

非对称截面 Kirchhoff 弹性细杆模型简化方法研究*

王炜† 张琪昌 靳刚

(天津大学机械学院力学系, 内燃机燃烧学国家重点实验室, 天津 300072)

(2011年10月19日收到; 2011年12月5日收到修改稿)

研究弹性细杆 Kirchhoff 模型及其相关演化系统, 是深入考察宏观、微观柔性体拓扑结构与稳定性问题的重要依据. 以 DNA 弹性细杆数学模型为背景, 考虑截面非对称性特征的影响, 构造新的复数形式 Kirchhoff 系统. 在此基础上, 结合复变量扭矩设解形式, 获得了非对称截面系统的有效抗弯刚度; 并通过相关理论在高维系统简化过程中的应用, 得到了对应于原有系统的单变量二阶常微分方程. 此外, 将 DNA 分子具备的抗弯刚度周期变化特征转化为针对有效抗弯刚度的周期摄动形式, 以期从总体上减少理论分析对于数值积分的依赖, 为后续定量分析工作提供新的思路.

关键词: 弹性细杆, Kirchhoff 方程, DNA 分子

PACS: 46.15.-x, 05.10.-a, 05.45.-a

1 引言

Kirchhoff 理论^[1]具有广泛的应用背景, 研究内容涉及自然科学发展的诸多热门领域. 以 DNA 双螺旋结构为例: Benham^[2]和 Le Bret^[3]在 Kirchhoff 弹性杆理论上建立了 DNA 弹性细杆模型. 刘延柱、薛纭等^[4-6]将非线性动力学的经典理论和以分子生物学为背景的弹性细杆平衡与稳定性问题纳入统一的理论体系, 在 Kirchhoff 方程的稳定性与动力学行为研究方面进行了大量卓有成效的研究工作. Shi 和 Hearst^[7]在弹性杆 Kirchhoff 方程的基础上, 以曲率和挠率为变量, 建立了圆截面弹性杆的 Schrödinger 模型. 薛纭等^[8]借助复刚度概念, 建立了非圆截面弹性细杆的 Schrödinger 方程, 获得了准圆截面系统 ($\rho = \frac{B}{A} \approx 1$) 的近似解析解 (其中 A, B 分别为系统截面上绕 x 轴与 y 轴的抗弯刚度). 实验数据表明: 处于弹性细杆力学模型应用研究范畴内的 DNA 分子集复杂内部结构与外部环境于一体, 表现出显著的截面非对称性^[9] ($\rho \approx 4$)、周期性变化的抗弯刚度^[10,11] 以及

由于多场耦合效应而引发的复杂接触力形式^[12]等特征. 因此以非对称截面 Kirchhoff 方程为基础考察生物大分子的微观拓扑结构, 探讨解旋酶的作用机理等问题^[13], 具有重要的科学价值. 只是碍于复杂系统的简化手段尚不完善, 目前相关计算很大程度上还依赖于数值模拟方法^[14-16].

为克服具有非对称截面特征的 Kirchhoff 系统在简化和分析过程中遇到的计算复杂性问题, 发挥定量分析手段在研究系统运动特性、确立控制参数相关性等方面的作用, 引入复矢量基构造复数形式的 Kirchhoff 方程. 将复规范形的设解思想^[17]融入弹性细杆数学模型中, 考虑截面非对称性摄动因素的影响, 形成了以截面扭矩为未知量的单变量二阶常微分方程, 并且进一步完善了有效抗弯刚度理论及其在系统简化、降维过程的应用. 将 DNA 分子具备的截面抗弯刚度周期变化特征^[10,11]转化为针对常值有效抗弯刚度的周期摄动形式. 为融合定量分析方法与奇异性理论展开环状分子的拓扑构形研究^[18-20](图 1), 探讨解旋过程中拓扑异构酶 (DNA topoisomerase) 的生物作用机理^[13]奠定了

* 国家自然科学基金 (批准号: 10872141, 11072168) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20100032120006) 资助的课题.

