

УДК 531.38, 575

©2008. А.А. Илюхин, Д.В. Тимошенко

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ДЕФОРМАЦИИ ЕСТЕСТВЕННО ЗАКРУЧЕННОГО И РАСТЯЖИМОГО СТЕРЖНЯ И ПРИМЕНЕНИЕ ЕГО К ИССЛЕДОВАНИЮ УСЛОВИЙ ЗАМКНУТОСТИ МОЛЕКУЛ ДНК

В основу решения задачи о деформации естественно закрученного и растяжимого стержня положена теория Лурье–Джанелидзе. Для системы дифференциальных уравнений указаны три модифицированных общих интеграла и для случая равных жесткостей при изгибе построен четвертый интеграл, переходящий для прямолинейных стержней в интеграл Лагранжа. С помощью полученных четырех общих интегралов построено точное решение исходной системы дифференциальных уравнений в виде эллиптических функций Якоби. Установлены новые механические эффекты. Во-первых, кручение стержня не является постоянным по длине, как это имеет место при использовании теории Кирхгофа, во-вторых, кручение стержня заключено в определенных пределах, зависящих от конструктивных параметров и концевых усилий. Применительно к задаче об определении конфигураций молекул ДНК указаны условия, при которых молекула будет замкнута.

Одним из направлений применения теории стержней в последние годы является исследование геометрии молекул биополимеров и, прежде всего, нуклеиновых кислот [1–3]. Попытки использования в данной области классической теории Кирхгофа–Клебша зачастую не позволяли описать некоторые из экспериментально установленных свойств рассматриваемых молекул [4, 5]. К таким свойствам, в частности, относятся ограничения по возможностям сверхспирализации и образованию замкнутых конфигураций. С целью теоретического выявления указанных, а также других, эффектов в настоящей работе предлагается модель, описывающая конфигурацию молекулы в виде естественно закрученного стержня.

Изложим основные положения предлагаемой модели. При построении одномерной теории упругих стержней возникает необходимость обращения к уравнениям теории упругости. Это связано с тем, что получающаяся из условий равновесия бесконечно малого элемента стержня при деформации концевыми нагрузками система шести дифференциальных уравнений Кирхгофа

$$\begin{cases} \frac{dM_1}{ds} + \omega_2 M_3 - \omega_3 M_2 = 0, \\ \frac{dM_2}{ds} + \omega_3 M_1 - \omega_1 M_3 + P\gamma_3 = 0, \\ \frac{dM_3}{ds} + \omega_1 M_2 - \omega_2 M_1 - P\gamma_2 = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{d\gamma_1}{ds} + \gamma_3 \omega_2 - \gamma_2 \omega_3 = 0, \\ \frac{d\gamma_2}{ds} + \gamma_1 \omega_3 - \gamma_3 \omega_1 = 0, \\ \frac{d\gamma_3}{ds} + \gamma_2 \omega_1 - \gamma_1 \omega_2 = 0 \end{cases} \quad (1)$$

является незамкнутой. Здесь $\omega(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ – вектор Дарбу оси стержня; P – равнодействующая концевых сил; $\mathbf{M}(M_1, M_2, M_3)$ – вектор-момент внутренних сил; $\gamma(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ – единичный вектор, направленный вдоль концевой

силы. Классическая теория упругих стержней Кирхгофа–Клебша исходит из предположения, что компоненты вектора-момента \mathbf{M} пропорциональны соответствующим компонентам вектора Дарбу:

$$M_1 = B_1\omega_1, \quad M_2 = B_2\omega_2, \quad M_3 = B_3\omega_3, \quad (2)$$

где B_i – диагональные элементы матрицы жесткостей стержня [6].

Использование соотношений (2) приводило к заметным погрешностям в исследовании деформаций стержней достаточно сложной конфигурации, особенно в тех случаях, когда длина стержня лишь в несколько раз превышает диаметр его поперечного сечения [6–9]. Кроме того, классическая теория [7, 8] не могла объяснить ряд экспериментально наблюдаемых эффектов при испытании различных технических элементов (например, винтов летательных аппаратов).

Приведенные примеры показывают, насколько важную роль играет характер замыкающих соотношений системы уравнений Кирхгофа при решении задач механики стержней. В связи с этим были получены [7–9] различные обобщения зависимостей (2). Одним из таких обобщений служат зависимости, полученные Г.Ю. Джанелидзе в [8]. Он рассмотрел растяжимый стержень, имеющий в естественном состоянии прямую ось и равномерно закрученный по длине на величину r .

