ской химии, т. 40, 1966, № 4, с. 965 – 966. 4. Карнаухов,А.П. Глобулярная модель пористых тел корпускулярного строения. – Кинетика и катализ, т. 12, 1971, Вып. 4, с. 1025 – 1033. 5. Карнаухов,А.П. Модели пористых систем. – В кн.: Моделирование пористых материалов. Новосибирск, 1976, с. 42 – 59. 6. Фукс,Н.А., Кирш,А.А., Стечкина,И.Б. Динамические методы исследования структуры волокнистых фильтров. – В кн.: Адсорбция и пористость, М.: Наука, 1976, с. 313 – 317. 7. Шейдеггер,А.Э. Физика течения жидкостей через пористые среды. – М.: Гостоптехиздат, 1960. 249 с. 8. Коллинз,Р. Течение жидкостей через пористые материалы. – М.: Мир, 1964, 350 с. 9. Косторнов,А.Г. Параметры пористой структуры проницаемых материалов. Сообщение 1. Теоретические предпосылки и модельные исследования. – Порошковая металлургия, 1978, № 4, с. 34 – 40. 10. Кудряшов,А.Ф., Волгин,В.Д., Плановский А.Н. Определение экспериментального ряда распределения пор по размерам в пористых телах применительно к процессам фильтрации и ультрафильтрации. – В кн.: Химическое машиностроение. М., 1974, Вып. 1, с. 108 – 114. 11.Фенелонов,В.Б., Загорская,Р.В. Некоторые вопросы моделирования структуры катализаторов, носителей и адсорбентов. – В кн. Моделирование пористых материалов. Новосибирск, 1976, с. 60 – 77. 12.Лейбензон,Л.С. Движение природных жидкостей и газов в пористой среде. – М. – Л.: Гостехиздат, 1947. 244 с.

УДК 531.8

Ширко А.В., Камлюк А.Н., Немцов В.Б.

МЕХАНИКА СВЕРХСКРУЧЕННЫХ СТЕРЖНЕЙ С ВИНТОВОЙ СТРУКТУРОЙ

Белорусский государственный технологический университет
Минск, Беларусь

Введение. Для описания поведения сложных систем и явлений часто используются упрощенные модели. Одной из широко используемых моделей является модель упругого стержня с круговым поперечным сечением.

Данная модель получила применение для исследования упругих свойств не только механических объектов. Как оказалось модель в виде стержня позволяет успешно изучать такие классы веществ и материалов как эластомеры, ЖК-полимеры и биомолекулы [1, 2].

В данной работе исследуются равновесные формы сверхскрученных стержней. Для анализа используется модель упругого изотропного гомогенного стержня единичной длины с круглым поперечным сечением при больших нелинейных деформациях кручения и изгиба.

Постановка задачи. Каждому значению естественной координаты s ($0 \le s \le 1$), отсчитываемой вдоль оси стержня, соответствует определенное значение радиус-вектора $\mathbf{r}(s)$. Ориентация поперечного сечения стержня задается ортогональной системой единичных векторов $(\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3)$. Вектор $\mathbf{d}_3$, нормальный к плоскости сечения, является первой производной от радиус-вектора $\mathbf{d}_3 = \mathbf{r}'$. Штрих означает дифференцирование по s. Векторы $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_2$ лежат в плоскости сечения и совпадают с его главными осями.

Разложение вектора полной деформации $\mathbf{u}$ по ортогональному базису $(\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3)$ имеет вид

$$\mathbf{u} = u_1\mathbf{d}_1 + u_2\mathbf{d}_2 + u_3\mathbf{d}_3 .$$

Составляющие u_1 и u_2 описывают изгиб стержня, а составляющая u_3 – его кручение. Используя кинематику ориентационной деформации [3] вектор $\mathbf{u}$ можно записать в форме

$$\mathbf{u}(\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{d}_1 \times \frac{d\mathbf{d}_1}{ds} + \mathbf{d}_2 \times \frac{d\mathbf{d}_2}{ds} + \mathbf{d}_3 \times \frac{d\mathbf{d}_3}{ds}\right). \quad (1)$$

Равновесие стержня соответствует минимуму энергии деформации при определенных ограничениях, наложенных на пространственные конфигурации стержня.

