

TESE DE DOUTORAMENTO

Universidade Estadual de Campinas

Departamento de Física da Matéria Condensada - IFGW

**Conformações Tridimensionais de
Filamentos Elásticos: Aplicações à
Molécula de DNA**

Aluno: Alexandre Fontes da Fonseca

Orientador: Prof. Dr. Marcus Aloízio M. de Aguiar

Suporte financeiro - FAPESP

Agradecimentos

- A Deus pela sua infinita bondade.
- Ao prof. Marcus A. M. de Aguiar pela orientação, confiança e amizade.
- À minha esposa Andréia pelo afeto, carinho e incentivo.
- À minha filha Ana Elisa pela felicidade que me traz.
- Aos meus pais pela vida.
- Aos profs. Alain Goriely e Bruce Bayly pela orientação no estágio realizado na Universidade do Arizona.
- Ao amigo Delcides F. Sousa pela ajuda com a parte computacional.
- A todos que, direta ou indiretamente, me ajudaram ao longo da minha caminhada.

Fé inabalável é somente aquela que pode encarar a razão, face a face, em todas as épocas da humanidade.

Allan Kardec

Toda a nossa ciência, comparada com a realidade, é primitiva e infantil. No entanto, é a coisa mais preciosa que temos.

Albert Einstein

O bem que praticares em algum lugar é teu advogado em toda a parte.

Francisco Cândido Xavier

Resumo

Apresentamos o chamado Modelo de Kirchhoff, que permite o estudo do comportamento elástico de cordas e filamentos. Aplicações deste modelo vão da Engenharia a Biologia Estrutural. Neste trabalho aplicamos o modelo no estudo de conformações espaciais, ou estruturas tridimensionais, da molécula de DNA considerando-a como um filamento elástico não-homogêneo. Primeiramente, consideramos não-homogeneidades na distribuição de massa ao longo de anéis planares torcidos em meios viscosos. Nós mostramos que a dinâmica perto do equilíbrio é afetada pela distribuição de massa, mesmo em meios bem viscosos. Consideramos, também, não-homogeneidades nos módulos de Young e de cisalhamento variando ao longo da molécula. Mostramos que, neste caso, as equações de Kirchhoff estacionárias, ou de equilíbrio, não são mais integráveis fazendo com que o sistema apresente comportamento caótico espacial. Comparamos os resultados com aqueles obtidos com cordas homogêneas. Finalmente, apresentamos um método novo para a resolução do problema de condições de contorno, presente em muitas situações biológicas, onde as posições das extremidades da corda são escolhidas e mantidas fixas. Utilizamos os parâmetros da molécula do DNA em todas as aplicações, comentando a relevância deste estudo na compreensão do comportamento elástico desta molécula.

Abstract

We study the so called Kirchhoff rod model. It permits the study of the behavior of elastic thin rods and has large applications ranging from Engineering to Structural Biology. We apply the model to study the tridimensional structures of the DNA molecule considering it as a non-homogeneous elastic filament. The first non-homogeneity considered is the distribution of the mass along a twisted closed rod, namely, the *twisted planar ring*. We show that, even when imersed in a viscous medium, the dynamics of the unstable planar ring depends on its mass distribution. The second non-homogeneity considered is in the Young's and shear modulus. We show that these non-homogeneities produce spatial complex equilibrium solutions of the static Kirchhoff equations and we compare them with the solutions of the homogeneous case. Finally, we develop a method to solve the boundary value problem, commom in many biological situations. This method allow us to find equilibrium solutions for given positions of both ends of the rod.

Sumário

Capítulo 1: Introdução.....	1
Capítulo 2: Modelo de Kirchhoff.....	8
2.1 A curva no espaço: A base diretora.....	9
2.2 Definindo a corda.....	12
2.3 Balanço de Momento Linear e Momento Angular.....	15
2.4 Relações Constitutivas.....	22
2.5 As Equações de Kirchhoff Escalonadas.....	24
Capítulo 3: Soluções Estacionárias das equações de Kirchhoff.....	27
3.1 Soluções de equilíbrio.....	28
3.1.1 Anel planar torcido.....	29
3.1.2 Barra reta.....	30
3.1.3 Hélice.....	31
3.2 Ângulos de Euler.....	32
3.3 Formulação Hamiltoniana.....	35
Capítulo 4: Anel Planar Torcido com Densidade de Massa Não-Homogênea.....	41
4.1 Efeito da viscosidade sobre a corda homogênea.....	43
4.2 Anel não-homogêneo.....	53
4.3 Aplicação à Molécula de DNA.....	58
Capítulo 5: Caos espacial em filamentos.....	65
5.1 Motivação: molécula de DNA.....	67
5.2 Formulação hamiltoniana da corda não-homogênea.....	71
5.3 Energia elástica total e caos espacial.....	74
Capítulo 6: Método de resolução do problema de condições de contorno.....	84
6.1 Motivações.....	85
6.2 Método linear de solução do PCC para filamentos.....	88
6.3 Existência de soluções.....	97
6.4 Variação com os parâmetros mecânicos.....	104
6.5 Cordas não-homogêneas.....	108
Capítulo 7: Conclusões.....	112
Apêndice A: Introdução à Mecânica dos Meios Contínuos.....	120
Apêndice B: Equações de Kirchhoff em ângulos de Euler.....	138
Apêndice C: Método linear de análise dinâmica de soluções de equilíbrio.....	141
Apêndice D: Artigos publicados e submetidos à publicação.....	156
Referências Bibliográficas.....	221

Capítulo 1

Introdução

O conhecimento acumulado de que a humanidade dispõe tem crescido exponencialmente[1]. O grau de complexidade que os sistemas estudados apresentam segue a mesma regra. Como comenta Yaneer Bar-Yam[2], “a ciência está tentando entender a complexidade presente na natureza em contraponto ao objetivo tradicional de entender a simplicidade fundamental das leis que a regem”. Isto ressalta a importância da multidisciplinaridade na busca de uma melhor compreensão da natureza.

Podemos citar Webb[3] que, há mais de duas décadas, já chamou a atenção dos pesquisadores para a necessidade de se estudar certas propriedades físicas das células *in vivo*, já que, nesta situação, certos fenômenos ocorrem, como os processos batizados de “relógio celular”, que são capazes de dirigir, no tempo e no espaço, rápidos eventos sequenciais com grande precisão, o

que nunca foi obtido em tubo de teste. Podemos citar também o *Projeto Genoma*[4, 5] que a FAPESP(Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) financia e coordena, que envolve não só a colaboração entre vários laboratórios e grupos de pesquisa mas também a interação entre diferentes áreas do conhecimento como a Biologia, Matemática e Ciência da Computação. Exemplos onde a Física tem contribuído com a Biologia são o estudo de propriedades coletivas de organização de sistemas longe do equilíbrio termodinâmico[6, 7, 8, 9], caracterização de estruturas tridimensionais de proteínas utilizando-se raios X[10], o estudo de sistemas neurais[2, 11], e a elasticidade da molécula do DNA e como sua estrutura se relaciona com a função biológica[12, 13].

