

# CAMBIOS INFORMACIONALES EN BIOMOLÉCULAS CAUSADAS POR RADIACIONES IONIZANTES: LO QUE PUEDE DECIR LA ENTROPÍA DE TSALLIS

INFORMATIONAL CHANGES IN BIOMOLECULES CAUSED BY IONIZING RADIATIONS: WHAT TSALLIS ENTROPY CAN SAY

L. RODRÍGUEZ<sup>a,b</sup>, R. CÁRDENAS<sup>a†</sup>, L. GONZÁLEZ<sup>a,b</sup>, O. RODRÍGUEZ<sup>c</sup>

a) Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba; rcardenas@uclv.edu.cu<sup>†</sup>

b) Centro de Estudios Ambientales (EULA), Universidad de Concepción, Chile

c) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, La Habana, Cuba

† autor para la correspondencia

Recibido 13/2/2015; Aceptado 1/11/2016

PACS: Effects of radiation and external fields on biomolecules, cells and higher organisms 87.50.-a, Entropy 05.70.-a, 65.40.Gr; Information theory, 89.70.1c

La entropía es uno de los conceptos más importantes de las Ciencias Naturales. Su interpretación como una densidad logarítmica de microestados en la Física Estadística y ha sido extrapolada a Teoría de la Información, Ecología Economía y otras ciencias. Su primera formulación fue en el siglo XIX e implicaba extensividad (aditividad)

$$S(A + B) = S(A) + S(B). \quad (1)$$

Esta propiedad es implementada a través de la función logarítmica con la formulación de entropía de Boltzman Gibbs(BG)

$$S = -k \sum_n p_n \ln p_n, \quad (2)$$

donde  $p_n$  es la probabilidad del microestado n-ésimo y  $k$  es la constante de Boltzman.

En sistemas donde las fuerzas predominantes son las gravitacionales (de largo alcance) la extensividad ha sido cuestionada. En 1988 Tsallis formuló un nuevo concepto de entropía no extensiva

$$S_q = -k \frac{1 - \sum_n p_n^q}{1 - q}. \quad (3)$$

La nueva suma quedaría de la siguiente forma:

$$\frac{S_q(A + B)}{k} = \frac{S_q(A)}{k} + \frac{S_q(B)}{k} + 1 - q \frac{S_q(A)}{k} \frac{S_q(B)}{k}, \quad (4)$$

donde  $q$  es el parámetro de no extensividad.

Cuando  $q = 1$ , se recupera la entropía de BG,  $q > 1$  es el caso subextensivo, y  $q < 1$  es el superextensivo [1].

Una manera de codificar la información química de las proteínas es formando palabras, donde las letras son los diferentes aminoácidos que la componen [2]. La longitud de la palabra es a lo que llamamos orden, donde el orden 0 sería la palabra formada por 1 aminoácido, de orden 1 las formadas por dos aminoácidos y así sucesivamente.

Estudiamos un fragmento de la proteína *Bacillus Subtillis* expuesta a radiación cósmica ionizante. La secuencia en su estado salvaje es **LSQFMDQTNPLAELTHKRRLS A**, y la secuencia de codones que codificó este fragmento es **CTT TCT CAA TTC ATG GAT CAG ACG AAC CCG GCT GAA TTA CAC AAG CGT CTG TCA GCA**.

La radiación cósmica produce mutaciones en los genomas, quedando la proteína de la forma **PSLFLMDQTNPLVELTYKPRLLP**. Formamos todas las posibles palabras con longitudes desde 1 hasta 5 aminoácidos, desde el orden 0 hasta el orden 4. La longitud de la cadena es de 22 aminoácidos, dando 22 palabras de orden 0, 42 de orden 1, 60 de orden 2, etc. Computamos la probabilidad de que aparezca un aminoácido en la cadena

$$p_n = \frac{n}{N}, \quad (5)$$

donde  $n$  es el número de veces que aparece el aminoácido en la palabra y  $N$  el número de palabras. Como medida de la información utilizamos las formulaciones de entropía de BG y Tsallis

$$S = -k \sum_1^{22} p_n \ln p_n, \quad S_q = -k \frac{1 - \sum_1^{22} p_n^q}{1 - q}. \quad (6)$$

Esta proteína fue sometida a diferentes entornos radiacionales:

1. Proteína en su estado salvaje (no irradiada).
2. Mutada por iones pesados (helio, carbono, silicio e hierro).
3. Mutada por rayos X.

Para cada caso calculamos la entropía de Tsallis y BG (ver Tabla 1).

Tabla 1. Cálculo de la entropía de la proteína *Bacillus Subtilis* sometida a varios entornos radiacionales.

| Entorno Rad  | BG                  | Tsallisq1,2         | Tsallisq3,4         | Tsallisq1,4         |
|--------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| 1- P salvaje | $3,9700 * 10^{-23}$ | $7,7800 * 10^{-24}$ | $5,8568 * 10^{-24}$ | $4,4131 * 10^{-24}$ |
| 2- P iones   | $3,9549 * 10^{-23}$ | $7,6703 * 10^{-24}$ | $5,7579 * 10^{-24}$ | $4,3270 * 10^{-24}$ |
| 3- P rayos X | $3,8394 * 10^{-23}$ | $7,9405 * 10^{-24}$ | $6,0396 * 10^{-24}$ | $4,6018 * 10^{-24}$ |

En todos los casos la entropía de Tsallis resultó menor que la de BG. Esto era de esperar, pues se trabajó con el caso subextensivo ( $q > 1$ ) de la entropía de Tsallis. Respecto a la proteína salvaje, se nota una tendencia a un aumento de la entropía después de la irradiación con rayos X, y una disminución después de la irradiación con iones pesados.

### CONCLUSIONES

Se evaluó la afectación informacional de los genomas estudiados cuando se someten a un ambiente radiacional, vinculando la Física Estadística con la Teoría de la

Información. Las tendencias observadas requerirán de confirmación al investigar un mayor número de casos, ya que este es un trabajo en un estadio aún preliminar.

### REFERENCIAS

- [1] C. Marante, F. Castro-Smirnov, O. Rodriguez-Hoyos, A. Días de Toledo, J. Mod. Phys., 3, 431-437 (2012).
- [2] S. J. Barigye, Teoría de información en la codificación de la estructura química. Tesis de Doctorado en Ciencias Químicas, Universidad Martha Abreu de las Villas, Santa Clara (2013).