

УДК 531.38, 575

©2008. А.А. Илюхин, Д.В. Тимошенко

**ТЕОРИЯ УПРУГИХ СТЕРЖНЕЙ
С ВРАЩАТЕЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ЧАСТИЦ
И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ К ИССЛЕДОВАНИЮ
УСЛОВИЙ ЗАМКНУТОСТИ МОЛЕКУЛ ДНК**

В дополнение к результатам работы [1] получены замыкающие соотношения для системы уравнений Кирхгофа. Указаны кинематические параметры, которые нужно привлечь, чтобы вместе с системой дифференциальных уравнений Кирхгофа получить замкнутую систему. Остальные геометрические величины найдены из определяющих их соотношений. Получены условия, которым должны удовлетворять коэффициенты в замыкающих соотношениях. Для одномерной теории указано решение при наличии жесткостной симметрии. Полученные результаты проинтерпретированы в рамках механического подхода к определению конфигураций молекул ДНК.

Введение. Развитие механики сплошной среды тесно связано с появлением новых математических моделей, рассматривающих частицу материала не как материальную точку, а как более сложный объект, наделенный дополнительными свойствами, описывающими микроструктуру материала. Классическая теория упругости описывает свойства тел, у которых между частицами действуют центральные силы. Эта теория не всеобъемлюща: она, в частности, не в состоянии корректно описать закономерности распространения коротких акустических волн, в особенности в жидких кристаллах, и, в некоторых случаях, законы пьезоэлектрических явлений, а также аномалии динамической упругости пластиков и тонких тел [2]. В связи с этим в работах [2–8] была развита теория упругости сплошных сред, учитывающая моментное (вращательное) взаимодействие частиц – моментная теория упругости.

Поскольку частицы вещества в рамках моментной теории представляют не точки, а пространственные образования, расположенные на расстояниях, сравнимых с их размерами, действие одной частицы на другую определяется целой системой сил и моментов. Взаимодействие любых двух частиц и необходимо воспроизводить [2] с помощью двух сил F^A и F (можно считать, что они приложены к центрам инерции частиц) и двух моментов M^A и M^B , для которых выполняются соотношения:

$$F^A + F^B = 0,$$
$$M^A + M^B + r^{AB} \times F^A = 0,$$

где r^{AB} – вектор, соединяющий центры инерции частиц. Таким образом, наряду с обычным полем напряжений в микрополярированной среде присутствует также и поле моментных напряжений.

Отметим, что экспериментальные исследования структуры и свойств органических молекул и кристаллов, проводившиеся в последние годы [9, 10],

а также практика химического синтеза свидетельствуют о том, что модель органической молекулы в виде системы частиц (атомов или групп атомов) с нецентральной взаимодействием является хорошим приближением к действительности [9]. В частности, в случае молекул ДНК в качестве таких составных частиц рассматривают четыре типа нуклеотидов, образующих двойную спираль. Учитывая сказанное, участок молекулы в виде системы взаимосвязанных частиц можно представить следующим образом (рис. 1):

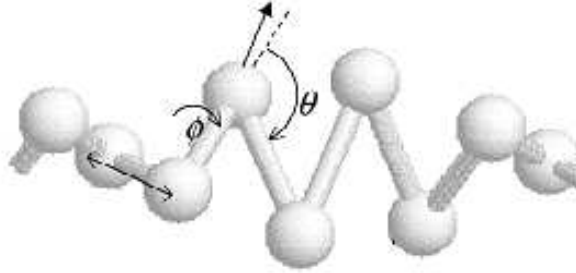


Рис. 1

Углы ϕ и θ , обозначенные на рис. 1, характеризуют поворот частиц как вокруг своей оси, так и относительно водородных связей, соединяющих компоненты двойной спирали.

Применительно к задаче определения пространственной конфигурации молекулы ДНК, сказанное означает необходимость построения стержневой модели, учитывающей большие градиенты напряжений, возникающие при деформациях молекулы. Такая модель позволит оценить интегральное влияние интенсивности моментных взаимодействий компонентов двойной спирали ДНК как на ее способность образовывать замкнутые конфигурации, так и на возможные формы равновесия вообще, при одинаковых, по сравнению с ранее рассмотренными моделями, воздействиях внешней среды.

С другой стороны, построение такой модели важно с точки зрения самой теории стержней, поскольку появляется возможность анализа поведения известных общих и частных решений системы уравнений Кирхгофа и получения новых с учетом изменения взаимосвязей между силовыми и геометрическими характеристиками поведения стержня.

Данная работа посвящена построению микрополярной стержневой модели посредством редукции от трехмерной моментной теории упругости к одномерной (теории стержней) с последующим приложением построенной модели к нахождению условий, при которых молекулы ДНК образуют замкнутые конфигурации в предположении, что молекула представляет собой стержень, структурные компоненты которого участвуют в моментных взаимодействиях. При этом возникает задача обоснования осуществимости редукции от трехмерной теории к одномерной и замкнутости основной системы уравнений полученной одномерной теории.