Neste contexto, o estudo sobre a estabilidade e a dinâmica de estruturas tridimensionais, ou conformações, de cordas elásticas finas sujeitas a forças de tensão, torques e torções está no centro de processos muito importantes em áreas que vão da Engenharia a Biologia Molecular. Exemplos em Química e Biologia são o estudo do comportamento elástico de polímeros [14, 15], da molécula do DNA[12, 13, 16, 17, 18] e fibras bacteriais[19]. Em engenharia, exemplos são o estudo do processo de formação de ‘loops’ e pontas em cabos torcidos sub-oceânicos[20, 21] e a aplicação no processo de instalação de fibras óticas[22].

Particularmente com relação à molécula do DNA, existem vários níveis de estudo que abrangem diferentes faixas de comprimentos da molécula[23]. O chamado *nível de todos-os-átomos* consiste em estudar a estrutura dos pares

de base considerando-se todos os átomos, incluindo-se os do meio que envolve o DNA, onde a posição de cada um é usada nos cálculos. Nesse nível não se pode trabalhar com moléculas de DNA com mais do que alguns poucos pares de base porque o sistema se torna difícil de se resolver e consome muito tempo em computação. O nível seguinte, chamado *nível de pares de base*, consiste em considerar cada par de bases como um objeto rígido que interage com os vizinhos a partir de determinadas formas, levando-se em conta como um tipo de par de base se “encaixa” com os vizinhos. O comprimento máximo que se pode estudar neste nível não passa de algumas poucas dezenas de pares de base, pela mesma razão anterior. Neste trabalho de tese, trabalharemos dentro do chamado *nível dos modelos elásticos ideais* onde a molécula do DNA é tratada como se fosse um cilindro elástico contínuo. Nesse nível, é possível estudar-se comprimentos muito maiores do que aqueles que os níveis anteriores permitem, porém os detalhes devidos à estrutura fina da molécula se perdem. Por esta razão, os modelos elásticos para cordas contínuas são considerados apenas uma primeira aproximação na determinação da estrutura tridimensional do DNA e outras biomoléculas em geral[13].

O chamado modelo de Kirchhoff para filamentos é uma ferramenta teórica básica para o estudo do comportamento elástico de cordas longas e finas sujeitas a forças de tensão e torques, na aproximação onde a curvatura é relativamente pequena. As equações de Kirchhoff são obtidas a partir da aplicação das equações de Newton a um corpo tridimensional, tratado como um meio contínuo, onde uma de suas dimensões varia numa faixa de va-

lores muito maior que as outras duas, dentro dos limites da teoria linear de elasticidade[24, 25].

Neste presente trabalho de tese, estamos contribuindo para o estudo do comportamento elástico da molécula de DNA, no nível dos modelos elásticos ideais, onde não-homogeneidades são consideradas diretamente no modelo contínuo. Nós mostraremos que um modelo elástico contínuo para filamentos pode incorporar algumas propriedades que variam com a posição e que, neste nível, é possível obter-se mais informações a respeito do comportamento elástico de biomoléculas. Desenvolvemos, também, um método geral de obtenção de soluções de equilíbrio para o problema de condições de contorno onde as extremidades do filamento são mantidas fixas em posições escolhidas. Este problema é de interesse em várias situações biológicas, conforme descreveremos adiante.

Estudamos um problema dinâmico e alguns problemas estáticos (ou de equilíbrio) de filamentos não-homogêneos, comparando os resultados com os do caso homogêneo.

O problema dinâmico consiste em estudar a evolução temporal de uma corda fechada quando sujeita à torções relativamente altas. Neste caso, consideramos cordas cuja não-homogeneidade, que varia ao longo do filamento, ocorre na sua densidade de massa. Este estudo é motivado por experimentos onde íons se ligam a pequenas moléculas de DNA circular, alterando a sua forma[26]. Mostraremos que, mesmo em meios viscosos, onde a dinâmica é

atenuada pelo atrito, uma pequena diferença na densidade de massa altera a forma que a corda assume na sua evolução temporal a partir da solução de equilíbrio instável, após a perturbação.

O problema estático ou de equilíbrio consiste em estudarmos as soluções de equilíbrio possíveis para filamentos não-homogêneos. Consideraremos, neste caso, a não-homogeneidade em parâmetros elásticos do material que compõe a corda, como os módulos de Young e de cisalhamento[27]. Mostraremos que as equações que regem as soluções de equilíbrio não são integráveis o que pode levar o sistema a apresentar um comportamento caótico espacial. Calcularemos a energia elástica total destas soluções e constataremos a presença de mais de uma solução estável para o sistema. Por fim, apresentaremos um método para a resolução do problema de condições de contorno onde as extremidades do filamento são mantidas fixas em posições escolhidas e compararemos várias soluções para cordas homogêneas com parâmetros mecânicos diferentes e com cordas não-homogêneas.

A apresentação desta tese está organizada da seguinte maneira. No capítulo 2 apresentamos a dedução das chamadas equações de Kirchhoff para cordas a partir das equações de Newton para um corpo rígido tratado como um meio contínuo. Uma introdução à mecânica dos meios contínuos está apresentada no Apêndice A. No capítulo 3 mostramos as soluções de equilíbrio mais simples das equações de Kirchhoff estacionárias (ou de equilíbrio), para o caso homogêneo, quais sejam o anel planar torcido, a barra reta torcida e a hélice. Também, introduzimos novas variáveis, os ângulos de Euler, e

mostramos como obter uma formulação análoga a uma formulação hamiltoniana para as equações de Kirchhoff estacionárias. Os passos necessários para a obtenção das equações de Kirchhoff estacionárias em função dos ângulos de Euler estão apresentados no Apêndice B. No capítulo 4, apresentamos e resolvemos o problema dinâmico comentado acima que consta do estudo da dinâmica próxima ao equilíbrio de um anel planar torcido instável em meio viscoso, com a sua densidade de massa variando ao longo da posição. Para tanto, utilizamos um método de análise dinâmica, em aproximação linear, de soluções de equilíbrio. Este método é explicado em detalhes no Apêndice C. Nos capítulos 5 e 6 estudamos o problema estático, ou de equilíbrio, como comentado acima. No capítulo 5 mostramos como a não-homogeneidade nos módulos de Young e de cisalhamento tornam o sistema caótico. Apresentamos algumas soluções para alguns casos onde os parâmetros da molécula de DNA são considerados diretamente. No capítulo 6 apresentamos um método para a obtenção de soluções e equilíbrio onde as extremidades do filamento são mantidas fixas em posições escolhidas. Discutimos os limites de resolução deste problema de condições de contorno e comparamos as soluções de equilíbrio com as mesmas posições inicial e final para cordas com diferentes parâmetros mecânicos como a força de tensão e o torque. Comparamos, também, as soluções entre cordas homogêneas e não-homogêneas com as mesmas posições para as suas extremidades. Em todos os casos, utilizamos os parâmetros da molécula de DNA nos cálculos das soluções para as cordas. Por fim, na Conclusão, apresentamos os resultados obtidos e comentamos as

perspectivas futuras. No Apêndice D, apresentamos os artigos que resultaram deste trabalho de tese.