† E-mail: wangweifranis@yahoo.com.cn

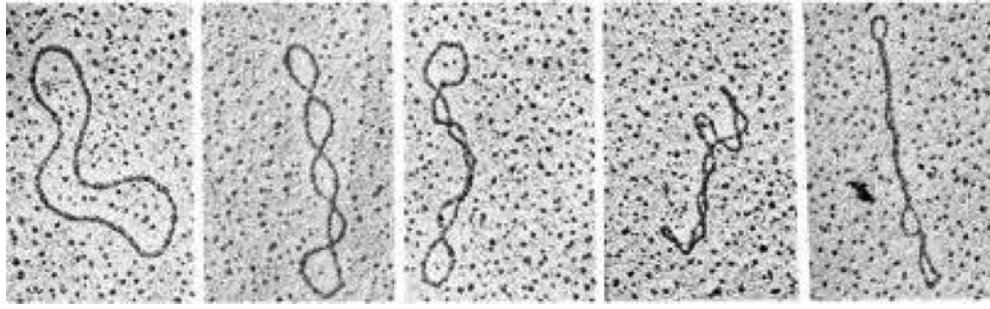


图1 DNA 分子的环状拓扑结构

基础.

2 复数形式 Kirchhoff 弹性细杆方程

考察微元弧段的平衡状态 (图 2), 由实数形式矢量基 $\{e_1, e_2, e_3\}$ 建立静平衡方程^[4]

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{F}}{ds} + \mathbf{f} = 0, \\ \frac{d\mathbf{M}}{ds} + \mathbf{e}_3 \times \mathbf{F} + \mathbf{m} = 0. \end{cases} \quad (1)$$

将 (1) 式中的主矢和主矩 \mathbf{F}, \mathbf{M} , 均布力和均布力偶 \mathbf{f}, \mathbf{m} , 弯扭度 ω 表示为复数形式

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= F_a \mathbf{D}_a + \bar{F}_a \bar{\mathbf{D}}_a + F_3 \mathbf{D}_3, \\ \mathbf{M} &= M_a \mathbf{D}_a + \bar{M}_a \bar{\mathbf{D}}_a + M_3 \mathbf{D}_3, \\ \mathbf{f} &= f_a \mathbf{D}_a + \bar{f}_a \bar{\mathbf{D}}_a + f_3 \mathbf{D}_3, \\ \mathbf{m} &= m_a \mathbf{D}_a + \bar{m}_a \bar{\mathbf{D}}_a + m_3 \mathbf{D}_3, \\ \omega &= \omega_a \mathbf{D}_a + \bar{\omega}_a \bar{\mathbf{D}}_a + \omega_3 \mathbf{D}_3, \end{aligned} \quad (2)$$

其中, 复变量 x_a 可以表示成为 $x_a = x_1 + ix_2$, \bar{x}_a 为其共轭. 此处的复矢量基 $\{\mathbf{D}_a, \bar{\mathbf{D}}_a, \mathbf{D}_3\}$ 可由实数形式矢量基 $\{e_1, e_2, e_3\}$ 导出, 即

$$\begin{cases} \mathbf{D}_a = \frac{1}{2}(e_1 - ie_2), \\ \bar{\mathbf{D}}_a = \frac{1}{2}(e_1 + ie_2), \\ \mathbf{D}_3 = e_3. \end{cases} \quad (3)$$

利用复矢量基构造复数形式 Kirchhoff 方程

$$\begin{cases} \frac{dF_a}{ds} + i(F_a\omega_3 - F_3\omega_a) + f_a = 0, \\ \frac{dM_a}{ds} + i(M_a\omega_3 - M_3\omega_a + F_a) = 0, \\ \frac{dF_3}{ds} + \frac{i}{2}(\bar{F}_a\omega_a - F_a\bar{\omega}_a) + f_3 = 0, \\ \frac{dM_3}{ds} + \frac{i}{2}(\bar{M}_a\omega_a - M_a\bar{\omega}_a) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

并从复变量角度对 (4) 式及其简化方程进行分析.

