 0.44$ eV, $K_b = 10^{-5}$ eV \AA^{-2} , and $C = 2$.^{10,11} By assuming that the displacement of the base from its equilibrium position (y_n) at the bottom of the Morse potential oscillates with an amplitude large enough to be assumed as anharmonic, but still insufficient to break the bond since the plateau of the Morse potential is not reached, we can therefore expand the exponentials $\exp[-b(y_n - y_{n-1})^2]$, $\exp[-b(y_{n+1} - y_n)^2]$ and $\exp(-ay_n)$ up to second and third order, respectively, and the master equation (4) is reduced to

$$\ddot{y}_n - \frac{2}{m} \left(K_b + \frac{\Delta Hb}{C} \right) (y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + \frac{2\Delta Hb^2}{mC} [(y_{n+1} - y_n)^3 - (y_n - y_{n-1})^3] + \frac{2a^2D}{m} \left(y_n - \frac{3}{2}ay_n^2 + \frac{7}{6}a^2y_n^3 \right) = 0. \quad (5)$$

In order to solve Eq. (5), it is convenient to transform it into

$$\ddot{Y}_n - k_2(Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) + \omega_g^2(Y_n + \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) + k_4[(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] = 0, \quad (6)$$

where

$$Y_n = ay_n; \quad t = \sqrt{\frac{m}{a^2 D}} \tau; \quad \beta = \frac{7}{6}; \quad \omega_g^2 = 2; \quad (7)$$

$$k_4 = \frac{2\Delta H b^2}{CD a^4}; \quad k_2 = \frac{2}{a^2 D} \left(K_b + \frac{\Delta H b}{C} \right); \quad \alpha = -\frac{3}{2}.$$

In Sec. III, we will try to investigate modulated discrete breathers for Eq. (6).

III. THE EXTENDED DISCRETE NONLINEAR SCHRÖDINGER EQUATION

In order to solve Eq. (6), we seek for the stationary time-periodic small-amplitude solutions under the form^{40–43}

$$Y_n(\tau) = \sum_{p=-L}^{p=L} a_n^{(p)}(\epsilon^2 \tau) \exp(ip\omega_b \tau), \quad (8)$$

where ω_b is close for some phonon frequency of the fundamental mode, ϵ is the amplitude of the standard harmonic (plane-wave) small-amplitude solutions, and the Fourier coefficients are slowly depending on time $a_n^{(p)}(\epsilon^2 \tau)$. Note that the ansatz in Eq. (8) is also called rotating wave approximation (RWA).^{17,18} Due to the exponential decay of the Fourier coefficients in p , they must satisfy $a_n^{(p)} \sim \epsilon^p$ for $p > 0$, while $a_n^{(0)} \sim \epsilon^2$. Moreover $a_n^{(p)} = a_n^{(-p)*}$ since Y_n is real. After inserting the relation (8) inside (6), we obtained for the respective harmonics $L = 0, 1, 2$ the three equations

$$a_n^{(0)} = -2\alpha |a_n^{(1)}|^2 + O(\epsilon^4), \quad (9)$$

$$2i\omega_b \dot{a}_n^{(1)} + k_2 \left(2a_n^{(1)} - a_{n+1}^{(1)} - a_{n-1}^{(1)} \right) + \left(\omega_g^2 - \omega_b^2 \right) a_n^{(1)} \\ + 2\alpha \omega_g^2 \left(a_n^{(0)} a_n^{(1)} + a_n^{(2)} a_n^{(1)*} \right) \\ + \left(3\beta \omega_g^2 - 6k_4 \right) |a_n^{(1)}|^2 a_n^{(1)} \\ + 6k_4 \left(a_{n+1}^{(1)} + a_{n-1}^{(1)} \right) |a_n^{(1)}|^2 + 3k_4 |a_{n+1}^{(1)}|^2 a_{n+1}^{(1)} \\ - 3k_4 \left[\left(a_{n+1}^{(1)} \right)^2 + \left(a_{n-1}^{(1)} \right)^2 \right] a_n^{(1)*} + 3k_4 |a_{n-1}^{(1)}|^2 a_{n-1}^{(1)} \\ + 3k_4 \left(a_{n+1}^{(1)*} + a_{n-1}^{(1)*} \right) \left(a_n^{(1)} \right)^2 - 6k_4 |a_{n+1}^{(1)}|^2 a_n^{(1)} \\ - 6k_4 |a_{n-1}^{(1)}|^2 a_n^{(1)} = 0 + O(\epsilon^5), \quad (10)$$

$$a_n^{(2)} = -\frac{\alpha \omega_g^2}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2} \left(a_n^{(1)} \right)^2 + O(\epsilon^4). \quad (11)$$

Inserting Eqs. (11) and (9) into Eq. (10) and rescaling $a_n^{(1)}$ as $a_n^{(1)} = \sqrt{\frac{2\omega_b}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}} \psi_n \exp(i\vartheta t)$, the following extended discrete nonlinear Schrödinger equation (EDNLSE) is obtained:

$$i\dot{\psi}_n + \left(P_1 + Q_1 |\psi_n|^2 \right) (\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + Q_2 |\psi_n|^2 \psi_n \\ + R_1 \left[(\psi_{n+1} - 2\psi_n) |\psi_{n+1}|^2 + (\psi_{n-1} - 2\psi_n) |\psi_{n-1}|^2 \right] \\ + R_1 \left[(\psi_{n+1}^* + \psi_{n-1}^*) \psi_n^2 - (\psi_{n+1}^2 + \psi_{n-1}^2) \psi_n^* \right] = 0, \quad (12)$$

where

$$P_1 = -\frac{k_2}{2\omega_b}, \quad R_1 = \frac{3k_4}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}, \quad Q_1 = 2R_1, \\ Q_2 = \frac{3\beta\omega_g^2 - \eta}{|3\beta\omega_g^2 - \eta|}, \quad \vartheta = \frac{2k_2 + \omega_g^2 - \omega_b^2}{2\omega_b}, \quad (13) \\ \eta = 6k_4 + 4\alpha^2 \omega_g^2 + \frac{2\alpha^2 \omega_g^4}{\omega_g^2 - 4\omega_b^2}.$$

This equation is different from the EDNLSE found in the literature.^{19–25} Without the extended terms (terms proportional to R_1 which include the effect of nonlinear dispersion terms), the previous equation is the well known modified discrete nonlinear Schrödinger equation or Salerno's equation. It appears that previous studies did not consider the asymmetric term (term proportional to α) during the derivation of the nonlinear Schrödinger equation.^{14–16} The two conserved quantities for (12) are the Hamiltonian (energy)^{19–25}

$$\mathcal{H} = \sum_n \left\{ P_1 \psi_n^* \psi_{n+1} + \frac{1}{4} Q_2 |\psi_n|^4 \right. \\ \left. + \frac{1}{2} R_1 \left[2\psi_n \psi_{n+1} (\psi_n^{*2} + \psi_{n+1}^{*2}) - \psi_n^2 \psi_{n+1}^{*2} \right. \right. \\ \left. \left. - 2|\psi_n|^2 |\psi_{n+1}|^2 \right] \right\} + c.c., \quad (14)$$

and the power (norm)

$$\mathcal{P} = \sum_n |\psi_n|^2, \quad (15)$$

where $c.c.$ denotes complex conjugate. Equation (12) is the core of Sec. IV.

IV. DISCRETE MODULATIONAL INSTABILITY

Discrete modulational instability (MI) phenomenon is considered as a first step toward localization of energy in nonlinear lattices.³⁸ Hence, it is a way to produce ILMs in discrete lattices via modulation of plane waves. As naturally expected, EDNLSE must be able to exhibit MI phenomenon which can lead to the formation of localized waves in the lattice. Let us examine this route of creation of such localized structures in detail.

Equation (12) has exact plane wave solutions in the form $\psi_n(\tau) = \psi_0 \exp[i(qn - \omega\tau)]$ if the relation between the wave number q , the angular frequency ω , and the amplitude ψ_0 is given as

$$\omega = -2P_1 \cos(q) - \left\{ Q_2 + 2R_1 \left[1 - 8 \sin^4 \left(\frac{q}{2} \right) \right] \right\} |\psi_0|^2. \quad (16)$$

To investigate the MI of amplitude of this plane wave, we introduce a sufficiently small perturbation in ψ_0 so that one can linearize the equation of the envelope of the carrier wave. Therefore, we look for a solution of the form $\psi_n(\tau) = [\psi_0 + \chi_n(\tau)] \exp[i(qn - \omega\tau)]$, where the perturbation amplitude

$\chi_n(\tau)$ is assumed to be small in comparison with the carrier ψ_0 and assume to be of the form $\chi_n(\tau) = B_1 \exp[i(Qn - \Omega\tau)] + B_2^* \exp[-i(Qn - \Omega^*\tau)]$. In this previous expression, the asterisk denotes complex conjugate, Q and Ω represent, respectively, the wave number and the angular frequency of the perturbation amplitude, and B_1 and B_2 are complex constant amplitudes. Introducing this perturbation solution in (12), using (16) and after linearization with respect to complex constant amplitudes, one obtains the following homogeneous system:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 + \Omega & \beta_1 \\ \beta_1 & \alpha_2 - \Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

where

$$\begin{aligned} \alpha_1 = & 2P_1[\cos(q + Q) - \cos(q)] \\ & + \{Q_2 + 2R_1[1 - 2\cos(2q + Q) + 4\cos(q + Q) \\ & + 2(\cos^2(q) - \cos(Q))]\} |\psi_0|^2, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \alpha_2 = & 2P_1[\cos(q - Q) - \cos(q)] \\ & + \{Q_2 - 2R_1[1 + 2\cos(2q - Q) + 4\cos(q - Q) \\ & - 2(\cos^2(q) - \cos(Q))]\} |\psi_0|^2, \end{aligned} \quad (19)$$

and

$$\begin{aligned} \beta_1 = & 2R_1 \left[4\cos(q) \cos^2\left(\frac{Q}{2}\right) - \cos(2q) - 2\cos(Q) \right] |\psi_0|^2 \\ & + Q_2 |\psi_0|^2. \end{aligned} \quad (20)$$

By setting $\Omega_1 = \Omega - \Omega_0$, the system (17) admits plane wave solutions with wave number Q and frequency Ω if the dispersion relation for the modulation waves is

$$\begin{aligned} \Omega_1^2 = & (\Omega - \Omega_0)^2 = 4\{2P_1 \cos(q) \sin^2(Q/2) \\ & + R_1[1 + 2\cos(q) - 4\cos(Q) \sin^2(q/2)] |\psi_0|^2\} \\ & \times \{2P_1 \cos(q) \sin^2(Q/2) \\ & - \{Q_2 + R_1[1 + 2(1 + 3\cos(Q)) \cos(q) \\ & - 2(1 + 2\cos^2(q)) \cos(Q)]\} |\psi_0|^2\}, \end{aligned} \quad (21)$$

where

$$\begin{aligned} \Omega_0 = & 2P_1 \sin(q) \sin(Q) \\ & - 2R_1 \left[1 - 8\sin(q) \sin(Q) \sin^2\left(\frac{q}{2}\right) \right] |\psi_0|^2. \end{aligned} \quad (22)$$

If the right-hand side of $(\Omega_1)^2$ is negative, then two complex numbers are solutions of the above equation and the perturbation grows exponentially with a rate $\Sigma(q, Q) = \sqrt{-\Omega_1^2}$. This MI is possible if the initial amplitude $|\psi_0|$ exceeds the threshold amplitude $|\psi_{0,cr}|$ defined as follows:

$$\begin{aligned} |\psi_0|^2 \geq |\psi_{0,cr}|^2 = & \frac{2P_1 \cos(q) \sin^2\left(\frac{Q}{2}\right)}{F(q, Q)}, \\ F(q, Q) = & Q_2 + R_1 \{1 + 2[1 + 3\cos(Q)] \cos(q)\} \\ & - 2R_1 [1 + 2\cos^2(q)] \cos(Q). \end{aligned} \quad (23)$$

Figure 1 shows the regions of stability/instability [panels (a) and (b)], and the blue dotted regions in the (q, Q) plane stand for the regions of instability, while white regions are regions of stability. These two panels show that stability/instability area strongly depends of ω_b , the phonon frequency of the fundamental mode. The panel (c) of this figure displays the growth rate instability $\Sigma(q, Q)$ in the case $q = 0.2\pi$ versus wave number Q for different values of phonon frequency ω_b , and it appears clearly that the high values of ω_b increase the number of wave numbers of the plane wave perturbation (large interval of Q) leading to the MI (strictly positive growth rate). For fixed lower values of Q/π , it is noticed that the growth rate of instability decreases with increasing values of ω_b , whereas there are no MI for larger values of Q . In panel (d), the stability/instability domain is given in the (q, ω_b) plane which confirms regions of MI given in panel (a) and (b). This analytical analysis of MI shows that energy flow is possible in the EDNLSE obtained in the discrete JB model. In order to check the predicted energy localization, Eq. (4) has been solved numerically by assigning the initial conditions

$$\begin{aligned} y_n(t = 0) = & \psi_0 [1 + \chi_0 \cos(Qn)] \cos(qn) \\ \dot{y}_n(t = 0) = & Y(q) \psi_0 [1 + \chi_0 \cos(Qn)] \sin(qn), \end{aligned} \quad (24)$$

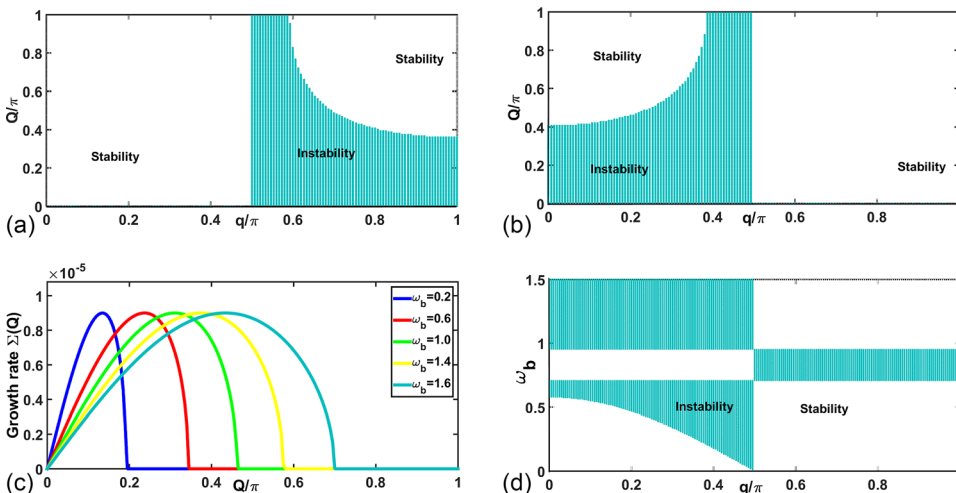


FIG. 1. The stability/instability diagram in the (q, Q) for $\omega_b = 0.8071$ panel (a) and $\omega_b = 1$ panel (b); panel (c) displays the growth rate instability $\Sigma(q, Q)$ in the case $q = 0.2\pi$ versus wave number Q for different values of phonon frequency ω_b , and it clearly shows that the high values of ω_b increase the growth rate instability. Panel (d) shows the stability/instability area of plane wave in the (q, ω_b) plane for $Q = 0.3\pi$. For all these panels, $|\psi_0| = 0.003$ which is greater than $\psi_{0,cr} = 3.13 \times 10^{-5}$ panel (a) and $\psi_{0,cr} = 2.53 \times 10^{-5}$ panel (b).

under the periodic boundary condition $y_0 = y_N, y_{N+1} = y_1$ where $N = 200$ is the number of base pairs used for simulations. In Eq. (24), $Y(q)$ is the linear dispersion relation obtained by assuming $y_n(\tau) \propto \cos(qn - Y(q)\tau)$ in (7) and retaining only linear terms which yield $Y(q) = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2(q/2)}$. It thus appears that the JB model is a pass band filter with a phonon band frequency between $\omega_{min} = \omega_g$ and $\omega_{max} = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2}$. The Runge-Kutta-Fehlberg (RKF) with time step chosen small enough in order to conserve the energy was used for numerical integrations.

Figure 2 depicts the MI development with time. In order to check if the derived MI criterion is valid, a perturbed initial plane wave solution is plotted in Fig. 2(a) and, its evolution is represented for a time $t = 390.4$ ps for $|\psi_0| < |\psi_{0,cr}|$ [Fig. 2(b)] and for $|\psi_0| > |\psi_{0,cr}|$ [Fig. 2(c)]. The numerical results show agreement with the analytical estimates. In the density plots shown in the lower panel, the gray shading represents energy (with darker shades corresponding to higher energies), and the total energy of each base pair n of the system is plotted as a function of time. The lattices are initially unexcited before being subjected to the initial condition (24) at $t = 0$ ps. The MI phenomenon can be clearly noticed through the energy localization becoming more and more substantial for $t > 50$ ps.

V. DB SEEDING AND LINEAR STABILITY ANALYSIS

Although MI is a particularly useful technique toward producing ILMs, one of its important disadvantages is that it

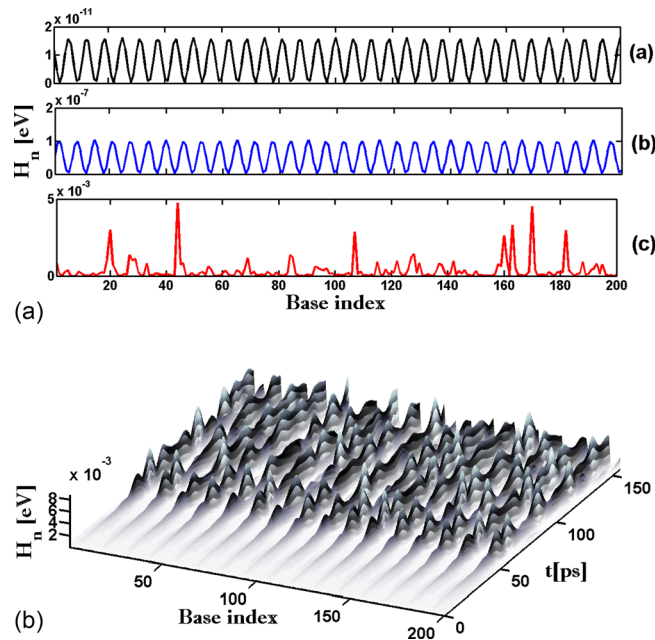


FIG. 2. Temporal evolution of the energy distribution $H_n(t)$ given in (1). The energy distribution of the perturbed plane wave is plotted at each base pair. A snapshot of the perturbed plane wave is represented for parameters not inducing the MI ($Q = 0.8\pi, q = 0.16\pi, \chi_0 = 0.005$, and $|\psi_0| = 2 \times 10^{-5}$) in (a) $t = 0$ ps and (b) $t = 390.4$ ps, and for parameters inducing MI in (c) ($Q = 0.205\pi, q = 0.16\pi, \chi_0 = 0.005$, and $|\psi_0| = 0.14$) at $t = 390.4$ ps. The lower panel shows the evolution of the MI for parameter values given by $\psi_0 = 0.135, q = 0.16\pi, Q = 0.205\pi, \psi_0 = 0.135, \chi_0 = 0.005$ ($\chi_0 \ll 1$).

relies on the manifestation of the instability which occurs only for specific values of wave number and critical amplitude of the plane and for particular values of system parameters. There is, however, a more direct alternative method toward the creation of ILMs in DNLSE overcoming the previously mentioned MI inconvenient. This method is called the anti-continuous limit.³² The latter is implemented by decoupling the dynamics adjacent sites, finding the trivial solution which is corrected numerically.³² It has been successfully applied in DNLSE³² as well as in EDNLSE.²⁰

In order to solve Eq. (12), we seek a discrete stationary intrinsic localized mode with a purely harmonic time-dependence of the form

$$\psi_n(\tau) = u_n \exp(-i\mu\tau), \quad (25)$$

where the mode profile u_n is a real function and time independent, μ being the frequency. Inserting Eq. (25) into Eq. (12) gives the following set of real coupled algebraic equations:

$$\begin{aligned} \mu u_n + (P_1 + Q_1 u_n^2)(u_{n+1} + u_{n-1}) + Q_2 u_n^3 \\ + R_1 [(u_{n+1} - 2u_n)u_{n+1}^2 + (u_{n-1} - 2u_n)u_{n-1}^2] \\ + R_1 [(u_{n+1} + u_{n-1})u_n^2 - (u_{n+1}^2 + u_{n-1}^2)u_n] = 0, \quad (26) \end{aligned}$$

and the trivial solution of the previous equation is $u_n = \sqrt{-\mu/Q_2}$. This trivial solution is obtained by solving Eq. (26) without the coupling terms between neighboring sites (setting terms in $u_{n\pm 1}$ equal to zero).³¹ Solutions of the nonlinear coupled equation (26) are found by using the iterative multidimensional Newton-Raphson scheme with periodic boundary conditions $u_n = u_{n+N}$, where N is the number of base pairs (see Ref. 32).

After several trials and using relation provided in Eq. (12), it is noticed that the sign product $P_1 \times Q_2$ varies with the values of ω_b . This product is negative for $0.707 < \omega_b < 0.954$ and positive elsewhere. Moreover, it is noticed that Q_2 is positive for $0.707 < \omega_b < 0.954$ and negative elsewhere. Therefore, the trivial solution exists for different values of the parameters inside the roots. Thus, we were curious to see what are the zones where the trivial solution exists for different values of ω_b and how the ILM would look like in these zones.

Figure 3 shows the area of existence of trivial solution and the corresponding solution. In Fig. 3(a), the space parameter in black dot represents a zone of existence of localized modes, while in the blank area they do not exist. In the black left area (zone A) of this figure where $\mu < 0$, the sign of the product between the nonlinear and dispersion coefficients $P_1 \times Q_2$ of EDNLSE is negative which gives rise of ILM with neighboring base pairs oscillating in opposition of phase (staggered ILM) depicted in Fig. 3(c); whereas, in Figs. 3(b) and 3(d) associated with the zone B and C, respectively, the ILM has a bell shape (unstaggered ILM).

Given that the initial guess (iteration $k = 0$) for the iterative Newton-Raphson scheme was under the form $u_n^0 = (0, \dots, 0, \sqrt{-\mu/Q_2}, 0, \dots, 0)$ and without a further staggering transformation $[u_n \rightarrow (-1)^n u_n]$, it is not common to see

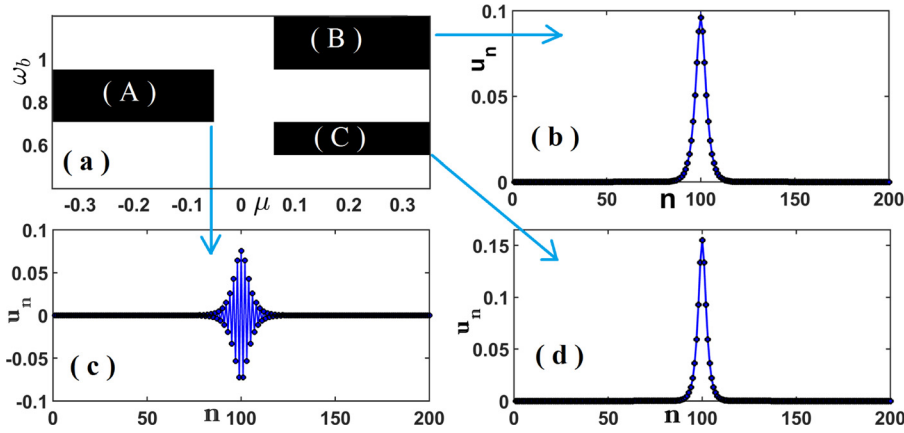


FIG. 3. (a) The area of existence of the trivial solution in the $\omega_b - \mu$ parameter plane and corresponding single-hump soliton solution corrected with Newton-Raphson for [(b) ($\mu = 0.05996, \omega_b = 1$), (c) ($\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071$), and (d) ($\mu = 0.0995, \omega_b = 0.631$)].

the straightforward occurrence of staggered stationary ILM as in Fig. 3(c). When the Fourier spectra for modes in zone C of Fig. 3(a) are determined, it is noticed that the dominant mode has a frequency closer to the upper cutoff of the first Brillouin zone. This explains the staggering of the envelope.

It is noticed that results displayed in Fig. 1(d) are further corroborated by Fig. 3(a). The zone of plane-wave modulations stability predicted in Fig. 1(d) appears to coincide with the zone of existence of the localized modes in Fig. 3(a).

In order to check the linear stability of the stationary solutions u_n obtained by the Newton-Raphson, a perturbation is introduced as follows:

$$\psi_n(\tau) = (u_n + \varepsilon v_n) \exp(-i\mu\tau). \tag{27}$$

When this perturbation increases/decreases over time, the solution will be unstable or not. In the previous equation, ε is a constant very small, and v_n is a complex number acting as a perturbation. Its expression is given by $v_n = a_n \exp(\lambda\tau) + b_n \exp(\bar{\lambda}\tau)$, where a_n and b_n are complex numbers. Let us introduce (27) into (12) by using the fact that u_n is a solution of the non-perturbed equation, we obtain from the linear functions $e^{\lambda\tau}$ and $e^{\bar{\lambda}\tau}$, and an eigenvalue problem under the form $\lambda V = MV$ is obtained. Following this analysis, the solution of EDNLSE (12) is used to estimate the solution of (8) of the initial system (4). Furthermore, the Floquet stability analysis of (4) was performed. The approach is used to linearize (4) by setting $y_n(t) = \hat{y}_n(t) + \xi_n(t)$ where $\hat{y}_n(t)$ is the time periodic solution of (4) and

$\xi_n(t) \ll 1$ a small perturbation. Subsequently, we find the eigenvalues of the main matrix of the linear system $\ddot{\xi}_n(t) = \mathcal{M}(t, \hat{y}_n) \xi_n(t)$.⁵⁴ The system is linearly unstable if at least one of the eigenvalues of the monodromy matrix \mathcal{M} has its modulus greater than 1.⁵⁴

A. Staggered case

The solutions of this case are those obtained for $P_1 \times Q_2 < 0$. Figure 4 depicts single or multi-hump DB obtained by the multidimensional Newton-Raphson method and the corresponding eigenvalues from the linear stability. The parameters $\mu = -0.0715$ and $\omega_b = 0.8071$ are selected in Fig. 3(a). It is noticed that the multi-humped ILM and the single-humped ILMs found are linearly unstable as depicted by the spectrum of eigenvalues. The same process was repeated for higher number of humps (results not shown in the paper), and it was noticed that the number of humps do not have an influence on the linear stability. If instead of 1-hump, n -hump ($n > 1$) DBs are constructed, the eigenvalues remain identical to the 1-hump case for same frequency μ . However, the width of these solutions is the decreasing function of the frequencies $|\mu|$, while the amplitude of these solutions as well as their instabilities is less pronounced for values of $|\mu|$. It is also observed that the separation ℓ_δ ³³ between the peaks of ILMs depends on the frequency (Fig. 5). The minimal distance between the peaks of two consecutive humps ℓ_δ for a δ -humped DB varies as a decreasing function of the parameter $|\mu|$ as displayed in Fig. 5. Note that

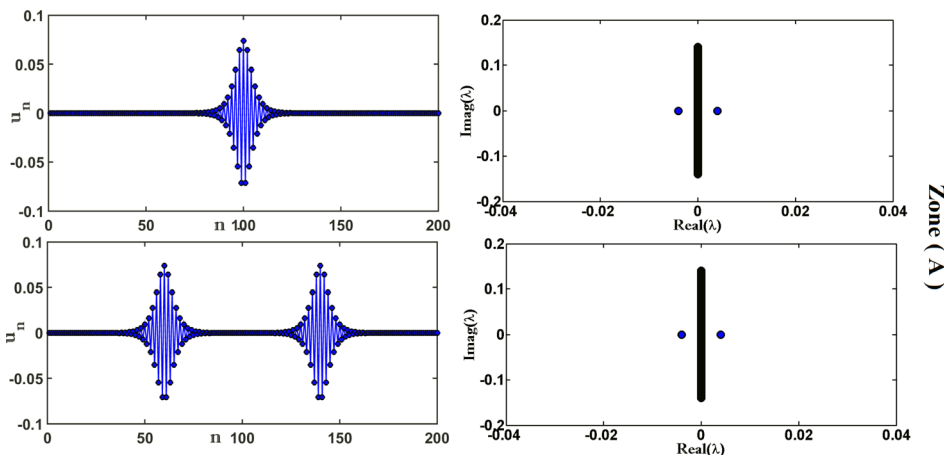


FIG. 4. Examples of discrete single and multi-breather solutions of Eq. (26) corrected with Newton-Raphson, where the parameters are $\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071$ taken from Fig. 3(a). On the right column, the imaginary part of the eigenvalue [$\text{Imag}(\lambda)$] as a function of the real part [$\text{Real}(\lambda)$] is displayed.

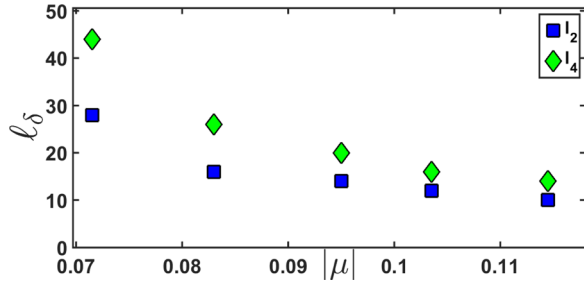


FIG. 5. Minimal inter-peak distances ℓ_δ separating maxima of δ -humped DB. The cases considered here are 2-, 4-hump DBs, $\delta = 2$ (blue square), and $\delta = 4$ (green rhombus) according to different values of $|\mu|$ and $\omega_b = 0.8071$.

our attempt to construct multi-humped DBs with interpeak distances below this threshold was not successful.