1. Постановка задачи. В работе [1] асимптотическим методом было получено первое приближение решения задачи о деформации гибкого стержня

в рамках моментной теории упругости, что позволяет поставить задачу: на основе построенного первого приближения решения получить расщепление задачи о деформации стержня на совокупность двумерной и одномерной задач. Уравнения для функций $u_i^{(2)}$, $\theta_i^{(2)}$ координат точек поперечного сечения

$$\begin{aligned}
 &(\mu + \varepsilon)\tilde{\Delta}u_1^{(2)} + 2\varepsilon(\nabla_2\theta_3^{(2)} - \nabla_3\theta_2^{(2)}) = 0, \\
 &(\lambda + 2\mu)\nabla_2\nabla_2u_2^{(2)} + (\mu + \varepsilon)\nabla_3\nabla_3u_2^{(2)} + (\lambda + \mu - \varepsilon)\nabla_2\nabla_3u_3^{(2)} + 2\varepsilon\nabla_3\theta_1^{(2)} = \\
 &= \lambda\kappa_3^{(1)}, \\
 &(\lambda + 2\mu)\nabla_3\nabla_3u_3^{(2)} + (\mu + \varepsilon)\nabla_2\nabla_2u_3^{(2)} + (\lambda + \mu - \varepsilon)\nabla_2\nabla_3u_2^{(2)} - 2\varepsilon\nabla_2\theta_1^{(2)} = \\
 &= -\lambda\kappa_2^{(1)}, \tag{1} \\
 &(\beta + \nu)\tilde{\Delta}\theta_1^{(2)} - 4\varepsilon\theta_1^{(2)} + 2\varepsilon(\nabla_2u_3^{(2)} - \nabla_3u_2^{(2)}) = 0, \\
 &(\delta + 2\beta)\nabla_2\nabla_2\theta_2^{(2)} + (\beta + \nu)\nabla_3\nabla_3\theta_2^{(2)} + (\delta + \beta - \nu)\nabla_2\nabla_3\theta_3^{(2)} - \\
 &- 4\varepsilon\theta_2^{(2)} + 2\varepsilon\nabla_3u_1^{(2)} = 2\varepsilon(\chi_3^{(1)} + x_2\kappa_1^{(1)}), \\
 &(\delta + 2\beta)\nabla_3\nabla_3\theta_3^{(2)} + (\beta + \nu)\nabla_2\nabla_2\theta_3^{(2)} + (\delta + \beta - \nu)\nabla_2\nabla_3\theta_2^{(2)} - \\
 &- 4\varepsilon\theta_3^{(2)} - 2\varepsilon\nabla_2u_1^{(2)} = -2\varepsilon(\chi_2^{(1)} - x_3\kappa_1^{(1)});
 \end{aligned}$$

и граничные условия для них

$$\begin{aligned}
 &(\mu + \varepsilon)\frac{\partial}{\partial n}u_1^{(2)} + 2\varepsilon e_{1\alpha\beta}n_\alpha\theta_\beta^{(2)} = -(\mu - \varepsilon)(n_\alpha\chi_\alpha^{(1)} + \kappa_1^{(1)}e_{1\alpha\beta}x_\alpha n_\beta), \\
 &n_2[(\lambda + 2\mu)\nabla_2u_2^{(2)} + \lambda\nabla_3u_3^{(2)}] + n_3[(\mu + \varepsilon)\nabla_3u_2^{(2)} + (\mu - \varepsilon)\nabla_2u_3^{(2)} + 2\varepsilon\theta_1^{(2)}] = \\
 &= -\lambda n_2(\chi_1^{(1)} + e_{1\alpha\beta}\kappa_\alpha^{(1)}x_\beta), \\
 &n_3[(\lambda + 2\mu)\nabla_3u_3^{(2)} + \lambda\nabla_2u_2^{(2)}] + n_2\{(\mu + \varepsilon)\nabla_2u_3^{(2)} + (\mu - \varepsilon)\nabla_3u_2^{(2)} - 2\varepsilon\theta_1^{(2)}\} = \\
 &= -\lambda n_3(\chi_1^{(1)} + e_{1\alpha\beta}\kappa_\alpha^{(1)}x_\beta), \tag{2} \\
 &(\beta + \nu)\frac{\partial}{\partial n}\theta_1^{(2)} = -(\beta - \nu)n_\alpha\kappa_\alpha^{(1)}, \\
 &n_2[(\delta + 2\beta)\nabla_2\theta_2^{(2)} + \delta\nabla_3\theta_3^{(2)}] + n_3[(\beta + \nu)\nabla_3\theta_2^{(2)} + (\beta - \nu)\nabla_2\theta_3^{(2)}] = -\delta n_2\kappa_1^{(1)}, \\
 &n_3[(\delta + 2\beta)\nabla_3\theta_3^{(2)} + \delta\nabla_2\theta_2^{(2)}] + n_2[(\beta + \nu)\nabla_2\theta_3^{(2)} + (\beta - \nu)\nabla_3\theta_2^{(2)}] = -\delta n_3\kappa_1^{(1)}.
 \end{aligned}$$