根据弹性细杆的本构关系定义弯矩 M_i

$$\begin{aligned} M_a &= M_1 + iM_2 = A\omega_1 + iB\omega_2 = B(\rho\omega_1 + i\omega_2), \\ M_3 &= C\omega_3, \end{aligned} \quad (5)$$

其中, $\rho = A/B$ 为截面抗弯刚度比, C 为抗扭刚度. 由 (4) 式可知: 对于圆截面 ($A = B, \rho = 1$) 以及一类具备常扭率的非对称截面弹性杆模型^[4](相对扭角 $\chi = n\frac{\pi}{2}, n = 0, 1, \dots$), 均满足条件 $M_a\bar{\omega}_a = \bar{M}_a\omega_a$, 使得截面上作用的扭矩沿弧坐标守恒

$$\frac{dM_3}{ds} = 0. \quad (6)$$

对于满足守恒条件的系统, 可以直接开展定量分析 (计算截面扭矩或弯扭度), 而普通非对称截面 Kirchhoff 系统由于不具备 (6) 式的守恒条件, 导致其控制系统更为复杂, 不便于直接计算^[4,8,10]. 有鉴于此, 本文尝试从复数形式 Kirchhoff 方程的角度出发, 运用相关分析、设解手段实现对于非对称截面系统的简化降维, 为后续定量分析提供研究基础.

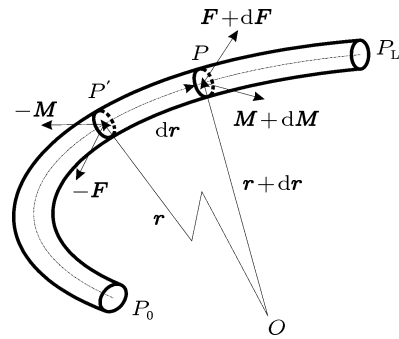


图2 弹性杆微圆弧段的平衡状态

3 非对称截面系统的有效抗弯刚度

考虑 (4) 式中涉及 M_3 关于弧长 s 的一阶

导数式

$$\frac{dM_3}{ds} = i \left(\frac{1}{2} M_a \bar{\omega}_a - \frac{1}{2} \bar{M}_a \omega_a \right). \quad (7)$$

在实数系统中, 非对称截面系统分析的难点在于建立 M_3 与 M_1, M_2 之间的关系^[4]; 而对于复变量方程, 则可以参照复规范形的设解形式^[17], 由(7)式导出 M_3 的一阶表达式

$$M_3 = \frac{1}{2} M_a \bar{\omega}_a + \frac{1}{2} \bar{M}_a \omega_a. \quad (8)$$

联立(7), (8)两式, 求解其中包含的 ω_1, ω_2 , 可得

$$\omega_1 = \frac{(A-B)M_3 \mp \sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}{2AM_3'} \omega_2, \\ \omega_2 = \sqrt{\frac{(A-B)M_3 \pm \sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}{2(A-B)B}}, \quad (9)$$

其中 $(\cdot)'$ 表示变量相对于弧长 s 的一阶导数. 由(9)式获取 $\omega_a \bar{\omega}_a$ 关于 M_3' 与 M_3 的表达式

$$\omega_a \bar{\omega}_a = \frac{A+B}{2AB} M_3 + \frac{\sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}{2AB}. \quad (10)$$

由(8), (10)两式可知, 若存在截面有效抗弯刚度 B_{eff} 使得

$$M_3 = B_{\text{eff}} \omega_a \bar{\omega}_a \approx \frac{2AB}{A+B} \omega_a \bar{\omega}_a, \quad (11)$$

且 \approx 成立, 需满足条件 $A\omega_1^2 = B\omega_2^2$. 在此基础上, 进一步考虑(7), (8)两式, 并令其中 $\sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2} = \varepsilon$, 可以推知

$$\lim_{A\omega_1^2 \rightarrow B\omega_2^2} \sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2} = 0. \quad (12)$$

综合(11), (12)两式, 可以确定有效抗弯刚度 B_{eff} 的近似结果与相应的衍生条件

$$B_{\text{eff}} = \frac{2AB}{A+B}, \\ \frac{dM_3}{ds} = \pm \frac{A-B}{2\sqrt{AB}} M_3 + O(\varepsilon). \quad (13)$$