By using the solution given by the multidimensional Newton-Raphson algorithm, the initial solution of model can be constructed. This is done by combining Eqs. (25), (11), (9) and (8). Figure 6 shows the Floquet multiplier spectrum projected on a unit circle. The multi-hump analog for this solution has exactly the same Floquet's multipliers (not shown in the paper). All the modulus of the eigenvalues is located on the unit circle of the complex plane, which means that there is a linear (marginal) stability of the DB solution as all perturbations will stay bounded in time. Thus, this family of solutions is linearly stable.

B. Unstaggered case

These unstaggered solutions are obtained when $P_1 \times Q_2 > 0$. This condition is fulfilled in the zones B and C of Fig. 3(a). By using the same process as the staggered case, the single and multi-humps DB solutions as their stabilities are depicted in Fig. 7. It appears that these solutions are more unstable than those obtained in the preceding Sec. V A. Figure 8 displays the separation ℓ_δ between the peaks for different values of the frequency. In particular, for the case of $\omega_b = 1$, the minimal distance between the peaks of two consecutive humps ℓ_δ for a δ -humped DB varies as a decreasing

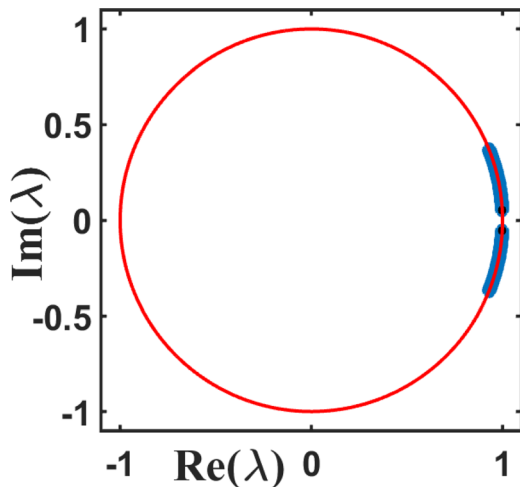


FIG. 6. Floquet multiplier spectrum for the staggered DB solution obtained by solving (4) with the initial condition given in (8) for $\mu = -0.0715$ and $\omega_b = 0.8071$.

function of the parameter μ . For lower values of μ , $\ell_2 \simeq \ell_3 \simeq \ell_4$. It is further noticed that for higher values of μ , $\ell_2 > \ell_3$ and $\ell_2 > \ell_4$; which means that a DB with high number of humps can have closer peaks in contrast to the staggered case. Figure 9 shows the Floquet multiplier spectrum projected on a unit circle. As for the staggered case, the multi-hump analog of the solution has the same Floquet's multiplier (not shown in the paper). From these graphs, it is clear that most of the Floquet's eigenvalues are on the unit circle. However, there are some eigenvalues which will generate contraction ($|\lambda| < 1$) and others that will create expansion ($|\lambda| > 1$), typical signature of the DB instability. As there is at least one eigenvalue that crosses the unit circle, the unstaggered discrete breathers (single hump and multi-humps) are linearly unstable.

VI. MOBILITY OF DB

In reality, the ILM investigated in Sec. V has two possible stationary positions within the lattice structure. From a simplistic point of view, the energy extrema are often positioned symmetrically, either at a lattice site (site centered mode) or halfway between two neighboring lattice sites (bond centered mode). These stationary positions correspond to local minimum and the saddle point of the potential energy. The energy difference between these two configurations determines the minimum energy barrier that the ILM must overcome in order to propel itself from one lattice cell to another. This minimum energy difference is called the Peierls-Nabarro barrier (PNB).^{25,45–47} Therefore, in order to study the mobility of the DBs, the Pierl-Nabarro barrier also called Pierl-Nabarro potential (PNP) is investigated.^{25,45–47} Although this concept has been applied in various DNLSes,^{25,45–47} it is yet to be applied in a EDNLS.^{19–25}

In order to estimate such energy, it is assumed that Eq. (5) gives two types of strongly localized modes with the amplitude u_n in Eq. (25). The first one (A) is centered at the lattice site $n = 0$ and the second one (B) is centered between two neighboring lattice elements $n = \pm 1$ with the following patterns: $\psi_n^{(A)}(\tau) = A(0, \dots, 0, \xi_1, 1, \xi_1, 0, \dots, 0) \exp(-i\mu\tau)$ and $\psi_n^{(B)}(\tau) = B(0, \dots, 0, \xi_2, 1, 1, \xi_2, 0, \dots, 0) \exp(-i\mu\tau)$, where $\xi_{1,2} \geq 0$, and $\xi_{1,2} \ll 1$. For a strongly localized mode satisfying $|u_{n+1}| \ll |u_n|$ for $n \geq 0$, we can estimate the difference of energy between these two ILM states for the same norm [or the power \mathcal{P} in Eq. (15)] $N_A = N_B = N$ and to get the effective PN potential $E_{PN} = \Delta E_{AB} = \mathcal{H}_A(N) - \mathcal{H}_B(N)$.^{25,45–47}

There are one solution centered on a single base pair and one centered in between two base pairs of the DNA corresponding to energy (see Fig. 10, top panel). The first one (A) is more stable than the second one (B), and it can be clearly seen that the energy of (A) represents a minimum of the Hamiltonian. If the ILM is shoved to move sideways, it has to jump from base pair to base pair, passing from an unstable to less unstable configuration. The colored area in the figure symbolizing the difference between the Hamiltonians (the PNP) represents the resistance that the ILM has to overcome during its propagation.^{25,45–47} For an increasing energy, the PNP increases (see Fig. 10 top panel), resulting in a strong localization of the ILM, mainly in a

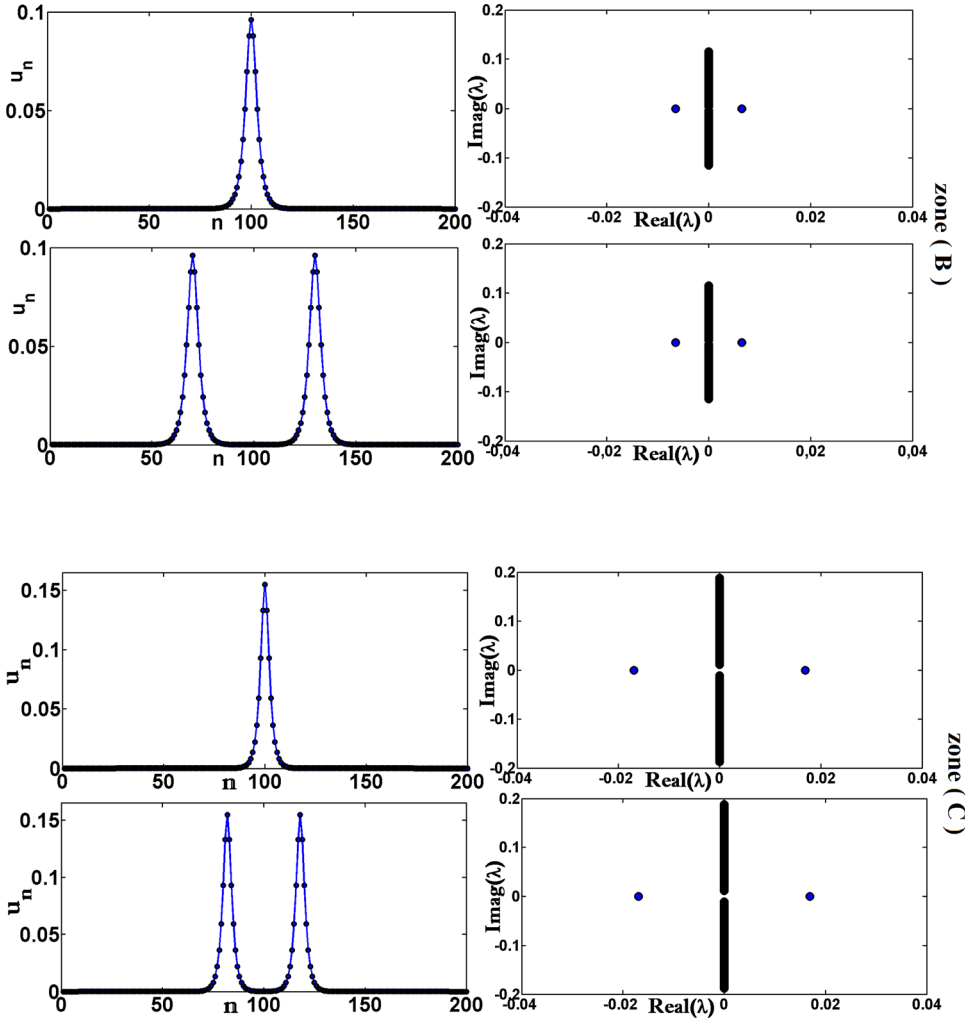


FIG. 7. Examples of discrete multi-breathers solutions of Eq. (26) corrected with Newton-Raphson, where the parameters are those of $\omega_b - \mu$ parameter plane shown in Fig. 3(a): zone B: $\omega_b = 1, \mu = 0.05996$; zone C: $\omega_b = 0.631, \mu = 0.0995$. On the right column, the imaginary part of the eigenvalue [$\text{Imag}(\lambda)$] as a function of the real part [$\text{Real}(\lambda)$] is displayed.

single base pair which is effectively decoupled from the rest of the DNA chain. Similar curves have been obtained in optical DNLS with a cubic nonlinearity.⁴⁷ In the bottom, it can be clearly seen that there is a threshold frequency μ around 0.066 whereby here present N becomes distinct for the mode (A) and the mode (B). This result suggests that low frequency ILMs are more mobile.

The mobile discrete breathers are obtained by kicking the static solution estimated numerically in Sec. V by multiplication of $Y(\tau = 0)$ and $\dot{Y}(\tau = 0)$ by $\cos[\varpi(n - n_0)]$

and $\pm \sin[\varpi(n - n_0)]$, where $n_0 = N/2$, and ϖ is the kick.³⁹

The major difficulty lies in the choice of the parameter $\bar{\omega}$. Thus, Fig. 11 represents the mean velocity of the wave versus the kick $\bar{\omega}$. It comes out from this figure that the maximum speed reached in the case of the staggered is obtained for $\bar{\omega} = \pm 1.6$, whereas in the case of the unstaggered $\bar{\omega} = \pm 2$. Note that for the case of the unstaggered, the value $\bar{\omega}$ around ± 2 destroys the coherence of the wave.

Figure 12 illustrates the propagation of ILM across the DNA for two values of the initial phase difference. During our trials, we noticed that the ILM with a small initial ϖ starts to steer, slows down, and is finally trapped by the PNB. The ILMs with a larger initial phase difference (high ϖ) do not necessarily propagate across the lattice. However, it is noticed that for $\varpi = 1$ the single- and multi-humped ILMs propagate.

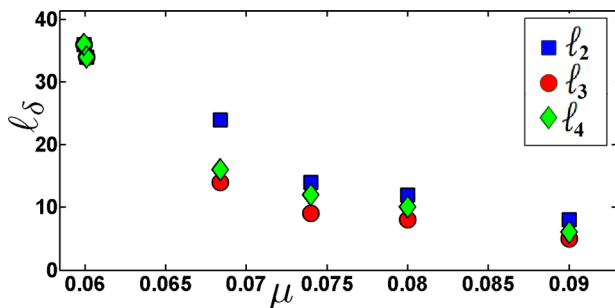


FIG. 8. Minimal inter-peak distances l_δ separating maxima of δ -humped DB. The cases considered here are 2-, 3-, 4-hump DBs, $\delta = 2$ (blue square), $\delta = 3$ (red circle), and $\delta = 4$ (green rhombus) according to different values of μ and $\omega_b = 1$.

VII. DISCUSSION

A. The nonlinear dynamic

Most of the studies devoted to the understanding of DNA dynamics reduced the initial model either to a continuous nonlinear Schrödinger equation¹³⁻¹⁶ or a discrete nonlinear Schrödinger equation.^{41,49,50} Such simplification allowed

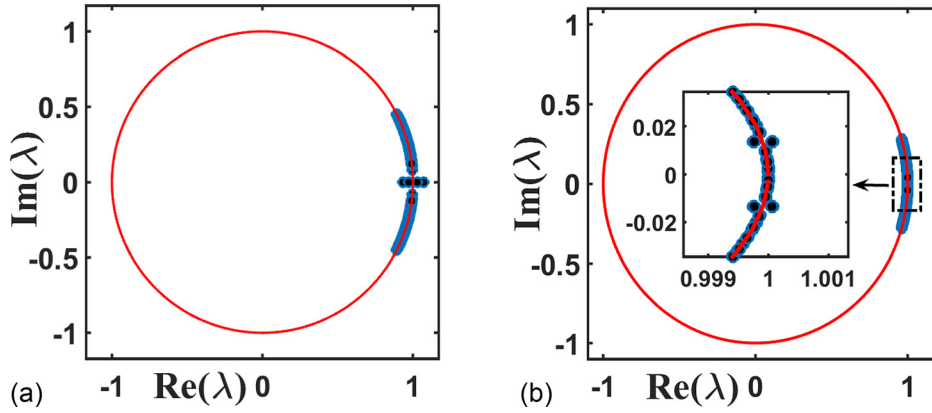


FIG. 9. Floquet multiplier spectrum for unstaggered DB solution obtained by solving (4) with the initial condition given in (8) for top: $\omega_b = 1, \mu = 0.05996$ [zone B in Fig. 3(a)]; bottom: $\omega_b = 0.631, \mu = 0.0995$ [zone C in Fig. 3(a)].

the solution approximation of the continuous solution^{14–16} or the prediction of the discrete MI.^{41,49,50} In this study, the core model is reduced into an EDNLSE in which the existence of discrete single and multi-hump ILM is demonstrated. Note that Ndjoko *et al.*¹⁴ obtained an extended nonlinear Schrödinger equation (NLSE) from the JB equation under a continuous form by using a semi-discrete (continuous envelope-discrete phase) approximation in order to study the compact-envelope bright solitary wave. Moreover, the derived NLSE used to approximate the analytical solution for the DPB model for DNA is continuous,⁹ which is not the case in this study.

In the literature, the existence of the pulse in the continuous NLSE in DNA is conditioned by the sign of the product between the nonlinearity and dispersion coefficients which should be positive.⁹ In this study, both pulse-like discrete breathers and pulse with alternating phase between next neighboring sites are obtained for specific values of the discrete breather frequency. Although staggered/unstaggered

discrete localized excitation in DNLS is introduced by a particular transformation [the so-called staggering transformation $u_n \rightarrow (-1)^n u_n$ as in Refs. 32 and 44], they both appear spontaneously for particular values of DB frequencies in this study. To our knowledge, such ILMs are yet to be investigated in other EDNLSEs.^{19–25} This study emphasized the richness of the model discrete approach in DNA for the existence and type of localized discrete solutions.

The single-humped ILM in DNA models based on DPB or Klein-Gordon equations incorporate short/long range interaction,^{26–31} whereas the JB model is used in this study in order to analyze both discrete single/multi-humped ILMs. Note that we used the numerical algorithm taking full account of nonlinearities in order to approximate the spatial profile of the DB whereas in the preceding studies, DBs were constructed mainly by linearization.^{26,31} In a recent study conducted by Tchingang *et al.*,³³ the saturable DNLS did not admit discrete multibreather with an infinite number of humps, which is not the case in our study. This is certainly due to the presence of extended terms in the present model. In contrary to what is usually noticed in DNLS in the literature,^{32–37} the number of humps of the ILM does not affect the linear stability in this study. In contrary to other studies where various forms of EDNLSE have been studied,^{19–25} discrete multi-humped localized excitations and their linear stability are investigated here. In ordinary DNLS, the stability of discrete multi-humped is achieved by adjusting the coupling/nonlinear coefficient^{32,33} or applying an initial kick during numerical simulations.³⁶ The results obtained in this study suggest that the extended terms in DNLS can

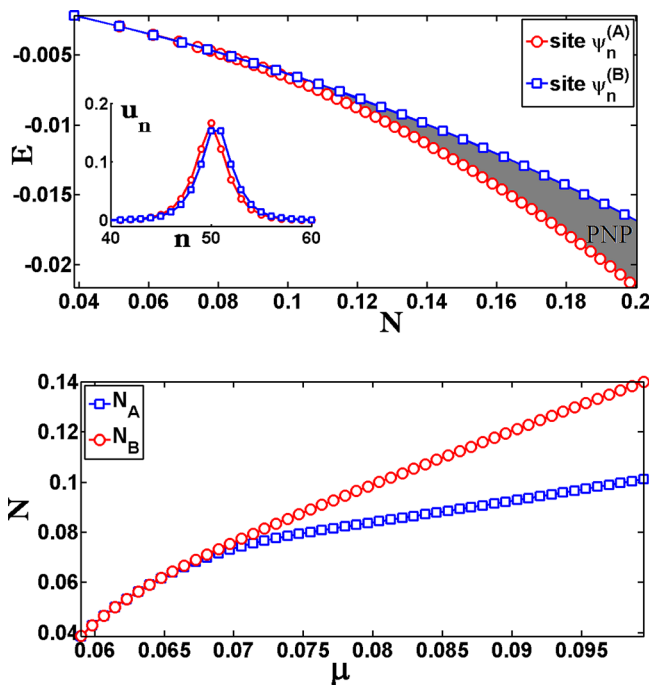


FIG. 10. Evolution of the energy (E) of the different sites and of the energy of the barrier E_{PN} according to the parameter μ and $\omega_b = 1, \mu = 0.05996$ in the top panel.

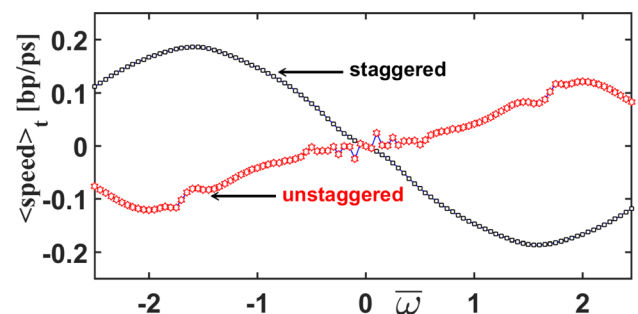


FIG. 11. Mean velocity of single hump SDB ($\mu = -0.0715, \omega_b = 0.8071$) and USDB ($\omega_b = 1, \mu = 0.05996$) in units of pairs of bases per picosecond versus the kick $\bar{\omega}$.

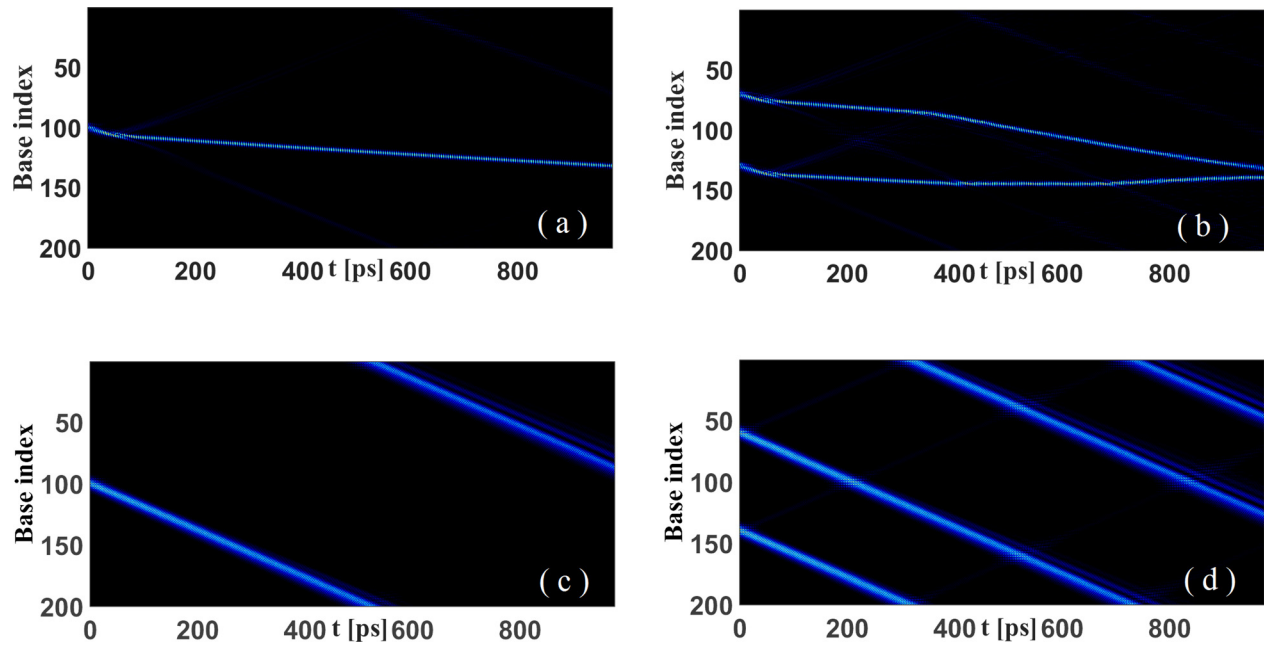


FIG. 12. Energy propagation of single humped and multi-humped DB for the unstaggered case [panel (a) and (b), $\omega_b = 1$, $\mu = 0.05996$, $\varpi = 1$] and the staggered case [panel (c) and (d), $\mu = -0.0715$, $\omega_b = 0.8071$, $\varpi = -1.6$].

contribute to achieve such stability. Note that the effect of the discrete breather frequency³² and the effect of inter-peak distance between localized multi-hump discrete breathers³³ on the linear stability of localized mode have been investigated already.

The discrete modulational instability (MI) was not investigated in previous studies analyzing the JB model for DNA.^{14–16} Furthermore, the discrete MI analysis in a particular EDNLSE, namely, the perturbed Ablowitz-Ladik equation for energy transfer in α -helix protein has been conducted.⁴⁸ The presence of extended terms in the Ablowitz-Ladik equation makes the emerging localized structures compact and splits them.⁴⁸ Quasi-similar observation is made here for specific values for the DB frequency. The discrete MI has been investigated in the DNA model by using the PBD model reduced to cubic DNLSE, cubic complex Ginzburg-Landau, and cubic Salerno equation by Tabi *et al.*;^{41,49,50} whereas the EDNLSE derived from the JB model is used here. In contrary to the previous studies,^{41,48–50} the current research attempted to link the discrete MI and the existence of a strongly localized state. In addition to that, it is noticed that the discrete MI investigated in Refs. 41,49,50 for the DNA model is limited to the case where the discrete breather frequency is equal to the unity while this study revealed more regions for MI for different values of this frequency.

The mobility of discrete breathers in DNA is mostly triggered by a critical initial velocity of short/long range coupling parameter,^{26–31} while in this study, the mobility of discrete breather is due to the vibration frequency of the ILM. We noticed also that the mobility of multi-hump DB in DNA was often generated by launching two localized modes at distinct positions.³¹ Furthermore, the mobility of the discrete breather has been investigated in EDNLSE mostly by directed numerical simulation,^{19–25} whereas the present

study used the concept of Peierls-Nabarro energy potential adapted by Kivshar and Campbell for DNLSE.⁴⁶ This allowed us to determine suitable values for the discrete breather frequency for discrete ILM mobility through the DNA chain.

B. The biology

At room temperature, the DNA double helix spontaneously denatures locally, opens up, or fluctuates.⁵¹ Furthermore, understanding how the discrete spatial organization of the base pairs controls the relaxation of excess electronic energy in the double helix and in alternative structures is currently one of the most exciting challenges in the field.⁵² Moreover, the excitation of few base pairs is essential for the DNA loop formation,⁵³ which is primordial for regulation of gene expression via contact of a nearby regulatory sequence to the beginning of a gene and the packaging of DNA into nucleosomes.¹ In addition, RNA which is responsible for transfer, transcription, and messaging in DNA operates in few portions of the DNA sequence at the same time, which can generate localized discrete excitations in this molecule.¹ Therefore, the study of strongly spatially localized excitations in general and discrete breathers (DBs), in particular, can be of a paramount relevance for a deeper understanding of DNA dynamics.

Gene expression is a primordial phenomenon in life because it is a process whereby the information stored in DNA is transferred and materialized, most often in the production of proteins.¹ Moreover, the excitation of few base pairs is essential during this process in order to ensure proper DNA loop formation.^{1,53} This reading of the DNA strand in different sections of the DNA can generate discrete multi-humped ILMs. The RNA which is responsible for transfer, transcription, and messaging in DNA operates in few portions of the DNA sequence at the same time, which can

generate discrete multi-hump localized excitations in this molecule.¹

The instigation of the transcription process in DNA is connected with the dynamics originating from structural distortions of the double helix.¹ It was proposed that such deformations might be caused by a “hit and run” mechanism which is linked with the brief attachment of some proteins, constituting activator factors, to regions of the DNA leaving it in a deformed shape. In a nonlinear model approach, this study illustrates that multi-site activation can be under the form of discrete multi-humped ILM. The minimal distance separating the hump of DB emphasized in this study corroborates the non-overlapping during DNA transcription by several RNA messengers.

VIII. CONCLUSION

In summary, the current study demonstrated that the mechanism of formation of staggered ILMs is spontaneous and dependent on DB frequency. Discrete multi-humped ILMs have surprisingly the same instability as their single-humped analog. Staggered ILMs are more stable than unstaggered ILMs. It is found that lower frequency DBs have good propensity to vanquish Peierls-Nabarro energy barrier for the EDNLSE, thus becoming mobile.

The obtained results lead us to conclude that (i) the formation of staggered ILMs can be spontaneous and (ii) the number of humps of multi-humped ILMs does not influence its stability in an EDNLSE.

Although the current research provided good insight, polynomial approximation of the Morse potential beyond what was adopted in this study could provide richer dynamics in DNA. It could be of a particular interest to investigate ILM with higher order terms.

- ¹L. Yakusevich, *Nonlinear Physics of DNA*, Wiley Series in Nonlinear Sciences (John Wiley & Sons, Weinheim, 2004).
- ²S. W. Englander, N. R. Kallenbach, A. J. Heeger, J. A. Krumhansl, and S. Litwin, “Nature of the open state in long polynucleotide double helices: Possibility of soliton excitations,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **77**, 7222 (1980).
- ³S. Yomosa, *Phys. Rev. A* **27**, 2120–2125 (1983).
- ⁴S. Takeno and S. Homma, *Prog. Theor. Phys.* **70**, 308–311 (1983).
- ⁵M. Peyrard and A. R. Bishop, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2755–2758 (1989).
- ⁶T. Dauxois, M. Peyrard, and A. R. Bishop, *Phys. Rev. E* **47**, 684–695 (1993).
- ⁷T. Dauxois, M. Peyrard, and A. Bishop, *Physica D* **66**, 35–42 (1993).
- ⁸T. Dauxois and M. Peyrard, *Phys. Rev. E* **51**, 4027–4040 (1995).
- ⁹M. Peyrard, *Nonlinearity* **17**, R1–R40 (2004).
- ¹⁰M. Joyeux and S. Buyukdagli, *Phys. Rev. E* **72**, 051902 (2005).
- ¹¹M. Joyeux and A.-M. Florescu, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 34101 (2009).
- ¹²T. Dauxois, *Phys. Lett. A* **159**, 390–395 (1991).
- ¹³D. Toko, C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofané, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **9**, 97–101 (2012).
- ¹⁴P. B. Ndjoko, J. M. Bilbault, S. Binczak, and T. C. Kofané, *Phys. Rev. E* **85**, 011916 (2012).
- ¹⁵A. Mvogo and T. C. Kofané, *Chaos* **26**, 123120 (2016).
- ¹⁶C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofané, *J. Bionanosci.* **3**, 110–117 (2009).
- ¹⁷S. Flach and C. R. Willis, *Phys. Rep.* **295**, 181–264 (1998).