Энергию деформации U выразим через деформации изгиба и кручения $u_i(s)$:

Будем предполагать, что в отсутствии внешних сил стержень имеет определенную начальную конфигурацию $\left(\mathbf{d}_1^0(s), \mathbf{d}_2^0(s), \mathbf{d}_3^0(s)\right)$ с минимальной энергией, отвечающей деформациям $u_i^0(s) = \left(\mathbf{d}_1^0, \mathbf{d}_2^0, \mathbf{d}_3^0\right)$.

Энергию деформации выразим с помощью ее линейной плотности $W(u_1, u_2, u_3, s)$,

$$U = \int_0^1 W(u_1(s), u_2(s), u_3(s), s)\,ds, \tag{2}$$

где $W(u_1, u_2, u_3, s) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} K_i \left(u_i - u_i^0\right)^2$ ($K_1 = K_2$ – жесткости на изгиб, $K_3 = 0.8K_1$ – жесткость на кручение).

Для кольцевых форм функционал (2) должен удовлетворять трем условиям: во-первых, условию замкнутости кольца, являющимся интегральной связью (см. рис.1)

$$\mathbf{r}(1) = \mathbf{r}(0) \quad \text{или} \quad \int_0^1 \mathbf{d}_3(s)ds = 0, \tag{3}$$

во-вторых, условию равенства векторов касательных в начальной и конечной точках кольца

$$\mathbf{d}_3(1) = \mathbf{d}_3(0), \tag{4}$$

и в третьих, условию связи нормали и бинормали в начальной и конечной точках кольца

$$\mathbf{d}_1(1) = \cos\alpha\,\mathbf{d}_1(0) + \sin\alpha\,\mathbf{d}_2(0),$$
$$\mathbf{d}_2(1) = -\sin\alpha\,\mathbf{d}_1(0) + \cos\alpha\,\mathbf{d}_2(0).$$

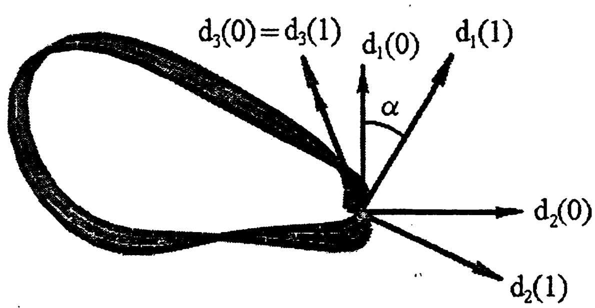

Рисунок 1 - Граничные условия для кольца $\mathbf{d}_1(s)$ – бинормаль; $\mathbf{d}_2(s)$ – нормаль; $\mathbf{d}_3(s)$ – касательная; α – угол поворота сечения стержня в начальном положении относительно его конечного положения

Уравнения равновесия. Компоненты ортогональной тройки векторов можно выразить с помощью углов Эйлера. Однако при решении уравнений равновесия записанных через углы Эйлера возникают существенные трудности, связанные с сингулярностью и вырожденностью якобиана. В данном представлении удается описать равновесные конфигурации стержня без учета кручения. Поэтому для построения уравнений равновесия используем алгебру кватернионов [4, 5].