此外, 基于(13)式的衍生条件, 还可以由 $M_a \bar{M}_a = B_{\text{eff}}^2 \omega_a \bar{\omega}_a$ 获得有效抗弯刚度 B_{eff}

$$B_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{M_a \bar{M}_a}{\omega_a \bar{\omega}_a}} = \sqrt{AB}. \quad (14)$$

上述刚度结果分别对应于 Kehrbaum 和 Maddocks^[21]、Eslami-Mossallam 和 Ejthadi^[22] 对于 DNA 弹性细杆模型截面有效抗弯刚度的描述,

其中前者贴近于细长螺旋状 DNA 分子的实验数据结果, 后者更适于研究环状 DNA 分子. 基于复数形式扭矩设解思想, 本文将采用不同方法获得的有效刚度结果有机地统一起来, 有助于从生物分子拓扑形态角度出发合理选择有效抗弯刚度结果.

4 非对称截面系统的 Jacobi 积分

为简化计算, 通常假设轴向均布力 $f_3 = 0$ ^[4,7], 由(4)式中 M_a', \bar{M}_a' 的表达式得到

$$\omega_a \bar{M}_a' + \bar{\omega}_a M_a' = -i(F_a \bar{\omega}_a - \bar{F}_a \omega_a) - i(M_a \bar{\omega}_a - \bar{M}_a \omega_a) \omega_3. \quad (15)$$

直接对(15)式进行积分, 获取有关 F_3 的积分表达式

$$F_3 = H - \frac{M_3^2}{2C} - \frac{1}{2} \int (\bar{\omega}_a M_a' ds + \omega_a \bar{M}_a' ds), \quad (16)$$

其中 H 为与初始条件有关的积分常数. 由于(16)式积分号内的一阶导数项满足

$$\omega_a \bar{M}_a' + \bar{\omega}_a M_a' = M_a \bar{\omega}_a' + \bar{M}_a \omega_a' = 2(A\omega_1 \omega_1' + B\omega_2 \omega_2'), \quad (17)$$

因此有如下关系成立

$$\omega_a \bar{M}_a' + \bar{\omega}_a M_a' = \frac{1}{2} (\omega_a \bar{M}_a' + \bar{\omega}_a M_a' + M_a \bar{\omega}_a' + \bar{M}_a \omega_a') = \frac{1}{2} (M_a \bar{\omega}_a + \omega_a \bar{M}_a)'. \quad (18)$$

由(16)式的积分可以得到 F_3 的具体表达式

$$F_3 = H - \frac{M_3^2}{2C} - \frac{1}{4} (M_a \bar{\omega}_a + \bar{M}_a \omega_a). \quad (19)$$

5 弹性细杆模型的低维简化方程

将(19)式代入(4)式, 以 $f_a = f_1 + if_2$ 表示截面分布力, 得到关于 M_a 的二阶常微分方程

$$\frac{d^2 M_a}{ds^2} = H\omega_a - \frac{3}{4} M_a \omega_a \bar{\omega}_a + \frac{M_3^2 M_a}{C^2} - \frac{3M_3^2 \omega_a}{2C} - \frac{M_a \omega_a \bar{M}_a}{2C} + \frac{1}{4} \omega_a^2 \bar{M}_a + \frac{M_a^2 \bar{\omega}_a}{2C} - \frac{2iM_3}{C} \frac{dM_a}{ds} + iM_3 \frac{d\omega_a}{ds} + if_a. \quad (20)$$