- ¹⁸S. Flach and A. V. Gorbach, *Phys. Rep.* **467**, 1–116 (2008).
- ¹⁹K. Kundu, *Phys. Rev. E* **61**, 5839–5851 (2000).
- ²⁰M. Oster, M. Johansson, and A. Eriksson, *Phys. Rev. E* **67**, 56606 (2003).
- ²¹P. G. Kevrekidis and V. V. Konotop, *Phys. Rev. E* **65**, 66614 (2002).
- ²²C. Claude, Y. S. Kivshar, O. Kluth, and K. H. Spatschek, *Phys. Rev. B* **47**, 14228–14232 (1993).
- ²³F. K. Abdullaev, Y. V. Bludov, S. V. Dmitriev, P. G. Kevrekidis, and V. V. Konotop, *Phys. Rev. E* **77**, 16604 (2008).
- ²⁴C. Menotti, A. Smerzi, and A. Trombettoni, *New J. Phys.* **5**, 112 (2003).
- ²⁵M. Johansson, J. E. Pilepisky, and S. A. Derevyanko, *Phys. Rev. E* **89**, 42912 (2014).
- ²⁶T. Dauxois, M. Peyrard, and C. R. Willis, *Physica D* **57**, 267–282 (1992).
- ²⁷J. Cuevas, J. F. R. Archilla, Y. B. Gaididei, and F. R. Romero, *Physica D* **163**, 106–126 (2002).
- ²⁸J. Cuevas, F. Palmero, J. F. R. Archilla, and F. R. Romero, *Phys. Lett. A* **299**, 221–225 (2002).
- ²⁹J. Cuevas, E. B. Starikov, J. F. R. Archilla, and D. Hennig, *Mod. Phys. Lett. B* **18**, 1319–1326 (2004).
- ³⁰A. Alvarez, F. R. Romero, J. F. R. Archilla, J. Cuevas, and P. V. Larsen, *Eur. Phys. J. B* **51**, 119–130 (2006).
- ³¹A. Alvarez, F. R. Romero, J. Cuevas, and J. F. R. Archilla, “Moving breather collisions in the Peyrard-Bishop DNA model,” in *International Conference on Complex Sciences*, Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social Informatics and Telecommunications Engineering, edited by J. Zhou (Springer, Berlin, Heidelberg, 2009), pp. 411–416.
- ³²P. G. Kevrekidis, *The Discrete Nonlinear Schrödinger Equation* (Springer, Berlin, Heidelberg, 2009).
- ³³J. D. T. Tchameu, A. B. T. Motcheyo, and C. Tchawoua, *Phys. Rev. E* **90**, 43203 (2014).
- ³⁴V. Koukoulouyannis and S. Ichtiaroglou, *Phys. Rev. E* **66**, 66602 (2002).
- ³⁵V. Koukoulouyannis, P. G. Kevrekidis, J. Cuevas, and V. Rothos, *Physica D* **242**, 16–29 (2013).
- ³⁶A. B. T. Motcheyo, C. Tchawoua, M. S. Siewe, and J. D. T. Tchameu, *Phys. Lett. A* **375**, 1104–1109 (2011).
- ³⁷F. Palmero, L. Q. English, J. Cuevas, R. Carretero-González, and P. G. Kevrekidis, *Phys. Rev. E* **84**, 26605 (2011).
- ³⁸I. Daumont, T. Dauxois, and M. Peyrard, *Nonlinearity* **10**, 617–630 (1997).
- ³⁹A. Alvarez, F. R. Romero, J. Cuevas, and J. F. R. Archilla, *Phys. Lett. A* **372**, 1256–1264 (2008).
- ⁴⁰C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofané, *Phys. Lett. A* **373**, 2476–2483 (2009).
- ⁴¹C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofané, *Eur. Phys. J. B* **74**, 151–158 (2010).
- ⁴²A. M. Morgante, M. Johansson, G. Kopidakis, and S. Aubry, *Physica D* **162**, 53–94 (2002).
- ⁴³M. Johansson and K. Ö. Rasmussen, *Phys. Rev. E* **70**, 66610 (2004).
- ⁴⁴J. Cuevas, N. I. Karachalios, and F. Palmero, *Appl. Anal.* **89**, 1351–1385 (2010).
- ⁴⁵Y. S. Kivshar and D. K. Campbell, *Phys. Rev. E* **48**, 3077–3081 (1993).
- ⁴⁶L. Hadzievski, A. Maluckov, M. Stepic, and D. Kip, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 33901 (2004).
- ⁴⁷R. Morandotti, U. Peschel, J. S. Aitchison, H. S. Eisenberg, and Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2726–2729 (1999).
- ⁴⁸R. Y. Ondoua, C. B. Tabi, H. P. E. Fouda, A. Mohamadou, and T. C. Kofané, *Eur. Phys. J. B* **85**, 318 (2012).
- ⁴⁹C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofané, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 415104 (2008).
- ⁵⁰C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofané, *Chin. Phys. Lett.* **26**, 68703 (2009).
- ⁵¹M. Manghi and N. Destainville, *Phys. Rep.* **631**, 1–41 (2016).
- ⁵²S. Buyukdagli and M. Joyeux, *Phys. Rev. E* **76**, 021917 (2007).
- ⁵³S. Buyukdagli and M. Joyeux, *Phys. Rev. E* **77**, 031903 (2008).
- ⁵⁴J. L. Marín and S. Aubry, *Nonlinearity* **9**, 1501–1528 (1996).

Taming intrinsic localized modes in a DNA lattice with damping, external force, and inhomogeneity

Carlos Lawrence Gninzanlong,^{1,*} Frank Thomas Ndjomatchoua,^{2,†} and Clément Tchawoua^{1,‡}

¹*Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaoundé 1, P.O. Box 812, Yaoundé, Cameroon*

²*Sustainable Impact Platform, Adaptive Agronomy and Pest Ecology Cluster, International Rice Research Institute (IRRI), DAPO Box 7777-1301, Metro Manila, Philippines*



(Received 31 October 2018; revised manuscript received 10 April 2019; published 13 May 2019)

The dynamics of DNA in the presence of uniform damping and periodic force is studied. The damped and driven Joyeux-Buyukdagli model is used to investigate the formation of intrinsic localized modes (ILMs). Branches of ILMs are identified as well as their orbital stabilities. A study of the effect of inhomogeneity introduced into the DNA lattice and its ability to control chaotic behavior is conducted. It is seen that a single defect in the chain can induce synchronized spatiotemporal patterns, despite the fact that the entire set of oscillators and the impurity are chaotic when uncoupled. It is also shown that the periodic excitation applied on a specific site can drive the whole lattice into chaotic or regular spatial and temporal patterns.

DOI: [10.1103/PhysRevE.99.052210](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.052210)

I. INTRODUCTION

Discrete breathers also termed intrinsic localized modes (ILMs) are spatially localized, temporally periodic excitations with an exponentially localized profile in nonlinear lattices [1,2]. Because they occur in discrete systems, they have been termed discrete breathers (DBs) in reference to their continuum analogs, called breathers, which were first discovered in completely integrable and continuous nonlinear wave equations [3]. While discrete breathers share many traits with solitons, they stand out because of their localization, which is brought about by a delicate sensitivity to lattice discreteness [3]. Discrete breathers have been ubiquitously studied in a wide variety of physical systems and have been the subject of intense theoretical and numerical scrutiny [1,2]. Although dissipation and driving are typically key experimental features, most of the theoretical and numerical studies found in the literature excluded such effects. It was not until quite recently that the effects of dissipation and uniform periodic driving have been considered in numerical studies of discrete breathers in nonlinear physical systems, including (but not limited to) the Frenkel-Kontorova chain and a ladder of Josephson junctions [4,5], coupled pendulums [6–8], discrete electrical transmission lines [9–14], and a micromechanical cantilever array [15,16]. Accounting for such constraints allowed these researchers to generate and control the dynamics of DBs as well as to stabilize them [4–16].

The majority of biomolecules are assembled under the form of lattices, and they are constantly submitted to fluid frictional forces induced by biological plasmas and exposed to external periodic electromagnetic radiation. Thus they rep-

resent a worthwhile contextual framework in which a DB would certainly play an important role, and dissipation and driving cannot be ignored. The biomolecules called DNA represent a system in which localization and energy transfer emerge as prevailing regulatory factors [17]. The Peyrard-Bishop-Dauxois (PBD) model of double-stranded DNA is arguably one of the most successful models for describing this local pairing-unpairing (breathing) dynamics because it reproduces a wide variety of qualitative results closer to experiments related to strand-separation dynamics [18]. Joyeux and Buyukdagli (JB) refined this model in such a way that it can account for on-site finite stacking enthalpy [19,20]. Such a modification yielded phase-transition curves in agreement with the denaturation observed by Raman spectroscopy, and it ensured a sharp melting transition [19,20]. Therefore, the JB model is selected as the core model in this study. On the one hand, the JB model was further analyzed free of external forces and without damping in order to look for analytical semidiscrete solutions and investigate their modulational stability [21–24]. On the other hand, motivated by the fact that oscillating terahertz (THz) drive applied in DNA can generate breathing states linked to gene expression [25–28], the PBD model was modified in order to include a monochromatic drive in the THz frequency range, and it was suggested to represent a simplified model for DNA dynamics in the presence of THz radiation [29–32].

Several studies taking into account the effects of dissipation (and/or of the periodic force) were performed on the DNA models presented in Refs. [29–32], but none of these studies generated ILMs by taking into account both dissipation and periodic force. In this study, we discuss the generation of ILMs that are locked to a uniform periodic driver and dissipation based in the JB model. The emphasis is on the characterization and stability of these modes. The spatial and temporal control of the chaotic behavior, as well as the effect of inhomogeneity and an external force, are also analyzed.

*gcarloslawrence@yahoo.fr

†ftndjomatchoua@gmail.com

‡Author to whom all correspondence should be addressed: ctchawa@yahoo.fr

It is worth noting that numerous authors have studied the effect of periodic forces on DBs of nonlinear lattices without dissipative forces by separating the space and time components [33–39]. Such a modification can straightforwardly reduce the system to a single degree of freedom embedding the parameters that are suitable for the generation of a generalized shape for the DB [36], which can further be analyzed using classical methods to study nonlinear dynamical system responses, nonlinear resonance, and bifurcations [40,41]. Surprisingly, none of the previous studies, including damping and uniform periodic driving in nonlinear lattices, attempted to conduct such an analysis with DBs. In addition, these studies did not account for the effect of linear dispersion [33–39]. To the best of our knowledge, highly spatially confined or compactlike DBs in a DNA lattice subjected to a uniform oscillating radiation field and damping, and with the presence of linear dispersion, have yet to be investigated. The present study focuses on DNA responses in a variety of DBs under such a physical context, including nonlinear resonance and spatiotemporal chaos.

It has been reported that impurities in driven and dissipative lattices can trap, reflect, or partially transmit propagating waves [42–44]. Although many authors have suggested that in the absence of dissipation and periodic driving force, an impurity in a DNA chain can trap and partially transmit the breather during its propagation [45–53], to the best of our knowledge taming the spatial and temporal dynamics of a driven and damped DNA lattice through an impurity has not yet been investigated.

To extend the previous work in this area, this paper investigates the existence of ILMs, orbital stability, and chaotic dynamics in a DNA model, including an impurity. Following the Introduction (Sec. I), the rest of the paper is structured as follows: In Sec. II, the JB model as well as its linear dispersion relation are derived. The ILMs are investigated by using the space-time separation of variables and the anticontinuum limit method. Also, the orbital stability is studied by means of Floquet’s theory. In Sec. III, the nonlinear response of a single based pair as well as chaos taming using an impurity are analyzed. Section IV is devoted to a discussion of the obtained results as compared to what was observed in the literature. In Sec. V, the major achievements of the study are summarized, and a conclusion is provided.

II. THE DNA LATTICE MODEL

Let us consider the Joyeux-Buyukdagli (JB) model for DNA, whose Hamiltonian is given by [19,20]

$$H = \sum_n \frac{1}{2m} P_n^2 + D[1 - \exp(-ay_n)]^2 + \frac{\Delta H}{C}[1 - e^{-b(y_n - y_{n-1})^2}] + K_b(y_n - y_{n-1})^2, \quad (1)$$

where $P_n = m\dot{y}_n$ is the momentum, y_n represents the transverse stretching of the nucleotide pair at site n , and m denotes the mass of a nucleotide. The variables D and a are the depth and inverse width of the Morse potential. ΔH is a finite stacking energy, K_b is the harmonic elastic constant, and b is a spatial scale factor.

The dimensionless equation of motion corresponding to the Hamiltonian Eq. (1) is

$$\begin{aligned} \frac{d^2 Y_n}{d\tau^2} + \frac{2K_b}{a^2 D} (2Y_n - Y_{n+1} - Y_{n-1}) - 2(e^{-Y_n} - 1)e^{-Y_n} \\ + \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} [(Y_n - Y_{n-1})e^{-\frac{b}{a^2}(Y_n - Y_{n-1})^2}] \\ - \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} [(Y_{n+1} - Y_n)e^{-\frac{b}{a^2}(Y_{n+1} - Y_n)^2}] = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

where $Y_n = ay_n$ and $\tau = t\sqrt{a^2 D/m}$.

Breathers of small amplitudes qualitatively describe the DNA breathing modes and are thought to be the precursors of the bubbles that appear prior to the transcription processes [17,18]. To computationally study small-amplitude breathers, the original approach in [54] is used, and it is assumed that the oscillations of bases are large enough to be anharmonic, but still insufficient to break the bond since the plateau of Morse’s potential is not reached. It is then presumed that the base nucleotides oscillate around the bottom of Morse’s potential. On the one hand, the wave amplitude is considered big enough that the nonlinear effect that plays an essential role in the DNA molecules can still be incorporated [17,18]. On the other hand, it is still very small compared with the amplitude of a total separation of DNA nucleotide pairs. We can therefore expand the terms $\exp[-\frac{b}{a^2}(Y_{n\pm 1} - Y_n)^2]$ and $\exp[-Y_n]$ in Eq. (2) up to second and third order, respectively [21–24]. Note that various regimes of motion (e.g., soliton, breather, and compacton) were investigated via likewise approximations, and they are supported by the original JB model [21–24].

To take into account the effect of viscosity of the medium as well as the influence of an external field, the JB original model is modified by incorporating $F_n(t) = A_n \cos(\omega t)$ and ν representing an external ac field and the effective damping of the system, respectively. From a physical viewpoint, external radiation effects on DNA are usually studied by means of artificial time-periodic external radiation that can be applied to the biomolecule from a laser source, an electronic device using a frequency up-conversion scheme, or an accelerating electron-based source [26]. Irradiations from biomedical imaging can be another controllable external source as well [25]. Therefore, the equation of motion can be written as

$$\begin{aligned} \ddot{Y}_n + \Gamma \dot{Y}_n - k_2(Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) \\ + \omega_g^2(Y_n + \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) - F_0 \cos(\Omega\tau) \\ + k_4[(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

The remaining coefficients of Eq. (3) are

$$\begin{aligned} \Gamma = \frac{\nu}{a} \sqrt{\frac{m}{D}}, \quad k_2 = \frac{2}{a^2 D} \left(K_b + \frac{b\Delta H}{C} \right), \quad \omega_g^2 = 2, \\ F_0 = \frac{A_n}{aD}, \quad k_4 = \frac{2\Delta H b^2}{CDa^4}, \quad \alpha = -\frac{3}{2}, \quad \beta = \frac{7}{6}, \\ \Omega_g = \sqrt{\frac{a^2 D}{m}}, \quad \Omega = \frac{\omega}{\Omega_g}. \end{aligned} \quad (4)$$

By assuming $y_n(\tau) \propto \cos[qn - \Upsilon(q)\tau]$ in Eq. (3), retaining only linear terms, and discarding dissipation and driving, we can derive the following dispersion relation given by

TABLE I. Numerical values for the parameters [12,13].

Parameter	Value	Unit
m	300	amu
D	0.04	eV
a	4.45	\AA^{-1}
b	0.10	\AA^{-2}
ΔH	0.44	eV
K_b	10^{-5}	eV \AA^{-2}
C	2	no unit

$\Upsilon(q) = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2(q/2)}$. It thus appears that the JB model is a pass band filter with a phonon band frequency between $\omega_{\min} = \omega_g$ and $\omega_{\max} = \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2}$. In the first Brillouin zone ($q \in [0, \pi]$) [55], using the values of parameters in Table I, the allowed frequency band is bound by the frequencies $\omega_{\min} = 1.4142$ and $\omega_{\max} = 1.4907$. In the following subsection, the existence of discrete breathers of Eq. (3) is investigated.

A. Discrete-breather generation by the time-space separability method

Let us assume that the nonlinear excitation solution of Eq. (3) is under the stationary form $Y_n(\tau) = \phi_n G(\tau)$ [34–39], with an arbitrary time-dependent amplitude $G(\tau)$ describing uniform oscillations of all the sites. After substitution of the previously mentioned ansatz $Y_n(\tau)$ into Eq. (3), the following equation is obtained:

$$\begin{aligned} \phi_n \ddot{G}(\tau) + \Gamma \phi_n \dot{G}(\tau) - k_2(\phi_{n-1} - 2\phi_n + \phi_{n+1})G(\tau) \\ + k_4 G^3(\tau)[(\phi_{n+1} - \phi_n)^3 - (\phi_n - \phi_{n-1})^3] \\ + \omega_g^2[\phi_n G(\tau) + \alpha \phi_n^2 G^2(\tau) + \beta \phi_n^3 G^3(\tau)] \\ - F_0 \cos(\Omega\tau) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

To understand the dynamics of different classes of solutions of Eq. (5), it is useful to start with a straightforward case restricted to the dynamics of a few coupled base pairs. This simple model gives a rather good approximation for the sites of a DB core, which are practically not affected by the presence of long-range interactions [35]. A simplification is further operated by taking into account only symmetric DBs centered at site $j = 0$ in the form $\phi_n = (0, \dots, 0, \phi_{-2}, \phi_{-1}, \phi_0, \phi_1, \phi_2, 0, \dots, 0)$, and then setting $\phi_{\pm(j+1)} = (-k_0)^{j+1} \phi_0$, with $j = 0, 1$, and k_0 a real parameter smaller than 1 ($|k_0| < 1$). This model approximation is a clear-cut scheme to design more complicated types of DBs with a tunable shape (varying ϕ_0 and k_0) [35]. After inserting this form of ϕ_n in Eq. (5), we obtain for the case $n = 0$ and 1 the following set of equations:

$$\begin{aligned} \phi_0 \ddot{G} + \Gamma \phi_0 \dot{G} + [\omega_g^2 + 2k_2(1 + k_0)]\phi_0 G + \alpha \omega_g^2 \phi_0^2 G^2 \\ + [\beta \omega_g^2 - 2k_4(1 + k_0)^3]\phi_0^3 G^3 - F_0 \cos(\Omega\tau) = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} k_0 \phi_0 \ddot{G} + k_0 \Gamma \phi_0 \dot{G} + [k_0 \omega_g^2 + k_2(1 + k_0)^2]\phi_0 G \\ - \alpha \omega_g^2 k_0^2 \phi_0^2 G^2 + [\beta \omega_g^2 k_0^3 - k_4(1 + k_0^3)(1 + k_0)^3]\phi_0^3 G^3 \\ + F_0 \cos(\Omega\tau) = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

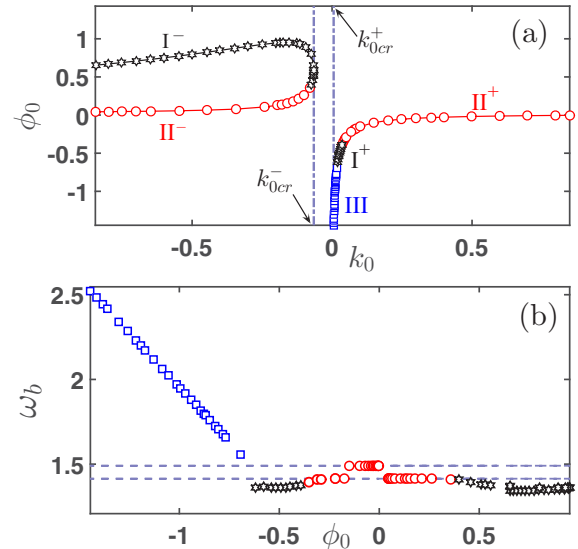


FIG. 1. (a) Real roots of Eq. (8) in the (k_0, ϕ_0) plane. In this figure, the dashed lines indicate the critical values of k_0 with $k_{0cr}^- = -0.0653$ and $k_{0cr}^+ = 0.0056$. (b) DB frequency ω_b vs ϕ_0 for ILMs obtained in I^- , I^+ , and III of the (k_0, ϕ_0) plane. The dashed lines indicate the location of the phonon band.

It should be noted that due to the symmetric term in Eq. (5), it is not possible to separate the space and temporal parts as in Refs. [34–39]. Inserting Eq. (6) into Eq. (7), one obtains the following nonlinear algebraic equation (see the details in the Appendix):

$$\begin{aligned} k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^6 + 3k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^5 + k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^4 - [\beta \omega_g^2 G^3 \phi_0^3 \\ + 4k_4 G^3 \phi_0^3] k_0^3 + [\alpha \omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - 3k_4 \phi_0^3 G^3 + k_2 \phi_0 G] k_0^2 \\ + [k_4 \phi_0^3 G^3 + \beta \omega_g^2 \phi_0^3 G^3 + \alpha \omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - F_0] k_0 - k_2 \phi_0 G \\ + k_4 \phi_0^3 G^3 - F_0 = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Without any loss of generality, it is assumed that $G(\tau = 0) = G = 1$. It is also assumed that the chain is initially nonexcited [$F_0(\tau = 0) = 0$]. The resolution of Eq. (8) makes it possible to know the couples (k_0, ϕ_0) for which the DBs exist. This resolution is made by means of the Newton-Raphson algorithm.

In Fig. 1(a), we report the roots of Eq. (8) in the range of parameters (k_0, ϕ_0) . For the region $k_0 \leq k_{0cr}^-$, there are two branches of the values of ϕ_0 that are solutions of Eq. (8), in particular the upper branch indexed by I^- represented by a black hexagon, and the lower branch indexed by II^- represented by a red circle. For $k_0 \in]k_{0cr}^-, k_{0cr}^+[$, Eq. (8) has no solution. When $k_0 \geq k_{0cr}^+$, Fig. 1(a) exhibits one branch of solution that is further divided into three parts: III, I^+ , and II^+ , represented by blue squares, black hexagons, and red circles, respectively. It can be noticed that for low values of ϕ_0 , the solutions are resonant with phonon modes (II^- and II^+ branches) since their frequencies are in the allowed phonon band as depicted in Fig. 1(b) (zone in the red circle). I^- and I^+ give localized mode solutions with dominant frequencies located in the lower forbidden band gap but closer to ω_{\min} [see the curve in the black hexagon in Fig. 1(b)], while part III gives localized mode solutions with frequencies located in

the upper forbidden band gap [see the curve in the blue square in Fig. 1(b)]. These DBs with fundamental frequencies in the forbidden band gaps (III and I^\pm) are prone to less radiation and might have the propensity to keep their shape for longer times [1,2]. It will therefore be interesting to carry out a stability analysis of the ILM belonging to the branches I^- , I^+ , and III in order to see if such excitation is suitable for the energy localization and transfer in the DNA in the context of periodic driving and dissipation.

In physical applications, it is expedient to consider the solutions that are stable against small perturbations. Thus once a given DB solution $\hat{Y}_n(\tau)$ is obtained, we add a small perturbation to it [$Y_n(\tau) = \hat{Y}_n(\tau) + \epsilon_n(\tau)$] and linearize the equation of motion (3) with respect to $\epsilon_n(\tau)$:

$$\begin{aligned} \ddot{\epsilon}_n - k_2(\epsilon_{n+1} - 2\epsilon_n + \epsilon_{n-1}) + \omega_g^2(1 + 2\alpha\hat{Y}_n + 3\beta\hat{Y}_n^2)\epsilon_n \\ - 3k_4[(\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n)^2(\epsilon_{n+1} - \epsilon_n) \\ + (\hat{Y}_{n-1} - \hat{Y}_n)^2(\epsilon_{n-1} - \epsilon_n)] = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Let us note that to obtain Eq. (9), the coefficient of dissipation is canceled since we seek nondissipative initial solutions. To identify the orbital stability of these solutions, Floquet's analysis can be performed. Floquet's method is the commonly accepted method for DB stability analysis. A solution $\hat{Y}_n(\tau)$ is considered stable when, for any initial conditions, the linear perturbation $\epsilon_n(\tau)$ does not grow exponentially with time. When $\hat{Y}_n(\tau)$ is time-periodic with period T_b , then Eq. (9) defines a linear symplectic map between the initial perturbation at $\tau = 0$ and the perturbation at time $\tau = T_b$, expressed by a

matrix $\mathcal{M} = \mathcal{M}(\hat{Y}_n)$, known as the monodromy matrix:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_n(T_b) \\ \dot{\epsilon}_n(T_b) \end{bmatrix} = \mathcal{M} \begin{bmatrix} \epsilon_n(0) \\ \dot{\epsilon}_n(0) \end{bmatrix}. \quad (10)$$

The complex eigenvalues λ and eigenvectors of the $2N \times 2N$ monodromy matrix \mathcal{M} provide information about the stability of the DB. If all eigenvalue moduli $|\lambda|$ are less than (or equal to) 1, then the DB is linearly (or marginally) stable. Otherwise perturbations persisting and growing with time (typically exponentially) correspond to a linearly unstable DB.

The study of the orbital stability of ILMs derived from Fig. 1(a) is performed over an interval of five DB periods ($\tau = 5T_b$ with $T_b = 2\pi/\omega_b$). The results are represented in Fig. 2, which shows three types of solutions taken on branches I^- , I^+ , and III, with the corresponding Floquet multiplier on a unit circle, as well as the corresponding power spectrum. We can also observe that some solutions in branches I^- and I^+ , which possess nondominant frequencies inside the phonon band, are linearly unstable since some eigenvalues of their monodromy matrices leave the unit circle outward [see Figs. 2(b) and 2(e)]. However, the intrinsic localized modes of branch III of Fig. 1(a) are marginally stable [see Fig. 2(h)].

B. Discrete breather generation by continuation to the anticontinuous limit: Effects of dissipation and external driving

From the previous analysis, the DBs were estimated without dissipation and external force for specific values of system parameters. Thus in what follows, taking into account those

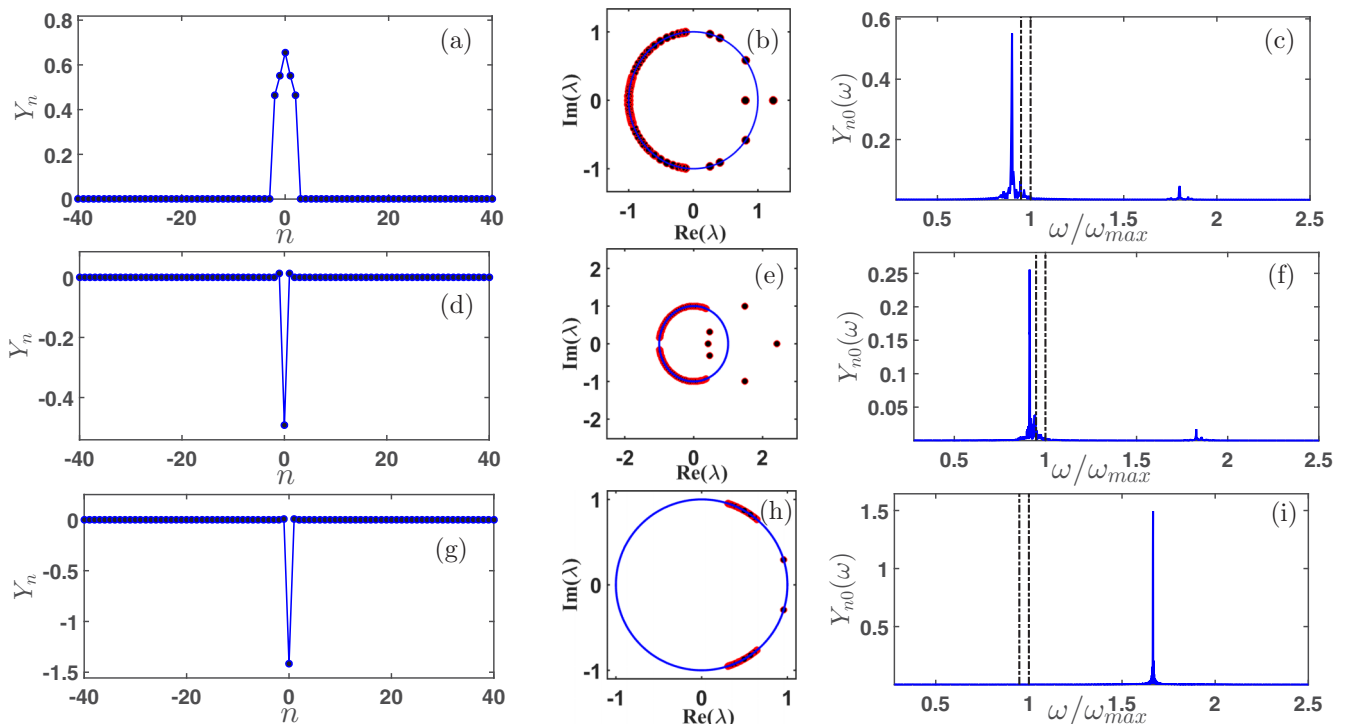


FIG. 2. Discrete breather profiles taken in branches I^- , I^+ , and III for (a) $k_0 = -0.8426$, $\phi_0 = 0.6546$; (d) $k_0 = 0.0267$, $\phi_0 = -0.4915$; and (g) $k_0 = 0.0061$, $\phi_0 = -1.415$, respectively, and corresponding Floquet multiplier spectra [middle column (b), (e), and (h)]. The right column [(c), (f), and (i)] depicts power spectra of each ILM (the dashed lines indicate the location of the phonon band). For all these panels, $F_0 = 0$ and $\Gamma = 0$.

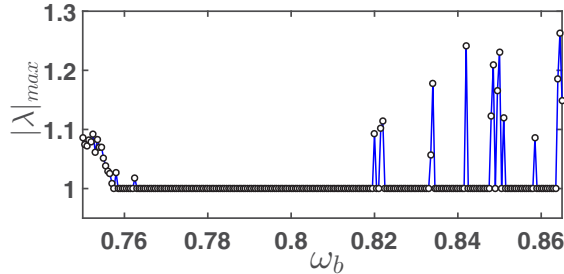


FIG. 3. Evolution with respect to the DB frequency ω_b of the maximum modulus of the Floquet multiplier with $F_0 = 0$, $\Gamma = 0$.

effects, the ILM with arbitrary frequency $f_b = \omega_b/2\pi$ in the forbidden band gap is estimated regardless of the restrictions imposed by the branches of existence calculated previously. The DBs are spatially localized time-periodic solutions to the nonlinear system of equations of motion in terms of $Y_n(\tau)$. They are calculated as fixed points of the map,

$$\mathcal{P} : \begin{bmatrix} Y_n(0) \\ \dot{Y}_n(0) \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} Y_n(T_b) \\ \dot{Y}_n(T_b) \end{bmatrix}, \quad (11)$$

where $T_b = 1/f_b$ is the temporal period of the DB. The estimate of the periodic DB solution of Eq. (3) is made by using Newton’s method combined with the anticontinuous limit described in [56]. This procedure is useful for obtaining solutions with relatively high accuracy.

Figure 3 shows the absolute value of Floquet’s multipliers λ for a one-site DB versus the driving frequency ω_b . It can be seen that there are very few values of ω_b for which the discrete breathers centered on one site are unstable.