Соотношения, полученные Г.Ю. Джанелидзе, имеют вид

$$\begin{cases} M_1 = B_1(\omega_1 - r) + E(I_P - T)r\varepsilon, & M_2 = B_2\omega_2, & M_3 = B_3\omega_3, \\ \gamma_1 = \frac{E\Omega}{P}\varepsilon + \frac{E}{P}(I_P - T)r(\omega_1 - r), \end{cases} \quad (3)$$

где E – модуль Юнга; Ω – площадь поперечного сечения стержня; T – геометрическая жесткость при кручении; I_P – полярный момент инерции сечения стержня относительно центра тяжести; r – первоначальное (естественное) кручение стержня; ε – относительное удлинение в процессе деформации.

Поставим задачу проинтегрировать систему уравнений Кирхгофа (1) с замыкающими соотношениями (3). Получение точных решений системы (1) для естественно закрученных стержней, так же, как и в теории Кирхгофа–Клебша, имеет большое значение, поскольку с их помощью можно проводить качественный анализ поведения деформированного стержня.

Рассмотрим случай, когда стержень имеет равные жесткости на изгиб, т.е.

$$B_2 = B_3. \quad (4)$$

Система (1), (3) допускает три интеграла

$$\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_3^2 = 1, \quad (5)$$

$$M_1\gamma_1 + M_2\gamma_2 + M_3\gamma_3 = K, \quad (6)$$

$$\frac{1}{2} \left[\frac{M_1^2}{B_1} + \frac{1}{B_2} (M_2^2 + M_3^2) \right] - P\gamma_1 = H. \quad (7)$$

Из соотношений (3), (4) и первого уравнения системы (1) следует дополнительный интеграл

$$M_1 = C_1. \quad (8)$$

С помощью формул (3) перейдем в интегралах (6)–(8) от компонент M_i вектора-момента к компонентам ω_i вектора Дарбу, дополнительно исключив из всех интегралов величину относительного удлинения ε . В результате получим

$$B_1\omega_1\gamma_1 + B_2(\omega_2\gamma_2 + \omega_3\gamma_3) + r\gamma_1\left(\frac{I_P - T}{\Omega}P\gamma_1 - B_1\right) = K, \quad (9)$$

$$B_1\omega_1^2 + B_2(\omega_2^2 + \omega_3^2) - 2P\gamma_1 + 2r\omega_1\left(\frac{I_P - T}{\Omega}P\gamma_1 - B_1\right) = H, \quad (10)$$

$$M_1 = B_1(\omega_1 - r) + r\frac{(I_P - T)P}{\Omega}\gamma_1 = C_1. \quad (11)$$

Согласно теории последнего множителя Якоби, четырех интегралов (5)–(8) достаточно для интегрирования системы (1), (3) в конечном виде, т.е. для нахождения девяти неизвестных величин M_i , ω_i и γ_i как функций дуговой координаты s . С этой целью воспользуемся кинематическими формулами Эйлера

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \dot{\psi} \cos \vartheta + \dot{\varphi}, & \gamma_1 &= \cos \vartheta, \\ \omega_2 &= \dot{\psi} \sin \vartheta \sin \varphi + \dot{\vartheta} \cos \varphi, & \gamma_2 &= \sin \vartheta \sin \varphi, \\ \omega_3 &= \dot{\psi} \sin \vartheta \cos \varphi - \dot{\vartheta} \sin \varphi, & \gamma_3 &= \sin \vartheta \cos \varphi. \end{aligned} \quad (12)$$

Величины ψ , ϑ , φ представляют собой углы Эйлера, определяемые как углы между осями неподвижного базиса и естественного базиса стержня в деформированном состоянии.