对 (20) 进行实数形式展开, 同时考虑 (8) 式, 得到以 ω_1, ω_2 表示的两自由度常微分方程

$$\begin{aligned} \frac{d^2\omega_1}{ds^2} &= \frac{H\omega_1}{A} - \frac{\omega_1^3}{2} + \frac{A(2A-3C)\omega_1^5}{2C^2} \\ &+ \frac{[2A(B-C) + B(-2B+C)]\omega_1\omega_2^2}{2AC} - \frac{f_2}{A} \\ &+ \frac{B(2A-3C)\omega_1^3\omega_2^2}{C^2} + \frac{B^2(2A-3C)\omega_1\omega_2^4}{2AC^2} \\ &+ \frac{(2B-C)(A\omega_1^2 + B\omega_2^2)}{AC} \frac{d\omega_2}{ds}, \\ \frac{d^2\omega_2}{ds^2} &= \frac{H\omega_2}{B} - \frac{\omega_2^3}{2} + \frac{B(2B-3C)\omega_2^5}{2C^2} \\ &+ \frac{[2B(A-C) + A(-2A+C)]\omega_1^2\omega_2}{2BC} + \frac{f_1}{B} \\ &+ \frac{A(2B-3C)\omega_1^2\omega_2^3}{C^2} + \frac{A^2(2B-3C)\omega_1^4\omega_2}{2BC^2} \\ &- \frac{(2A-C)(A\omega_1^2 + B\omega_2^2)}{BC} \frac{d\omega_1}{ds}, \end{aligned} \quad (21)$$

其中, 在 (20) 式中考虑 $A = B$, 可直接将其退化为圆截面 Kirchhoff 系统的简化方程^[4]; 考虑 DNA 分子的截面非对称性假设 ($\rho \approx 4$)^[10], 可以确立两自由度系统基频间的 1:2 内共振关系, 由常规摄动方法^[17,23] 即可求解相应的稳态渐近解. 此外, 以 (20) 式为基础, 运用有效抗弯刚度理论, 还可以实现振动系统的进一步简化.

扭矩 M_3 关于弧长 s 的二阶导数可以表示为

$$\begin{aligned} M_3'' &= \frac{1}{2}(M_a\bar{\omega}_a + \bar{M}_a\omega_a)'' \\ &= \omega_a' \bar{M}_a' + M_a' \bar{\omega}_a' + \frac{1}{2}(\bar{\omega}_a M_a'' + \bar{M}_a \omega_a'' \\ &+ \omega_a \bar{M}_a'' + M_a \bar{\omega}_a''), \end{aligned} \quad (22)$$

其中, $(\cdot)''$ 表示变量相对于弧长 s 的二阶偏导数. 考虑方程中元素的实数形式展开式, 可知: 上式中 $\bar{\omega}_a M_a'' + \omega_a \bar{M}_a'' = \bar{M}_a \omega_a'' + M_a \bar{\omega}_a''$, 因此 (22) 式可以简化为

$$M_3'' = \bar{M}_a' \omega_a' + M_a' \bar{\omega}_a' + \bar{\omega}_a M_a'' + \omega_a \bar{M}_a''. \quad (23)$$

将 (20) 式及其共轭表达式代入 (23) 式, 忽略截面分布力 f_a 的作用, 得到

$$\begin{aligned} \frac{d^2 M_3}{ds^2} &= i M_3 \left(\bar{\omega}_a \frac{d\omega_a}{ds} - \omega_a \frac{d\bar{\omega}_a}{ds} \right) \\ &+ \left(2H - M_3 - \frac{3}{C} M_3^2 \right) \omega_a \bar{\omega}_a \\ &- \frac{2}{C} \left(\frac{dM_3}{ds} \right)^2 \\ &+ \frac{2i M_3}{C} \left(\omega_a \frac{d\bar{M}_a}{ds} - \bar{\omega}_a \frac{dM_a}{ds} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \left(\frac{dM_a}{ds} \frac{d\bar{\omega}_a}{ds} + \frac{d\bar{M}_a}{ds} \frac{d\omega_a}{ds} \right) \\ &+ \frac{2M_3^3}{C^2}. \end{aligned} \quad (24)$$