Figure 4 illustrates two types of solutions whose DB frequencies are worth, respectively, $\omega_b = 0.8$ [Fig. 4(a) for $F_0 = 0$, $\Gamma = 0$ and Fig. 4(c) for $F_0 = 0.75$, $\Gamma = 0$] and $\omega_b = 0.75$ [Fig. 4(b) for $F_0 = 0$, $\Gamma = 0$ and Fig. 4(d) for $F_0 = 0.75$, $\Gamma = 0$]. These solutions, obtained by the anticontinuous limit,

have their Floquet multipliers projected on the unit circle (inset curve). The corresponding power spectrum of these solutions (not shown here) reveals that these discrete breathers have their frequency above the upper cutoff frequency of the forbidden band of the phonon’s mode. The linear instability of the solution obtained for $\omega_b = 0.75$ in the absence of viscosity and periodic force is certainly due to the interaction of the weak frequencies of its corresponding power spectrum with the phonon’s mode. Curves (c) and (d) of Fig. 4 illustrate the intrinsic localized modes in the presence of the driving force only, and it arises that these solutions are linearly unstable for the value $F_0 = 0.75$.

For the choice of frequency $\omega_b = 0.8$, we also generated DBs by taking into account simultaneously the viscosity of the medium and the external force. These discrete breathers take form for small values of Γ and F_0 as predicted in [57]. Figure 5(a) represents this discrete breather and its corresponding Floquet spectrum arising from its linear stability. After building this discrete breather in the presence of dissipation and external driving, the robustness of this solution is subsequently checked. Figures 5(b) and 5(c) depict the absolute value and argument (inset curves) of the eigenvalues of the DB with $\omega_b = 0.8$, $F_0 = 0.06$. An instability is observed for a critical viscosity $\nu_{cr} = 0.087 \text{ ps}^{-1}$ [Fig. 5(b)], while in Fig. 5(c) there is a very close domain where the constructed discrete breather is marginally stable. Let us note that for increasingly significant values of F_0 , the generated discrete breathers become increasingly unstable.

In the following section, we will analyze the influence of the impurity on DNA dynamics subjected to periodic excitation.

III. EFFECT OF THE IMPURITY ON DNA DYNAMICS

It is well known that the DNA molecule can be subjected to genetic changes during the transmission of hereditary features

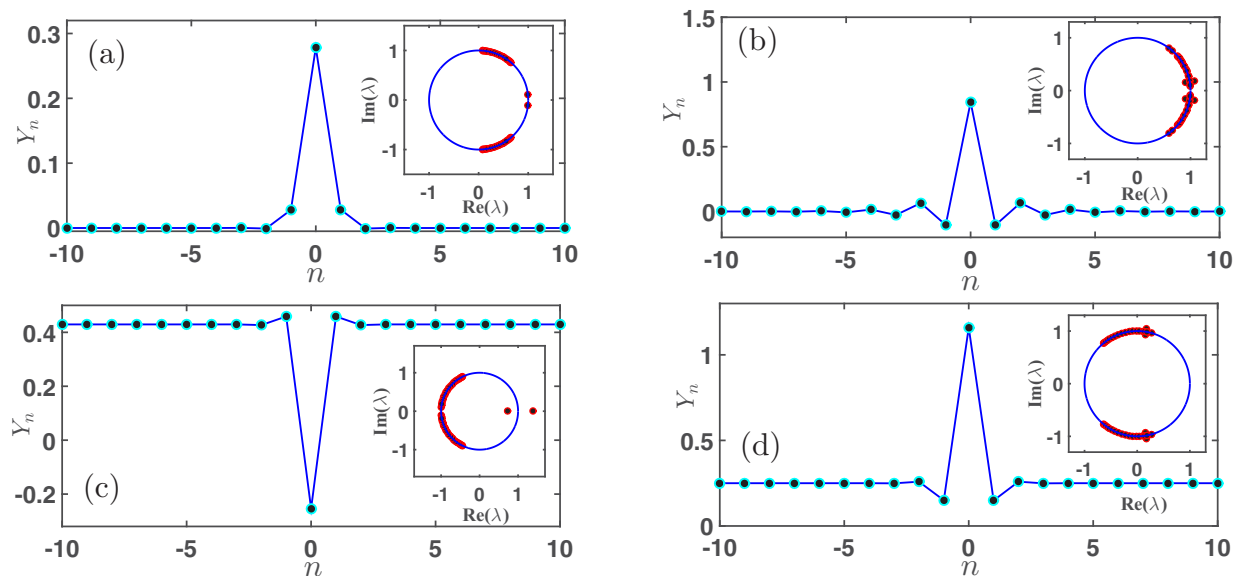


FIG. 4. Discrete breather profiles for $\omega_b = 0.8$ [(a) $F_0 = 0$, $\Gamma = 0$; (c) $F_0 = 0.75$, $\Gamma = 0$] and for $\omega_b = 0.75$ [(b) $F_0 = 0$, $\Gamma = 0$; (d) $F_0 = 0.75$, $\Gamma = 0$]. The inset shows the corresponding Floquet multiplier spectra of these DBs.

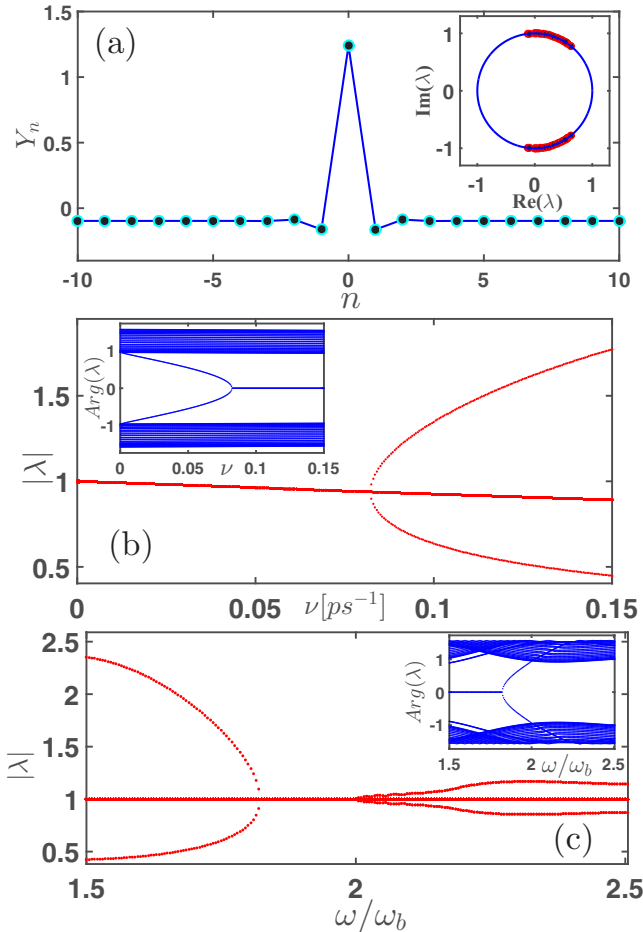


FIG. 5. (a) Discrete breather profiles under periodic driving and viscosity and the corresponding Floquet multiplier spectra for $\omega_b = 0.8$, $\Omega = 2\omega_b$, $F_0 = 0.06$, and $\Gamma \approx 1.95 \times 10^{-4}$. Panels (b) and (c) display the absolute value and argument (inset) of the eigenvalues of the continued discrete breather.

from one generation to another. These changes can have dramatic consequences on the descendants of a specie. The genetic changes can be centered in a precise site, or extended on a portion of the DNA. In the present section, we are interested in the change that is centered on a site. Taking into account the fact that in the DNA molecule the hydrogen bonds between adenine and thymine are about 2, whereas between guanine and cytosine they are about 3, a change of this

configuration can lead to another sequence that can be view as an impurity. Thus, the impurity throughout this section will be defined by the coefficients of the Morse potential, symbolizing the interaction between the pairs of bases.

It is of primary importance to start with the study of only one base pair subjected to the action of a periodic force and the viscosity. This will enable us to gain insight into the characteristics of the amplitude response of the system according to the frequency of the external force. It allows us to better probe and spot which features of the single cell are crucial for the emergence of the collective phenomenon of localization in the lattice. Thus, the dynamics of an uncoupled basic pair ($k_2 = k_4 = 0$) is given by the equation

$$\ddot{Y}_n(\tau) + \Gamma \dot{Y}_n(\tau) + \sum_{j=1}^3 \alpha_j Y_n^j(\tau) = F_0 \cos(\Omega\tau),$$

$$\alpha_1 = \omega_g^2, \quad \alpha_2 = \alpha\omega_g^2, \quad \alpha_3 = \beta\omega_g^2. \quad (12)$$

Due to the nonlinearity of Eq. (12), it is very difficult to obtain the exact solution. However, techniques were developed in the literature to approach an analytical solution. One of these is the harmonic balance method, which approximates periodic solutions of nonlinear differential equations by finite sums of trigonometric functions [40]. To do so, it is assumed that the periodic-like response of Eq. (12) can be written as

$$Y_n(\tau) = B_0 + A_1 \cos(\Omega\tau) + A_2 \sin(\Omega\tau), \quad (13)$$

where B_0 , A_1 , and A_2 are the coefficients to be determined. Substituting Eq. (13) into Eq. (12) and equating the coefficients of the constant term and the first-harmonic components, we obtain

$$\begin{aligned} -\Gamma\Omega A_1 + \left[(3B_0^2 + \frac{3}{4}A^2)\alpha_3 + 2\alpha_2 B_0 + \alpha_1 - \Omega^2 \right] A_2 &= 0, \\ \left[(3B_0^2 + \frac{3}{4}A^2)\alpha_3 + 2\alpha_2 B_0 + \alpha_1 - \Omega^2 \right] A_1 + \Gamma\Omega A_2 &= F_0, \\ (B_0^2 + \frac{3}{2}A^2)\alpha_3 B_0 + (B_0^2 + \frac{1}{2}A^2)\alpha_2 + \alpha_1 B_0 &= 0, \end{aligned} \quad (14)$$

where $A^2 = A_1^2 + A_2^2$. The decoupling of B_0 from A_1 and A_2 in Eqs. (14) yields after some arrangements the following nonlinear algebraic equation:

$$\sum_{j=0}^9 e_j B_0^j = 0, \quad (15)$$

where the coefficients e_j are

$$\begin{aligned} e_0 &= 2F_0^2 \alpha_3^2, \\ e_1 &= 4\alpha_1 \alpha_2 \left[(\Omega^2 - \alpha_1)^2 + \Omega^2 \Gamma^2 + \frac{9F_0^2 \alpha_3}{2\alpha_1} \right], \\ e_2 &= 4\alpha_2 (\alpha_2^2 + 6\alpha_1 \alpha_3) \Omega^4 + 4\alpha_2 \left[(\Gamma^2 - 6\alpha_1) \alpha_2^2 + 3\alpha_1 \alpha_3 (\Gamma^2 - 3\alpha_1) \right] \Omega^2 + 4\alpha_2 \left[5\alpha_1^2 \alpha_2^2 + 3\alpha_1^3 \alpha_3 + \frac{27}{2} F_0^2 \alpha_3^2 \right], \\ e_3 &= 4\alpha_3 (9\alpha_1 \alpha_3 + 7\alpha_2^2) \Omega^4 + 4\alpha_3 \left[9\alpha_1 \alpha_3 (\Gamma^2 - \alpha_1) + (7\Gamma^2 - 38\alpha_1) \alpha_2 - 4 \frac{\alpha_2^4}{\alpha_3} \right] \Omega^2 + 32\alpha_1 \alpha_2^4 + 54\alpha_3^3 F_0^2 + 9\alpha_3^2 \alpha_1^3 \\ &\quad + 100\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 e_4 &= 60\alpha_2\alpha_3^2\Omega^4 + 4\alpha_2\alpha_3[3\alpha_3(5\Gamma^2 - 26\alpha_1) - 31\alpha_2^2]\Omega^2 + 16\alpha_2^5 + 171\alpha_1^2\alpha_3^2\alpha_2 + 220\alpha_1\alpha_3\alpha_2^3, \\
 e_5 &= 36\alpha_3^3\Omega^4 + 12\alpha_3^2[3\alpha_3(\Gamma^2 - 6\alpha_1) - 29\alpha_2^2]\Omega^2 + 99\alpha_1^2\alpha_3^3 + 136\alpha_3\alpha_2^4 + 579\alpha_1\alpha_2^2\alpha_3^2, \\
 e_6 &= 5\alpha_2\alpha_3^2[-84\alpha_3\Omega^2 + 93\alpha_2^2 + 138\alpha_1\alpha_3], \\
 e_7 &= -180\alpha_3^4\Omega^2 + 15\alpha_3^3(21\alpha_1\alpha_3 + 53\alpha_2^2), \\
 e_8 &= 675\alpha_2\alpha_3^4, \\
 e_9 &= 225\alpha_3^5.
 \end{aligned} \tag{16}$$

For any value of B_0 obtained from Eqs. (15), A_1 and A_2 can be determined using Eqs. (14). Then, the amplitude-frequency response relationship can be calculated by

$$\mathcal{A} = |B_0| + \sqrt{A_1^2 + A_2^2}. \tag{17}$$

Using the Newton-Raphson algorithm, one finds B_0 when the frequency Ω varies.

Figure 6 shows the extreme amplitude-frequency [$\max(Y_n) = \mathcal{A}$] and the response of the single base pair, obtained analytically and numerically by integrating Eq. (12) with the standard fourth-order Runge-Kutta algorithm. This figure shows the value of the frequency of the external force to be avoided because it is responsible for the occurrence of the resonance as well as jump phenomena. Thus, in the rest of the paper it is considered that $\Omega = 1.2$. Taking into account the fact that F_0 has an enormous influence on the amplitude response of the system, it is primordial to know the response of the unit cell for varying values of the amplitude F_0 . Figure 7 represents the bifurcation diagram of a single base pair under periodic excitation. One observes in

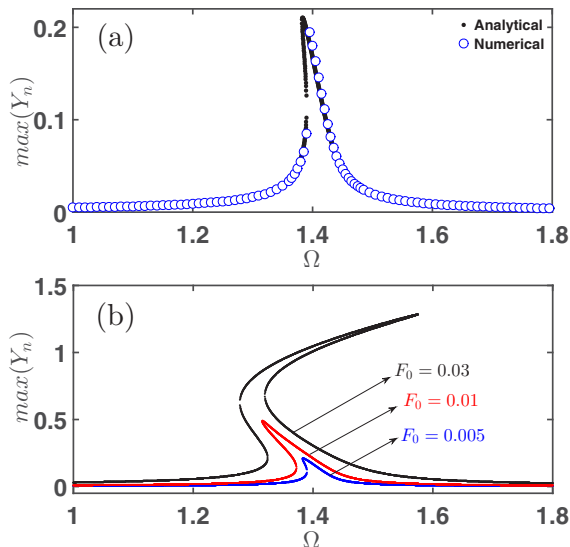


FIG. 6. (a) Extreme amplitude-frequency responses of a single base pair [$\max(Y_n) = \mathcal{A}$], obtained analytically (shown by a dot) and numerically (shown by a circle) from the integration of Eq. (12) with $F_0 = 0.005$. (b) Extreme amplitude-frequency response of a single base for different values of drive intensity and with $\Gamma = 1.952 \times 10^{-2}$ [the numerical curves with the same method of (a) were found concordant with this analytical result of (b). It was not shown here for the sake of clarity and to avoid an overload of the graphs].

this figure that there are values of F_0 for which the dynamics of a unit cell exhibits chaotic, quasiperiodic, or periodic behavior.

Knowing the chaotic behavior of the unit cell under periodic excitation, it is of primary importance to explore the dynamics of the coupled system in the presence of an impurity. Let us analyze the influence of a specific impurity in the DNA by taking into account the presence of a periodic force and viscosity. For that purpose, the new coefficients of the Morse potential, including the impurity localized at a site n_0 , are $a'_n = [(\mu - 1)\delta_{nm_0} + 1]a$ and $D'_n = [(\mu - 1)\delta_{nm_0} + 1]D$, with $0.399 \leq \mu \leq 1.5$ and δ_{nm_0} denoting the Kronecker symbol.

For all the upcoming numerical simulations, the driving amplitude and the frequency values are chosen as $F_0 = 8$ and $\Omega = 1.2$. Moreover, free boundary conditions are assumed. For these previous specific values, a single DNA base pair exhibits a strange attractor, a large number and dense set of orbits in the phase space, and a strictly positive Lyapunov exponent (results not shown in the paper). To detect the chaotic behavior of a whole DNA molecule subjected to the influence of the impurity, it is more convenient to measure the average speed of the pairs of bases given by

$$\sigma(jT) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{n=N} \dot{Y}_n(jT), \tag{18}$$

at times that are integer multiples of the forcing period $T = 2\pi/\Omega$. This measure is computed at each period, and it is plotted as a function of jT , i.e., at each subsequent period.

Figure 8 shows the average base-pair velocity $\sigma(\tau)$ at $\tau = 30T, 31T, \dots, 40T$ as a function of μ . This global bifurcation of the whole lattice according to the value of the impurity is

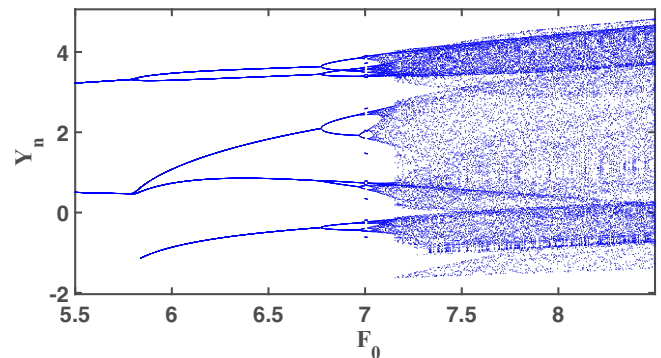


FIG. 7. Bifurcation diagram of a single base pair as a function of F_0 with $\Omega = 1.2$.

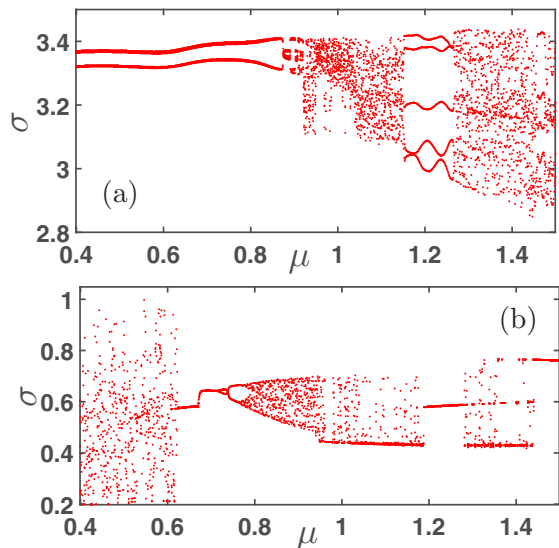


FIG. 8. Chaotic and regular dynamics as a function of the degree of impurity. The average velocity at $\tau = 30T, 31T, \dots, 40T$ is shown for each value of impurity parameter μ . Top panel: for $n \neq n_0$, $V_M = 0.8D(e^{-0.8ay_n} - 1)^2$; bottom panel: for $n \neq n_0$, $V_M = 1.2D(e^{-1.2ay_n} - 1)^2$.

depicted. It can be clearly seen that when the parameter μ of the impurity matches that of the other sites of the lattice, all the base pairs vibrate collectively with a high number of local minima. This means that the coupling between DNA base pairs does not inhibit the chaotic dynamics of isolated elements indicated before. In comparison with the bifurcation curve given in Fig. 8, we observe that when the Morse potential is not very deep, the behavior of the chains subjected to an impurity exhibits two quasiperiodic zones obtained for $0.399 \leq \mu \leq 0.921$ and $1.152 \leq \mu \leq 1.272$ [see Fig. 8(a)].

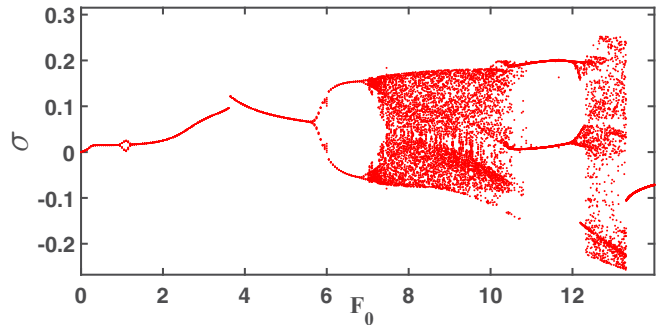


FIG. 10. Chaotic and regular dynamics of a single excited DNA base pair at site n_0 vs the amplitude of the exiting force F_0 . $\Omega = 1.2$, $D = 0.04$ eV, and $a = 4.45 \text{ \AA}^{-1}$.

The chain becomes chaotic for all other values of μ out of these intervals. Figure 8(b) obtained for a deeper Morse potential exhibits three zones where the chain has a chaotic behavior (for $0.399 \leq \mu \leq 0.623$, $0.783 \leq \mu \leq 1.188$, and $1.28 \leq \mu \leq 1.44$) and quasiperiodic dynamics elsewhere. It is observed that a nonintrinsic localized mode can remain quasiperiodic with time (Fig. 9, top left and bottom left), or it can still be present without inhibition of the collective chaotic vibration of the lattice (Fig. 9, top right and bottom right). Surprisingly, the same phenomena occur when only a single site of the lattice is excited (Fig. 10). For a homogeneous DNA chain, periodic driving applied to one site can induce either chaotic or regular collective motion.

IV. DISCUSSION

Most of the analytical studies devoted to the understanding of driven and damped nonlinear lattices in which DBs are explicitly constructed by an exact separation of their time and space dependence possessed models with either purely

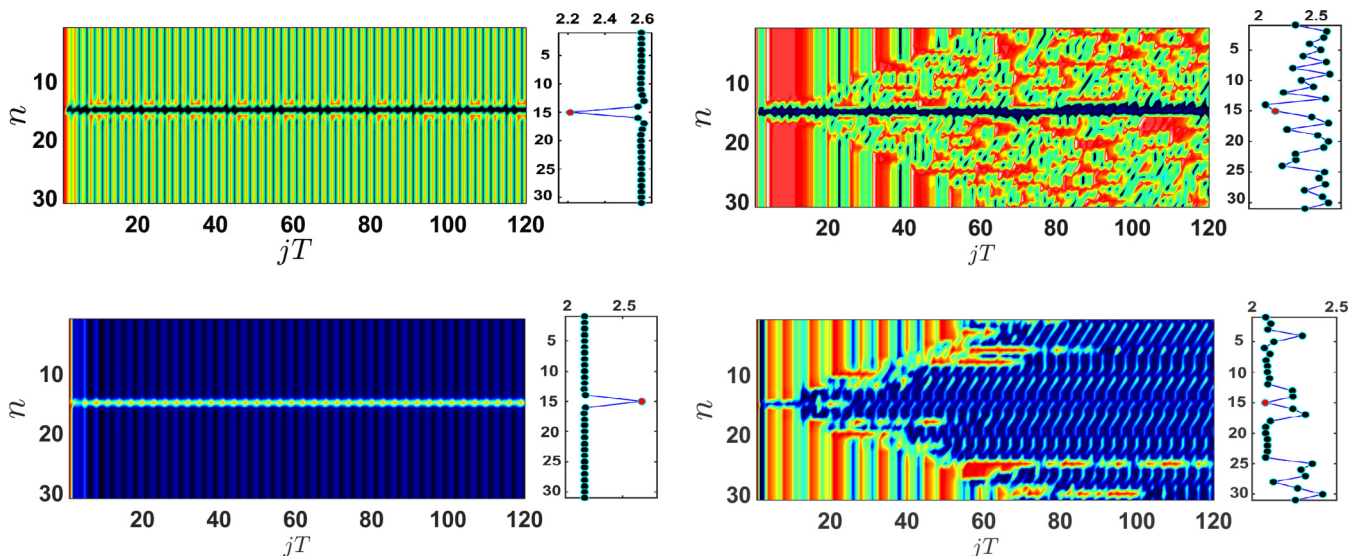


FIG. 9. Spatiotemporal position patterns for chaotic and regular dynamics in an array of $N = 31$ coupled DNA base pairs. Top left panel: for $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 0.8(a, D)$, at $n = n_0$ $(a'_n, D'_n) = 1.215(a, D)$; top right panel: for $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = (a, D)$, at $n = n_0$ $(a'_n, D'_n) = 1.215(a, D)$. Bottom left panel: for $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.2(a, D)$, at $n = n_0$ $(a'_n, D'_n) = 0.688(a, D)$; bottom right panel: for $n \neq n_0$, $(a'_n, D'_n) = 1.378(a, D)$, at $n = n_0$ $(a'_n, D'_n) = 1.2(a, D)$. These coefficient values of the Morse potential are taken from Figs. 8(a) and 8(b), respectively.

anharmonic short-range interaction potentials, nonlinear on-site potential, or nonlinear dispersion [33–39]. By using a simplified DB core structure as in Ref. [36], the present study provided rich families and several branches of ILM solutions in which there are branches of orbital stability and instability as well as the mixing of them. We showed that the dominant frequency of the DBs falls mostly outside the phonon band, which is naturally expected for nonlinear ILMs [3,57]. Note that this method of separation of variables was mostly applied in nonlinear lattices, where there is no linear dispersion and thus no phonon band [34,36]. This is not the case in the present study. In the current research work, the core model is reduced into an algebraic equation in which the existence of discrete ILMs is demonstrated. Note that Ndjoko *et al.* [23] and Gninzanlong *et al.* [24], respectively, obtained highly spatially confined solitons from continuous and discrete versions of the JB model without external driving and dissipation.

It was reported that impurities in driven and damped nonlinear electrical lattices can be used for movement control of ILMs [10,14], as well as for phase synchronization of vibrations of coupled pendulums [58,59]. These imperfections in the lattice modify the nonlinear frequency response of the system [60–62]. As compared to the previously mentioned studies [10,14,58–60,62], here it is demonstrated that a single defect in the local potential energy of the nonlinear chain can produce a nonintrinsic localized mode as well as synchronized spatiotemporal patterns when the entire set of oscillators and the impurity exhibit chaotic behavior. Moreover, it is shown that the periodic excitation applied at a specific single site can create regular spatial and temporal patterns in the whole lattice even if all sites are in a chaotic environment. This implies that the impurity and driving can be used as control parameters on the dynamics of the nonlinear chain. The nonlinear frequency response of a homogeneous, driven, and damped nonlinear lattice was analyzed [63–66]. However, the discrete waves constructed in these studies were not exponentially localized, possibly due to the resonance between phonon modes and the ILM [67].

The localized mode formation in driven and damped DNA was studied mostly by observing bifurcations and numerical simulations in the Dauxois-Peyrard-Bishop model [29–32]. Stacking interactions between neighbor bases along the DNA axis stabilize the secondary DNA structure. They hold one base over the next one and form a stack of bases [17]. This stacking interaction, however, does not incorporate any characteristic energy associated with it [18]. Inspired by the anharmonic model suggested by DPB, Joyeux and Buyukdagli (JB) proposed a new model based on site-specific enthalpy that is closer to the statistical models [19,20]. This study accounted for the damping and driving as in Refs. [29–32], but it investigated the generation of staggered or unstaggered discrete ILMs and their stability based on the JB model. The nonlinear response of the DNA as a function of driver amplitude and frequency was also analyzed. In the absence of dissipation and periodic driving force, the impurity in the DNA chain can trap, partially transmit, or reflect the breather during its propagation [45–53]. Here it is demonstrated that a base pair with different potential energy of interaction (impurity) can suppress or induce the spatial and temporal chaotic dynamics.

The model used here has been proposed by Joyeux and Buyukdagli to explain homogeneous and inhomogeneous DNA denaturation and the finite stacking enthalpy energy of base pairs [19,20]. This underscores the fact that our results can be useful to explore some properties of DNA chains. To illustrate this, if a DNA molecule exposed to external radiation and viscous damping can corner the energy at the inhomogeneity, these factors can therefore foster the occurrence of a transcription bubble [17]. These trapped ILMs may therefore operate as energy pools and can reassign this encapsulated energy to a localized and propagating transcription bubble. It is reported that periodic excitation on a DNA lattice can induce stable or unstable base-pair vibration or accelerate the separation of the double helix into single helices [29–32]. However, in the presence of such external forcing and damping, as expected for most nonlinear systems, the DNA lattice can undergo a transition to chaos. Nevertheless, the results obtained in the present study suggest that a suitable balance between the effect of these external factors and inhomogeneity can prevent and control the chaotic spatiotemporal dynamics.

V. CONCLUSION

In this paper, the formation of ILMs, their stability, and their chaotic dynamics are studied in damped and periodically driven DNA. The effect of inhomogeneity on the spatiotemporal dynamics is also investigated. The regions of existence and stability of one-peak unstaggered ILMs were characterized. These coherent localized modes of different kinds were also classified on the basis of stability properties and their corresponding Floquet spectra. It is demonstrated that a chain of chaotic DNA base pairs can be frequency-locked into a spatiotemporal pattern by incorporating a proper impurity at a site in the lattice. In most cases, a single impurity can tame chaos. It is found that a single nonchaotic defect with an appropriate Morse potential depth can control and organize the dynamics of the lattice. Increasing the potential depth increases the depth domain of the impurity base pair for which the organization can be observed. It is shown that when the periodic excitation is only applied at a specific single site, it can create regular spatial and temporal patterns in the whole lattice even when all the sites are in a chaotic regime.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank the Electronic Journal Delivery Service of the International Centre of Theoretical Physics (ICTP) for providing valuable references used in this study. The help of Patrick Guemkam Ghomsi of the University of Buea at the early stage of this work is gratefully acknowledged. We thank the reviewers for their comments, which improved this paper significantly.