É interessante comentar que a leitura de alguns capítulos pode ser feita de maneira independente porque a tese abrange a resolução de problemas bem diferentes entre si como os problemas dinâmico e estático. O capítulo 2 consiste na apresentação e dedução do modelo de Kirchhoff e culmina com as equações de Kirchhoff. Portanto é um capítulo básico que pode ser pulado caso o leitor já conheça estas equações ou as aceita como hipótese. É recomendada a leitura do capítulo 3 antes dos demais capítulos, pois ele apresenta as equações de equilíbrio e as suas soluções mais simples que serão consideradas nos capítulos seguintes ao compararmos os casos homogêneo e não-homogêneo. A leitura do Apêndice B é somente necessária se houver o interesse em seguir os passos para a obtenção das equações de Kirchhoff estacionárias em ângulos de Euler, apresentadas neste capítulo.

Capítulo 2

Modelo de Kirchhoff

O estudo do comportamento elástico de cordas e filamentos é de interesse fundamental em várias áreas da ciência, como Biologia, Química, Física e Engenharia, conforme comentado na Introdução. Em primeira aproximação, quando a curvatura é relativamente pequena e o comprimento do filamento é muito maior que o raio da sua seção transversal, a estática e a dinâmica de filamentos são governados pelas chamadas *equações de Kirchhoff*.

Neste capítulo, apresentaremos o assim chamado modelo de Kirchhoff para cordas e filamentos. Basicamente, o modelo consta da aplicação das equações de Newton, da mecânica dos meios contínuos[28, 24] a sistemas onde uma de suas dimensões, por exemplo a que define o arco comprimento da corda, varia numa faixa de valores muito maiores do que as outras duas que definem a sua seção transversal. As equações de Kirchhoff descrevem tanto

as possíveis configurações de equilíbrio quanto a evolução temporal de um filamento, sob ação de forças e torques externos, e consiste de um sistema de seis equações diferenciais parciais, acopladas, não-lineares, de segunda ordem no tempo e no arco comprimento.

Este capítulo está organizado da seguinte maneira. Na seção 2.1 definimos a curva espacial que representará o eixo da corda e a chamada *base diretora* que, como veremos, conterá toda a informação sobre como a corda se deforma, curvando ou torcendo, em função da posição, ao longo dela, e do tempo. Na seção 2.2 nós mostraremos como cada ponto material da corda pode ser escrito em termos das definições anteriores. Em seguida, na seção 2.3 obteremos as equações de Kirchhoff a partir das equações de balanço para os momentos linear e angular da corda. Na seção 2.4 nós apresentaremos a chamada *relação constitutiva*, necessária para fechar o sistema de equações, que relaciona o torque resultante por unidade de arco comprimento com as deformações da corda. Na seção 2.5, por fim, apresentaremos as equações de Kirchhoff em unidades escalonadas para o caso geral representado por uma corda perfeitamente homogênea.

2.1 A curva no espaço: A base diretora.

Primeiramente, vamos definir uma curva \mathbf{x} no espaço tridimensional, infinitamente diferenciável e parametrizada a partir de um intervalo aberto

$I = [p_0, p_1] \in \mathfrak{R}$. Seja, então, $\mathbf{x} : I \rightarrow \mathfrak{R}^3 : \mathbf{x}(p) = (x_1(p), x_2(p), x_3(p))$ esta curva. O vetor tangente \mathbf{t} é definido pela derivada de \mathbf{x} com relação a p . Um ponto $\mathbf{x}(p^*)$ é chamado *singular* se $\mathbf{t}(p^*) = 0$. Senão o ponto é chamado *regular*. Uma curva é chamada *regular* se $\mathbf{t}(p) \neq 0 \forall p \in I$. O *arco comprimento* s de uma curva regular é dado por:

$$s(p) = \int_{p_0}^p |\mathbf{t}(p')| dp' \quad (2.1)$$

onde $|\mathbf{t}(p)| = \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2} = \sqrt{\sum_i (\frac{\partial x_i}{\partial p})^2}$.

Como consequência temos, para curvas regulares,

$$\frac{ds}{dp} = |\mathbf{t}(p)|. \quad (2.2)$$

O arco comprimento s pode ser usado como uma parametrização da curva. Neste caso $|\mathbf{t}(s)| = 1$ e para curvas finitas, $[p_0, p_1] = [0, L]$, onde L é o comprimento total da curva \mathbf{x} . A *curvatura* $\kappa(s)$ no ponto s é dada por $\kappa(s) = |\mathbf{t}'(s)|$, onde o símbolo ' significa derivada em relação ao argumento, no caso s . O *plano normal* é definido como o plano normal ao vetor tangente. O vetor $\mathbf{x}'(s)$ é o próprio vetor $\mathbf{t}(s)$. Portanto $|\mathbf{x}'(s)| = |\mathbf{t}(s)| = 1$.

Consideremos uma curva regular \mathbf{x} como acima definida. Introduziremos, agora, a *base diretora ou tríade geral* $\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3\}$ da seguinte maneira: o versor $\mathbf{d}_3(s) = \mathbf{x}'(s)/|\mathbf{x}'(s)| = \mathbf{x}'(s)$ será um versor na direção tangente de \mathbf{x}

em s e $\{\mathbf{d}_1(s), \mathbf{d}_2(s)\}$ serão duas funções vetoriais diferenciáveis pertencentes ao plano normal de tal forma que $\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3\}$ formarão, para cada s , uma *tríade ortonormal do tipo 'right-handed'* ($\mathbf{d}_1 \times \mathbf{d}_2 = \mathbf{d}_3$, $\mathbf{d}_2 \times \mathbf{d}_3 = \mathbf{d}_1$). Considerando a relação de ortonormalidade $\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j = \delta_{ij}$ e tomando a derivada com relação a s temos:

$$\mathbf{d}'_i \cdot \mathbf{d}_j + \mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}'_j = 0. \quad (2.3)$$

Escrevendo $\mathbf{d}'_i = \sum_{l=1}^3 K_{il} \mathbf{d}_l$ a relação acima fica sendo:

$$\sum_l (K_{il} \mathbf{d}_l \cdot \mathbf{d}_j + K_{jl} \mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_l) = 0 \quad (2.4)$$

$$\Leftrightarrow K_{ij} + K_{ji} = 0 \quad (2.5)$$

Vemos, então, que K é uma matriz antisimétrica. Portanto, as equações para \mathbf{d}_i podem ser escritas em termos de um vetor chamado *vetor 'twist'*

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 k_i \mathbf{d}_i, \quad (2.6)$$

da seguinte maneira:

$$\mathbf{d}'_i = \mathbf{k} \times \mathbf{d}_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.7)$$