Введем безразмерные величины

$$\begin{aligned} (H - B_1\omega_1^2)/2P &= h, & C_1/\sqrt{2PB_2} &= b, & K/\sqrt{2PB_2} &= \beta, \\ B_1\omega_1/\sqrt{2PB_2} &= \tilde{\omega}, & \sqrt{B_2}/2P &= n, & (I_P - T)/\Omega &= I, & B_2/B_1 &= b_1, \\ B_1r\omega_1/P &= b_2, & r\omega_1(I_P - T)/\Omega &= b_3. \end{aligned} \quad (13)$$

Преобразуем интегралы (8) и (9), воспользовавшись представлением (12) основных переменных через углы Эйлера и равенствами (13). В результате получим уравнение для величины γ_1 :

$$n^2 \left(\frac{d\nu}{ds} \right)^2 = f(\nu) = \left(\delta + (\tilde{\omega}^2 - b^2) b_1 + \nu \right) (1 - \nu^2) - (h - \beta\nu)^2, \quad (14)$$

где введены обозначения $\nu = \gamma_1 = \cos \vartheta$, $\delta = h + b^2 - \beta^2$. Интегрирование уравнения (14) позволяет найти γ_1 в виде эллиптической функции дуговой координаты s .

Используя интегралы (9), (11) и соотношения (12), получим уравнение для производной угла ψ :

$$\dot{\psi} = \frac{K - C_1\nu}{B_2(1 - \nu^2)}. \quad (15)$$

Откуда интегрированием находим ψ в виде квадратуры от эллиптической функции дуговой координаты.

Величину ω_1 найдем из интеграла (11)

$$\omega_1 = \frac{1}{B_1}(C_1 + rB_1) + r \frac{(T - I_P)P}{B_1\Omega} \nu. \quad (16)$$

Соотношение (16) позволяет сделать важный вывод о поведении закрученности стержня в процессе деформации. В самом деле: (16) определяет линейную зависимость закрученности ω_1 от ν . Однако, величина ν в силу соотношений (12) и (14) изменяется в промежутке $[-1; 1]$, поэтому закрученность ω_1 при деформации также будет величиной ограниченной:

$$\frac{1}{B_1}(C_1 + rB_1) - r \frac{(T - I_P)P}{B_1\Omega} \leq \omega_1 \leq \frac{1}{B_1}(C_1 + rB_1) + r \frac{(T - I_P)P}{B_1\Omega}. \quad (17)$$

Последнее накладывает ограничение на способность молекулы к сверхспирализации.

Из уравнений (12) и соотношений (14)–(16) оставшиеся семь неизвестных величин ($M_1, M_2, M_3, \omega_2, \omega_3, \gamma_2, \gamma_3$) находятся в виде квадратур от эллиптических функций дуговой координаты s . Полученное решение является обобщением на случай естественно закрученного стержня известного в классической теории Кирхгофа–Клебша решения Лагранжа системы уравнений Кирхгофа (1).

Следует отметить, что запись первых интегралов системы (1), (3) в форме (9)–(11) отражает влияние первоначальной закрученности на постоянные интегрирования. В самом деле, при выборе в качестве независимых величин начальных условий для функций γ_i, ω_i ($i = 1, 2, 3$) зависимой относительно r величиной будет не только $M_1 = C_1$, но также и постоянные H и K интегралов энергии и площадей соответственно, поскольку, наряду с начальными условиями, они определяются еще и конструктивными параметрами исходной системы уравнений, одним из которых является параметр r .

Представим интеграл (11) следующим образом:

$$M_1 = B_1(\omega_1 - r) + E(I_P - T)r\varepsilon = C_1. \quad (18)$$

Соотношение (18) отражает связь между поворотом поперечного сечения при деформации (кручением при деформации) и растяжением. На данной траектории (решении) системы дифференциальных уравнений (1), (3) величина C_1 (а, следовательно, и $C_1 + rB_1$) сохраняет свое значение. Тогда для сохранения значения C_1 на данной траектории при изменении одной из величин ω_1 или ε другая величина также должна изменяться. Таким образом,

в рассматриваемом случае, в отличие от случая Лагранжа в теории Кирхгофа, ω_1 и ε могут быть функциями дуговой координаты, и их изменение будет регулироваться соотношением (18). Одним из проявлений такой связи будет изменение удлинения в результате изменения закрученности. Последний факт в теории Кирхгофа не учитывался.

Взаимосвязь при деформации кручения и удлинения можно использовать как одно из возможных теоретических обоснований явления сверхспирализации, наблюдаемого в молекулах ДНК, а именно: высокая степень закрученности уменьшает длину молекулы, что способствует упаковке длинных молекул в небольшом объеме.