APPENDIX: DERIVATION OF EQ. (8)

In this Appendix, we explain the procedure that allowed us to obtain the algebraic equation (8). Let us rewrite Eqs. (6) and (7) as the following Eqs. (A1) and (A2),

respectively:

$$\phi_0 \ddot{G} + \Gamma \phi_0 \dot{G} = F_0 \cos(\Omega\tau) - [\omega_g^2 + 2k_2(1 + k_0)]\phi_0 G - \alpha\omega_g^2\phi_0^2 G^2 - [\beta\omega_g^2 - 2k_4(1 + k_0)^3]\phi_0^3 G^3, \quad (\text{A1})$$

$$k_0\phi_0 \ddot{G} + k_0\Gamma\phi_0 \dot{G} = -F_0 \cos(\Omega\tau) + \alpha\omega_g^2 k_0^2 \phi_0^2 G^2 - [\beta\omega_g^2 k_0^3 - k_4(1 + k_0^3)(1 + k_0)^3]\phi_0^3 G^3 - [k_0\omega_g^2 + k_2(1 + k_0)^2]\phi_0 G. \quad (\text{A2})$$

The multiplication of Eq. (A1) by k_0 leads to

$$k_0\phi_0 \ddot{G} + k_0\Gamma\phi_0 \dot{G} = k_0 F_0 \cos(\Omega\tau) - k_0\alpha\omega_g^2\phi_0^2 G^2 - k_0[\beta\omega_g^2 - 2k_4(1 + k_0)^3]\phi_0^3 G^3 - k_0[\omega_g^2 + 2k_2(1 + k_0)]\phi_0 G. \quad (\text{A3})$$

It can be observed that the left-hand side of Eq. (A3) is identical to the left-hand side of Eq. (A2). With a substitution of the term $(k_0\phi_0 \ddot{G} + k_0\Gamma\phi_0 \dot{G})$ obtained from Eq. (A3) by its expression into Eq. (A2) and by collecting the terms in k_0 , we obtain

$$k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^6 + 3k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^5 + k_4 G^3 \phi_0^3 k_0^4 - [\beta\omega_g^2 G^3 \phi_0^3 + 4k_4 G^3 \phi_0^3]k_0^3 + [\alpha\omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - 3k_4 \phi_0^3 G^3 + k_2 \phi_0 G]k_0^2 + [k_4 \phi_0^3 G^3 + \beta\omega_g^2 \phi_0^3 G^3 + \alpha\omega_g^2 \phi_0^2 G^2 - F_0 \cos(\Omega\tau)]k_0 - k_2 \phi_0 G + k_4 \phi_0^3 G^3 - F_0 \cos(\Omega\tau) = 0. \quad (\text{A4})$$

Equation (A4) is reduced to Eq. (8) by setting $\tau = 0$.

-
- [1] S. Flach and A. V. Gorbach, Discrete breathers—Advances in theory and applications, *Phys. Rep.* **467**, 1 (2008).
- [2] S. Flach and C. R. Willis, Discrete breathers, *Phys. Rep.* **295**, 181 (1998).
- [3] D. K. Campbell, S. Flach, and Y. S. Kivshar, Localizing energy through nonlinearity and discreteness, *Phys. Today* **57**(1), 43 (2004).
- [4] D. Zueco, P. J. Martinez, L. M. Floría, and F. Falo, Mode-locking of mobile discrete breathers, *Phys. Rev. E* **71**, 036613 (2005).
- [5] P. J. Martinez, M. Meister, L. M. Floría, and F. Falo, Dissipative discrete breathers: Periodic, quasiperiodic, chaotic, and mobile, *Chaos Interdisc. J. Nonlin. Sci.* **13**, 610 (2003).
- [6] Y. Xu, T. J. Alexander, H. Sidhu, and P. G. Kevrekidis, Instability dynamics and breather formation in a horizontally shaken pendulum chain, *Phys. Rev. E* **90**, 042921 (2014).
- [7] F. Palmero, J. Han, L. Q. English, T. J. Alexander, and P. G. Kevrekidis, Multifrequency and edge breathers in the discrete sine-Gordon system via subharmonic driving: Theory, computation and experiment, *Phys. Lett. A* **380**, 402 (2016).
- [8] J. Cuevas, L. Q. English, P. G. Kevrekidis, and M. Anderson, Discrete Breathers in a Forced-Damped Array of Coupled Pendula: Modeling, Computation, and Experiment, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 224101 (2009).
- [9] L. Q. English, F. Palmero, J. F. Stormes, J. Cuevas, R. Carretero-González, and P. G. Kevrekidis, Nonlinear localized modes in two-dimensional electrical lattices, *Phys. Rev. E* **88**, 022912 (2013).
- [10] L. Q. English, F. Palmero, A. J. Sievers, P. G. Kevrekidis, and D. H. Barnak, Traveling and stationary intrinsic localized modes and their spatial control in electrical lattices, *Phys. Rev. E* **81**, 046605 (2010).
- [11] L. Q. English, R. B. Thakur, and R. Stearrett, Patterns of traveling intrinsic localized modes in a driven electrical lattice, *Phys. Rev. E* **77**, 066601 (2008).
- [12] L. Q. English, F. Palmero, P. Candiani, J. Cuevas, R. Carretero-Gonzalez, P. G. Kevrekidis, and A. J. Sievers, Generation of Localized Modes in an Electrical Lattice Using Subharmonic Driving, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 084101 (2012).
- [13] M. Sato, T. Mukaide, T. Nakaguchi, and A. J. Sievers, Inductive intrinsic localized modes in a one-dimensional nonlinear electric transmission line, *Phys. Rev. E* **94**, 012223 (2016).
- [14] F. Palmero, L. Q. English, J. Cuevas, R. Carretero-Gonzalez, and P. G. Kevrekidis, Discrete breathers in a nonlinear electric line: Modeling, computation, and experiment, *Phys. Rev. E* **84**, 026605 (2011).
- [15] M. Kimura and T. Hikihara, A study on intrinsic localized modes in a macro-mechanical cantilever array with tunable on-site nonlinearity, *Proc. IUTAM* **5**, 288 (2012).
- [16] M. Kimura and T. Hikihara, Coupled cantilever array with tunable on-site nonlinearity and observation of localized oscillations, *Phys. Lett. A* **373**, 1257 (2009).
- [17] L. Yakusevich, *Nonlinear Physics of DNA* (Wiley-Interscience, New York, 1998).
- [18] M. Peyrard, Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA, *Nonlinearity* **17**, R1 (2004).
- [19] M. Joyeux and A.-M. Florescu, Dynamical versus statistical mesoscopic models for DNA denaturation, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 034101 (2009).
- [20] M. Joyeux and S. Buyukdagli, Dynamical model based on finite stacking enthalpies for homogeneous and inhomogeneous DNA thermal denaturation, *Phys. Rev. E* **72**, 051902 (2005).
- [21] D. Toko, C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofane, Coherent modes and parameter selection in DNA models with finite stacking enthalpy, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **9**, 97 (2012).
- [22] A. Mvogo and T. C. Kofané, Fractional formalism to DNA chain and impact of the fractional order on breather dynamics, *Chaos Interdisc. J. Nonlin. Sci.* **26**, 123120 (2016).
- [23] P. B. Ndjoko, J. M. Bilbault, S. Binczak, and T. C. Kofane, Compact-envelope bright solitary wave in a DNA double strand, *Phys. Rev. E* **85**, 011916 (2012).
- [24] C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, and C. Tchawoua, Discrete breathers dynamic in a model for DNA chain with a finite stacking enthalpy, *Chaos* **28**, 043105 (2018).

- [25] X. Yang, X. Zhao, K. Yang, Y. Liu, Y. Liu, W. Fu, and Y. Luo, Biomedical applications of terahertz spectroscopy and imaging, *Trends Biotechnol.* **34**, 810 (2016).
- [26] G. J. Wilmink and J. E. Grundt, Invited review article: Current state of research on biological effects of terahertz radiation, *J. Infr. Millim. Terahertz Waves* **32**, 1074 (2011).
- [27] R. Shiurba, T. Hirabayashi, M. Masuda, A. Kawamura, Y. Komoike, W. Klitz, K. Kinowaki, T. Funatsu, S. Kondo, S. Kiyokawa, T. Sugai, K. Kawamura, H. Namiki, and T. Higashinakagawa, Cellular responses of the ciliate, *Tetrahymena thermophila*, to far infrared irradiation, *Photochem. Photobiol. Sci.* **5**, 799 (2006).
- [28] J. Bock, Y. Fukuyo, S. Kang, M. L. Phipps, L. B. Alexandrov, K. Ø. Rasmussen, A. R. Bishop, E. D. Rosen, J. S. Martinez, H.-T. Chen, G. Rodriguez, B. S. Alexandrov, and A. Usheva, Mammalian stem cells reprogramming in response to terahertz radiation, *PLoS One* **5**, e15806 (2010).
- [29] B. S. Alexandrov, V. Gelev, A. R. Bishop, A. Usheva, and K. Ø. Rasmussen, DNA breathing dynamics in the presence of a terahertz field, *Phys. Lett. A* **374**, 1214 (2010).
- [30] P. Maniadis, B. S. Alexandrov, A. R. Bishop, and K. Ø. Rasmussen, Feigenbaum cascade of discrete breathers in a model of DNA, *Phys. Rev. E* **83**, 011904 (2011).
- [31] A. Sulaiman, F. P. Zen, H. Alatas, and L. T. Handoko, Dynamics of DNA breathing in the Peyrard-Bishop model with damping and external force, *Phys. D* **241**, 1640 (2012).
- [32] E. S. Swanson, Modeling DNA response to terahertz radiation, *Phys. Rev. E* **83**, 040901(R) (2011).
- [33] P. Rosenau and J. M. Hyman, Compactons: Solitons with Finite Wavelength, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 564 (1993).
- [34] P. Maniadis and T. Bountis, Quasiperiodic and chaotic discrete breathers in a parametrically driven system without linear dispersion, *Phys. Rev. E* **73**, 046211 (2006).
- [35] Y. S. Kivshar, Intrinsic localized modes as solitons with a compact support, *Phys. Rev. E* **48**, R43 (1993).
- [36] A. V. Gorbach and S. Flach, Compactlike discrete breathers in systems with nonlinear and nonlocal dispersive terms, *Phys. Rev. E* **72**, 056607 (2005).
- [37] S. Flach, Conditions on the existence of localized excitations in nonlinear discrete systems, *Phys. Rev. E* **50**, 3134 (1994).
- [38] G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, and E. A. Mehonoshina, Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers, *Phys. Rev. E* **74**, 036608 (2006).
- [39] T. Bountis, T. Manos, and H. Christodoulidi, Application of the GALI method to localization dynamics in nonlinear systems, *J. Comput. Appl. Math.* **227**, 17 (2009).
- [40] V. Marinca and N. Herisanu, *Nonlinear Dynamical Systems in Engineering* (Springer, Berlin, 2011).
- [41] S. Wiggins, *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos* (Springer-Verlag, New York, 2003).
- [42] J. Pan, W. Chen, F. Tao, and W. Xu, Influence of impurities on solitons in the nonlinear LC transmission line, *Phys. Rev. E* **83**, 016601 (2011).
- [43] N. V. Alexeeva, I. V. Barashenkov, and G. P. Tsironis, Impurity-Induced Stabilization of Solitons in Arrays of Parametrically Driven Nonlinear Oscillators, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3053 (2000).
- [44] W. Chen, L. Lu, and Y. Zhu, Influence of impurities on hydrodynamic solitons, *Phys. Rev. E* **71**, 036622 (2005).
- [45] T. Dauxois, M. Peyrard, and C. R. Willis, Discreteness effects on the formation and propagation of breathers in nonlinear Klein-Gordon equations, *Phys. Rev. E* **48**, 4768 (1993).
- [46] K. Forinash, A. R. Bishop, and P. S. Lomdahl, Nonlinear dynamics in a double-chain model of DNA, *Phys. Rev. B* **43**, 10743 (1991).
- [47] P. V. Larsen, P. L. Christiansen, O. Bang, J. F. R. Archilla, and Y. B. Gaididei, Energy funneling in a bent chain of Morse oscillators with long-range coupling, *Phys. Rev. E* **69**, 026603 (2004).
- [48] M. Hisakado, Breather trapping mechanism in piecewise homogeneous DNA, *Phys. Lett. A* **227**, 87 (1997).
- [49] F. Palmero, J. F. R. Archilla, D. Hennig, and F. R. Romero, Effect of base-pair inhomogeneities on charge transport along the DNA molecule, mediated by twist and radial polarons, *New J. Phys.* **6**, 13 (2004).
- [50] M. Vanitha and M. Daniel, Internal nonlinear dynamics of a short lattice DNA model in terms of propagating kink-antikink solitons, *Phys. Rev. E* **85**, 041911 (2012).
- [51] J. Cuevas, F. Palmero, J. F. R. Archilla, and F. R. Romero, Moving discrete breathers in a Klein-Gordon chain with an impurity, *J. Phys. A* **35**, 10519 (2002).
- [52] A. Alvarez, F. R. Romero, J. F. R. Archilla, J. Cuevas, and P. V. Larsen, Breather trapping and breather transmission in a DNA model with an interface, *Eur. Phys. J. B* **51**, 119 (2006).
- [53] J. J.-L. Ting and M. Peyrard, Effective breather trapping mechanism for DNA transcription, *Phys. Rev. E* **53**, 1011 (1996).
- [54] T. Dauxois, M. Peyrard, and A. R. Bishop, Entropy-driven DNA denaturation, *Phys. Rev. E* **47**, R44 (1993).
- [55] L. Brillouin, *Periodic Structure: Electronic Filters and Crystal Lattices* (McGraw-Hill, New York, 1946).
- [56] J. L. Marín and S. Aubry, Breathers in nonlinear lattices: Numerical calculation from the anticontinuous limit, *Nonlinearity* **9**, 1501 (1996).
- [57] D. K. Campbell, *Nature* **432**, 455 (2004).
- [58] M. Weiss, T. Kottos, and T. Geisel, Taming chaos by impurities in two-dimensional oscillator arrays, *Phys. Rev. E* **63**, 056211 (2001).
- [59] A. Gavrielides, T. Kottos, V. Kovanis, and G. P. Tsironis, Spatiotemporal organization of coupled nonlinear pendula through impurities, *Phys. Rev. E* **58**, 5529 (1998).
- [60] T. Ikeda, Y. Harata, and K. Nishimura, Intrinsic localized modes of harmonic oscillations in pendulum arrays subjected to horizontal excitation, *J. Comput. Nonlin. Dyn.* **10**, 021007 (2015).
- [61] T. Ikeda, Y. Harata, and K. Nishimura, Intrinsic localized modes of harmonic oscillations in nonlinear oscillator arrays, *J. Comput. Nonlin. Dyn.* **8**, 041009 (2013).
- [62] T. Ikeda, Y. Harata, and R. Hiraoka, Intrinsic localized modes of 1/2-order subharmonic oscillations in nonlinear oscillator arrays, *Nonlin. Dyn.* **81**, 1759 (2015).
- [63] M. E. King and A. F. Vakakis, A very complicated structure of resonances in a nonlinear system with cyclic symmetry: Nonlinear forced localization, *Nonlin. Dyn.* **7**, 85 (1995).
- [64] S. Gutschmidt and O. Gottlieb, Nonlinear dynamic behavior of a microbeam array subject to parametric actuation at low, medium and large DC-voltages, *Nonlin. Dyn.* **67**, 1 (2012).


- [65] A. J. Dick, B. Balachandran, and C. D. Mote, Intrinsic localized modes in microresonator arrays and their relationship to nonlinear vibration modes, *Nonlin. Dyn.* **54**, 13 (2008).
- [66] D. Bitar, N. Kacem, N. Bouhaddi, and M. Collet, Collective dynamics of periodic nonlinear oscillators under simultaneous parametric and external excitations, *Nonlin. Dyn.* **82**, 749 (2015).
- [67] M. Sato, T. Nakaguchi, T. Ishikawa, S. Shige, Y. Soga, Y. Doi, and A. J. Sievers, Supertransmission channel for an intrinsic localized mode in a one-dimensional nonlinear physical lattice, *Chaos Interdisc. J. Nonlin. Sci.* **25**, 103122 (2015).

Forward and backward propagating breathers in a DNA model with dipole-dipole long-range interactions

Carlos Lawrence Gninzanlong,^{1,*} Frank Thomas Ndjomatchoua^{2,†} and Clément Tchawoua^{1,‡}

¹*Department of Physics, Faculty of Science, University of Yaoundé 1, P.O. Box 812, Yaoundé, Cameroon*

²*Geospatial Science & Modelling Cluster, Sustainable Impact Platform, International Rice Research Institute (IRRI), DAPO Box 7777-1301, Metro Manila, Philippines*

 (Received 18 July 2019; revised 4 September 2020; accepted 29 October 2020; published 20 November 2020)

The present study explores the existence and orbital stability of discrete bright breathers through the Joyeux-Buyukdagli DNA model incorporating long-range interactions (LRIs). The nonlinear Schrödinger equation is derived from a semidiscrete approximation and subsequently used to construct the targeted initial condition for numerical computations of the discrete breather. It appears that the interplay between the carrier wave frequency and the LRI induces stationary forward or backward propagating waves. For critical values of the LRI, stationary waves can occur out of the center/edge of the first Brillouin zone. The predicted breathers differ in their robustness and mobility for specific carrier-wave frequency and LRI. In all cases, semianalytical predictions agree with numerical simulations.

DOI: [10.1103/PhysRevE.102.052212](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.052212)

I. INTRODUCTION

In physics it is now commonly accepted that, without a break of translational invariance by an impurity or disorder, energy localization can occur in a system under the form of an intrinsic localized mode solely due to nonlinearity [1–4]. The discrete breather (DB) [also termed the intrinsic localized mode (ILM)] is a solution that is spatially localized as well as temporally periodic in a spatially discrete system [1–4]. DBs have been extensively studied numerically and experimentally in various practical nonlinear systems [1–4]. Although they have the propensity to be strongly pinned at a specific location of the lattice, they can also move easily under some circumstances while maintaining their localization [5,6]. Although DBs are mainly investigated in short-range lattice systems having, typically, nearest-neighbor interaction [1–4], they are also observed in next-nearest-neighbor interacting systems [7–9]. Another family, termed long-range interacting systems, can also form lattice structures such as Fermi-Pasta-Ulam systems [10–12], vortices of plasmas [13,14], a photonic crystal waveguide [15,16], fluids [17], a magnetic chain [18], and DNA [19–25].

The DNA molecule belongs to the class of biopolymers, and it has a very important biological function. It supports genetic information and allows the transmission of this information from cell to cell and from one generation to another via replication and transcription or recombination processes [26–28]. It is a biomolecule in which nonlinearity, localization, and energy transfer emerge as prevailing regulatory factors [27,28]. It is also an appealing playground to study

the effect of long-range forces, because the hydrogen bond responsible for the DNA interbase coupling has a finite dipole moment and produces long-range interaction (LRI) forces [19–25]. Most of the nonlinear wave studies of LRI in DNA are based on the Peyrard-Bishop (PB) model [19–25]. The PB model was refined by Joyeux and Buyukdagli (JB) to have phase-transition curves in agreement with experimental observations and to ensure a sharp melting transition [29,30]. The nonlinear DNA model developed by JB was previously used to study quasicontinuum compactons, fractional breathers, and DBs without LRI [31–35]. Therefore, in order to deal with a more realistic DNA model, a modified version of the JB model including LRI is selected as the core model in this study.

Nonlinear models can correctly predict the regions where a DNA molecule is more likely to open [36]. In addition, breathing modes that can be evidenced analytically/numerically through such models are presently widely accepted to be at the initiation of transcription in DNA [27,28]. This biomolecule has thus drawn considerable interest in the community of nonlinear physicists [19–25,27–35].

There are two dominant pictures for the computational studies of breathing mode dynamics in DNA. The first one uses the low amplitude and weakly nonlinear approximation in order to get the nonlinear Schrödinger (NLS) equation and to estimate the breather solution [27,28]. Although this quasicontinuum multiscale approximation appears to provide an analytically tractable wave amplitude profile [27,28], this continuum of initial breathers is unstable compared to its discrete analog [37]. The second picture shows how to compute the exact solution numerically starting with a chosen initial condition from the anticontinuous limit (i.e., the solution of the uncoupled lattice dynamics), and “*continue*” it using the Newton-Raphson method up to some specified value of the neighbor coupling constant [19–21,25]. Both approaches have considerable challenges: (i) the solution of the first picture is

*gcarloslawrence@yahoo.fr

†ftndjomatchoua@gmail.com

‡ctchawa@yahoo.fr

quasidiscrete, though the real DNA is discrete; (ii) the finding of the solution during the estimate of the discrete analog with the second picture is somewhat challenging due to numerous possibilities to select the initial spatial configuration for numerical computation of the exact DB after obtaining the anticontinuous solution. To overcome the previously mentioned challenges, the procedure for estimating the DB in this study begins with the standard NLS-model reduction to identify the initial *ansatz* analytically and then subsequently estimate the true nonlinear DB solutions numerically [38–40]. To the best of our knowledge, this has yet to be done in the study of nonlinear lattices with LRI [10–14,17–25,41,42].

In the past decade, it was demonstrated that a decrease in the carrier wave frequency in the first Brillouin zone induces a negative sign of the group velocity and can subsequently lead to the emergence of backward wave propagation [38,43–45]. It was further demonstrated that backward or forward waves can be obtained just by varying a system parameter without changing the overall system structure; this is termed chameleon behavior (CB) [46]. Although the study of nonlinear dynamics and solitons in LRI systems was first conducted several decades ago (e.g., Tchawoua *et al.* [47] and Remoissenet *et al.* [48]), and more recently (e.g., [10–14,17–25,41,42]), to best of our knowledge the CB has yet to be reported in LRI models. The present study explored the possibility of observing CB in a LRI system as well as analyzing breather orbital stability.

Following the Introduction (Sec. I), the rest of the present paper is structured as follows: In Sec. II, the model object of our study is introduced. It is a modification of the JB DNA model [29,30], with the incorporation of a LRI term due to dipole-dipole interactions. After derivation of the lattice-dynamics equations, the semidiscrete approximation is applied, the NLS equation is derived and the approximate analytical solution is obtained. In Sec. III, the DB is obtained and its stability is verified. Following Cuevas *et al.* [19–22], the effect of the LRI variation of the DNA model is systematically investigated while conducting an analysis. In Sec. IV, the obtained results are discussed, and the study ends with a summary and concluding remarks (Sec. V).

II. THE MODEL

The version of the JB model considered here consists of adding an energy term to the original Hamiltonian [29,30] that takes into account LRI due to the dipole-dipole forces. The Hamiltonian of the JB model can be rewritten as

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_n H_n, \\
 H_n &= \frac{1}{2m} p_n^2 + D[1 - \exp(-ay_n)]^2 \\
 &+ \frac{\Delta H}{C_J} [1 - \exp(-b(y_n - y_{n-1})^2)] + K_b(y_n - y_{n-1})^2 \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\kappa \neq n} \frac{q^2}{4\pi \epsilon_0 d^3} \frac{1}{|\kappa|^3} y_{n+\kappa} y_n. \tag{1}
 \end{aligned}$$

This Hamiltonian corresponds to the case of a homogeneous DNA molecule in which dipole moments are parallel

and point all in the same direction. In Eq. (1), $P_n = m\dot{y}_n$ is the momentum, y_n represents the transverse stretching of the nucleotide pair at site n , and m denotes the mass of a nucleotide. The variables D and a are, respectively, the depth and inverse width of the Morse potential, ΔH is a finite stacking energy, b is the spatial scale factor, and K_b is a harmonic elastic constant. The last term (LRI) in Eq. (1), which was not considered in the JB model [29,30], has the following coefficients: d is the distance between consecutive neighboring base pairs in the same strand, and q is the charge transfer due to the stretching of hydrogen bonds [19–22]. The LRI is limited to $(N - 1)/2$ neighboring base pairs if N is odd or to $(N - 2)/2$ neighboring base pairs in each direction of a given site of the chain if N is even [19–22]. The dimensionless equation of motion corresponding to the Hamiltonian Eq. (1) is

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 Y_n}{d\tau^2} + \frac{2K_b}{a^2 D} (2Y_n - Y_{n+1} - Y_{n-1}) \\
 + \frac{1}{a^2 D} \sum_{\kappa \neq n} J_\kappa Y_{n+\kappa} \\
 + \frac{2b\Delta H}{a^2 DC_J} \left[(Y_n - Y_{n-1}) e^{-\frac{b}{a^2} (Y_n - Y_{n-1})^2} \right] \\
 - \frac{2b\Delta H}{a^2 DC_J} \left[(Y_{n+1} - Y_n) e^{-\frac{b}{a^2} (Y_{n+1} - Y_n)^2} \right] \\
 - 2(e^{-Y_n} - 1)e^{-Y_n} = 0, \tag{2}
 \end{aligned}$$

where $Y_n = ay_n$, $\tau = t\sqrt{a^2 D/m}$, and $J_\kappa = \frac{q^2}{4\pi \epsilon_0 d^3 |\kappa|^3}$. The coupling constant J_κ is related to the charge transfer due to the formation of the hydrogen bonds (q) and the distance between base pairs (d). The subscript κ is the normalized distance between base pairs [19–22].

Following the original approach in [49], it is assumed that the oscillations of bases are large enough to be anharmonic, but still insufficient to break the bond since the plateau of the Morse potential is not reached. It is then presumed that the base nucleotides oscillate around the bottom of the Morse potential. On the one hand, the wave amplitude is considered large enough, so that the nonlinear effects that play an essential role in the DNA dynamics can be incorporated [27,28]. On the other hand, it is still very small compared with the motions that result in permanently open states where the nucleotides reach the plateau of the Morse potential. We can therefore expand the terms $\exp[-\frac{b}{a^2} (Y_{n\pm 1} - Y_n)^2]$ and $\exp[-Y_n]$ in Eq. (2) up to second and third order, respectively [31–35]. The corresponding equation of motion is

$$\begin{aligned}
 \ddot{Y}_n - k_2(Y_{n+1} - 2Y_n + Y_{n-1}) + \omega_g^2(Y_n - \alpha Y_n^2 + \beta Y_n^3) \\
 + k_4[(Y_{n+1} - Y_n)^3 - (Y_n - Y_{n-1})^3] \\
 + \sum_{\kappa} \hat{J}_\kappa Y_{n+\kappa} = 0, \tag{3}
 \end{aligned}$$

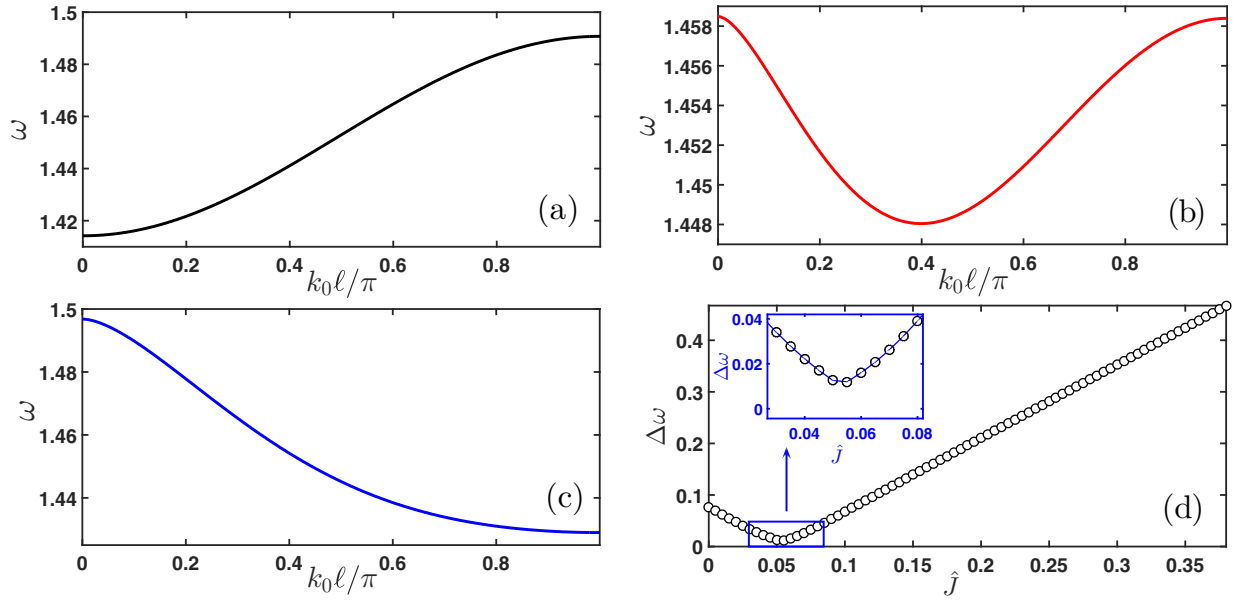


FIG. 1. The linear dispersion relation showing the pulsation ω as a function of the wave number k_0 in the first Brillouin zone for different values of \hat{J} : (a) $\hat{J} = 0$, (b) $\hat{J} = 0.053$, and (c) $\hat{J} = 0.1$. (d) Variation of the allowed phonon band according to \hat{J} .

with the coefficients

$$k_2 = \frac{2}{a^2 D} \left(K_b + \frac{b \Delta H}{C_J} \right), \quad k_4 = \frac{2 \Delta H b^2}{C_J D a^4}, \quad \omega_g^2 = 2, \quad (4)$$

$$\hat{J}_\kappa = \begin{cases} \frac{\hat{J}}{|\kappa|^3} & \text{for } 1 \leq |\kappa| \leq (N-1)/2, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad \alpha = \frac{3}{2},$$

$$\beta = \frac{7}{6}, \quad \hat{J} = \frac{q^2}{4\pi \varepsilon_0 a^2 d^3 D},$$

where $|\kappa|$ is the normalized distance between base pairs. The used parameters are $m = 300$ amu, $D = 0.04$ eV, $a = 4.45$ Å⁻¹, $b = 0.10$ Å⁻², $\Delta H = 0.44$ eV, $K_b = 10^{-5}$ eV Å⁻², $d = 3.4$ Å, $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$ Fm⁻¹, and $C_J = 2$ [19–22,29,30].