由 (9) 式分析 (24) 式中涉及的一阶导数项, 直接可以得到

$$\begin{aligned} &\bar{\omega}_a \frac{d\omega_a}{ds} - \omega_a \frac{d\bar{\omega}_a}{ds} \\ &= \frac{2i[(M_3')^2 - M_3 M_3'']}{\sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}, \\ &\omega_a \frac{d\bar{M}_a}{ds} - \bar{\omega}_a \frac{dM_a}{ds} \\ &= \frac{i(A-B)^2}{4AB} M_3 - \frac{i(A+B)[(M_3')^2 - M_3 M_3'']}{\sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}, \\ &\frac{dM_a}{ds} \frac{d\bar{\omega}_a}{ds} + \frac{d\bar{M}_a}{ds} \frac{d\omega_a}{ds} \\ &= \frac{(A-B)^2}{8AB} M_3 \\ &- \frac{[(A-B)^2 M_3 - 4AB M_3''][(M_3')^2 - M_3 M_3'']}{2[(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2]}. \end{aligned} \quad (25)$$

采用截面有效抗弯刚度及其衍生条件对 (24), (25) 两式进行简化 (可证 $(M_3')^2 - M_3 M_3''$ 属于较之 $\sqrt{(A-B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}$ 更高阶的无穷小量), 仅保留所得式中 ε 的零阶近似成分

$$\begin{aligned} \frac{d^2 M_3}{ds^2} &= \frac{(A-B)^2 + 8(A+B)H}{8AB} M_3 \\ &- \frac{(A-B)^2 + (A+B)C}{2ABC} M_3^2 \\ &+ \frac{4AB - 3(A+B)C}{2ABC^2} M_3^3 \\ &- \frac{2}{C} \left(\frac{dM_3}{ds} \right)^2. \end{aligned} \quad (26)$$

对于简化后得到的系统 (26) 式, 应用非线性摄动方法即可近似获取有关 M_3 的振动特性, 而相关结果无法针对 (4) 式的非对称截面系统直接进行定量分析获得; 此外, 参照文献 [19, 20] 的处理方法, 将结果深化为 M_3 或 ω_3 与曲杆拓扑参数 (扭转数 T_w , 连接数 L_k , 缠绕数 W_r) 的对应关系, 还可以深入研究具备非对称截面特征的弹性细杆空间拓扑结构.

6 具备周期变化抗弯刚度的非对称截面系统有效抗弯刚度

从生物模型角度出发, DNA 双螺旋结构在体

现截面非对称性的同时, 还具备了抗弯刚度的周期性变化特征^[10,11]. 为充分考虑该特征, 利用弹性细杆本构关系定义弯矩 M_i

$$\begin{aligned} M_1 &= (A + A_1 \cos \Omega s) \omega_1, \\ M_2 &= (B + B_1 \cos \Omega s) \omega_2, \\ M_3 &= C \omega_3, \end{aligned} \quad (27)$$

其中, A_1/A 与 B_1/B 均为常值小量, 同时假设 $A_1/A = B_1/B = k$, Ω 为摄动频率^[11].

在考虑 (27) 式的条件下, 联立 (7),(8) 两式, 求解其中包含的 ω_1, ω_2 , 可得

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{(A - B)M_3 \mp \sqrt{(A - B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}{2AM_3'} \omega_2, \\ \omega_2 &= \sqrt{\frac{(A - B)M_3 \pm \sqrt{(A - B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}{2(A - B)B(1 + k \cos \Omega s)}}, \end{aligned} \quad (28)$$

其中, $(\cdot)'$ 表示变量相对于弧长 s 的一阶导数. 由 (28) 式可得 $\omega_a \bar{\omega}_a$ 关于 M_3' 与 M_3 的表达式

$$\begin{aligned} \omega_a \bar{\omega}_a &= \frac{A + B}{2AB(1 + k \cos \Omega s)} M_3 \\ &+ \frac{\sqrt{(A - B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2}}{2AB(1 + k \cos \Omega s)}. \end{aligned} \quad (29)$$

另一方面, 由 (29) 式可知, 若存在截面有效抗弯刚度 B_{eff} 使得

$$M_3 = B_{\text{eff}} \omega_a \bar{\omega}_a \approx \frac{2AB}{A + B} (1 + k \cos \Omega s) \omega_a \bar{\omega}_a, \quad (30)$$