Ориентацию поперечных сечений стержня зададим с помощью компонентов кватерниона $\mathbf{q} = \mathbf{q}(s) = (q_1, q_2, q_3, q_4) \in \square^4$,

$$\left[\mathbf{d}_1(\mathbf{q})\ \mathbf{d}_2(\mathbf{q})\ \mathbf{d}_3(\mathbf{q})\right]=\begin{bmatrix} q_1^2-q_2^2-q_3^2+q_4^2 & 2q_1q_2-2q_3q_4 & 2q_1q_3+2q_2q_4 \\ 2q_1q_2+2q_3q_4 & -q_1^2+q_2^2-q_3^2+q_4^2 & 2q_2q_3-2q_1q_4 \\ 2q_1q_3-2q_2q_4 & 2q_2q_3+2q_1q_4 & -q_1^2-q_2^2+q_3^2+q_4^2 \end{bmatrix}.$$

Учтем, что в ортогональной системе координат $(\mathbf{d}_1,\mathbf{d}_2,\mathbf{d}_3)$ кватернион имеет норму $|\mathbf{q}|=1$.

Деформации u_i, выраженные в компонентах кватерниона с помощью формул (1) и учитывая норму кватерниона, примут вид

$$u_1(s)=-2q_1q_4'+2q_2q_3'-2q_3q_2'+2q_4q_1',$$

$$u_2(s)=-2q_1q_3'-2q_2q_4'+2q_3q_1'+2q_4q_2',$$

$$u_3(s)=2q_1q_2'-2q_2q_1'-2q_3q_4'+2q_4q_3'.$$

Для минимизации функционала (2), учитывая ограничения (3) и норму кватерниона, составим функцию Лагранжа вида [6]

$$L(\mathbf{q},\mathbf{q}',s)=W(\mathbf{q},\mathbf{q}',s)-\boldsymbol{\lambda}\cdot\mathbf{d}_3(\mathbf{q})-\mu(s)|\mathbf{q}|, \quad (5)$$

где $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$, $\mu(s)$ – множители Лагранжа. Последнее слагаемое представляет собой конечную или дифференциальную связь.

Уравненя равновесия стержня получим с помощью системы уравнений Эйлера-Лагранжа в следующей форме:

$$\frac{d}{ds}\frac{\partial L}{\partial q_k'}-\frac{\partial L}{\partial q_k}=0, \quad k=1..4. \quad (6)$$

Для решения нелинейной системы (6) используем конечно-разностную аппроксимацию производных:

$$q_k'=\frac{q_k^{i+1}-q_k^{i-1}}{2\Delta s},$$

$$q_k''=\frac{\dfrac{q_k^{i+1}-q_k^{i}}{\Delta s}-\dfrac{q_k^{i}-q_k^{i-1}}{\Delta s}}{\Delta s}=\frac{q_k^{i+1}-2q_k^{i}+q_k^{i-1}}{(\Delta s)^2},$$

где Δs – шаг дискретизации.

Полученная система уравнений содержит $5n+3$ неизвестных (n – число разбиений стержня на участки). Дополнительные $n+3$ уравнения получены из условия (3), представленного в дискретной форме:

$$\sum_{i=0}^{n}\mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i=0, \quad (7)$$

и условия выполнения нормы кватерниона на каждом дискретном шаге

$$|\mathbf{q}_i|=1. \quad (8)$$

Для проведения численного анализа полученной системы (6), представленной в дискретно-разностной форме и дополнительных уравнений (7), (8) стержень был разделен на 6(частей. Расчеты проводились в безразмерной форме, для чего каждое уравнение системы (' было умножено на отношение $1/K_1$. Поиск решений данной системы уравнений был осуществлен по методу Ньютона – Рафсона [7, 8], при соответствующих граничных условиях

$$\mathbf{r}(0)=\langle 0,0,0\rangle,\ \mathbf{r}(1)=\langle 0,0,0\rangle,$$
$$q_1(0)=q_2(0)=q_3(0)=0,$$
$$\mathbf{q}(1)=\langle 0,0,-\sin(\alpha/2),-\cos(\alpha/2)\rangle.$$

Будем полагать, что стержень имеет такую естественную конфигурацию, что кривизны $u_1^0=u_2^0=0$ (прямолинейный стержень), а кручение u_3^0, которое определяет естественную спиральность, варьируется в диапазоне от 0 до 2π. Исследуем два существенно отличающихся друг от друга варианта стержней. Сначала рассмотрим равновесные конфигурации незакрученного стержня ($u_3^0=0$), а затем – закрученного с $u_3^0=2$.