A. Linear analysis

By keeping only linear terms in Eq. (3), a plane-wave solution is assumed in the form $Y_n(\tau) = A \exp[i(k_0 n \ell - \omega \tau)]$, where A is the constant amplitude, ℓ is the distance separating neighboring bases, and ω and k_0 denote the angular frequency and the wave number, respectively. The substitution of the previously mentioned plane-wave ansatz into Eq. (3) leads to the following linear dispersion relation:

$$\omega^2 = \omega_g^2 + 4k_2 \sin^2 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right) + 2\hat{J} \sum_m \frac{\cos(k_0 m \ell)}{m^3}. \quad (5)$$

By using Eq. (5), the angular frequency ω is plotted as a function of the wave number k_0 in the first Brillouin zone ($k_0 \in [0, \pi/\ell]$ [50]) for three different values of \hat{J} (see Fig. 1). It can be noticed that the dipole-dipole coupling constant prominently shapes the regions for the allowed/forbidden band-gap frequencies. For certain values of \hat{J} , the dispersion curve has a positive [Fig. 1(a)], a negative [Fig. 1(c)], or a

mixed [Fig. 1(b)] slope. As the group velocity (v_g) of the wave is linked with the dispersion relation, the sign of the slope of the dispersion curve gives an indication about the sign of v_g . From Eq. (5), the group velocity is derived as follows:

$$v_g \equiv \frac{\partial \omega}{\partial k_0} = \frac{1}{\omega} \left[k_2 \ell \sin(k_0 \ell) - \hat{J} \ell \sum_m \frac{\sin(k_0 \ell m)}{m^2} \right]. \quad (6)$$

The variable v_g is null if $\hat{J} = \hat{J}_{cr}(k_0)$, positive if $\hat{J} < \hat{J}_{cr}(k_0)$, and negative if $\hat{J} > \hat{J}_{cr}(k_0)$. The variable $\hat{J}_{cr}(k_0)$ is the critical value of the dipole-dipole coupling interaction and is given by $\hat{J}_{cr}(k_0) = k_2 \ell \sin(k_0 \ell) / \sum_m [\sin(k_0 \ell m) / m^2]$. The variation of $\hat{J}_{cr}(k_0)$ according to the wave vector k_0 is depicted in Fig. 2. Figure 2 not only confirms the prediction made on Fig. 1(b) (namely that for $k_0 \ell < 0.4\pi$ the group velocity is negative, while it is positive for $k_0 \ell > 0.4\pi$), but it also shows that it is possible to obtain waves with null group velocity apart from

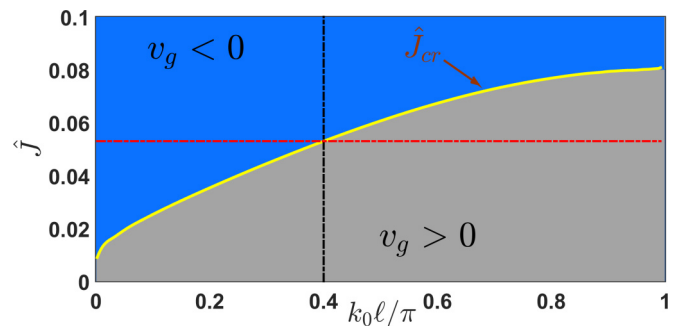


FIG. 2. Critical dipole-dipole coupling constant \hat{J}_{cr} as a function of wave vector k_0 . The zone colored in gray (or in blue) in this figure represents the parameter region for a positive (or negative) group velocity.

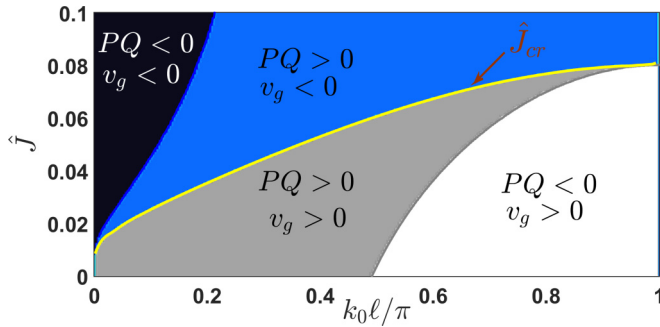


FIG. 3. Chart of the existence of bright and dark solitons as well as the sign of the group velocity as a function of the wave vector and the dipole-dipole coupling constant.

the center ($k_0\ell = 0$) and the upper limit ($k_0\ell = \pi$) of the first Brillouin zone.

B. Nonlinear analysis

Due to the fact that the mathematical model of Eq. (3) is less straightforward to tackle directly, the semidiscrete (or quasicontinuum) approximation is adopted [53,54]. The approach assumes that the solution of Eq. (3) is under the form

$$Y_n(\tau) = \varepsilon F_1(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)e^{i\theta_n} + \varepsilon^2[F_0(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau) + F_2(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)e^{2i\theta_n}] + \text{c.c.} + O(\varepsilon^3), \quad (7)$$

where $\theta_n = n\ell k_0 - \omega\tau$, $F_1(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)$, and $F_2(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)$ are complex functions and c.c. is their complex conjugate, $i^2 = -1$, $F_0(\varepsilon n\ell, \varepsilon\tau)$ is a real function, ω and k_0 denote the carrier's frequency and wave number, respectively, and ε is a formal small parameter. By inserting Eq. (7) into Eq. (3) and collecting the terms in different orders of ε and $e^{i\theta_n}$, the functions F_0 and F_2 can be expressed as functions of F_1 :

$$F_0 = \mu|F_1|^2, \quad F_2 = \delta F_1^2, \quad \mu = \frac{2\alpha\omega_g^2}{\omega_g^2 + 2\hat{J}\sum_m \frac{1}{m^3}},$$

$$\delta = \frac{\alpha\omega_g^2}{\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2(k_0\ell) - 4\omega^2 + 2\hat{J}\sum_m \frac{\cos(2k_0\ell m)}{m^3}}. \quad (8)$$

$$Y_n(\tau) = 2\varepsilon \sqrt{\frac{2P}{Q}} u_0 \operatorname{sech}\{\varepsilon u_0[n\ell - (v_g + 2\varepsilon PL_0)\tau]\} \times \left\{ \cos\{(\varepsilon L_0 + k_0)n\ell - [\omega + \varepsilon L_0 v_g + \varepsilon^2 P(L_0^2 - u_0^2)]\tau\} \right.$$

$$\left. + 2\varepsilon^2 \left(\frac{2P}{Q}\right) u_0^2 \operatorname{sech}^2\{\varepsilon u_0[n\ell - (v_g + 2\varepsilon PL_0)\tau]\} \times \left\{ \frac{\mu}{2} + \delta \cos\{2(\varepsilon L_0 + k_0)n\ell - 2[\omega + \varepsilon L_0 v_g + \varepsilon^2 P(L_0^2 - u_0^2)]\tau\} \right\} \right\}, \quad (12)$$

with u_0 and L_0 constants of integration.

To validate the previous analytical approximation, the discrete equation (2) is numerically integrated by means of the standard fifth-order Runge-Kutta scheme with periodic boundary conditions, and a time step chosen small enough to conserve the energy of the system. The initial conditions $Y_n(\tau = 0)$ and $\dot{Y}_n(\tau = 0)$ for numerical integration are derived from Eq. (12). The other constants necessary for this simulation are $\varepsilon = 0.1$, $\ell = 1$, $u_0 = 1$, and $L_0 = 0$. The re-

By using Eq. (8), one can show that F_1 is a solution of the nonlinear Schrödinger (NLS) equation [31,33]:

$$i \frac{\partial F_1}{\partial \tau} + P \frac{\partial^2 F_1}{\partial \eta^2} + Q|F_1|^2 F_1 = 0, \quad (9)$$

where the coefficients of dispersion (P) and nonlinearity (Q) are

$$P = \frac{1}{2\omega} \left[k_2 \ell^2 \cos(k_0\ell) - v_g^2 - \hat{J} \ell^2 \sum_m \frac{\cos(k_0\ell m)}{m} \right], \quad (10)$$

$$Q = \frac{1}{2\omega} \left[-\omega_g^2 [3\beta - 2\alpha(\delta + \mu)] + 48k_4 \sin^4\left(\frac{k_0\ell}{2}\right) \right], \quad (11)$$

with the group velocity (v_g) given in Eq. (6), and $\eta = \varepsilon(n\ell - v_g\tau)$ is the rescaled space variable. It is well known that the NLS equation possesses soliton solutions whose specific nature is governed by the signs of the coefficients P and Q [53–56]. In particular, if $PQ > 0$, the NLS equation supports bright soliton solutions, while for $PQ < 0$ it supports dark soliton solutions [53–56]. In the case under consideration, the signs of the coefficients P and Q for Eq. (9) depend not only on the frequency ω but also on the dipole-dipole coupling constant \hat{J} . The sign of the product PQ as a function of k_0 and \hat{J} is depicted in Fig. 3. It can be noticed that the dipole-dipole coupling constant influences considerably the types of solitons. For the absence or very low values of the LRI ($\hat{J} \leq 0.01235$), the system supports only forward propagating breathers. For $\hat{J} \in [0.01235, 0.08133]$, there are possibilities to have both forward and backward waves. When $\hat{J} > 0.08133$, only the backward waves (pulse/dark) exist in the system. Therefore, various soliton solutions (pulse or dark) with positive (forward wave) or negative (backward wave) group velocity emerge from specific values of the wave vector and LRI. Thus, the LRI enriches the system dynamics.

Bright breatherlike modes can mimic and match the experimentally observed local fluctuational opening as well as bubbles propagating along the DNA lattice [27,28]. The analysis of the present study is therefore restricted to the particular case $PQ > 0$.

By using the known analytical pulse soliton solution of Eq. (9) [53–56], and the relations given by Eq. (8), the resulting solution from the ansatz Eq. (7) is

sults are displayed in Figs. 4 and 5. In the panels of Fig. 4, $\hat{J} = 0.02$ and $k_0\ell = 0.45\pi$. This value of the wave vector corresponds to the forward bright solution analytically predicted in Fig. 3 (case $PQ > 0$, $v_g > 0$). Panel (a) of Fig. 4 shows the spatiotemporal dynamic of the breather, while panel (b) shows the snapshot evolution of the analytical solution given by Eq. (12) (gray line) as well as the numerical solution (gray circle) at time $\tau = 1000$, which demonstrates a good agreement with our analytical predictions. However, since

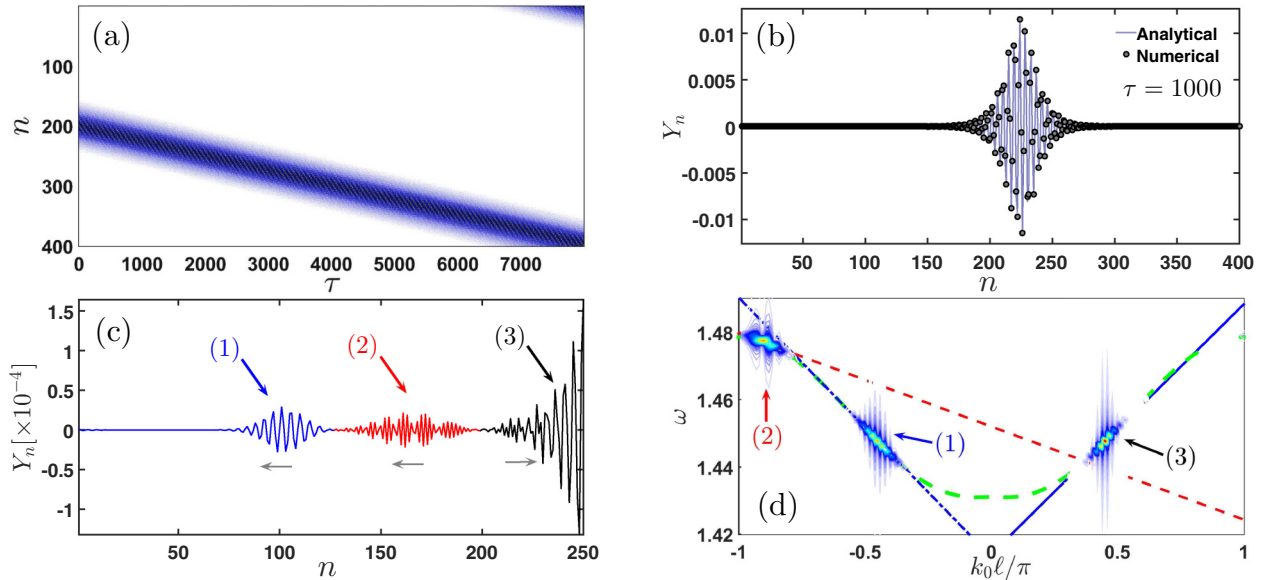


FIG. 4. Spatial and temporal evolution of the breather [panel (a)] and the snapshots of the evolution of the analytical/numerical solution [panel (b)] of the forward wave solution of Eq. (2) for $\hat{J} = 0.02$ and $k_0\ell = 0.45\pi$. Panel (c) represents only the zoom of the numerical solution given out in panel (b) at time $\tau = 4000$ and for $n \in [1, 250]$, where we observe two very-low-amplitude quasilinear wave packets [indexed by (1) and (2)], which move in the opposite direction of the initial excitation indexed by (3). Panel (d) represents the 2D DFT [see Eq. (14)] of the moving breather given in panel (a). The green dashed curve is the linear dispersion curve given by Eq. (5) while the line is for $\omega^{(p)} = \omega_c^{(p)} + \mathcal{V}^{(p)}(k_0 - k_c^{(p)})$ ($p = 1, 2, 3$) with $k_c^{(1)} = -0.45\pi$, $\omega_c^{(1)} \approx 1.448$, $\mathcal{V}^{(1)} \approx -2.4551 \times 10^{-2}$ (blue dotted line), $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(2)} \approx 1.477$, $\mathcal{V}^{(2)} \approx -8.8176 \times 10^{-3}$ (red dotted line), and $k_c^{(3)} = -k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(3)} = \omega_c^{(1)}$, $\mathcal{V}^{(3)} = -\mathcal{V}^{(1)}$ for the blue line. To see clearly the emitted waves (1) and (2) of panel (c) in the 2D DFT, we magnified each of those waves by 500.

the obtained solution given in Eq. (12) is the approximative solution for the real discrete system, the space-time evolution of the breather will generate tails of oscillations or relatively

small nonlinear/quasilinear extended waves called wings [57]. A zoom of the solution in Fig. 4(c) illustrates that the propagation of the main nonlinear wave indexed by (3) radiates

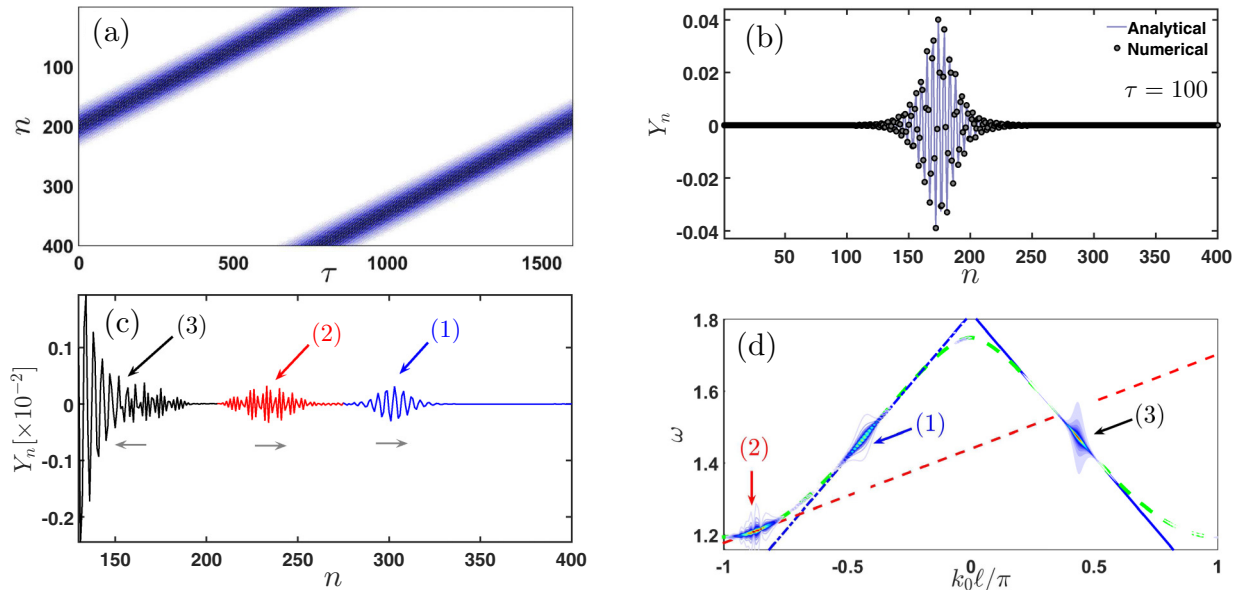


FIG. 5. Spatial and temporal evolution of the breather [panel (a)] and the snapshots of the evolution of the analytical/numerical solution [panel (b)] of the backward wave solution of Eq. (2) for $\hat{J} = 0.442$ and $k_0\ell = 0.4337\pi$. Panel (c) represents only the zoom of the numerical solution given out in panel (b) at time $\tau = 400$ and for $n \in [130, 400]$, where we observe two very-low-amplitude quasilinear wave packets [indexed by (1) and (2)] which move in the opposite direction of the initial excitation indexed by (3). Panel (d) represents the 2D DFT [see Eq. (14)] of the moving breather given in panel (a). The green dashed curve is the linear dispersion curve given by Eq. (5), while the line is for $\omega^{(p)} = \omega_c^{(p)} + \mathcal{V}^{(p)}(k_0 - k_c^{(p)})$ ($p = 1, 2, 3$) with $k_c^{(1)} = -0.4337\pi$, $\omega_c^{(1)} \approx 1.467$, $\mathcal{V}^{(1)} \approx +0.2562$ (blue dotted line), $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(2)} \approx 1.212$, $\mathcal{V}^{(2)} \approx +8.3632 \times 10^{-2}$ (red dotted line), and $k_c^{(3)} = -k_c^{(1)}$, $\omega_c^{(3)} = \omega_c^{(1)}$, $\mathcal{V}^{(3)} = -\mathcal{V}^{(1)}$ for the blue line. To see clearly the emitted waves (1) and (2) of panel (c) in the 2D DFT, we magnified each of those waves by 75.

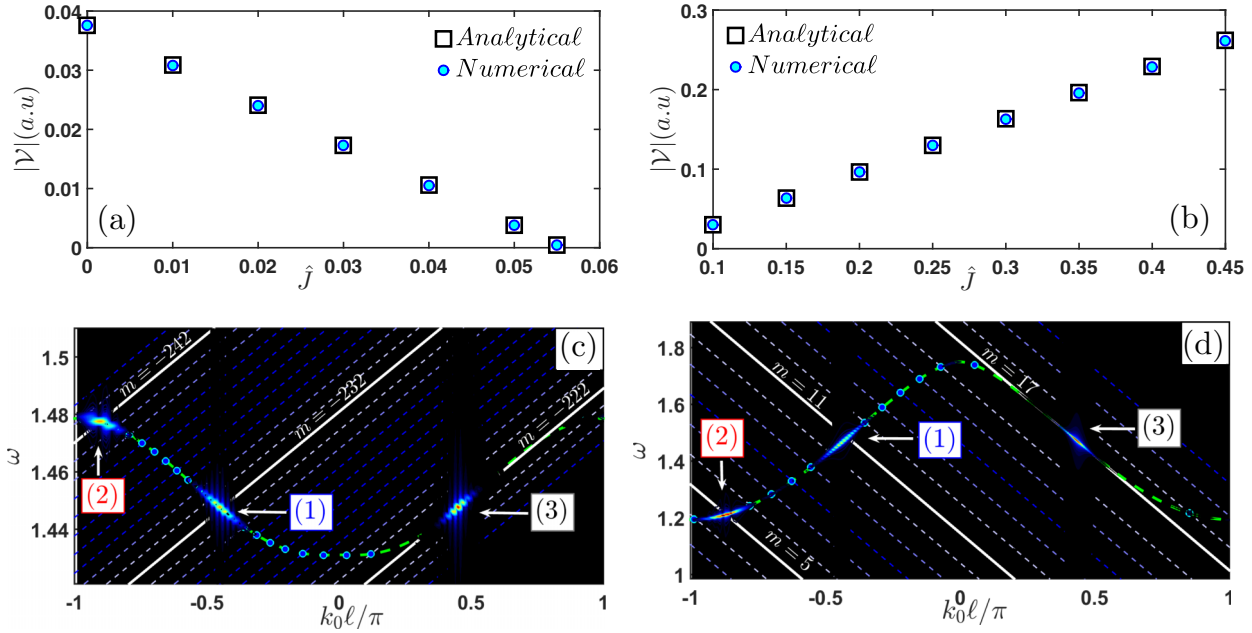


FIG. 6. (a), (b) Variation of the breather velocity as a function of the LRI. The analytical velocity stands for the group velocity v_g [Eq. (6)] while its numerical analog [Eq. (13)] is computed after solving the full discrete system given by Eq. (2). For all these panels, $k_0 \ell = 0.4337\pi$. (c), (d) 2D DFT of waves (1), (2), and (3) of Figs. 4(c) and 5(c) as well as the lines and intersection points of breather (3) with phonon mode.

two very-low-amplitude wave packets [indexed by (1) and (2)], which both move in the opposite direction of the initial excitation. To know if waves (1) and (2) of Figs. 4(c) and 5(c) are nonlinear or quasilinear waves, it would be judicious to perform the two-dimensional discrete Fourier transform of the moving breather.

C. Two-dimensional discrete Fourier transform

It is well known that certain information and characteristics of a signal that are hidden in the spatiotemporal domain (n, τ) can be emphasized in the frequency domain (k_0, ω) . To explore in-depth the response of the discrete lattice, the two-dimensional discrete Fourier transform (2D DFT) of the solution given by Eq. (12) is used. The traveling breather in the frequency domain moves along a line $\omega = \omega_c + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$ in (k_0, ω) space, where k_c and ω_c are, respectively, the frequency and wave number of a carrier wave [58]. The variable \mathcal{V} is the velocity (slope) of the moving wave, and it can be numerically estimated through Eqs. (13):

$$\mathcal{V} = \frac{1}{\mathcal{T}} \sum_{k=1}^{\mathcal{T}_k} \dot{\mathcal{Y}}(\tau_k), \quad \mathcal{Y}(\tau_k) = \frac{\sum_{n=1}^N n Y_n^2(\tau_k)}{\sum_{n=1}^N Y_n^2(\tau_k)}, \quad (13)$$

where \mathcal{T} is the simulation duration, \mathcal{T}_k the number of time steps, and $\mathcal{Y}(\tau_k)$ is the evolution of the pseudocenter of mass of the breather [51].

By using the 2D DFT formula below [58],

$$\tilde{Y}(k_0, \omega) = \sum_{p=0}^{\tau_p=\tau N-1} \sum_{q=0}^{N-1} Y_q(\tau_p) \exp[-i(k_0 \ell x_q - \omega \tau_p)], \quad (14)$$

the moving breather dynamics are represented in Figs. 4(d) and 5(d). The breather amplitude $|\tilde{Y}(k_0, \omega)|$ is displayed

by a heat map [low (blue) to red (high) values], and the green dashed curve is the linear dispersion curve given by Eq. (5).

The analysis of Fig. 4(d) shows that the breather velocity ($\mathcal{V}^{(3)} \approx 2.4551 \times 10^{-2}$) is almost equal at the group velocity ($v_g \approx 2.4603 \times 10^{-2}$), and the direction of propagation of the breather is according to the line $\omega^{(3)} = \omega_c^{(3)} + \mathcal{V}^{(3)}(k_0 - k_c^{(3)})$ (given by the solid blue curve) with $\omega_c^{(3)} \approx 1.448$ and $k_c^{(3)} = 0.45\pi$. It is noticed that the velocity of the breather decreases or increases for lower or higher values of the LRI coefficient, respectively [Figs. 6(a) and 6(b)].

The same observation is made in Fig. 5(d), where the breather propagation follows the line $\omega^{(3)} = \omega_c^{(3)} + \mathcal{V}^{(3)}(k_0 - k_c^{(3)})$ with $k_c^{(3)} = 0.4337\pi$, $\omega_c^{(3)} \approx 1.467$, and $\mathcal{V}^{(3)} \approx -0.2562$ while $v_g \approx -0.2565$.

Careful analysis and observation during evolution of wave (1) in Fig. 4(c) reveals that it is a very low nonlinear wave propagating symmetrically but in the opposite direction to the wave (3). Indeed, its 2D DFT shows that it follows the line given by $\omega^{(1)} = \omega_c^{(1)} + \mathcal{V}^{(1)}(k_0 - k_c^{(1)})$ with $\omega_c^{(1)} \approx 1.448$, $k_c^{(1)} = -0.45\pi$, and $\mathcal{V}^{(1)} = -2.4551 \times 10^{-2}$. By carrying out a similar analysis to wave (2), we see that it is a quasilinear wave that propagates along the line $\omega^{(2)} = \omega_c^{(2)} + \mathcal{V}^{(2)}(k_0 - k_c^{(2)})$ with $\omega_c^{(2)} \approx 1.477$, $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, and $\mathcal{V}^{(2)} = -8.8176 \times 10^{-3}$. It should be noted that wave (1) keeps its shape and speed almost constant for a fairly long evolution time, while wave (2) disappears for the same time. The analysis performed for the case of Fig. 4(c) can be transposed to Fig. 5(c) with $\omega_c^{(1)} \approx 1.467$, $k_c^{(1)} = 0.4337\pi$, $\mathcal{V}^{(1)} = +0.2562$, $\omega_c^{(2)} \approx 1.212$, $k_c^{(2)} = 2k_c^{(1)}$, and $\mathcal{V}^{(2)} = +8.3632 \times 10^{-2}$. It should be noted that in order to be able to observe the waves (1) and (2) in the plane (ω, k_0) , we have magnified them by 500 (for the case of Fig. 4) and by 75 (for the case of Fig. 5).

D. Resonant breather with the phonon band

The moving approximated solution given by Eq. (12) repeats itself after a time $\tau' = \tau + qT_b$, but it shifts from its initial position ($n' \rightarrow n \pm p$), with p, q integers and $T_b = 2\pi/\omega_b$ the breather period. This approximate solution could be resonant with the phonon mode. These resonant (p/q) moving breathers would then obey the following relation:

$$Y_{n\pm p}(\tau + qT_b) = Y_n(\tau), \quad \forall n. \quad (15)$$

Given that this breather would resonate with the plane wave of phonon modes, we could then apply *the plane-wave ansatz* (see Sec. II A) to Eq. (15), which leads to the condition [67]

$$\frac{\omega}{\omega_b} = \frac{1}{q} \left[\pm \left(\frac{k_0 \ell}{2\pi} \right) p - m \right], \quad (16)$$

with ω_b the breather frequency, m being any integer, and ω is given in Eq. (5). By using the values of the pair (k_0, ω) corresponding to the line of breather propagation on the one hand and the Gauss-Newton method on the other hand, it is possible to obtain the integers p, q , and m associated with the corresponding moving breather. Once p, q , and m have been obtained, it then becomes possible to calculate in a more general way all the values of m by combining Eqs. (16) and (5) through

$$m = \pm \left(\frac{k_0 \ell}{2\pi} \right) p \mp \frac{q}{\omega_b} \times \sqrt{\omega_g^2 + 4k_2 \sin^2 \left(\frac{k_0 \ell}{2} \right) + 2\hat{J} \sum_s \frac{\cos(k_0 \ell s)}{s^3}}, \quad (17)$$

as well as the intersection points with the phonon band (k_{0j}, ω_j) .

Figures 6(c) and 6(d) give the 2D DFT of the solutions shown in Figs. 4(a) and 5(a), respectively. We can see in these figures that the small wave amplitudes (1) and (2) highlighted in Figs. 4(c) and 5(c) originate from the resonance of breather (3) with the phonon mode as evidenced by the oblique white line. The dashed lines (which are the intersection lines) as well as the blue filled circles (which are the intersection points) come from Eqs. (17) and (16).

The diagram displayed in Fig. 3 shows that for $\hat{J} \in [0.01235, 0.08133]$, it is possible to have a coexistence of bright breathers having positive, negative, or null group speeds depending on the wave vector k_0 . Consequently, one can expect to have an interaction (collision) between the forward, backward, and stationary waves. To verify this, Eq. (2) is simulated with superpositions of initial conditions derived from Eq. (12), and corresponding to the forward, backward, or stationary propagating breather solution. The results of these simulations are displayed in Fig. 7, showing four types of collision: the forward-forward collision [Fig. 7(a)], the backward-backward collision [Fig. 7(b)], the forward-backward collision [Fig. 7(c)], and the forward-stationary-backward collision [Fig. 7(d)]. Figure 7 confirms the prediction made in Fig. 3 and shows that after the interaction (collision) of the various solutions, emergent breathers maintain their shapes and speeds (a key characteristic of a soliton [54]).