Daqui em diante estas equações serão referidas como *equações twist*. Elas descrevem as variações da base diretora ao longo do eixo, que segue a curva \mathbf{x} . Consideremos, agora, que esta curva possa variar no tempo: $\mathbf{x} = \mathbf{x}(s, t)$ e vamos observar a variação temporal dos versores da base diretora $\mathbf{d}_i =$

$\mathbf{d}_i(s, t)$. Analogamente ao que foi feito acima, pode ser definido um outro vetor, $\mathbf{w}(s, t)$, chamado *vetor `spin`* tal que as equações para a evolução temporal (*equações spin*) da base diretora ficam escritas da seguinte forma:

$$\dot{\mathbf{d}}_i = \mathbf{w} \times \mathbf{d}_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.8)$$

Levando-se em conta que os versores $\mathbf{d}_i(s, t)$ são funções contínuas dos seus argumentos, a derivada de \mathbf{k} com relação a t e de \mathbf{w} com relação a s estarão relacionadas pelo requerimento de que as derivadas cruzadas de \mathbf{d}_i sejam iguais: $\partial^2 \mathbf{d}_i / \partial t \partial s = \partial^2 \mathbf{d}_i / \partial s \partial t$. Isto leva a uma relação de compatibilidade:

$$\mathbf{w}' - \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{k} \times \mathbf{w}. \quad (2.9)$$

2.2 Definindo a corda

A definição mais geral de uma corda, ou de um filamento, é um corpo tridimensional onde duas de suas dimensões são muito menores que a terceira. Consideraremos uma corda cujo eixo central é uma curva espacial \mathbf{x} de comprimento L como definida na seção anterior. Nós assumiremos que esta curva é *inextensível*, isto é, o arco comprimento s é independente do tempo podendo, portanto, ser usado como uma coordenada material. Cada seção transversal $\mathcal{S}(s)$ da corda é centrada na curva $\mathbf{x}(s)$ e fica no plano normal a

ela. Cada ponto material pode ser escrito em função da base diretora como:

$$\mathbf{X}(s, x_1, x_2) = \mathbf{x}(s) + x_1 \mathbf{d}_1 + x_2 \mathbf{d}_2 \quad (2.10)$$

onde uma possível escolha de $(\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2)$ é ao longo dos principais eixos de inércia da seção transversal $\mathcal{S}(s)$. A figura 2.1 mostra o vetor \mathbf{X} como função do eixo da corda \mathbf{x} e da base diretora, ambos definidos numa dada posição s .

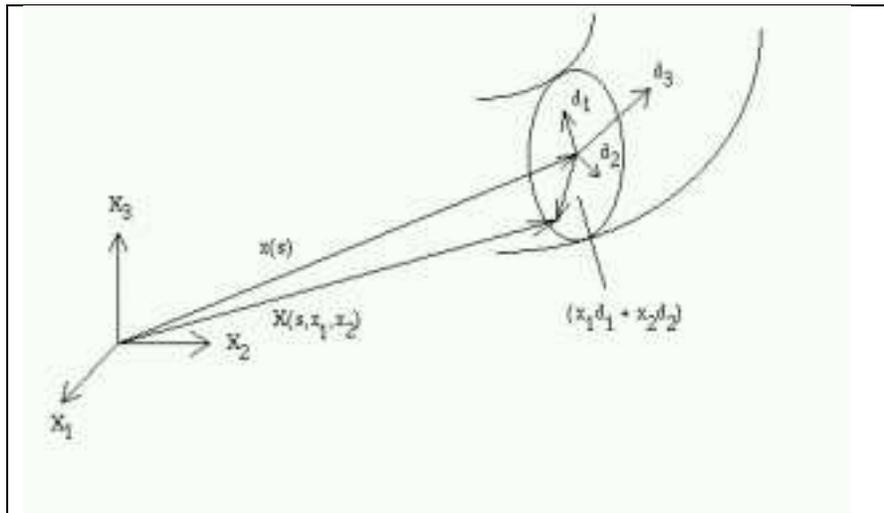


Fig. 2.1) Posição de um ponto material da corda em função do eixo e da base diretora.

Vamos definir um comprimento de escala h de uma seção transversal como:

$$h = \max_{s; x_1; x_2 \in \mathcal{S}(s)} \left\{ \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \right\}. \quad (2.11)$$

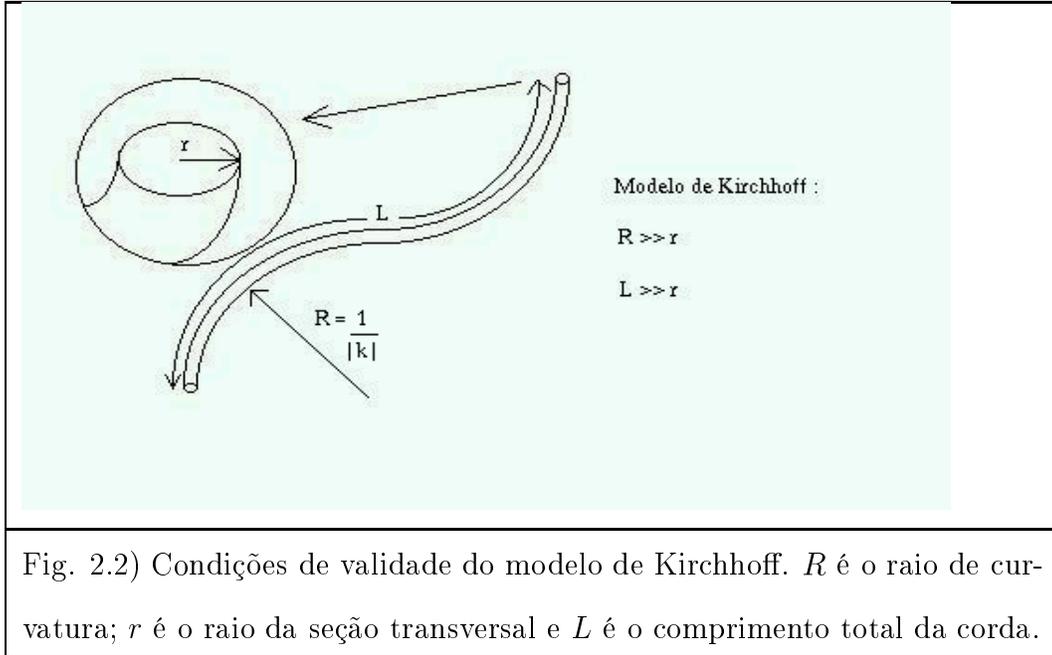
Uma corda *fina* é tal que o comprimento da corda L é muito maior que o

comprimento de escala da seção transversal: $h \ll L$.