Полученная система допускает представление решения в виде

$$\begin{aligned}
 u_2^{(2)} &= \tilde{u}_2^{(2)} - \frac{\lambda\chi_1^{(1)}}{2(\lambda+\mu)}x_2 - \tilde{\theta}_1^{(2)}x_3 + \frac{\kappa_3^{(1)}}{\beta+\nu}\left(\frac{\lambda\beta}{\lambda+2\mu}x_2^2 + \frac{\beta-\nu}{2}x_3^2\right) + \\
 &\quad + \frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\kappa_2^{(1)}x_2x_3 + \kappa_\alpha^{(1)}\nu_\alpha^{(2)}, \\
 u_3^{(2)} &= \tilde{u}_3^{(2)} - \frac{\lambda\chi_1^{(1)}}{2(\lambda+\mu)}x_3 + \tilde{\theta}_1^{(2)}x_2 - \frac{\kappa_2^{(1)}}{\beta+\nu}\left(\frac{\lambda\beta}{\lambda+2\mu}x_3^2 + \frac{\beta-\nu}{2}x_2^2\right) - \\
 &\quad - \frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\kappa_3^{(1)}x_2x_3 + \kappa_\alpha^{(1)}\nu_\alpha^{(3)}, \\
 u_1^{(2)} &= \tilde{u}_1^{(2)} - x_\alpha\chi_\alpha^{(1)} + k_1^{(1)}\nu_1^{(1)}, \\
 \theta_1^{(2)} &= \tilde{\theta}_1^{(2)} - \frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}x_\alpha\kappa_\alpha^{(1)} + \kappa_\alpha^{(1)}\Theta_\alpha^{(3)}, \\
 \theta_2^{(2)} &= -\chi_3^{(1)} - \frac{\delta\kappa_1^{(1)}}{2(\delta+\beta)}x_2 + \kappa_1^{(1)}\Theta_1^{(2)}, \\
 \theta_3^{(2)} &= \chi_2^{(1)} - \frac{\delta\kappa_1^{(1)}}{2(\delta+\beta)}x_3 + \kappa_1^{(1)}\Theta_1^{(3)}.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Одномерная задача представляет собой совокупность уравнений Кирхгофа

$$\frac{\tilde{d}}{ds}\mathbf{F} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{F} = \mathbf{0}, \quad \frac{\tilde{d}}{ds}\mathbf{M} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M} + \mathbf{e} \times \mathbf{F} = \mathbf{0} \tag{4}$$

и замыкающих соотношений

$$F_i = \int_{\Omega} \sigma_{1i} d\Omega, \quad M_i = \int_{\Omega} (e_{i\alpha k} x_k \sigma_{1k} + \mu_{1i}) d\Omega. \tag{5}$$

В уравнениях (4) $\frac{\tilde{d}}{ds}$ обозначает относительную производную по дуговой координате s в главных осях изгиба и кручения.

Ниже будет обоснована возможность расщепления трехмерной задачи на уравнения (1)–(5), найден явный вид замыкающих соотношений (5) и проанализированы их свойства.

В соотношениях (3) функции $\nu_i^{(j)}$, $\Theta_i^{(j)}$ являются функциями координат точек только в плоскости поперечного сечения. Для нахождения этих функций допустим определенный произвол в силу неединственности решения задачи Сен-Венана. Уравнения для нахождения функций $\nu_i^{(j)}$, $\Theta_i^{(j)}$ можно получить следующим образом. Запишем шесть дифференциальных уравнений

равновесия для функций $\nu_i^{(j)}, \Theta_i^{(j)}$, используя соотношения (3). В полученных соотношениях приравняем нулю коэффициенты при величинах $\kappa_i^{(1)}$, в результате получим уравнения для нахождения девяти неизвестных функций $\nu_i^{(j)}, \Theta_i^{(j)}$:

$$\begin{aligned} & \frac{2\lambda\beta}{\beta+\nu} + (\lambda+2\mu)\nabla_2^2\nu_3^{(2)} + (\mu+\varepsilon)\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} + (\mu+\varepsilon)\nabla_3^2\nu_3^{(2)} - (\lambda+\mu-\varepsilon)\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} + \\ & + (\lambda+\mu-\varepsilon)\nabla_2\nabla_3\nu_3^{(3)} - 2\varepsilon\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} + 2\varepsilon\nabla_3\Theta_3^{(3)} - \lambda = 0, \\ & (\lambda+2\mu)\nabla_2^2\nu_2^{(2)} + (\mu+\varepsilon)\nabla_3^2\nu_2^{(2)} + (\lambda+\mu-\varepsilon)\nabla_2\nabla_3\nu_2^{(3)} + 2\varepsilon\nabla_3\Theta_2^{(3)} = 0, \\ & (\mu+\varepsilon)\tilde{\Delta}\nu_1^{(1)} + 2\varepsilon(\nabla_2\Theta_1^{(3)} + \nabla_3\Theta_1^{(2)}) = 0, \\ & -\frac{2\lambda\beta}{\beta+\nu} + (\lambda+2\mu)\nabla_3^2\nu_2^{(3)} - (\mu+\varepsilon)\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} + (\mu+\varepsilon)\nabla_2^2\nu_2^{(3)} - (\lambda+\mu-\varepsilon)\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} + \\ & + (\lambda+\mu-\varepsilon)\nabla_2\nabla_3\nu_2^{(2)} + 2\varepsilon\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} - 2\varepsilon\nabla_2\Theta_2^{(3)} + \lambda = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & (\lambda+2\mu)\nabla_3^2\nu_3^{(3)} + (\mu+\varepsilon)\nabla_2^2\nu_3^{(3)} + (\lambda+\mu-\varepsilon)\nabla_2\nabla_3\nu_3^{(2)} + 2\varepsilon\nabla_3\Theta_3^{(3)} = 0, \\ & (\beta+\nu)\tilde{\Delta}\Theta_2^{(3)} + 2\varepsilon(\nabla_2\nu_2^{(3)} - \nabla_3\nu_2^{(2)} - 2\Theta_2^{(3)}) = 0, \\ & (\beta+\nu)\tilde{\Delta}\Theta_3^{(3)} + 2\varepsilon(\nabla_2\nu_3^{(3)} - \nabla_3\nu_3^{(2)} - 2\Theta_3^{(3)}) = 0, \\ & (\delta+2\beta)\nabla_2^2\Theta_1^{(2)} + (\beta+\nu)\nabla_3^2\Theta_1^{(2)} + (\delta+\beta-\nu)\nabla_2\nabla_3\Theta_1^{(3)} + \\ & + \left(2\varepsilon\frac{\delta}{\delta+\beta} - 1\right)x_2 - 4\varepsilon\Theta_1^{(2)} + 2\varepsilon\nabla_3\nu_1^{(1)} = 0, \\ & (\delta+2\beta)\nabla_3^2\Theta_1^{(3)} + (\beta+\nu)\nabla_2^2\Theta_1^{(3)} + (\delta+\beta-\nu)\nabla_2\nabla_3\Theta_1^{(2)} + \\ & + \left(2\varepsilon\frac{\delta}{\delta+\beta} - 1\right)x_3 - 4\varepsilon\Theta_1^{(3)} - 2\varepsilon\nabla_2\nu_1^{(1)} = 0. \end{aligned}$$

Граничные условия для функций $\nu_i^{(j)}, \Theta_i^{(j)}$ имеют вид

$$\begin{aligned} & \lambda(n_2\nu_2^{(2)} + n_3\nu_2^{(3)}) = 0, \quad n_2\nabla_2\Theta_2^{(3)} - n_3\nabla_3\Theta_2^{(3)} = 0, \quad n_2\nabla_2\Theta_3^{(3)} + n_3\nabla_3\Theta_3^{(3)} = 0, \\ & n_2(\delta+2\beta)\nabla_2\Theta_1^{(2)} + n_3(\beta+\nu)\nabla_3\Theta_1^{(2)} = 0, \quad (7) \\ & (\beta-\nu)n_2\Theta_3^{(3)} - (\beta+\nu)n_3\Theta_2^{(3)} = 0, \\ & n_2(\beta-\nu)\nabla_2\Theta_1^{(3)} + n_3\delta\nabla_3\Theta_1^{(3)} = 0. \end{aligned}$$

Девять уравнений (6) для девяти неизвестных $\nu_i^{(j)}$, $\Theta_i^{(j)}$ являются независимыми, что указывает на расщепление трехмерной задачи на систему двумерных уравнений для нахождения функций $\nu_i^{(j)}$, $\Theta_i^{(j)}$ координат точек поперечного сечения и одномерных уравнений для нахождения функций дуговой координаты.

Используя формулы (5), получим следующие выражения для компонент M_i вектора-момента:

$$\begin{aligned} M_1 &= (B_1 + A_1)\omega_1, & M_2 &= B_{22}\omega_2 + (B_{23} + A_2)\omega_3, \\ M_3 &= (B_{31} + A_3)\omega_2 + B_{33}\omega_3, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} B_1 &= \iint_{\Omega} \left(\mu x_2 \nabla_3 \nu_1^{(1)} + \mu x_2^2 - \frac{\varepsilon \delta}{\delta + \beta} x_2^2 + 2\varepsilon x_2 \Theta_1^{(2)} + \varepsilon x_2^2 - \varepsilon x_2 \nabla_3 \nu_1^{(1)} - \right. \\ &\quad \left. - \mu x_3 \nabla_2 \nu_1^{(1)} \right) d\Omega + \iint_{\Omega} \left(\mu x_3^2 - \frac{\varepsilon \delta}{\delta + \beta} x_3^2 + 2\varepsilon x_3 \Theta_1^{(3)} + \varepsilon x_3 \nabla_2 \nu_1^{(1)} + \varepsilon x_3^2 \right) d\Omega, \\ A_1 &= \iint_{\Omega} \delta \left(\nabla_2 \Theta_1^{(2)} + \nabla_3 \Theta_1^{(3)} \right) d\Omega, \\ B_{22} &= \iint_{\Omega} \left(2\mu \left(1 + \frac{2\lambda\beta}{(\beta + \nu)(\lambda + 2\mu)} \right) x_3^2 + \lambda \left(\nabla_2 \nu_2^{(2)} + \nabla_3 \nu_2^{(3)} \right) x_3 \right) d\Omega, \\ B_{23} &= \iint_{\Omega} \left(-2\mu \left(1 + \frac{2\lambda\beta}{(\beta + \nu)(\lambda + 2\mu)} \right) x_2 x_3 + \lambda \left(\nabla_2 \nu_3^{(2)} + \nabla_3 \nu_3^{(3)} \right) x_3 \right) d\Omega, \\ A_2 &= \iint_{\Omega} (\beta - \nu) \nabla_2 \Theta_3^{(3)} d\Omega, \\ B_{31} &= \iint_{\Omega} \lambda \left(\nabla_2 \nu_2^{(2)} + \nabla_3 \nu_2^{(3)} \right) x_2 d\Omega, \\ B_{33} &= \iint_{\Omega} \left(2\mu \left(1 + \frac{2\lambda\beta}{(\beta + \nu)(\lambda + 2\mu)} \right) x_2^2 + \lambda \left(\nabla_3 \nu_3^{(2)} - \nabla_2 \nu_3^{(3)} \right) x_2 \right) d\Omega, \\ A_3 &= \iint_{\Omega} (\beta + \nu) \nabla_3 \Theta_2^{(3)} d\Omega. \end{aligned} \quad (9)$$