而式中 \approx 成立, 需满足 $A\omega_1^2 = B\omega_2^2$. 由此进一步假设 $\sqrt{(A - B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2} = \varepsilon$, 可以推知

$$\lim_{A\omega_1^2 \rightarrow B\omega_2^2} \sqrt{(A - B)^2 M_3^2 - 4AB(M_3')^2} = 0. \quad (31)$$

综合 (30),(31) 两式, 可以确定具备周期变化抗弯刚度系统的有效抗弯刚度结果及其衍生条件

$$\begin{aligned} B_{\text{eff}} &= \frac{2AB}{A + B} (1 + k \cos \Omega s), \\ \frac{dM_3}{ds} &= \pm \frac{A - B}{2\sqrt{AB}} M_3 + O(\varepsilon). \end{aligned} \quad (32)$$

此外, 与 (14) 式类似, 还可以由 $M_a \bar{M}_a = B_{\text{eff}}^2 \omega_a \bar{\omega}_a$ 获得有效抗弯刚度 B_{eff}

$$B_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{M_a \bar{M}_a}{\omega_a \bar{\omega}_a}} = \sqrt{AB} (1 + k \cos \Omega s). \quad (33)$$

由 (32),(33) 两式可知, 上述刚度值分别为 (13), (14) 两式已有刚度结果的进一步拓展, 而借鉴第 4, 5 部分的处理方法, 可以获取相应系统的低维简化方程(略).

7 讨论

考虑 DNA 分子的截面非对称性特征, 开展针对非对称弹性细杆模型的研究是后续定量、定性分析的前提和基础. 相关领域中一个很重要的研究方向就是环状弹性杆的拓扑构形分析, 其体现的分子生物学背景在于: 完全呈直杆形态的 DNA 分子是几乎不存在的, 它必须经过不断的缠绕、卷曲和折叠才能存在于相对狭小的细胞核内^[4], 此外解旋复制过程中拓扑异构酶的作用也使得环状分子的正负超螺旋状态不断地经历着变化^[13]. 因此在非对称截面弹性杆的基础上, 不断改进复杂系统的简化方法、提高有效抗弯刚度的计算精度, 有助于从本质上完善依据弹性细杆模型开展深入的 DNA 拓扑结构识别(建立一定数量碱基对具备的弹性与缠绕数、扭转数、截面扭角等参数的关系^[20])、拓扑异构酶作用机理研究等内容.

8 总结

本文以化简非对称截面弹性细杆 Kirchhoff 方程为目标, 获得了有效抗弯刚度在常值抗弯刚度及以 DNA 双螺旋结构为背景的周期变化抗弯刚度系统中的具体表达式, 并以前者为对象得到了关于截面扭矩的单变量二阶微分方程, 为开展后续定量分析奠定了基础.

研究表明: 复矢量基与复变量设解形式的联合应用为高维 Kirchhoff 方程的简化提供了新的思路, 而有效抗弯刚度理论及其衍生条件的应用则成为实现这一过程的重要途径; 同时该理论的适用范围也并非局限于常规非对称截面系统, 对于以 Kirchhoff 方程为模型的一类科学课题依然具有应用价值.

本文的研究着重考虑了弹性细杆模型的截面特征, 若要进一步深化该系统在分子生物学领域中的应用, 还需要针对微尺度生物结构具备的表面效应、尺寸效应^[24], 以及由多场耦合效应引发的复杂接触力进行更为充分的研究. 在此基础上开展的复杂系统简化、定量分析(如 DNA 双螺旋结构的微环拓扑构形研究)将会成为后续工作的主要内容.

作者感谢上海应用技术学院薛纭教授在本文写作过程中给予的帮助.