Используя далее метод [6] представления оси стержня в цилиндрической системе координат в виде пересечения цилиндрической поверхности

$$\rho^2 = 4n^2 (\delta + (1 - b_3) \nu + b_2), \quad \frac{d\alpha}{ds} = \frac{\beta\nu - nb}{2n (\delta + (1 - b_3) \nu + b_2)} \quad (19)$$

и поверхности вращения

$$\rho^2 = 4n^2 (\delta + (1 - b_3) \nu + b_2), \quad \frac{d\zeta}{ds} = \nu, \quad (20)$$

и принимая в дальнейшем, что ось молекулы описывается уравнениями (19), (20), приведем условия, которым должны удовлетворять параметры (13), чтобы полученное решение описывало семейство замкнутых конфигураций молекул ДНК.

Перейдем в выражениях для $\frac{d\alpha}{ds}$ и $\frac{d\zeta}{ds}$ к дифференцированию по переменной ν :

$$\frac{d\alpha}{d\nu} = \frac{\beta\nu - nb}{2n(\delta + (1 - b_3)\nu + 2Rb) \sqrt{f(\nu)}}, \quad (21)$$

$$\frac{d\zeta}{d\nu} = \frac{\nu}{\sqrt{f(\nu)}}. \quad (22)$$

Условия замкнутости проекции оси стержня на плоскость, перпендикулярную концевой силе, определяются соотношением

$$\frac{1}{\pi} \int_{\nu_2}^{\nu_3} \frac{(\beta\nu - nb) d\nu}{2n (\delta + (1 - b_3) \nu + 2Rb) \sqrt{f(\nu)}} = \frac{2k}{m}, \quad (23)$$

где k, m – целые числа. Иначе говоря, интеграл, входящий в соотношение (23), должен быть соизмерим с π .

Меридиан поверхности вращения будет замкнут, если

$$\int_{\nu_2}^{\nu_3} \frac{\nu d\nu}{\sqrt{f(\nu)}} = 0. \quad (24)$$

Для осуществления замкнутости совместно с условиями (23), (24) должно выполняться условие для длины стержня:

$$s_k - s_0 = B \int_{\nu_2}^{\nu_3} \frac{d\nu}{\sqrt{f(\nu)}}. \quad (25)$$

Из соотношения (19) следует, что при выполнении условия $b_3 = 1$, имеет место соотношение

$$\rho^2 = 4n^2 (\delta + b_2), \quad (26)$$

т. е. ρ – величина постоянная. Геометрически это означает, что молекула расположена на цилиндрической поверхности. В случае Лагранжа ρ являлось постоянным лишь при постоянном ν , что в динамике твердого тела соответствовало безнутацонному движению гиростата. В рассматриваемом случае постоянство ρ возможно при произвольном ν .

Интегралы в выражениях (23) и (24) имеют устранимые особенности на концах промежутка интегрирования. Устранение этих особенностей можно осуществить с помощью преобразования

$$\nu = \frac{\nu_2 + \nu_3}{2} + \frac{\nu_3 - \nu_2}{2} \sin u,$$

где $-\frac{\pi}{2} \leq u \leq \frac{\pi}{2}$; ν_2, ν_3 – корни полинома $f(\nu) = (\delta + (\tilde{\omega}^2 - b^2)b_1 + \nu)(1 - \nu^2) - (h - \beta\nu)^2$.

Применение указанного преобразования к интегралам в соотношениях (23) и (24) и последующее разложение по степеням независимой переменной в ряд до пятого порядка приводят к следующим выражениям для условий (23) и (24):

для проекции $\alpha(\rho)$:

$$m \left(\frac{\pi h + b_3 \tilde{\omega} + 3\pi\beta(\tilde{\omega} + 7b_3 h \beta + 1) + 3}{\sqrt[3]{(n^4 - h^2 + 3h + h^2 n^3)^4 + \sqrt{5} + (b_3 - b)^4}} + \beta^2 + n^3 + \right. \\ \left. + \tilde{\omega} b_3 \sqrt[3]{n + \beta} + \frac{\pi n \sqrt[3]{n^5 + \sqrt{15}h - b_3^3}}{3\sqrt[4]{29}} \right)^5 = 2\pi k; \quad (27)$$