Podemos, também, introduzir um outro parâmetro que depende da razão h/L e do módulo do vetor twist:

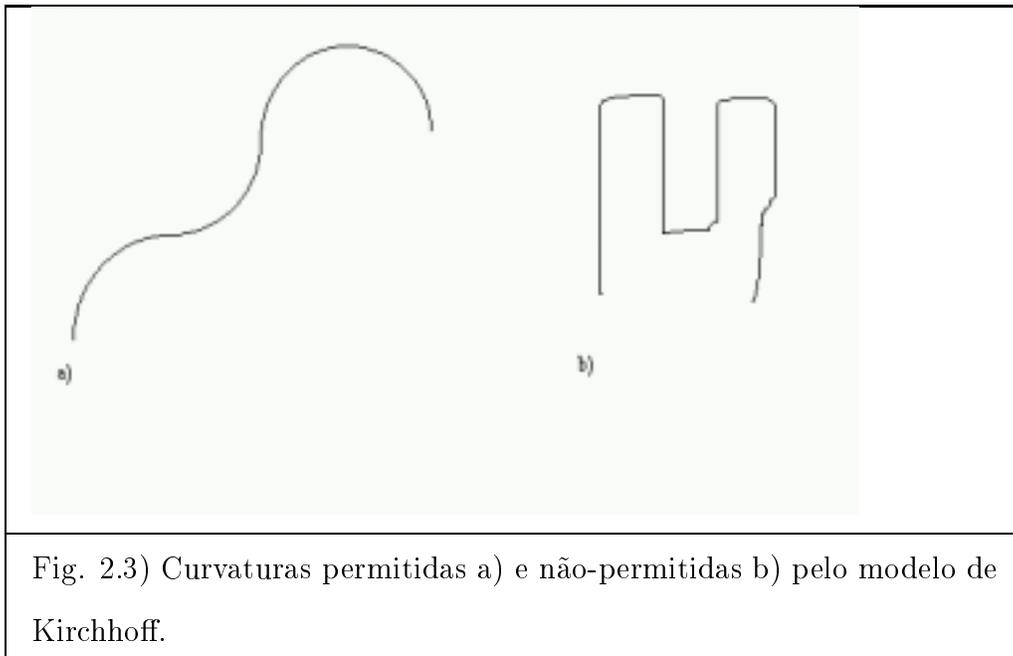
$$\tau = \max_{s \in [0, L]; t \in T} \{|\mathbf{k}(s, t)| h, h/L\} \quad (2.12)$$

onde T é o intervalo de tempo sobre o qual a evolução temporal da corda é considerada.



O parâmetro τ governa a deformação da corda. No modelo de Kirchhoff τ é assumido pequeno e quantidades da ordem $O(\tau^2)$ são desprezadas. A figura 2.2 mostra como o raio de curvatura $R = \frac{1}{|\mathbf{k}|}$ e o comprimento total

L devem se relacionar com o raio médio da seção transversal r . Pela Eq. 2.11, h é o valor máximo de r . Grosseiramente falando, τ pequeno significa que a razão h/L é pequena e que a curvatura relativa (em unidades de h^{-1}) também é muito pequena. Apesar disso, este regime não exclui a possibilidade de grandes deformações globais na corda. A figura 2.3 mostra o tipo de curvatura permitida.



2.3 Balanço de Momento Linear e Momento Angular

As equações de Kirchhoff nada mais são do que a aplicação da segunda lei

de Newton para os momentos linear e angular, dos sistemas tratados como um meio contínuo, a um corpo nas condições definidas na seção anterior. O resultado é:

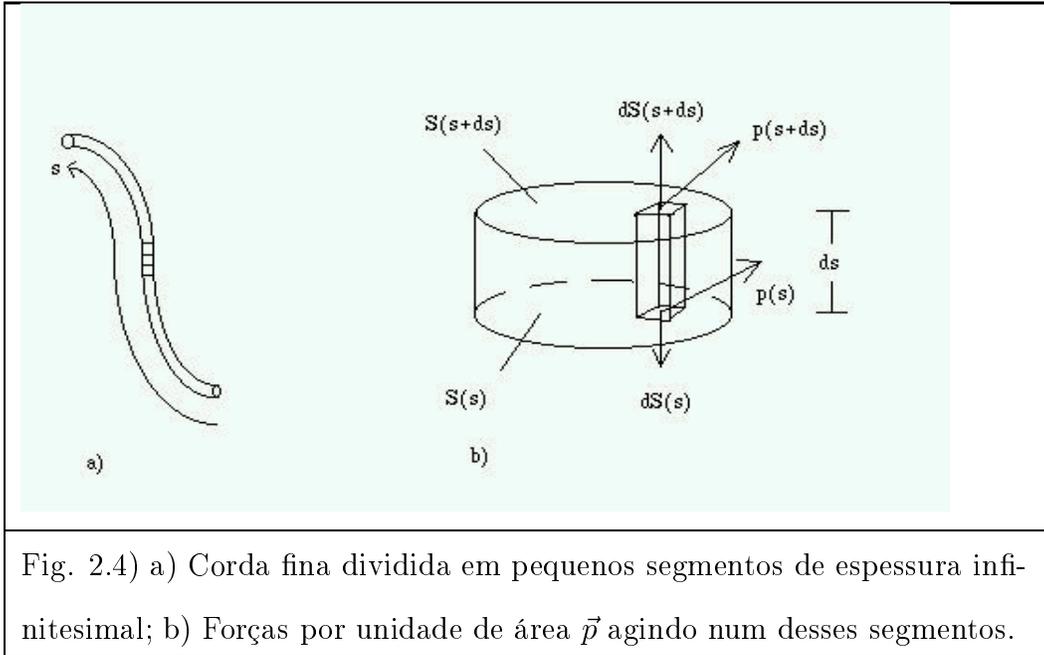
$$\int_A \vec{p}_n dS + \int_V \vec{f} dV = \int_V \rho \ddot{\mathbf{R}} dV \quad (2.13)$$

e

$$\int_A (\mathbf{R} \times \vec{p}_n) dS + \int_V (\mathbf{R} \times \vec{f}) dV = \int_V \rho (\mathbf{R} \times \ddot{\mathbf{R}}) dV. \quad (2.14)$$

Uma dedução geral destas equações está descrita no Apêndice A (Eqs. A.45 e A.51).

Para desenvolver a teoria nós consideraremos a corda como sendo uma sequência de discos de espessura infinitesimal com uma seção transversal de área $\mathcal{S}(s)$ perpendicular à curva axial, conforme a figura 2.4.