В качестве начального приближения были взяты координаты кольца единичной длины, выраженные через углы Эйлера ($\theta_i=0..2\pi$, $\varphi_i=0$, $\psi_i=0$), а затем преобразованы в компоненты кватерниона с помощью формул:

$$q_1^i=\sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right)\cos\left(\frac{\varphi_i-\psi_i}{2}\right),\ q_2^i=\sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right)\sin\left(\frac{\varphi_i-\psi_i}{2}\right),$$
$$q_3^i=\cos\left(\frac{\theta_i}{2}\right)\sin\left(\frac{\varphi_i+\psi_i}{2}\right),\ q_4^i=\cos\left(\frac{\theta_i}{2}\right)\sin\left(\frac{\varphi_i+\psi_i}{2}\right).$$

Поиск равновесных конфигураций проводился при различный значениях α (см. рис.1), которые связаны с крутящим моментом соотношением $M_3=K_3\alpha$. После определения первой равновесной конфигурации, соответствующей значению $\alpha=0$, эта форма принималась за начальное приближение на следующем шаге ($\alpha+\Delta\alpha$), причем $\Delta\alpha$ непосредственно влияет на продолжительность времени счета. Так, мы принимали $\Delta\alpha=\pi/20$, что соответствовало машинному времени ~20 часов. Расчеты проводились в системе Maple.

Координаты точек стержня, отвечающие положению его равновесия, можно записать следующим образом:

$$X(s)_n=\sum_{i=0}^{n}\left(\mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i\right)_x\Delta s=\sum_{i=0}^{n}\left(2q_1^iq_3^i+2q_2^iq_4^i\right)\Delta s,$$
$$Y(s)_n=\sum_{i=0}^{n}\left(\mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i\right)_y\Delta s=\sum_{i=0}^{n}\left(2q_2^iq_3^i-2q_1^iq_4^i\right)\Delta s,$$
$$Z(s)_n=\sum_{i=0}^{n}\left(\mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i\right)_z\Delta s=\sum_{i=0}^{n}\left(-\left(q_1^i\right)^2-\left(q_2^i\right)^2+\left(q_3^i\right)^2+\left(q_4^i\right)^2\right)\Delta s, \quad (9)$$

где $\Delta s=1/30$.

Обсуждение результатов. Для равновесных конфигураций, соответствующих различным значениям крутящего момента, можно рассчитать энергию изгиба и энергию кручения как функцию безразмерного крутящего момента $M_t=\alpha=M_3/K_3$

$$U_b(M_t)=\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n}\left(K_1\left(u_1(\mathbf{q})_i-u_1^0\right)^2+K_2\left(u_2(\mathbf{q})_i-u_2^0\right)^2\right),$$
$$U_t(M_t)=\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n}K_3\left(u_3(\mathbf{q})_i-u_3^0\right)^2.$$

График соответствующих энергий отнесенных к K_1 приведен на рисунке 2 и рисунке 3.

Если не учитывать естественную спиральность стержня, то изменения энергии при воздействии него положительным крутящим моментом (направление кручения соответствует направлению винтовой линии) и отрицательным моментом являются строго симметричными по M_t (рисунок 2). За нулевой уровень принят уровень при $M_t=0$. Иная картина имеет место, если в выражении для энергии учесть собственную спиральность стержня. В этом случае графики не являются симметричными по $M_t=0$ (рис. 3).