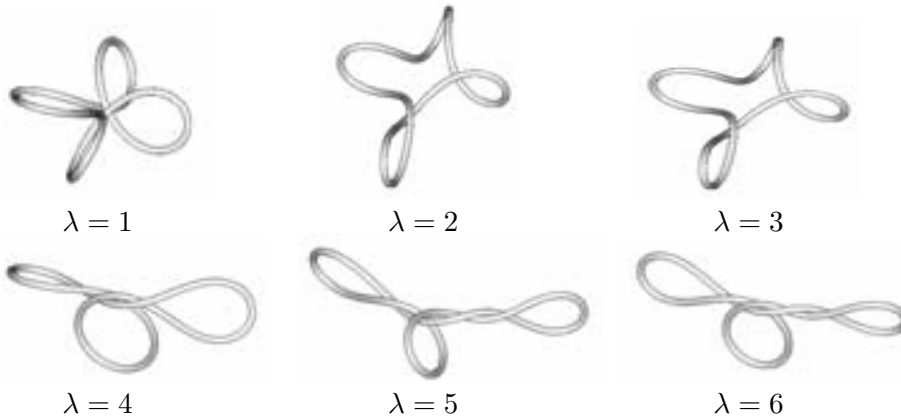
для проекции $\zeta(\rho)$:

$$\left(2h\pi^3 + n - \sqrt[3]{b_1 b_3} \right) \left(n + 2\beta\pi^5 - 2 - \tilde{\omega} \frac{b_3 \sqrt[5]{n + b_1}}{17} \right) = 0. \quad (28)$$

Отметим, что в отсутствие естественной закрученности полученные условия замкнутости молекулы переходят в соответствующие условия для решения Лагранжа [11].

В заключение приведены примеры замкнутых конфигураций молекулы для шести наборов значений параметров решения:

$$b = \lambda 10^{-2}, b_1 = b_2 = b_3 = \beta = n = \lambda 10^{-3}, h = \lambda 10^{-1} \quad (\lambda = \overline{1,6}).$$



Замкнутые конфигурации построены с помощью методов численного анализа [10], примененных к соотношениям (27), (28) и уравнениям (21), (22).

1. Кугушев Е.И., Старостин Е.Л. Математическая модель образования трехмерной структуры ДНК. – М., 1997. – с. – (Препринт / Ин-т проблем механики РАН им. М.В. Келдыша; № 77).
2. Козлов Н.Н., Кугушев Е.И., Сабитов Д.И., Энеев Т.М. Компьютерный анализ процессов структурообразования нуклеиновых кислот. – М., 2002. – с. – (Препринт / Ин-т проблем механики РАН им. М.В. Келдыша; № 42).
3. Frank-Kamenetskii M.D., Lukashin A.V., Anshelevich V.V., Vologodskii A.V. Torsional and bending rigidity of the double helix from data on small DNA rings // J. Biomol. Struct. Dynam. – 1985. – 2. – P. 1005–1012.
4. Smith S.B., Finzi L., Bustamante C. Direkt Mechanical Measurements of the Elasticity of Single DNA-Molecules by using Magnetic Beads // Science. – 1992. – 258. – P. 1122–1126.
5. Storm C., Nelson P. Theory of High-Force DNA Stretching and Overstretching. – ArXiv: physics/0206088, 2002.
6. Илюхин А.А. Пространственные задачи нелинейной теории упругих стержней. – Киев: Наук. думка, 1979. – 216 с.
7. Лурье А.И., Джанелидзе Г.Ю. Задача Сен-Венана для стержней, близких к призматическим // Докл. АН СССР. – 1939. – XXIV, № 1 – № 3. – С.
8. Джанелидзе Г.Ю. Соотношения Кирхгофа для естественно закрученных стержней и их приложения // Тр. Ленинград. политехн. ин-та, 1946. – № 1. – С. 23–32.
9. Устинов Ю.А. Задачи Сен-Венана для псевдоцилиндров. – М., 2003. – 128 с.
10. Илюхин А.А., Тимошенко Д.В. О существовании замкнутых конформаций молекул ДНК // Сб. тр. Междунар. научно-техн. конф. “Математические модели и алгоритмы для имитации физических процессов” (11–14 сентября, 2006 г., Таганрог, Россия). – 2006. – С. 250–255.
11. Илюхин А.А., Тимошенко Д.В. Достаточные условия замкнутости молекул ДНК // Вест. ТГПИ. – 2006. – № 1. – С. 48–54.