Aplicaremos, então, as Eqs. 2.13 e 2.14 a cada disco de espessura infinitesimal da figura 2.4b). Começamos com a Eq. 2.13. Para a nossa corda $\mathbf{R} = \mathbf{X}$ da Eq. 2.10. O termo $\int_V \vec{f} dV$ desta equação representa eventuais forças externas agindo sobre a corda. O primeiro termo representa a força total resultante sobre o disco devido ao contato com os discos adjacentes. A área A , a ser considerada, é toda a área que envolve o disco. \vec{p}_n é a força de contato por unidade de área. Nas paredes laterais, portanto, \vec{p}_n é nulo e só há contribuição devido as forças agindo nas seções transversais $\mathcal{S}(s)$ e $\mathcal{S}(s + ds)$. Assim temos:

$$\int_A \vec{p}_n dS = \int_{\mathcal{S}(s+ds)} \vec{p}_s(s + ds) dS - \int_{\mathcal{S}(s)} \vec{p}_s(s) dS \quad (2.15)$$

$$= \int \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} ds dS = \int_V \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} dV. \quad (2.16)$$

Onde \vec{p}_s é a força resultante agindo sobre cada elemento de superfície das seções transversais $\mathcal{S}(s)$ e $\mathcal{S}(s + ds)$. O sinal de menos na equação 2.15 vem da orientação da normal em $\mathcal{S}(s)$ ser contrária à orientação em $\mathcal{S}(s + ds)$ (ver figura 2.4). Substituindo este resultado na equação 2.13 temos:

$$\int_V \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} dV + \int_V \vec{f} dV = \int_V \rho \ddot{\mathbf{X}} dV. \quad (2.17)$$

Isso nos leva a uma equação para um elemento de volume infinitesimal do disco da figura 2.4:

$$\frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} + \vec{f} = \rho \ddot{\mathbf{X}}. \quad (2.18)$$

Vamos assumir, neste capítulo, que $\vec{f} = 0$ e definir a força resultante sobre toda a seção transversal $\mathcal{S}(s)$ como:

$$\mathbf{F} \equiv \int_{\mathcal{S}(s)} \vec{p}_s dS. \quad (2.19)$$

Para obtermos a equação final de balanço de momento linear para uma seção transversal $\mathcal{S}(s)$ da corda, vamos integrar a equação 2.18 sobre $\mathcal{S}(s)$:

$$\frac{\partial}{\partial s} \int_{\mathcal{S}(s)} \vec{p}_s dS = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho \ddot{\mathbf{X}} dS, \quad (2.20)$$

ou numa forma final:

$$\mathbf{F}' = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho \ddot{\mathbf{X}} dS. \quad (2.21)$$

Vamos, agora, definir um vetor $\mathbf{r}(s, t)$ da seguinte maneira:

$$\mathbf{r}(s, t) \equiv x_1 \mathbf{d}_1(s, t) + x_2 \mathbf{d}_2(s, t). \quad (2.22)$$

Este vetor liga o eixo da corda a algum ponto na seção transversal. Assim o vetor posição de algum ponto material da corda, Eq. 2.10, fica sendo dado por:

$$\mathbf{X}(s, x_1, x_2, t) = \mathbf{x}(s, t) + \mathbf{r}(s, t). \quad (2.23)$$

Vamos agora considerar a Eq. 2.14 para o balanço de momento angular. Esta equação se refere ao torque em relação à origem. Aqui queremos calcular

o torque com relação ao eixo, ou em relação ao ponto $\mathbf{x}(s, t)$. Portanto a equação com a qual trabalharemos é:

$$\int_A (\mathbf{r} \times \vec{p}_n) dS + \int_V (\mathbf{r} \times \vec{f}) dV = \int_V \rho (\mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}}) dV, \quad (2.24)$$

onde fizemos $\mathbf{R} = \mathbf{r}$ para o cálculo do torque e $\mathbf{R} = \mathbf{X}$ para a posição do ponto material. V é o volume de um segmento da corda (disco da figura 2.4) e a área A é a sua área total, como anteriormente. O termo $\int_V (\mathbf{r} \times \vec{f}) dV$ representa o torque devido a forças externas e, neste capítulo, está sendo desconsiderado ($\vec{f} = 0$). Da mesma forma anterior, \vec{p}_n é nulo nas paredes laterais do disco e, portanto, o primeiro termo da equação acima fica:

$$\int_A (\mathbf{r} \times \vec{p}_n) dS = \int_{S(s+ds)} \mathbf{r} \times \vec{p}_s(s+ds) dS - \int_{S(s)} \mathbf{r} \times \vec{p}_s(s) dS = \int_V \mathbf{r} \times \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} dV. \quad (2.25)$$

Substituindo na equação 2.24, ficamos com:

$$\int \left(\int_{S(s)} \mathbf{r} \times \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} dS \right) ds = \int \left(\int_{S(s)} \rho (\mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}}) dS \right) ds, \quad (2.26)$$

ou

$$\int_{S(s)} \mathbf{r} \times \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} dS = \int_{S(s)} \rho (\mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}}) dS. \quad (2.27)$$

O produto vetorial $\mathbf{r} \times \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s}$ da equação acima pode ser simplificado como:

$$\mathbf{r} \times \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} (\mathbf{r} \times \vec{p}_s) - \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial s} \times \vec{p}_s \right). \quad (2.28)$$

Como $\mathbf{X} = \mathbf{x} + \mathbf{r}$, então:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial s} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} - \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s} = \vec{g}_s - \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s}, \quad (2.29)$$

onde a segunda igualdade é devido à definição do vetor gradiente dado pela equação A.22 do Apêndice A. Como mostrado no Apêndice A, pelas Eqs. A.38 e A.39, a soma do produto vetorial entre os versores da base e as forças por unidade de área é nula. Como as forças por unidade de área nas direções \mathbf{d}_1 e \mathbf{d}_2 são nulas na superfície, $\vec{p}_1 = \vec{p}_2 = 0$, a equação A.39, para os pontos da superfície do disco $\mathcal{S}(s)$, se torna:

$$\hat{x}_s \times \vec{p}_s = 0, \quad (2.30)$$

onde a direção de \hat{x}_s é definida pelo vetor gradiente $\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} = \vec{g}_s$, isto é, $\vec{g}_s = |\vec{g}_s| \hat{x}_s$. Isso leva a:

$$\vec{g}_s \times \vec{p}_s = 0. \quad (2.31)$$

A equação 2.28 fica, então, escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{r} \times \frac{\partial \vec{p}_s}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} (\mathbf{r} \times \vec{p}_s) + \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s} \times \vec{p}_s \right). \quad (2.32)$$

O resultado acima pode ser substituído na equação 2.27:

$$\int_{\mathcal{S}(s)} \frac{\partial}{\partial s} (\mathbf{r} \times \vec{p}_s) dS + \int_{\mathcal{S}(s)} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s} \times \vec{p}_s \right) dS = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho (\mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}}) dS. \quad (2.33)$$

A derivada com relação a s que aparece no primeiro termo da equação acima pode sair da integração sobre a seção transversal $\mathcal{S}(s)$. $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial s} = \mathbf{x}'(s)$ pode, também, sair da integral pois $\mathbf{x}'(s)$ não depende da seção transversal. Utilizando a definição dada pela equação 2.19 e definindo, ainda, o torque resultante em relação ao eixo da corda, $\mathbf{M}(s, t)$, da seção transversal do disco como sendo:

$$\mathbf{M} \equiv \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{r} \times \vec{p}_s dS, \quad (2.34)$$

a equação 2.33, de balanço de momento angular, fica da seguinte forma final:

$$\mathbf{M}' + \mathbf{x}' \times \mathbf{F} = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho \mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}} dS. \quad (2.35)$$