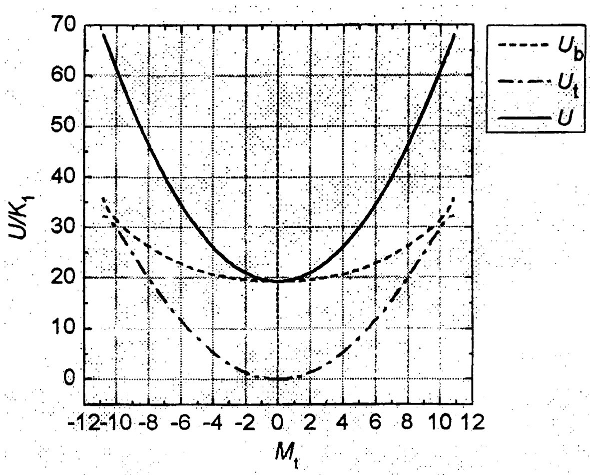

Рисунок 2 - Энергия при $u_3^0 = 0$

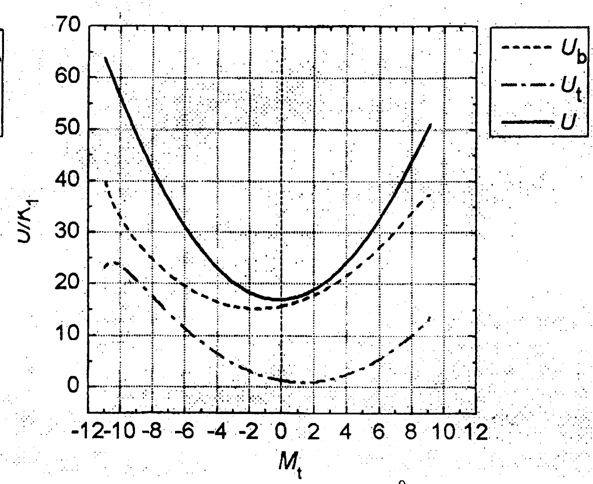

Рисунок 3 - Энергия при $u_3^0 = 2$

При положительном крутящем моменте ярко выражен рост функции U_b и уменьшение U_t на участке графика, соответствующем малым M_t, а при отрицательном крутящем моменте наоборот ярко выражен рост U_t при уменьшении U_b при тех же M_t. Данный факт свидетельствует о том, что собственная крутка существенно влияет на процесс сверхспирализации при небольших деформациях.

При больших деформациях, соответствующих M_t порядка 10, как при положительном. так и при отрицательном крутящих моментах энергии изгиба и кручения возрастают. Однако следует отметить, что данный рост количественно отличается один от другого, что свидетельствует о различных эффектах, проходящих на рассматриваемом участке кривых, представленных на рисунке 3.

Полученные результаты могут найти применение для изучения биологических систем с винтовой структурой, например, для исследования процесса сверхспирализации молекулы ДНК.

ЛИТЕРАТУРА

1. Julicher,F. Supercoiling transitions of closed DNA // Phys. Rev. E. – 1994. – V. 49, № 3. – P. 2429–2435. 2. Westcott,T. P., Tobias,I., Olson,W. K. Elasticity theory and numerical analysis of DNA supercoiling: an application to DNA looped // J. Phys. Chem. – 1995. – V. 99. – P. 17962–17935. 3. Nemtsov,V.B. Thermodynamical description of the thermochemical mechanisms of DNA deformation // NPCS. 2000. V. 3, № 1. P. 37–40. 4. Benham,C. J. Geometry and mechanics of DNA superhelicity // Biopolymers. – 1983. – V. 22. – P. 2477–2495. 5. Рашевский,П. К. Курс дифференциальной геометрии. – М.: Гос. издат. технико-теоретической литературы. – 1950. – 428 с. 6. Мышкис,А. Д. Математика для ВТУЗов. Специальные курсы. М.: Наука. – 1971. – 632 с. 7. Амосов,А. А., Дубинский,Ю. А., Копченова,Н. В. Вычислительные методы для инженеров. – М.: Высшая школа. – 1994. – 545 с. 8. Дэннис,Дж., Шнабель,Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. – М.: Мир. – 1988. – 440 с.