Коэффициенты A_i в соотношениях (9) характеризуют вклад моментных напряжений, возникающих между частицами в процессе деформации, в величину компонент вектора-момента.

Анализ выражения для коэффициента B_{23} показывает, что интеграл

$$\iint_{\Omega} -2\mu \left(1 + \frac{2\lambda\beta}{(\beta + \nu)(\lambda + 2\mu)} \right) x_2 x_3 d\Omega$$

обращается в нуль как интеграл в главных осях инерции поперечного сечения. Таким образом, выражение для коэффициента B_{23} принимает вид

$$B_{23} = \iint_{\Omega} \lambda (\nabla_2 \nu_3^{(2)} + \nabla_3 \nu_3^{(3)}) x_3 d\Omega.$$

Применим к последнему интегралу формулу Грина, тогда

$$B_{23} = \int_{\Gamma} \lambda (n_2 \nu_3^{(2)} + n_3 \nu_3^{(3)}) d\Gamma.$$

Интеграл в правой части обращается в нуль в силу граничных условий (7). Следовательно, имеет место равенство

$$B_{23} = 0.$$

Анализируя соотношение для коэффициента B_{31} , с учетом граничных условий (7) получим

$$B_{31} = 0.$$

Таким образом, показано, что величины B_{23} и B_{31} в соотношениях (8) обращаются в нуль без каких-либо дополнительных ограничений на характер деформаций или свойства деформируемого объекта. Последнее означает, что учет моментных напряжений не приводит к изменению структуры замыкающих соотношений системы уравнений Кирхгофа посредством появления величин γ_i , зависящих от силовых напряжений, что имело место в случае естественно закрученного стержня [11]. Следовательно, при отсутствии моментных напряжений ($A_i = 0$) замыкающие соотношения (8) переходят в соотношения, соответствующие классической теории Кирхгофа.

Проанализируем величины A_i . Можно показать, что коэффициент A_1 является величиной неотрицательной, таким образом, учет моментных напряжений приводит к увеличению сопротивления материала стержня деформации растяжения (увеличению суммарной жесткости) и, как следствие, к увеличению растягивающего момента M_1 .

Рассмотрим выражения для коэффициентов A_2 и A_3 :

$$A_2 = \iint_{\Omega} (\beta - \nu) \nabla_2 \Theta_3^{(3)} d\Omega, \quad A_3 = \iint_{\Omega} (\beta + \nu) \nabla_3 \Theta_2^{(3)} d\Omega;$$

вычтем из A_2 величину A_3 , получим

$$A_2 - A_3 = \iint_{\Omega} \left((\beta - \nu) \nabla_2 \Theta_3^{(3)} - (\beta + \nu) \nabla_3 \Theta_2^{(3)} \right) d\Omega.$$

В последнем равенстве воспользуемся формулой Грина:

$$A_2 - A_3 = \int_{\Gamma} \left((\beta - \nu) n_2 \Theta_3^{(3)} - (\beta + \nu) n_3 \Theta_2^{(3)} \right) d\Gamma, \quad (10)$$

где Γ – контур поперечного сечения. В силу граничных условий (7) подынтегральное выражение в (10) обращается в нуль, откуда следует, что

$$A_2 = A_3 = A. \quad (11)$$

Равенство (11) носит общий характер, поскольку получено без каких-либо дополнительных ограничений на систему уравнений трехмерной задачи.

Соотношения (8) для компонент M_i вектора-момента представляют собой замыкающие соотношения для системы уравнений Кирхгофа. С учетом произведенного анализа эти соотношения принимают вид

$$M_1 = \tilde{B}_1 \omega_1, \quad M_2 = B_2 \omega_2 + A \omega_3, \quad M_3 = B_3 \omega_3 + A \omega_2, \quad (12)$$

где $\tilde{B}_1 = B_1 + A_1$, а $B_i = B_{ii}$ ($i = 1, 2$).

Соотношения (12) совместно с системой уравнений Кирхгофа представляют собой замкнутую систему, описывающую деформации стержня под действием конечных нагрузок с учетом моментных напряжений, возникающих в процессе деформации между частицами, из которых состоит материал стержня.