III. IDENTIFYING STATIONARY DISCRETE BREATHERS

The NLS-model reduction is used to identify an initial ansatz of an approximate soliton solution, subsequently introduced in the original dynamical lattice to assess its potential robustness. In contrast to previous studies of breathers in DNA [27,28,31–33], here we do not restrict our considerations to that. We went a step further toward a numerical calculation of the “true” nonlinear bright breather solutions (up to a prescribed numerical accuracy) and assessing their spectral stability.

It was demonstrated that breathers of small amplitude that are highly localized describe the information transfer in DNA [27,28]. Thus, the low amplitude breather solution estimated in the previous section through a perturbation approach can be a good initial profile in our quest for the exact DB. Our attention here will be focused on the discrete bright breatherlike solutions, which means that the following conditions must be satisfied:

$$Y_n(\tau) = Y_n \left(\tau + \frac{2\pi}{\omega_b} \right), \quad \lim_{|n| \rightarrow \infty} Y_n = 0. \quad (18)$$

Here, ω_b and $T_b = 2\pi/\omega_b$ are the DB frequencies and periods, respectively. It should be noted that these solutions exist if and only if the condition of nonresonance with the phonon modes is fulfilled, namely $z \times \omega_b \neq \omega(\hat{J}, k_0)$, where $\omega(\hat{J}, k_0)$ is the linear spectrum frequency of the system given by Eq. (5), and z is an integer [1–4]. Various methods can be used to find the DB solutions to Eq. (2). In this study, the iterative Newton-Raphson method, which makes possible the obtention of the discrete breatherlike solutions with a relatively high accuracy, is employed [59]. The true challenge of the Newton-Raphson method resides in the suitable choice of the initial condition. Indeed, it is well known that when this initial condition is not close to the sought solution, the method does not converge [59]. Since we are interested in discrete bright breathers, we will use the procedure of Refs. [38–40]. For this purpose, the NLS bright soliton solution estimated in Eq. (12) is used as the initial condition for the Newton-Raphson method to estimate numerically the exact periodic motion.

As the initial solution is static, a standing-wave profile ($v_g = 0$) can be determined with values of the wave number k_0 and \hat{J} suitably chosen [solving the equation $v_g = 0$ based on Eq. (6)]. In addition, since the solution with the typical exponential decay amplitude is supported in the k_0 -parameter range where the product PQ of the NLS equation (9) demonstrates focusing behavior (i.e., $PQ > 0$), Figs. 2 and 3 show the appropriate choices of this wave number, which are $k_0 \ell = 0$ for $\hat{J} \in [0, 0.01235]$, $k_0 \ell = \pi$ for $\hat{J} \in [0.08133, 0.37]$, and for $\hat{J} \in]0.01235, 0.08133[$ for values of $k_0 \ell$ pertaining to \hat{J}_{cr} . The long-range coefficient modifies the allowed bandwidth $\Delta\omega = \omega_{\max} - \omega_{\min}$ of the phonon modes [see Fig. 1(d)]. Thus it appears that values of \hat{J} should be carefully selected.

To fulfill the nonresonance condition, a value of the breather frequency ω_b is suitably chosen such that the second harmonic $2\omega_b$ of this frequency lies above the value of $\omega_{\max}(\hat{J}, k_0)$.

Once the periodic and localized solution $\hat{Y}_n(\tau)$ [condition Eq. (18)] is obtained, it is important to study its stability. For

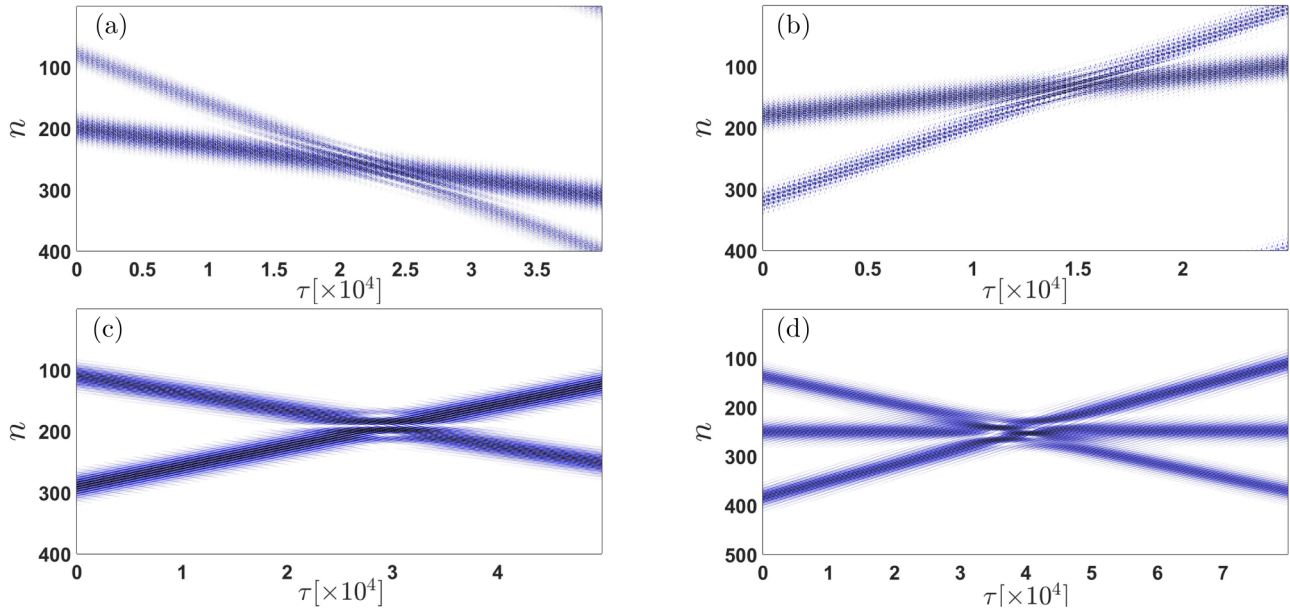


FIG. 7. Contour plot showing four types of spatiotemporal collision of forward and backward waves: (a) Forward-forward collision obtained for $k_1^0 \ell = 0.620\pi$ ($v_{g1} = 8.072 \times 10^{-3}$, $A_{\max 1} = 8.327 \times 10^{-3}$) and $k_2^0 \ell = 0.454\pi$ ($v_{g2} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{\max 2} = 1.602 \times 10^{-2}$); (b) backward-backward collision obtained for $k_1^0 \ell = 0.344\pi$ ($v_{g1} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{\max 1} = 1.788 \times 10^{-2}$) and $k_2^0 \ell = 0.152\pi$ ($v_{g2} = -1.277 \times 10^{-2}$, $A_{\max 2} = 1.035 \times 10^{-2}$); (c) forward-backward collision obtained for $k_1^0 \ell = 0.454\pi$ ($v_{g1} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{\max 1} = 1.602 \times 10^{-2}$) and $k_2^0 \ell = 0.344\pi$ ($v_{g2} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{\max 2} = 1.788 \times 10^{-2}$); (d) forward-stationary-backward collision obtained for $k_1^0 \ell = 0.454\pi$ ($v_{g1} = 2.820 \times 10^{-3}$, $A_{\max 1} = 1.602 \times 10^{-2}$), $k_2^0 \ell = 0.400\pi$ ($v_{g2} = 0$, $A_{\max 2} = 1.721 \times 10^{-2}$), and $k_3^0 \ell = 0.344\pi$ ($v_{g3} = -3.268 \times 10^{-3}$, $A_{\max 3} = 1.788 \times 10^{-2}$). For all these simulations, the value of the dipole-dipole coupling constant is fixed at $\hat{J} = 0.053$. [Note: A_{\max} and v_g stand for maximum amplitude and group velocity of the breather, respectively. The index 1, 2, ... stands for each individual breather during initial superposition. The numerical simulation results [Eq. (2)] and the analytical solution [Eq. (12)] agree. For the sake of clarity, they are not compared as in Figs. 4(b) and 5(b) to avoid an overload of the plotted graphs.]

that purpose, an infinitesimal perturbation $\chi_n(\tau)$ is added to it [$Y_n(\tau) = \hat{Y}_n(\tau) + \chi_n(\tau)$] and the equation of motion (2) is linearized with respect to $\chi_n(\tau)$:

$$\begin{aligned} \ddot{\chi}_n + \frac{2K_b}{a^2 D} (2\chi_n - \chi_{n+1} - \chi_{n-1}) + \sum_{i \neq n} \hat{J}_i \chi_{n+i} \\ + \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} \left[1 - \frac{2b}{a^2} (\hat{Y}_n - \hat{Y}_{n-1})^2 \right] (\chi_n - \chi_{n-1}) \\ \times e^{-\frac{b}{a^2} (\hat{Y}_n - \hat{Y}_{n-1})^2} - \frac{2b\Delta H}{a^2 DC} \left[1 - \frac{2b}{a^2} (\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n)^2 \right] \\ \times (\chi_{n+1} - \chi_n) e^{-\frac{b}{a^2} (\hat{Y}_{n+1} - \hat{Y}_n)^2} \\ + 2(2e^{-\hat{Y}_n} - 1)e^{-\hat{Y}_n} \chi_n = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

To identify the orbital stability of these solutions, Floquet's analysis can be performed. Floquet's method is commonly accepted for the DB stability analysis [2,5]. A solution $\hat{Y}_n(\tau)$ is considered stable when, for any initial conditions, the linear perturbation $\chi_n(\tau)$ does not grow exponentially with time. When $\hat{Y}_n(\tau)$ is time-periodic with period T_b , then Eq. (19) defines a linear map between the initial perturbation at $\tau = 0$ and the perturbation at time $\tau = T_b$, expressed by a matrix $\mathcal{M} = \mathcal{M}(\hat{Y}_n)$, known as the monodromy matrix:

$$\begin{bmatrix} \chi_n \\ \dot{\chi}_n \end{bmatrix}_{\tau=T_b} = \mathcal{M} \times \begin{bmatrix} \chi_n \\ \dot{\chi}_n \end{bmatrix}_{\tau=0}. \quad (20)$$

The complex eigenvalues λ and eigenvectors of the $2N \times 2N$ monodromy matrix \mathcal{M} provide information about the stability of the DB. If all eigenvalues modulus $|\lambda|$ are less than (or equal to) 1, then the DB is linearly (or marginally) stable. Otherwise, perturbation effects persist and grow with time (typically exponentially), leading to a linearly unstable DB.

Parameters used for this numerical simulation whose periodic boundary conditions were used are $N = 50$ and $\varepsilon = 0.8$; other parameters such as u_0 and ℓ are unchanged. Figure 8 gives the representation of the solutions obtained by using Eq. (12) as the initial condition. The parameters used to obtain Figs. 8(a) and 8(b) are $k_0 \ell = 0$ [(a) $\omega_b = 1.40$, $\hat{J} = 0.0$; (b) $\omega_b = 1.40763$, $\hat{J} = 0.011115$]; Figs. 8(c) and 8(d) are obtained for $k_0 \ell = \pi$ [(c) $\omega_b = 1.417$, $\hat{J} = 0.1$; (d) $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$]; while Fig. 8(e) is obtained for $k_0 \ell = 0.0275\pi$, $\omega_b = 1.426$, $\hat{J} = 0.0161$, and Fig. 8(f) for $k_0 \ell = 0.474\pi$, $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J} = 0.05874$. After conducting a Floquet stability analysis of the obtained solution, the eigenvalues of the monodromy matrix are projected on the unit circle (see the inset curves). It appears that both cases $k_0 \ell = 0$ (with $\omega_b = 1.40$, $\hat{J} = 0.0$ or with $\omega_b = 1.40763$, $\hat{J} = 0.011115$) and $k_0 \ell = \pi$ (with $\omega_b = 1.417$, $\hat{J} = 0.1$ or with $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$) give solutions that are linearly stable [see Figs. 8(a)–8(d)]. However, when $\hat{J} = \hat{J}_{cr}(k_0)$, it is observed that for $\hat{J}_{cr} = 0.0161$, the periodic solution of frequency $\omega_b = 1.426$ is linearly stable [see Fig. 8(e)] while the one obtained for $\omega_b = 1.4471$ and $\hat{J}_{cr} = 0.05874$ is linearly unstable [see Fig. 8(f)].

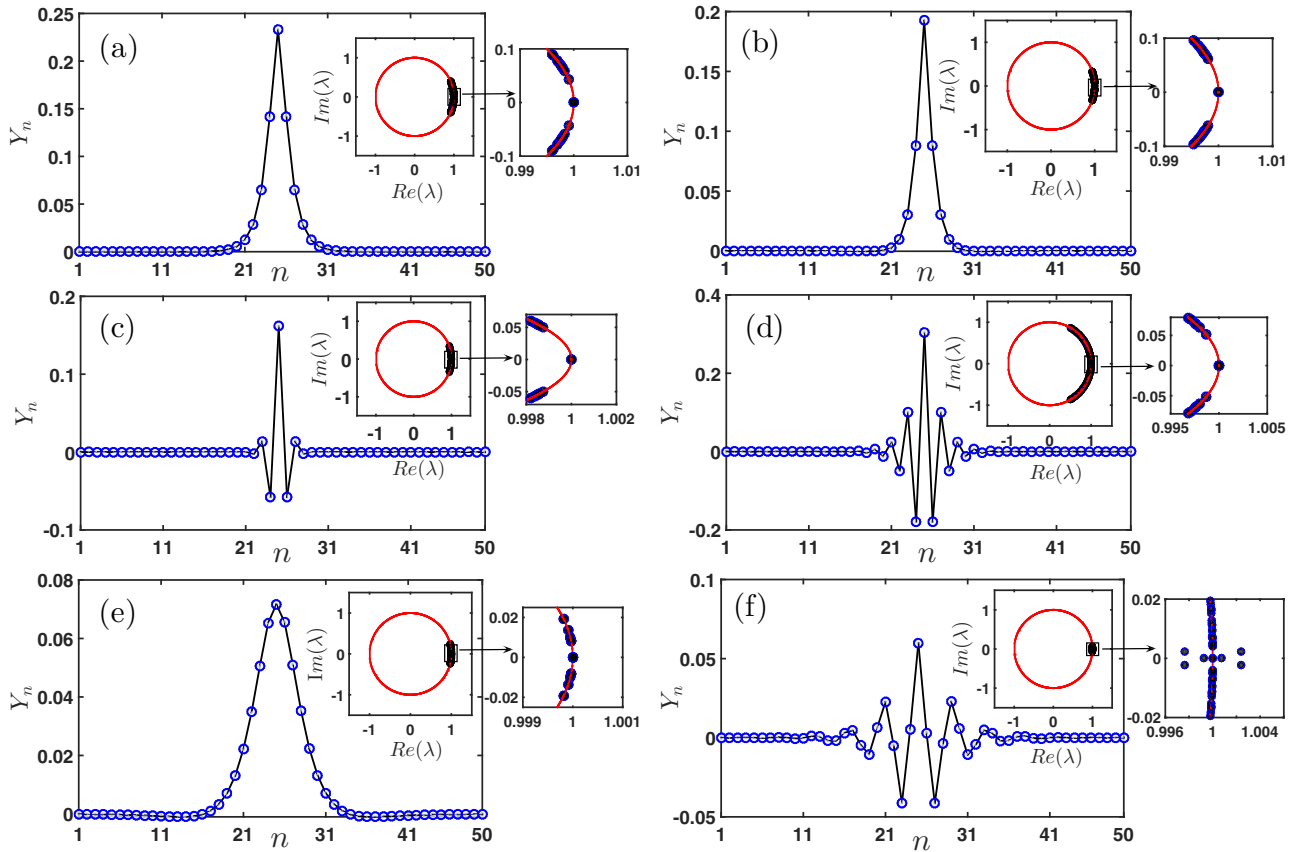


FIG. 8. Family of corrected DBs together with the corresponding Floquet multipliers (inset curve) projected on a unit circle, obtained for $k_0\ell = 0$ [(a) $\omega_b = 1.40$, $\hat{J} = 0.0$; (b) $\omega_b = 1.40763$, $\hat{J} = 0.011115$], for $k_0\ell = \pi$ [(c) $\omega_b = 1.417$, $\hat{J} = 0.1$; (d) $\omega_b = 1.35$, $\hat{J} = 0.2$], for $k_0\ell = 0.0275\pi$ [(e) $\omega_b = 1.426$, $\hat{J}_{cr} = 0.0161$], and for $k_0\ell = 0.474\pi$ [(f) $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J}_{cr} = 0.05874$].

Figure 9 displays the energy propagation resulting from the numerical simulation over 8000 periods of the built DBs, as well as the representation of solution Y_n in the (k_0, ω) Fourier space. Figure 9(b) confirms the instability of the solution evidenced by Fig. 8(f). After time $\tau \approx 4000T_b$, the wave is progressively delocalized along the lattice in a noncoherent manner due to interaction with the lattice phonon mode as the 2D DFT shows it (see the inset curve). Moreover, Fig. 9(a) shows that the wave keeps its shape and its localization throughout simulation and does not interact with the phonon mode, thus confirming the stability of the solution obtained in

Fig. 8(e). It should be noted that the solutions obtained with Figs. 8(a)–8(d) behave with dynamics nearly similar to that reported in Fig. 8(e).

The 2D DFT of the built stationary solutions shows a clear separation between the position of the discrete breather and the value of the dispersion relation at the considered wave vector k_c . This separation is indeed due to the constructed solution with frequency inside the lower forbidden band gap, and it is still observed in the stationary mode ($\mathcal{V} = 0$), in which the position of the discrete breather is parallel to the line $\omega = \omega_b$ and centered at k_c (see the inset curve of Fig. 9).

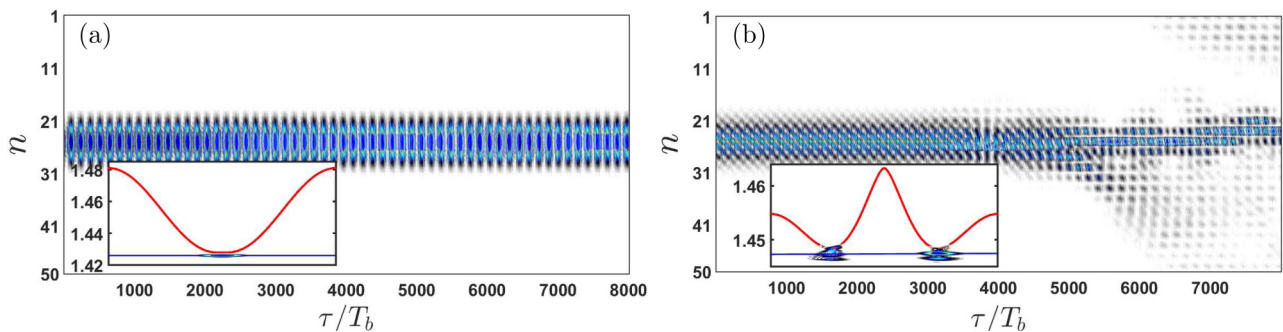


FIG. 9. Contour plot showing spatiotemporal energy propagation of a stable [panel (a): $\omega_b = 1.426$, $\hat{J}_{cr} = 0.0161$, $k_0\ell = 0.0275\pi$] and an unstable [panel (b): $\omega_b = 1.4474$, $\hat{J}_{cr} = 0.05874$, $k_0\ell = 0.474\pi$] discrete breather given by Figs. 8(e) and 8(f), respectively. The inset is the 2D DFT of a stationary DB computed from Eq. (14).

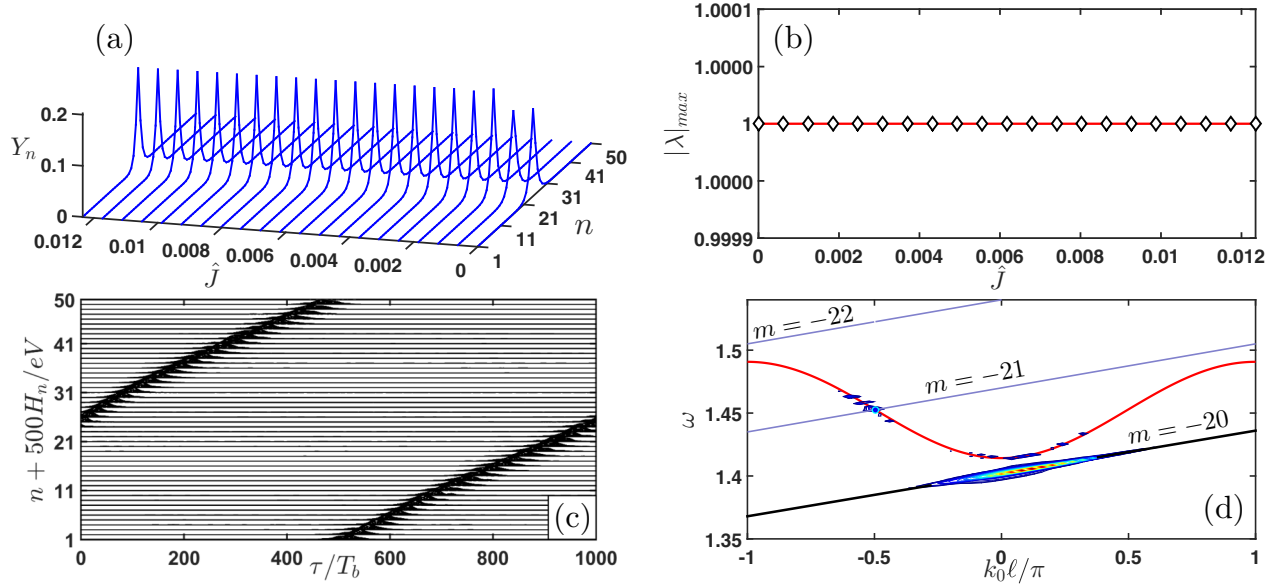


FIG. 10. Profile of corrected discrete breather (a) vs the long-range coefficient parameter \hat{J} obtained for $k_0\ell = 0$. (b) Evolution with respect to dipole-dipole coupling constant \hat{J} of the maximum modulus of the Floquet multiplier. (c) Energy propagation of a MDB emitted by a perturbed SDB for $k_0\ell = 0$, $\hat{J} = 0$, $\omega_b = 1.40$, and $\nu = 0.56$. (d) 2D DFT $|\tilde{Y}(k_0, \omega)|$ in the (k_0, ω) space [given by Eq. (14)] of displacements $Y_n(\tau)$ of the obtained moving discrete breather, where the red curve is the linear dispersion curve given by Eq. (5). The black curve corresponds to the line $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, with $\omega_b = 1.40$, $k_c = 0$, and $\mathcal{V} \approx 1.084 \times 10^{-2}$, while the gray curves are those obtained by means of Eqs. (16) and (17). The blue filled circle represents the intersection of the resonant breather line with the phonon band.

Once the stationary periodic solution is obtained, the next step is to perform its mobility. Indeed, to be able to answer the proteinic request of the living organism, the DNA molecule needs to be transcribed, which is modeled by a bubble of translation being propagated on the segment of selected DNA for this purpose. The mobility of the exact discrete breather is achieved with the method of Alvarez *et al.* [60], which consists in “kicking” the exact stationary DB solution obtained with the formula

$$\begin{aligned} Y_{\text{MDB},n}^0 &= Y_{\text{SDB},n}^0 \cos[\nu(n - n_0)], \\ \dot{Y}_{\text{MDB},n}^0 &= \pm Y_{\text{SDB},n}^0 \sin[\nu(n - n_0)], \end{aligned} \quad (21)$$

where MDB/SDB stand for moving/static discrete breather. The parameter ν refers to a wave number. The \pm sign corresponds to a breather moving forward (+) and backward (−). Note that during their propagation, DBs can interact with the phonon mode. Certainly, achieving mobility of ILM by the “kick” method produces a lot of phonons, but despite this, it is also possible to find the intersection points of the propagating breather with the dispersion curve as performed in Sec. IID.

Due to the fact that $k_0\ell$ is chosen at the middle of the first Brillouin zone ($k_0\ell = 0$), Fig. 10 shows the emergence of a DB solution with neighboring base pairs oscillating spatially in phase, as shown in Fig. 10(a). It can be noticed that for values of $\hat{J} \in]0, 0.01235]$, the amplitude of the obtained periodic solutions is a decreasing function of the coefficient \hat{J} , while the spatial expansion of the solution grows with LRI. This family of solutions is linearly stable [Fig. 10(b)], and their frequencies vary not linearly according to the law $\omega_b^{\text{app}} = A\hat{J}^r$, with $A = 1.4185563$ and $r = 0.0019635172$. Using Eq. (21), Fig. 10(c) gives the energy propagation [Eq. (1)] of the obtained MDB for $\hat{J} = 0$, $\omega_b = 1.40$, and $\nu = 0.56$. This

energy propagates while passing from site n to site $n + 1$ at each q -period ($q = 20$) and resonates with the phonon band at the point indicated by the blue filled circle [see Fig. 10(d)]. As one can see, this MDB emits phonons that propagate in the opposite direction (negative intersection wave vector), as shown in Fig. 10(d), where we plot the 2D DFT in the (k_0, ω) plane and through which one can see several frequencies interacting with the phonon-dispersion relation.

The analysis of Fig. 10 can be applied to Fig. 11 concerning the amplitude as well as the width of the built periodic solutions. It should be noted, however, that these solutions are obtained for $\hat{J} = \hat{J}_{\text{cr}}(k_0)$. It can be seen in Fig. 11(a) that for certain values of the couples $[k_0, \hat{J}_{\text{cr}}(k_0)]$, the obtained periodic solutions have neighboring base pairs oscillating spatially either in phase or in opposition of phase. These solutions are stable for any $\hat{J}_{\text{cr}}(k_0) \leq \hat{J}_{\text{cr}1}$ (with $\hat{J}_{\text{cr}1} = 0.023212$) while they become unstable for any $\hat{J}_{\text{cr}}(k_0) > \hat{J}_{\text{cr}1}$ [see Fig. 11(b)] and their frequencies vary also not linearly according to the law $\omega_b^{\text{app}} = A\hat{J}_{\text{cr}}^r(k_0)$ with $A = 1.4975743$ and $r = 0.007233644$. The analysis of Figs. 10(c) and 10(d) can still hold for Figs. 11(c) and 11(d) but with $k_0\ell = 0.474\pi$, $\hat{J}_{\text{cr}}(k_0) = 0.05874$, $\omega_b = 1.4474$, and $\nu = 0.14474$. However, unlike the case of Fig. 10(d), this MDB passes from site n to site $n + 1$ at every $q = 208$ periods and resonates highly with the phonon band, as can be seen in Fig. 11(d), where the blue filled circles represent the intersection points of the resonant DB with the phonon band.

The solutions obtained and reported in Fig. 12 are those corresponding to values of the wave vector chosen at the edge of the first Brillouin zone ($k_0\ell = \pi$). Figure 12(a) shows the emergence of a solution with neighboring base pairs oscillating spatially in opposition of phase, in contrast with the solution at the center of the first Brillouin zone [see

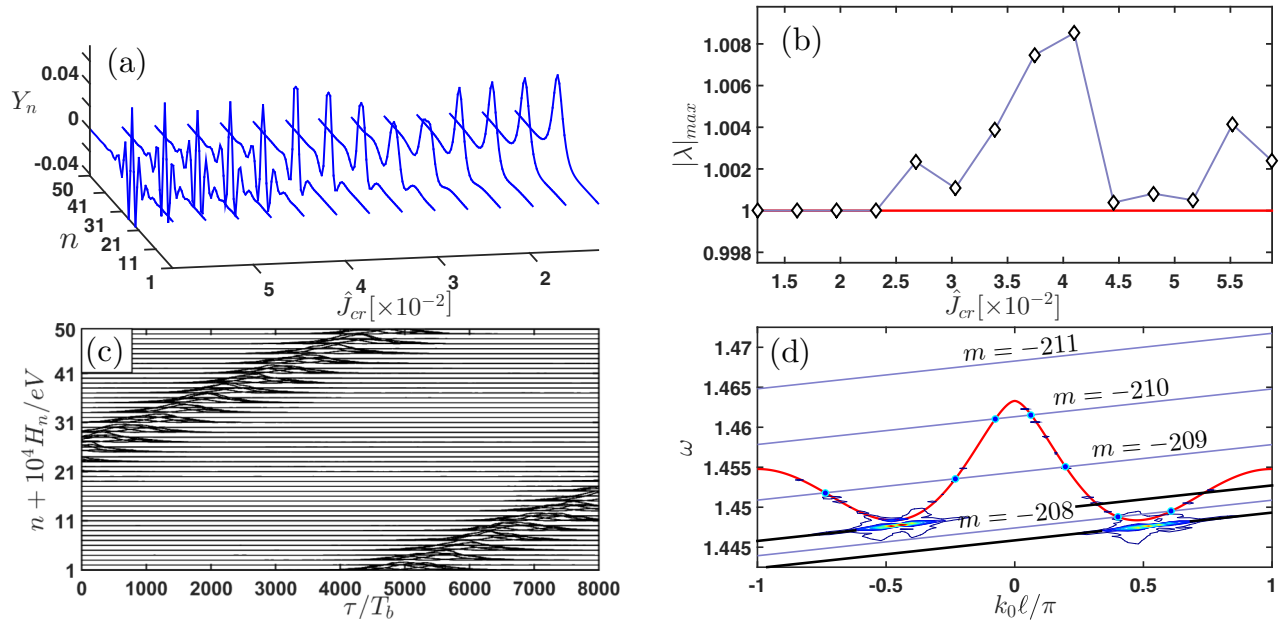


FIG. 11. Profile of corrected discrete breather (a) vs the long-range coefficient parameter \hat{J} obtained for $\hat{J} = \hat{J}_{cr}(k_0)$. (b) Evolution with respect to dipole-dipole coupling constant \hat{J} of the maximum modulus of Floquet's multiplier. (c) The dependence of the DB frequency with respect to \hat{J} . Energy propagation of a MDB emitted by a perturbed SDB for $k_0 \ell = 0.474\pi$, $\hat{J}_{cr}(k_0) = 0.058\ 74$, $\omega_b = 1.4474$, and $\nu = 0.14474$. (d) 2D DFT $|\tilde{Y}(k_0, \omega)|$ in the (k_0, ω) space [given by Eq. (14)] of displacements $Y_n(\tau)$ of the obtained moving discrete breather, where the red curve is the linear dispersion curve given by Eq. (5). The black curves correspond to the lines $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, with $\omega_b = 1.4474$, $k_c^\pm = \pm 0.474\pi$, $\mathcal{V} \approx 1.105 \times 10^{-3}$, while the gray curves are those obtained by means of Eqs. (16) and (17). The blue filled circles represent the intersection points of the resonant breather line with the phonon band.