Supondo que a corda tem uma seção transversal, $\mathcal{S}(s) = A$, circular e uniforme e que seus dois principais momentos de inércia são iguais e independentes de s , as equações 2.21 e 2.35 podem ser simplificadas:

$$\mathbf{F}'' = \rho A \ddot{\mathbf{d}}_3 \quad (2.36)$$

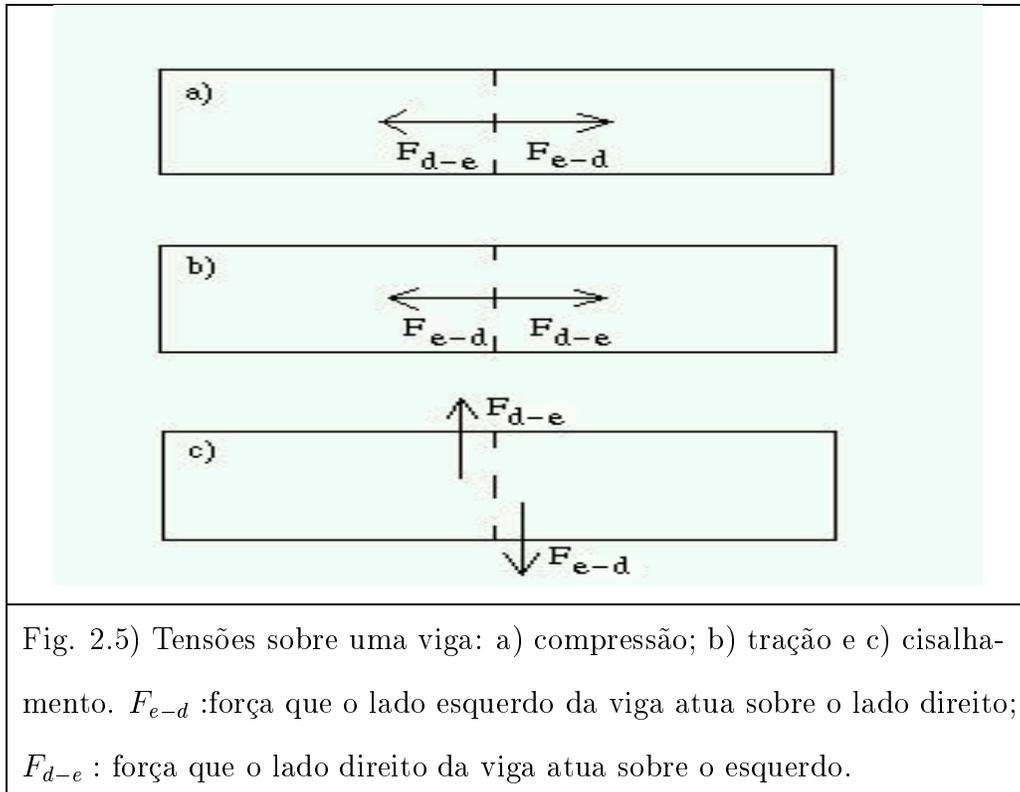
$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = \rho I (\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2), \quad (2.37)$$

onde I é o momento de inércia da seção transversal circular. Nós diferenciamos a equação 2.36 com relação a s para obtermos um sistema de equações, preferivelmente, em termos da base diretora, ao invés de em termos do vetor posição do eixo, \mathbf{x} . Daqui por diante, estas equações serão mencionadas

como *equação de Newton* e *equação de torque*, respectivamente.

2.4 Relações Constitutivas

Desde que a base diretora pode ser representada por três variáveis e a força e o torque são vetores tridimensionais, as equações, quando escritas em suas componentes, constituem um sistema de seis equações para nove incógnitas (três componentes de cada um dos vetores \mathbf{M} , \mathbf{F} e os três versores da base diretora \mathbf{d}_i , $i=1,2,3$). Para fechar o sistema é necessário introduzir alguma informação adicional relacionando forças e torques (“stresses”) a deformações elásticas do corpo (“strains”). Para isso nós temos que levar em conta as propriedades elásticas do meio. Vamos supor que a corda seja feita de um material elástico homogêneo e isotrópico. Em teoria de elasticidade linear a força resultante de uma pequena deformação é proporcional à própria deformação. As constantes de proporcionalidade são características do meio e especificam suas propriedades elásticas.



Seja E o *módulo de Young*, que relaciona a força, por unidade de área, à deformação, por unidade de comprimento, na direção de orientação da superfície que sofre a ação da força, casos a) e b) da figura 2.5; e μ o *módulo de cisalhamento*, que relaciona a força, por unidade de área, à deformação na direção perpendicular à orientação da face que sofre a força, caso c) da figura 2.5. Estes dois parâmetros se relacionam através da razão de Poisson: $\sigma_P = \frac{E}{2\mu} - 1$, que caracteriza a contração de um corpo elástico sob ação de uma compressão. Seu valor varia no intervalo $0 < \sigma_P \leq \frac{1}{2}$. O limite $\sigma_P \rightarrow \frac{1}{2}$ corresponde a um material incompressível.

Em teoria de elasticidade linear é possível obter, para pequenas deformações, uma *relação constitutiva* para o torque[25]. Expressando o torque resultante \mathbf{M} na base diretora, $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^3 M_i \mathbf{d}_i$, os componentes M_i 's estão relacionados ao vetor twist, equação 2.6, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} M_1 &= EI(k_1 - k_1^u), & (a) \\ M_2 &= EI(k_2 - k_2^u), & (b) \\ M_3 &= \mu J(k_3 - k_3^u), & (c) \end{aligned} \tag{2.38}$$

onde J é o momento de inércia axial que, para uma seção transversal circular, vale $2I$. O vetor \mathbf{k}^u corresponde à torção (se existir) na configuração de referência. O caso $\mathbf{k}^u = 0$ corresponde a uma corda ou tubo reto e não torcido. Vamos assumir $\mathbf{k}^u = 0$ no que segue.

Vamos, por fim, reescrever as equações de Kirchhoff juntas:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}'' &= \rho A \ddot{\mathbf{d}}_3, & (a) \\ \mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} &= \rho I (\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2), & (b) \\ \mathbf{M} &= EIk_1 \mathbf{d}_1 + EIk_2 \mathbf{d}_2 + 2\mu k_3 \mathbf{d}_3. & (c) \end{aligned} \tag{2.39}$$

2.5 As Equações de Kirchhoff Escalonadas

As equações 2.39 podem ser simplificadas introduzindo-se uma escala

padrão:

$$t \rightarrow t\sqrt{\frac{I\rho}{AE}}, \quad s \rightarrow s\sqrt{\frac{I}{A}}, \quad \mathbf{F} \rightarrow \mathbf{F}AE, \quad (2.40)$$

$$\mathbf{M} \rightarrow \mathbf{M}E\sqrt{AI}, \quad \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}\sqrt{\frac{A}{I}}, \quad \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{w}\sqrt{\frac{AE}{I\rho}}.$$

As equações de Kirchhoff ficam escritas da seguinte forma:

$$\mathbf{F}'' = \ddot{\mathbf{d}}_3, \quad (a)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = \mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2, \quad (b) \quad (2.41)$$

$$\mathbf{M} = k_1\mathbf{d}_1 + k_2\mathbf{d}_2 + \Gamma k_3\mathbf{d}_3, \quad (c)$$

onde o parâmetro $\Gamma = \frac{2\mu}{E} = \frac{1}{1+\sigma_P}$ varia entre $2/3$ (caso incompressível) e 1 (caso hiper-elástico). Estas equações descrevem tanto as soluções de equilíbrio quanto a evolução temporal da corda no limite de pequenas deformações.