2. Исследование общих соотношений одномерной теории. Система уравнений Кирхгофа для рассматриваемой модели сохраняет свой вид:

$$\begin{cases} \frac{dM_1}{ds} + \omega_2 M_3 - \omega_3 M_2 = 0, \\ \frac{dM_2}{ds} + \omega_3 M_1 - \omega_1 M_3 + P\gamma_3 = 0, \\ \frac{dM_3}{ds} + \omega_1 M_2 - \omega_2 M_1 - P\gamma_2 = 0; \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{d\gamma_1}{ds} + \gamma_3 \omega_2 - \gamma_2 \omega_3 = 0, \\ \frac{d\gamma_2}{ds} + \gamma_1 \omega_3 - \gamma_3 \omega_1 = 0, \\ \frac{d\gamma_3}{ds} + \gamma_2 \omega_1 - \gamma_1 \omega_2 = 0, \end{cases} \quad (13)$$

а замыкающие соотношения приведены к виду (12).

Система (13) без дополнительных ограничений на коэффициенты соотношений (12) допускает следующие два интеграла:

$$\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_3^2 = 1, \quad (14)$$

$$M_1 \gamma_1 + M_2 \gamma_2 + M_3 \gamma_3 = K. \quad (15)$$

Как видно, структура геометрического интеграла и интеграла площадей сохраняется по сравнению с теорией Кирхгофа, в то же время, интеграл энергии имеет вид

$$\tilde{B}_1 \omega_1^2 + B_2 \omega_2^2 + B_3 \omega_3^2 + 2A \omega_2 \omega_3 - 2P\gamma_1 = 2H. \quad (16)$$

При дополнительном условии $B_2 = B_3$ система (13) допускает четвертый интеграл, который следует из первого уравнения системы:

$$\tilde{B}_1 \omega_1^2 + 2A\omega_2\omega_3 + 2\frac{A}{B_2}P\gamma_1 = C. \quad (17)$$

Преобразовав интегралы (15) и (16) с помощью кинематических уравнений Эйлера, получим следующее уравнение для нахождения величины γ_1 :

$$n^2 \left(\frac{d\nu}{ds} \right)^2 = f(\nu) = [h + (a_2 + 1)\nu] (1 - \nu^2) - [an(a - 1) - b]\nu + \beta]^2, \quad (18)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} \sqrt{B_2/2P} = n, \quad (2H - C)/2P = h, \quad a = \frac{A}{B_1}, \quad a_2 = \frac{A}{B_2}, \\ K/\sqrt{2PB_2} = \beta, \quad \gamma_1 = \cos \vartheta = \nu. \end{aligned} \quad (19)$$

Так как левая часть уравнения (18) неотрицательна, возникает необходимость определить те значения ν , при которых выполнено условие $f(\nu) \geq 0$. В силу свойств системы дифференциальных уравнений (13) ее решение определено при любых начальных значениях $\vartheta|_{s=0} = \vartheta_0$ (при этом необходимо иметь в виду соответствующие начальным значениям переменных значения безразмерных параметров). Поэтому можно считать выполненным неравенство $f(\nu_0) = f(\cos \vartheta_0) \geq 0$, $|\nu_0| \leq 1$. Заметим далее, что $f(-\infty) > 0$, $f(-1) \leq 0$, $f(1) \leq 0$. Отсюда следует, что уравнение $f(\nu) = 0$ имеет три действительных корня. Один корень принадлежит полуоси $\nu \leq -1$, а два других находятся в интервале $(-1; 1)$. Обозначим эти корни ν_1, ν_2, ν_3 в соответствии с их расположением на числовой оси: $\nu_1 \leq -1 \leq \nu_2 \leq \nu_3 \leq 1$. Функция $f(\nu)$ будет принимать следующие значения:

$$\begin{aligned} f(\nu) > 0 \quad \text{для } \nu < \nu_1 \leq -1, \quad f(\nu) < 0 \quad \text{для } \nu_1 < \nu < \nu_2, \\ f(\nu) > 0 \quad \text{для } \nu_2 < \nu \leq \nu_3, \quad f(\nu) < 0 \quad \text{для } \nu > \nu_3. \end{aligned}$$

Учитывая, что $\nu = \cos \vartheta$ не превосходит по абсолютной величине единицы, областью определения правой части дифференциального уравнения (18) следует считать отрезок

$$\nu_2 \leq \nu \leq \nu_3. \quad (20)$$

Перепишем уравнение (18), воспользовавшись разложением полинома $f(\nu)$:

$$n^2 \left(\frac{d\nu}{ds} \right)^2 = (a_2 + 1)(\nu_3 - \nu)(\nu - \nu_2)(\nu - \nu_1). \quad (21)$$

С целью определения зависимости $\nu = \nu(s)$ выполним ряд последовательных преобразований. После замены $\nu = \nu_3 - (\nu_3 - \nu_2)w^2$ уравнение (21) примет вид

$$\left(\frac{dw}{ds} \right)^2 = m^2 (1 - w^2) (1 - k^2 w^2), \quad (22)$$

где $m = \frac{1}{2b} \sqrt{\nu_3 - \nu_2}$, $k^2 = \frac{\nu_3 - \nu_2}{\nu_3 - \nu_1}$, причем интервал изменения переменной w фиксирован

$$0 \leq w^2 \leq 1. \quad (23)$$

Обе величины в скобках в уравнении (22) положительны, когда w^2 изменяется в интервале (23), так как $k^2 < 1$.