- [1] Kirchhoff G 1859 *J. Reine. Angew. Math.* **56** 285
- [2] Benham C J 1977 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **74** 2397
- [3] Le Bret M 1978 *Biopolymers* **17** 1939
- [4] Liu Y Z 2006 *Nonlinear Mechanics of Thin Elastic Rod* (Beijing: Tsinghua University) p15 (in Chinese) [刘延柱 2006 弹性细杆的非线性力学 (北京: 清华大学出版社) 第 15 页]
- [5] Liu Y Z, Zu J W 2004 *Acta Mech.* **24** 206
- [6] Xue Y, Liu Y Z, Chen L Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 4029 (in Chinese) [薛纭, 刘延柱, 陈立群 2004 物理学报 **53** 4029]
- [7] Shi Y M, Hearst J E 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 5186
- [8] Xue Y, Liu Y Z, Chen L Q 2004 *Chin. Phys.* **13** 794
- [9] Balaeff A, Mahadevan L, Schulten K 2006 *Phys. Rev. E* **73** 031919
- [10] Da Fonseca Alexandre F, Malta C P, De Aguiar M A M 2005 *Physica A* **352** 547
- [11] Davies M A, Moon F C 1993 *Chaos* **3** 93
- [12] Westcott T P, Tobias I, Olson W K 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 3967
- [13] Nitiss J L 1998 *Biochim. Biophys. Acta* **1400** 63
- [14] Zhao W J, Zhang G H 2008 *Chin. J. Comput. Mech.* **25** 265 (in Chinese) [赵维加, 张光辉 2008 计算力学学报 **25** 265]
- [15] Huang J F, Zhao W J, Jia M J, Yang B 2008 *J. Qingdao Technol. Univ.* **21** 3 (in Chinese) [黄健飞, 赵维加, 贾美娟, 杨斌 2008 青岛大学学报 **21** 3]
- [16] Jiang G H, Zhao W J, Jiang Y M 2007 *J. Qingdao Technol. Univ.* **20** 10 (in Chinese) [张光辉, 赵维加, 姜咏梅 2007 青岛大学学报 **20** 10]
- [17] Nayfeh A H 1993 *Method of Normal Forms* (New York: John Wiley & Sons) p14
- [18] Gore J, Bryant Z, Nollmann M, Le M U, Cozzarelli N R, Bustamante C 2006 *Nature* **442** 836
- [19] Balaeff A, Koudella C R, Mahadevan L, Schulten K 2004 *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **362** 1355
- [20] Hoffman K A, Manning R S, Maddocks J H 2003 *Biopolymers* **70** 145
- [21] Kehrbau S, Maddocks J H 2000 *Proceedings of the 16th IMACS World Congress* Lausanne, Switzerland, August 21–25 2000, ISBN 3-9522075-1-9
- [22] Eslami-Mossallam B, Ejthadi M R 2009 *Phys. Rev. E* **80** 011919
- [23] Zhang Q C, Wang W, He X J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5384 (in Chinese) [张琪昌, 王伟, 何学军 2008 物理学报 **57** 5384]
- [24] Guo J G, Zhou L J, Zhao Y P 2008 *Surf. Rev. Lett.* **15** 599

The analytical reduction of the Kirchhoff thin elastic rod model with asymmetric cross section*

Wang Wei[†] Zhang Qi-Chang Jin Gang

(State Key Laboratory of Engines, Department of Mechanics, School of Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

(Received 19 October 2011; revised manuscript received 5 December 2011)

Abstract

The Kirchhoff thin elastic rod models and related systems are always the important basis to research the topology and stability of the flexible structures in not only the macroscopic but also microscopic scale. Firstly the initial Kirchhoff equations are rebuilt in a complex style to suit the character of obvious asymmetry embodied on the cross section by considering the mathematical background of DNA double helix. Then we introduce a complex form variable solution of the torque, and extend the knowledge of effective bending coefficients as well as its facility in the high dimensional system by using the complicated system. As the result, a simplified second order ordinary differential equation with single variable is obtained. Furthermore the periodically varying bending coefficients of the DNA molecular are considered as the appended components to the effective bending coefficients. The whole reduction process makes the numerical simulation become not solely the exclusively eligible approach, and produces adaptable channel to quantitative analysis.

Keywords: thin elastic rod, Kirchhoff equation, DNA molecular

PACS: 46.15.-x, 05.10.-a, 05.45.-a

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10872141, 11072168) and Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20100032120006).

[†] E-mail: wangweifrancis@yahoo.com.cn