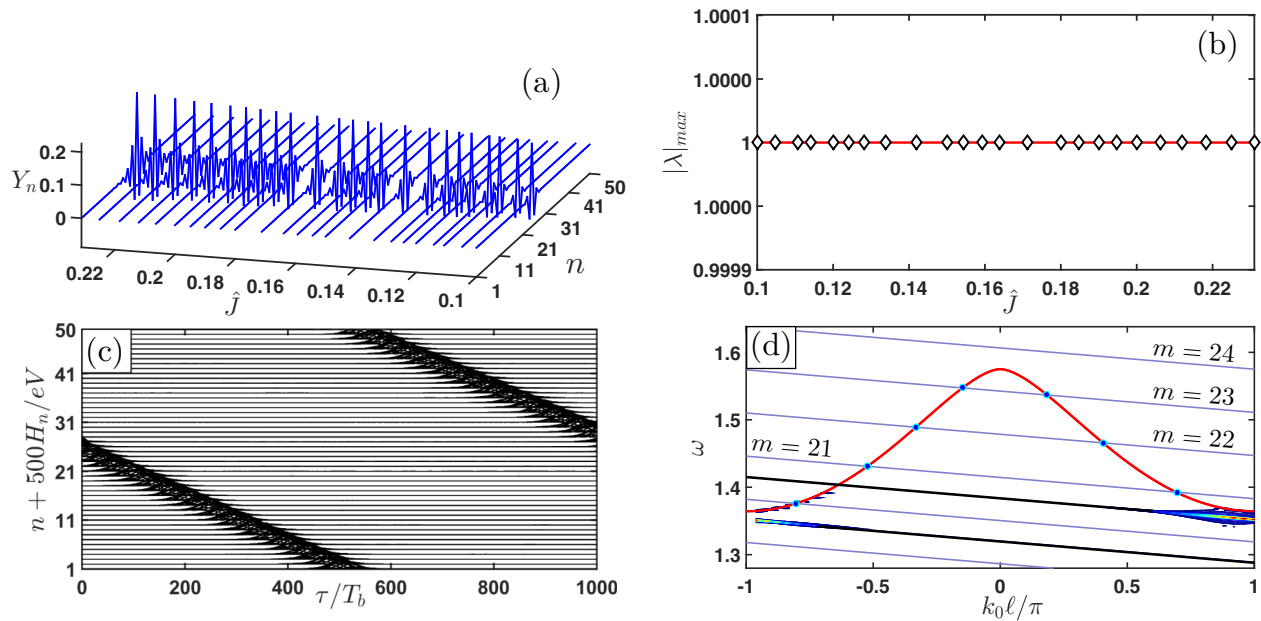


FIG. 12. Profile of corrected discrete breather (a) vs the long-range coefficient parameter \hat{J} obtained for $k_0 \ell = \pi$. (b) Evolution with respect to dipole-dipole coupling constant \hat{J} of the maximum modulus of the Floquet multiplier. (c) The dependence of the DB frequency with respect to \hat{J} . Energy propagation of a MDB emitted by a perturbed SDB for $k_0 \ell = \pi$, $\hat{J} = 0.2$, $\omega_b = 1.35$, and $\nu = 0.27$. (d) 2D DFT $|\tilde{Y}(k_0, \omega)|$ in the (k_0, ω) space [given by Eq. (14)] of displacements $Y_n(\tau)$ of the obtained moving discrete breather where the red curve is the linear dispersion curve given by Eq. (5). The black curves correspond to the lines $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, with $\omega_b = 1.35$, $k_c = \pi$, $\mathcal{V} \approx -1.01 \times 10^{-2}$ while the gray curves are those obtained by means of the Eqs. (16) and (17). The blue filled circles represent the intersection points of the resonant breather line with the phonon band.

Fig. 10(a)]. These solutions with the wave number closer to the upper cutoff of the first Brillouin zone are linearly stable [see Fig. 12(b)]. Their frequencies vary also not linearly according to the law $\omega_b^{\text{app}} = A\hat{J}^r$, with $A = 1.160\,365\,2$ and $r = -0.090\,687\,018$. The analysis of Figs. 10(c) and 10(d) can apply to Figs. 12(c) and 12(d) but with $k_0\ell = \pi$, $\hat{J} = 0.2$, $\omega_b = 1.35$, and $\nu = 0.27$. Just like the case of Figs. 10(d) and 11(d), this backward MDB propagates from site n to site $n - 1$ every 20 periods and also interacts with the phonon band at several points (see the blue filled circles), as shown in Fig. 12(d).

We can observe in Figs. 10(d), 11(d), and 12(d) that the direction of propagation of the moving discrete breather is according to the line $\omega = \omega_b + \mathcal{V}(k_0 - k_c)$, as shown by the black curves in these figures.

IV. DISCUSSION

The analysis of the linear dispersion relation is crucial as the DB mainly vibrates in the forbidden band gap for the avoidance of possible resonances with phonons of the lattice with frequencies inside the allowed frequency band [1–4]. The obtained results show that such analysis is also capital for understanding the nonlinear wave propagation. When the product between the group velocity (v_g) and the phase velocity ($v_{\text{ph}} = \omega/k_0$) is positive, then the soliton moves forward. When this product is negative, there is a backward wave propagation. The latter is frequently encountered in left-handed metamaterials (e.g., [38,43–45]). Surprisingly, it can be seen that the dispersion relation of the DNA, or any other nonlinear lattice models with LRI, did not receive enough attention from this angle [10–14,17–25,41,42]. Different values of \hat{J} change the direction of the wave, and then induce the chameleon behavior emphasized by Togueu *et al.* [46]. More interestingly, stationary bright breathers beyond the edge/center of the first Brillouin zone (wave number different from 0 or π) are obtained solely due to a specific LRI. To our knowledge this has yet to be reported in the literature [10–14,17–25,41,42].

It was demonstrated that bright and dark solitons can be achieved in the same medium, structure and wavelength depending on a slight change of the input condition in an optical waveguide array [61]. A possible alternation of envelope and dark-soliton solutions that depends on the long-range interactions was noticed a long time ago in monatomic/diatomic systems (e.g., Tchawoua *et al.* [47], Remoissenet *et al.* [48], and references therein). Likewise, it is notably observed that semidiscrete dark and bright breathers from the NLS reduction can be supported by the DNA discrete system. Notably, the existence and the modification of the direction of propagation of these two families of solutions are possible in the present model depending solely on the LRI magnitude. The obtained results in the present study, therefore, led us to conclude that a slight change in the LRI can foster the occurrence of dark or bright breathers in a physical system. Note that the semidiscrete dark solution and simulation was purposely not mentioned in this study, which focused solely on the bright breather, which is qualitatively and biologically more relevant for the studied system.

The study of LRI in nonlinear discrete systems has recently attracted more scientific interest. Among the reported

phenomena, the LRI modifies the speed and amplitude of the propagating semidiscrete breathers [10], or it induces nonlinear supratransmission [11] and creates on-site DBs [12]. In opposition to the well-known forward waves (FWs) ubiquitously found in various physical media [62,63], the backward waves (BWs) are waves with antiparallel phase and group velocities. The BWs are not mathematical artifacts. They have been highlighted for instance in dusty plasma crystals [64,65]. In electrodynamics, they correspond to the opposition between field momentum connected to the phase velocity and the Poynting vector, which is connected to the group velocity [66]. Depending on the system parameters of physical devices such as a nonlinear discrete transmission electrical line, the microwave moving breather can have its wavelets and wave packets traveling in opposite directions, thus exhibiting either BW or FW behavior [45,46]. The present study shows the possibility of CB in the model as noticed in the short-range-interacting nonlinear discrete electrical transmission line [46].

In the literature, it is demonstrated that quasisemidiscrete backward and forward waves can interact [51,52], or they can be generated separately depending on the system parameter [46]. It is demonstrated here that their discrete analog can also be generated depending on the specific carrier wave number and LRI intensity. Moreover, it can be noticed that the obtained mobile discrete breather from the perturbation procedures is not an exact solution of the dynamical equations because they have peaks inside the phonon band, and they are naturally expected to radiate small-amplitude waves. They have a finite life because they radiate phonons. This fact occurs because a mobile discrete breather has two frequencies: one due to the internal vibration and another one due to the periodic translation, which is smaller than the first one and is responsible for the resonance with the phonons, and thus of their emission [2,3]. The precise numerical computation of traveling bright breathers using Newton-Raphson-type methods and their stability analysis through Floquet's theory (modulo shifts) constitute another interesting problem that is worth addressing. The systematic analysis of stability of moving breathers is a challenging task left for future work. It is important to note that this task would only be accessible by standard methods when the velocity and frequency of the traveling breather satisfy specific commensurability conditions. (See, for example, Refs. [57,67] for a relevant discussion.)

In a series of papers, Cuevas *et al.* [19–22] demonstrated that the speed and the orbital stability of the forward DB in DNA can be modified by the LRI. However, their procedure to construct the numerically exact DB involves a selection of an initial condition that is not easy to choose, while in the present study the semidiscrete solution, which is analytically tractable, is selected as the initial guess and further corrected numerically.

The direct usage of the semidiscrete solution in the simulation shows that there are some radiation losses due because the quasicontinuum waves try to adapt to the real system, which is discrete. Furthermore, the continuum limit and multiscale approximation narrow the existence domain of DBs to solutions that have frequencies close to the linear band [1–4]. Floquet's stability analysis of the semidiscrete solution (results not shown in the text) shows that it is always less

stable than the exact DB. In the study of Dauxois *et al.* [37], the same problem was already pointed out during numerical simulations of the short-range Peyrard-Bishop (PB) model. A semianalytical approach similar to what was adopted in a physical setup such as short-range interacting nonlinear left-handed electrical lines and granular materials [38–40] is employed as an attempt to overcome the weakness in this study.

In the PB model, the existence of DBs has been demonstrated [27,28], and DBs are thought to be the precursors to the bubbles that appear before the transcription processes in which large fluctuations of energy have been experimentally observed. The PB model was further amended in order to incorporate the effect of LRI [19–24]. Such interaction was reported to influence the breather, shape, speed, and stability [19–24]. Inspired by the anharmonic model suggested by PB, Joyeux and Buyukdagli (JB) proposed a new model based on site-specific enthalpy and closer to the statistical models [29,30]. This study accounted for LRI as in Refs. [19–24], but highlighted instead the existence of two different regimes, namely forward and backward discrete ILMs, as well as their stability based on the JB model.

The moving breather evidenced in the original DNA model of Peyrard and Bishop was proven to accurately mimic the breathing mode between base pairs as well as the low amplitude breathing modes moving along the molecule, which can be amplified and initiate the transcription process [27]. It is well known that the DNA transcription can be done in two directions. However, the solution obtained from the original PB model cannot explain why this breathing can move backward or forward solely on model parameter values. The incorporation of the long-range interaction in this study was an attempt to address this issue.

The core model used here has been proposed by JB to explain homogeneous/inhomogeneous DNA denaturation and finite stacking enthalpy energy of base pairs [29,30]. This advocates that our results obtained by amending the JB model with LRI can be useful to explore some properties of DNA chains. It is worthwhile to recall that hydrogen bonds responsible for the interbase coupling, namely the hydrogen bond in the N-H...O group, is characterized by a finite dipole moment. Therefore, a stretching of the base pair will cause a change of the dipole moment, so that the excitation transfer in the molecule will be due to transition dipole-dipole interaction with a $1/r^3$ dependence on the distance, r . It is also demonstrated that hydrogen-bonded water filaments are linked with nucleotides in DNA [68–70]. In this case, an effective long-range excitation transfer may occur due to the nucleotide-water coupling. The propagating soliton along the DNA molecule was suggested to cause long-range interference with the DNA-protein interaction [28]. These factors can thus modify LRI and breather mobility to corner the energy at the different sites of the DNA. It can therefore foster/enhance the transcription bubble occurrence/amplitude [27,28]. These trapped ILMs may therefore operate as local energy pools and can reassign this encapsulated energy to a localized and propagating transcription bubble. The results obtained in the present study suggest that a suitable balance between the effect of these external factors can prevent amplitude rise and control the spatiotemporal dynamics of the energy.

The transcription of DNA into RNA is not a one-way process: the DNA strand can be read in both directions. One strand of DNA is not identical in one way or another. Indeed, by the structure of the nucleotides that constitute it, there are two types of ends, denoted 5' and 3'. These numbers refer to the carbon numbers of deoxyribose (the DNA D), one of the nucleotide elements. In other words, at the 5' (or 3') end of a strand, it is the 5' carbon (3') of the deoxyribose that is free. Transcription takes place in both directions, 3' to 5', but also 5' to 3' [71]. The directions of transcription processes are different not only for DNA molecules of different living organisms but also for different promoter regions of the same DNA molecule. For some promoters (regions of DNA that lead to initiation of transcription of a particular gene), the transcription process preferably develops in the upstream direction, while for others the process develops in the downstream direction. There are also promoters that do not have a preferred direction of transcription [28].

From the PB model [26–28], or from its improved version [29–35], the dynamical equations have been studied numerically, and a kinklike/breather solution was used as an initial condition. As a result, it was found that an initially static soliton can remain static, oscillate, or move. It can move along the DNA molecule in one of two possible directions (due to an appropriate “kick” or velocity sign of the initial solution): upstream or downstream. In the present study, it is demonstrated that these three events can happen only due to the specific values of the LRI. Note that the direction of transcription further depends on the sequence of bases near the starting point, as well as on the relative position of the initial soliton and the promoter region [72].

V. CONCLUSION

On the theoretical side, in the present study we used the NLS reduction to illustrate the existence of a small-amplitude forward and backward breather arising from the interplay between long-range interactions and the carrier wave frequency. It was further demonstrated that there exist zero-velocity breathers due to the LRI even if the wave number is neither at the edge nor at the center of the first Brillouin zone

Contrary to earlier works that simply tested the robustness of such states with only the use of direct numerical simulations, here we went a significant step further. The numerically discrete exact solutions were identified and continued parametrically over the frequency and LRI values. This allowed us to identify a possible relationship between the discrete breather frequency and the LRI. Their spectral stability was also verified. The mobile discrete breathers are obtained after “kicking” the static discrete breather despite considerable radiation losses due to resonance with phonons.

As highlighted previously, there are nontrivial technical obstacles to overcome toward a calculation for general parameter values of both the frequency and the velocity of the exact traveling discrete breather [57,67]. A numerical study of the stability of periodic traveling and standing waves going beyond the nonlinear Schrödinger solution (NLS) approximation used in this study will also be of interest in order to classify the parameter regimes leading to modulated periodic waves, localized structures, or disordered regimes.

We have demonstrated that bright breathers are not only interesting nonlinear excitations of the DNA model from a theoretical point of view, but they are also within the reach of real world importance for this biopolymer, given the ability to control LRI (e.g., with water solvent). The forward and backward breather could explain the mechanism by which the DNA breathing mode and DNA transcription can be achieved in two directions along the biomolecule.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors gratefully acknowledge the advice and support from Juan Francisco Rodríguez Archilla at Universidad de Sevilla, Spain. Thanks to the Electronic Journal Delivery Service of the International Centre of Theoretical Physics (ICTP) for providing valuable references used in this study. We thank the anonymous reviewers for their thorough review and invaluable comments, which improved this paper significantly.

-
- [1] D. K. Campbell, S. Flach, and Y. S. Kivshar, Localizing energy through nonlinearity and discreteness, *Phys. Today* **57**, 43 (2004).
- [2] S. Flach and C. R. Willis, Discrete breathers, *Phys. Rep.* **295**, 181 (1998).
- [3] S. Flach and A. V. Gorbach, Discrete breathers: Advances in theory and applications, *Phys. Rep.* **467**, 1 (2008).
- [4] D. K. Campbell, Fresh breather, *Nature (London)* **432**, 455 (2004).
- [5] S. Aubry and T. Cretegny, Mobility and reactivity of discrete breathers, *Phys. D* **119**, 34 (1998).
- [6] D. Chen, S. Aubry, and G. P. Tsironis, Breather Mobility in Discrete Nonlinear Lattices, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4776 (1996).
- [7] J. D. T. Tchameu, C. Tchawoua, and A. B. Togueu Motcheyo, Effects of next-nearest-neighbor interactions on discrete multi-breathers corresponding to Davydov model with saturable nonlinearities, *Phys. Lett. A* **379**, 2984 (2015).
- [8] B. Tang and K. Deng, Discrete breathers and modulational instability in a discrete Φ^4 nonlinear lattice with next-nearest-neighbor couplings, *Nonlin. Dyn.* **88**, 2417 (2017).
- [9] X-L. Chen, S. Abdoukary, P. G. Kevrekidis, and L. Q. English, Resonant localized modes in electrical lattices with second-neighbor coupling, *Phys. Rev. E* **98**, 052201 (2018).
- [10] G. Miloshevich, J. P. Nguenang, T. Dauxois, R. Khomeriki, and S. Ruffo, Traveling solitons in long-range oscillator chains, *J. Phys. A* **50**, 12LT02 (2017).
- [11] J. E. Macias-Diaz and A. Bountis, Suprtransmission in β -Fermi-Pasta-Ulam chains with different ranges of interactions, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul.* **63**, 307 (2018).
- [12] Y. Y. Yamaguchi and Y. Doi, Low-frequency discrete breathers in long-range systems without on-site potential, *Phys. Rev. E* **97**, 062218 (2018).
- [13] Y. Yatsuyanagi, Y. Kiwamoto, T. Ebisuzaki, T. Hatori, and T. Kato, Simulations of diocotron instability using a special-purpose computer, MDGRAPE-2, *Phys. Plasmas* **10**, 3188 (2003).
- [14] Y. Kawai, Y. Kiwamoto, K. Ito, A. Sanpei, Y. Soga, J. Aoki *et al.*, Relaxation of azimuthal flow pattern from ring to bell shape through two-dimensional turbulence triggered by diocotron instability, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 104502 (2006).
- [15] S. F. Mingaleev and Y. S. Kivshar, Nonlinear transmission and light localization in photonic-crystal waveguides, *J. Opt. Soc. Am. B* **19**, 2241 (2002).
- [16] S. F. Mingaleev, Y. S. Kivshar, and R. A. Sammut, Long-range interaction and nonlinear localized modes in photonic crystal waveguides, *Phys. Rev. E* **62**, 5777 (2000).
- [17] T. Watanabe, T. Iwayama, and H. Fujisaka, Scaling law for coherent vortices in decaying drift Rossby wave turbulence, *Phys. Rev. E* **57**, 1636 (1998).
- [18] M. Molerón, C. Chong, A. J. Martínez, M. A. Porter, P. G. Kevrekidis, and C. Daraio, Nonlinear excitations in magnetic lattices with long-range-interactions, *New J. Phys.* **21**, 063032 (2019).
- [19] J. Cuevas, F. Palmero, J. F. Archilla, and F. Romero, Moving breathers in a bent DNA model, *Phys. Lett. A* **299**, 221 (2002).
- [20] J. Cuevas, J. F. R. Archilla, Y. B. Gaididei, and F. R. Romero, Moving breathers in a DNA model with competing short-and long-range dispersive interactions, *Phys. D* **163**, 106 (2002).
- [21] J. Cuevas, E. B. Starikov, J. F. R. Archilla, and D. Henning, Moving breathers in bent DNA with realistic parameters, *Mod. Phys. Lett. B* **18**, 1319 (2004).
- [22] A. Alvarez, F. R. Romero, J. F. R. Archilla, J. Cuevas, and P. V. Larsen, Breather trapping and breather transmission in a DNA model with an interface, *Eur. Phys. J. B* **51**, 119 (2006).
- [23] J. B. Okaly, A. Mvogo, R. L. Woulaché, and T. C. Kofane, Nonlinear dynamics of damped DNA systems with long-range interactions, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul.* **55**, 183 (2018).
- [24] S. F. Mingaleev, P. L. Christiansen, Y. B. Gaididei, M. Johansson, and K. Rasmussen, Models for energy and charge transport and storage in biomolecules, *J. Biol. Phys.* **25**, 41 (1999).
- [25] J. F. R. Archilla, P. L. Christiansen, and Y. B. Gaididei, Interplay of nonlinearity and geometry in a DNA-related, Klein-Gordon model with long-range dipole-dipole interaction, *Phys. Rev. E* **65**, 016609 (2001).
- [26] M. Peyrard and A. R. Bishop, Statistical Mechanics of a Non-linear Model for DNA Denaturation, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2755 (1989).
- [27] M. Peyrard, Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA, *Nonlinearity* **17**, R1 (2004).
- [28] L. Yakusevich, *Nonlinear Physics of DNA*, *Wiley Series in Non-linear Sciences* (Wiley, Weinheim, Germany, 2004).
- [29] M. Joyeux and S. Buyukdagli, Dynamical model based on finite stacking enthalpies for homogeneous and inhomogeneous DNA thermal denaturation, *Phys. Rev. E* **72**, 051902 (2005).
- [30] M. Joyeux and A-M. Florescu, Dynamical versus statistical mesoscopic models for DNA denaturation, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 034101 (2009).
- [31] D. Toko, C. B. Tabi, A. Mohamadou, and T. C. Kofane, Coherent modes and parameter selection in DNA models with finite stacking enthalpy, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **9**, 97 (2012).

- [32] P. B. Ndjoko, J. M. Bilbault, S. Binczak, and T. C. Kofane, Compact-envelope bright solitary wave in a DNA double strand, *Phys. Rev. E* **85**, 011916 (2012).
- [33] A. Mvogo and T. C. Kofane, Fractional formalism to DNA chain and impact of the fractional order on breather dynamics, *Chaos* **26**, 123120 (2016).
- [34] C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, and C. Tchawoua, Discrete breathers dynamic in a model for DNA chain with a finite stacking enthalpy, *Chaos* **28**, 043105 (2018).
- [35] C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, and C. Tchawoua, Taming intrinsic localized modes in a DNA lattice with damping, external force, and inhomogeneity, *Phys. Rev. E* **99**, 052210 (2019).
- [36] M. Peyrard, Melting the double helix, *Nat. Phys.* **2**, 13 (2006).
- [37] T. Dauxois, M. Peyrard, and C. R. Willis, Localized breather-like solution in a discrete Klein-Gordon model and application to DNA, *Phys. D* **57**, 267 (1992).
- [38] V. Koukoulouyannis, P. G. Kevrekidis, G. P. Veldes, D. J. Frantzeskakis, D. DiMarzio, X. Lan *et al.*, Bright breathers in nonlinear left-handed metamaterial lattices, *Phys. Scr.* **93**, 025202 (2018).
- [39] C. Chong, P. G. Kevrekidis, G. Theocharis, and C. Daraio, Dark breathers in granular crystals, *Phys. Rev. E* **87**, 042202 (2013).
- [40] L. Liu, G. James, P. Kevrekidis, and A. Vainchtein, Breathers in a locally resonant granular chain with precompression, *Phys. D* **331**, 27 (2016).
- [41] S. Flach, Breathers on lattices with long range interaction, *Phys. Rev. E* **58**, R4116 (1998).
- [42] A. V. Gorbach and S. Flach, Compactlike discrete breathers in systems with nonlinear and nonlocal dispersive terms, *Phys. Rev. E* **72**, 056607 (2005).
- [43] S. Abdoukary, L. Q. English, and A. Mohamadou, Envelope solitons in a left-handed nonlinear transmission line with Josephson junction, *Chaos Solitons Fractals* **85**, 44 (2016).
- [44] Y. Shen, P. G. Kevrekidis, G. P. Veldes, D. J. Frantzeskakis, D. DiMarzio, X. Lan, and V. Radisic, From solitons to rogue waves in nonlinear left-handed metamaterials, *Phys. Rev. E* **95**, 032223 (2017).
- [45] G. P. Veldes, J. Cuevas, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, Quasidiscrete microwave solitons in a split-ring-resonator-based left-handed coplanar waveguide, *Phys. Rev. E* **83**, 046608 (2011).
- [46] A. B. Togueu Motcheyo, J. D. Tchingang Tchameu, S. I. Fewo, C. Tchawoua, and T. C. Kofane, Chameleon's behavior of modulable nonlinear electrical transmission line, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul.* **53**, 22 (2017).
- [47] C. Tchawoua, T. C. Kofane, and A. S. Bokosah, Dynamics of solitary waves in diatomic chains with long-range Kac-Baker interactions, *J. Phys. A* **26**, 6477 (1993).
- [48] M. Remoissenet and N. Flytzanis, Solitons in anharmonic chains with long-range interactions, *J. Phys. C* **18**, 1573 (1985).
- [49] T. Dauxois, M. Peyrard, and A. R. Bishop, Entropy-driven DNA denaturation, *Phys. Rev. E* **47**, R44 (1993).
- [50] L. Brillouin, *Periodic Structure: Electronic Filters and Crystal Lattices*, 1st ed. (McGraw-Hill, New York, 1946).
- [51] G. P. Veldes, J. Cuevas, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, Coupled backward- and forward-propagating solitons in a composite right- and left-handed transmission line, *Phys. Rev. E* **88**, 013203 (2013).
- [52] T. Yoshinaga, N. Sugimoto, and T. Kakutani, Nonlinear wave interactions on a discrete transmission line, *J. Phys. Soc. Jpn.* **50**, 2122 (1981).
- [53] M. Remoissenet, Low-amplitude breather and envelope solitons in quasi-one-dimensional physical models, *Phys. Rev. B* **33**, 2386 (1986).
- [54] M. Remoissenet, *Waves Called Solitons* (Springer, Berlin, 1994).
- [55] *The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-Focusing and Wave Collapse*, edited by C. Sulem and P-L. Sulem (Springer, New York, 2004).
- [56] G. Fibich, *The Nonlinear Schrödinger Equation* (Springer International, Cham, 2015).
- [57] J. F. R. Archilla, Y. Doi, and M. Kimura, Pterobreaters in a model for a layered crystal with realistic potentials: Exact moving breathers in a moving frame, *Phys. Rev. E* **100**, 022206 (2019).
- [58] M. Sato, T. Nakaguchi, T. Ishikawa, S. Shige, Y. Soga, Y. Doi, and A. J. Sievers, Supertransmission channel for an intrinsic localized mode in a one-dimensional nonlinear physical lattice, *Chaos* **25**, 103122 (2015).
- [59] J. L. Marín and S. Aubry, Breathers in nonlinear lattices: numerical calculation from the anticontinuous limit, *Nonlinearity* **9**, 1501 (1996).
- [60] A. Alvarez, F. R. Romero, J. Cuevas, and J. F. R. Archilla, *Phys. Lett. A* **372**, 1256 (2008).
- [61] R. Morandotti, H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, M. Sorel, and J. S. Aitchison, Self-Focusing and Defocusing in Waveguide Arrays, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3296 (2001).
- [62] F. T. Ndjomatchoua, C. Tchawoua, J. D. T. Tchingang, B. P. LeRü, and H. E. Z. Tonnang, Discrete Davydov's soliton in α -helical protein molecule with anharmonic hydrogen bond and thermal noise, *Commun. Nonlin. Sci. Numer. Simul.* **29**, 148 (2015).
- [63] F. T. Ndjomatchoua, C. Tchawoua, F. M. M. Kakmeni, B. P. LeRü, and H. E. Z. Tonnang, Waves transmission and amplification in an electrical model of microtubules, *Chaos* **26**, 053111 (2016).
- [64] T. Misawa, N. Ohno, K. Asano, M. Sawai, S. Takamura, and P. K. Kaw, Experimental Observation of Vertically Polarized Transverse Dust-Lattice Wave Propagating in a One-Dimensional Strongly Coupled Dust Chain, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1219 (2001).
- [65] A. B. Togueu Motcheyo, E. Nkendi Kenkeu, J. Djako, and C. Tchawoua, Backward-wave propagation with vertical dust grain oscillations in dusty plasma crystals, *Phys. Plasmas* **25**, 123701 (2018).
- [66] V. G. Veselago, The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ , *Sov. Phys. Usp.* **10**, 509 (1968).
- [67] J. Gómez-Gardeñes, F. Falo, and L. M. Floría, Mobile localization in nonlinear Schrödinger lattices, *Phys. Lett. A* **332**, 213 (2004).

- [68] D. C. Rau and V. A. Parsegian, Direct measurement of the intermolecular forces between counterion-condensed DNA double helices. Evidence for long range attractive hydration forces, *Biophys. J.* **61**, 246 (1992).
- [69] G. Corongiu and E. Clementi, Simulations of the solvent structure for macromolecules. I. Solvation of B-DNA double helix at $T = 300$ K, *Biopolymers* **20**, 551 (1981).
- [70] U. Dahlborg and A. Rupprecht, Hydration of DNA: A neutron scattering study of oriented NaDNA, *Biopolymers* **10**, 849 (1971).
- [71] P. Raven, G. Johnson, K. Mason, J. Losos, and S. Singer, *Biology*, 11th ed. (McGraw-Hill, New York, 2017).
- [72] M. Salerno, Discrete model for DNA-promoter dynamics, *Phys. Rev. A* **44**, 5292 (1991).