Полагая $w = \sin x$, решение уравнения (22) представим в нормальной форме Лежандра

$$m(s - s_1) = \int_0^x \frac{dx}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 x}}, \quad (24)$$

или, в обозначениях Лежандра, $m(s - s_1) = F(k, x)$. С помощью функций Якоби равенство (24) представим в виде $w = \operatorname{sn} m(s - s_1)$. Окончательно получаем

$$\nu = \nu_3 - (\nu_3 - \nu_2) \operatorname{sn}^2 m(s - s_1). \quad (25)$$

3. Цилиндрические координаты точек упругой линии. Определив зависимость ν от s , можно считать зависимость других величин от s также известной, если они заданы как функции ν . Используем метод [12] представления оси стержня в цилиндрической системе координат в виде пересечения цилиндрической поверхности

$$\rho^2 = 4n^2 (\delta + (a + 1)\nu + (a + a_2)\nu^2), \quad (26)$$

$$\frac{d\alpha}{ds} = \frac{\beta(a + 1)\nu + \beta(a + a_2)\nu^2 - (nb + a(a + a_2))}{2n(\delta + (a + 1)\nu + a(a + a_2)\nu^2)} \quad (27)$$

и поверхности вращения

$$\rho^2 = 4n^2 (\delta + (a + 1)\nu + (a + a_2)\nu^2), \quad \frac{d\zeta}{ds} = \nu. \quad (28)$$

Для дальнейших исследований удобно в соотношениях (27) и (28) перейти к дифференцированию по переменной ν :

$$\frac{d\alpha}{d\nu} = \frac{\beta(a + 1)\nu + \beta(a + a_2)\nu^2 - (b + a(a + a_2))}{2n(\delta + (a + 1)\nu + a(a + a_2)\nu^2)\sqrt{f(\nu)}}, \quad \frac{d\zeta}{d\nu} = \frac{\nu}{\sqrt{f(\nu)}}. \quad (29)$$

Условия замкнутости проекций имеют вид

$$m\Delta\alpha = m \int_{\nu_2}^{\nu_3} \frac{\beta(a + 1)\nu + \beta(a + a_2)\nu^2 - (b + a(a + a_2))}{2n(\delta + (a + 1)\nu + a(a + a_2)\nu^2)\sqrt{f(\nu)}} d\nu = 2\pi k, \quad (30)$$

$$\Delta\zeta = \int_{\nu_2}^{\nu_3} \frac{\nu}{\sqrt{f(\nu)}} d\nu = 0. \quad (31)$$

Границами промежутков интегрирования в (30) и (31) служат корни полинома $f(\nu)$; кроме того, интегралы (30) и (31) имеют в точках ν_2 и ν_3 особенность, устранимую при помощи следующей замены:

$$\nu = \frac{\nu_2 + \nu_3}{2} + \frac{\nu_3 - \nu_2}{2} \sin u, \quad (32)$$

где $-\frac{\pi}{2} \leq u \leq \frac{\pi}{2}$, ν_2, ν_3 – корни полинома $f(\nu)$.

Применяя преобразование (32) к интегралам (30) и (31), а затем разлагая подынтегральные функции в ряд Тейлора до пятого порядка, получим следующие представления условий замкнутости:

для проекции $\alpha(\rho)$

$$m \left(\frac{\pi(h+3\beta)^3 \sqrt{-3a_2^2 + 8a_2 + 27}}{\sqrt[3]{(a\beta + n^4 - (h+a_2)^2 + 3h - 12aa_2\beta h + h^2n^3)^4 + \sqrt{5}} + \beta^2 + (a+n)^3 - a_2h + \frac{\pi n^3 \sqrt{n^5 + \sqrt{15}h}}{((a+a_2^3)^2 + 3)\sqrt{-a^2 - \sqrt{5}a + \sqrt{29}}} \right)^5 = 2\pi k; \quad (33)$$

для проекции $\zeta(\rho)$

$$(2h\pi^3 + n(a_2 + 1) + \beta a(2a_2 - 1))(n + 2\beta(a + 1)\pi^5 - 2) = 0. \quad (34)$$

Из соотношения (33) вытекают дополнительные ограничения для параметров a и a_2 :

$$\frac{1}{2}(\sqrt{5} - \sqrt{5 + 4\sqrt{29}}) < a < \frac{1}{2}(\sqrt{5} + \sqrt{5 + 4\sqrt{29}}), \quad (35)$$

$$4 - \sqrt{97} < a_2 < 4 + \sqrt{97}. \quad (36)$$

Соотношения (33), (34) описывают поверхности в пространстве параметров a, a_2, n, h, β . При этом на пересечении указанных поверхностей (т. е. при удовлетворении параметров сразу двум соотношениям) осуществляется одновременная замкнутость обеих проекций. Ограничения (35), (36) можно интерпретировать в том смысле, что учет взаимодействий структурных компонентов молекулы приводит к ограничениям на физические параметры молекулы, а также, что не менее важно, на возможность образования замкнутых конфигураций.

Следует отметить, что при отсутствии учета моментных взаимодействий, (33) и (34) переходят в соотношения, описывающие множество замкнутых конфигураций для случая прямолинейного исходного состояния с равными жесткостями на изгиб, полученные в [13]. Последнее показывает преимущество построенной модели по отношению к классической теории Кирхгофа.

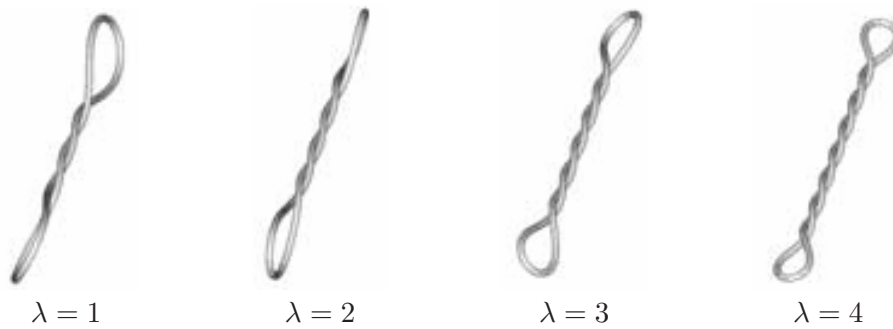


Рис. 2

В заключение приведены примеры замкнутых конфигураций молекулы для следующих значений набора параметров решения:

$$a = \lambda 10^{-4}, \quad a_2 = \beta = \lambda 10^{-3}, \quad n = \lambda 10^{-5}, \quad h = \lambda 10^{-2} \quad (\lambda = \overline{1, 4}; \text{ см. рис. 2})$$

и $a = \lambda 10^{-4}, \quad a_2 = \beta = \lambda 10^{-3}, \quad n = \lambda 10^{-5}, \quad h = \lambda 10^{-2}, \quad (\lambda = \overline{1, 3}; \text{ см. рис. 3})$

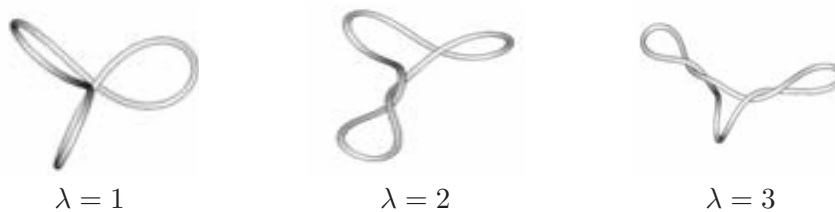


Рис. 3

Замкнутые конфигурации построены с помощью методов численного анализа [13] для соотношений (33), (34) и уравнений (29).

1. *Илюхин А.А., Щепин Н.Н.* К моментной теории упругих стержней // Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естеств. науки. Спецвыпуск. – 2001. – С. 92–94.
2. *Аэро Э.Л., Кувшинский Е.В.* Основные уравнения теории упругости сред с вращательным взаимодействием частиц // Физика твердого тела. – 1960. – **2**, № 7. – С. 1399–1409.
3. *Аэро Э.Л., Кувшинский Е.В.* Континуальная теория асимметрической упругости // Там же. – 1969. – **5**, № 9. – С. 2591–2598.
4. *Пальмов В.А.* Основные уравнения теории несимметричной упругости // Прикл. математика и механика. – 1964. – **28**, вып. 3. – С. 401–408.
5. *Шкутин Л.И.* Нелинейные модели деформируемых моментных сред // Прикл. механика и техн. физика. – 1980. – № 6. – С. 111–117.
6. *Шкутин Л.И.* Обобщенные модели типа Коссера для анализа конечных деформаций тонких тел // Там же. – 1996. – **37**, № 3. – С. 120–132.

7. *Еремеев В.А.* Об устойчивости упругих тел с моментными напряжениями // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 1994. – № 3. – С. 181–190.
8. *Cosserat E., Cosserat F.* Théorie des corps deformables. – Paris, 1909. – 226 pp. (Appendix, p. 953–1173 of Chwolson’s *Traite de Physique*. 2nd ed., Paris).
9. *Китайгородский А.И.* Невалентные взаимодействия атомов в органических кристаллах и молекулах // Успехи физ. наук. – 1979. – **127**, вып. 3. – С. 391–419.
10. *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.
11. *Илюхин А.А., Тимошенко Д.В.* Решение задачи о деформации естественно закрученного и растяжимого стержня и применение его к исследованию условий замкнутости молекул ДНК // См. статью в наст. сб. – С. 161–167.
12. *Илюхин А.А.* Пространственные задачи нелинейной теории упругих стержней. – Киев: Наук. думка, 1979. – 216 с.
13. *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, Россия, Таганрог). – 2006. – С. 250–255.

Гос. педагогический институт, Таганрог, Россия
stab@tgpi.org.ru, dmitrytim@yandex.ru

Получено 15.09.08