Uma vez obtida uma solução para as equações de Kirchhoff a corda pode ser construída simplesmente integrando-se o versor $\mathbf{d}_3(s, t)$ ao longo da corda:

$$\mathbf{x}(s, t) = \int_0^s \mathbf{d}_3(s', t) ds'. \quad (2.42)$$

As equações 2.41 constituem o modelo de Kirchhoff para cordas homogêneas de seção transversal circular de raio constante, livre de forças externas. No próximo capítulo, mostraremos as soluções de equilíbrio mais simples para a corda homogênea, quais sejam, o anel planar, a barra reta e a hélice. O modelo, entretanto, pode ser estendido para considerar cordas não-homogêneas. A dedução das equações de Kirchhoff, neste caso, apenas

requer que para cada disco da figura 2.4 o material deve ser homogêneo. Isso significa que a não-homogeneidade deverá depender apenas da posição da corda, ou seja, do arco comprimento s . Também é possível considerar forças externas no modelo. No capítulo 4 analisaremos a dinâmica de anéis planares não-homogêneos instáveis em meios viscosos. Como veremos, a viscosidade pode ser inserida no modelo como uma força externa. Nos capítulos seguintes estudaremos como as soluções de equilíbrio variam, a partir do caso homogêneo, com a não-homogeneidade considerada.

Capítulo 3

Soluções estacionárias das equações de Kirchhoff.

No capítulo anterior nós apresentamos a dedução das equações de Kirchhoff para uma corda homogênea de seção transversal circular de raio constante, livre de forças externas. Neste capítulo apresentaremos as soluções estacionárias, ou de equilíbrio, mais simples que são o anel planar torcido, a barra reta e a hélice. Primeiramente mostraremos as soluções escritas em termos das grandezas vetor `twist` e força resultante que aparecem diretamente nas equações. Em seguida escreveremos tanto as equações de Kirchhoff quanto as três soluções de equilíbrio acima citadas em termos dos ângulos de Euler. Finalmente, mostraremos que as equações de Kirchhoff em ângulos de Euler podem ser escritas numa formulação hamiltoniana e que a solução

para a hélice corresponde ao ponto de mínimo do potencial efetivo deste hamiltoniano.

As equações de Kirchhoff formam um conjunto de nove equações diferenciais parciais não-lineares de segunda ordem no tempo e no arco comprimento para nove incógnitas: três componentes da força, três do momento e os três versores da base. Porém, utilizando a relação de compatibilidade (equação 2.9) as equações de Kirchhoff podem ser vistas como um conjunto de seis equações de segunda ordem em s e t para seis independentes incógnitas (três componentes do vetor 'twist' \mathbf{k} , e três do vetor força resultante \mathbf{F}). As equações de equilíbrio, no caso, podem ser escritas bastando anular-se os termos proporcionais às derivadas temporais nas Eqs. 2.41:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}' &= 0, & (a) \\ \mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} &= 0 & (b) \\ \mathbf{M} &= k_1 \mathbf{d}_1 + k_2 \mathbf{d}_2 + \Gamma k_3 \mathbf{d}_3 . & (c) \end{aligned} \tag{3.1}$$

3.1 Soluções de equilíbrio

Nesta seção apresentaremos as soluções de equilíbrio mais simples das equações de Kirchhoff estacionárias na seguinte ordem: 1) anel planar torcido, 2) a barra reta torcida e 3) hélice.

3.1.1 Anel planar torcido

A solução estacionária para o anel planar torcido é dada pela seguinte expressão para os vetores 'twist' e força resultante, escritos na base diretora:

$$\mathbf{k}(s) = (\kappa \sin \gamma s, \kappa \cos \gamma s, \gamma), \quad (3.2)$$

$$\mathbf{F}(s) = (\Gamma \gamma \kappa \sin \gamma s, \Gamma \gamma \kappa \cos \gamma s, 0), \quad (3.3)$$

onde κ é o inverso do raio do anel e $k_3 \equiv \gamma$ é um parâmetro constante que representa a densidade de torção do anel. Para esta escolha do vetor 'twist' os versores $(\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2)$ giram em relação ao eixo do anel de acordo com uma torção dada por γs . A figura 3.1 mostra esta solução.

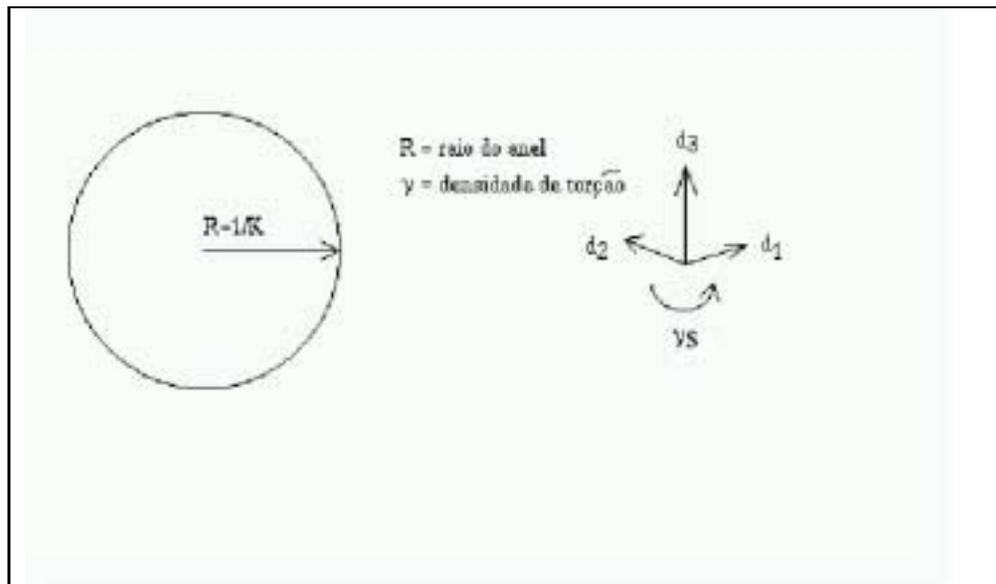


Fig. 3.1) Anel planar de raio R . No detalhe, o significado do ângulo γ .

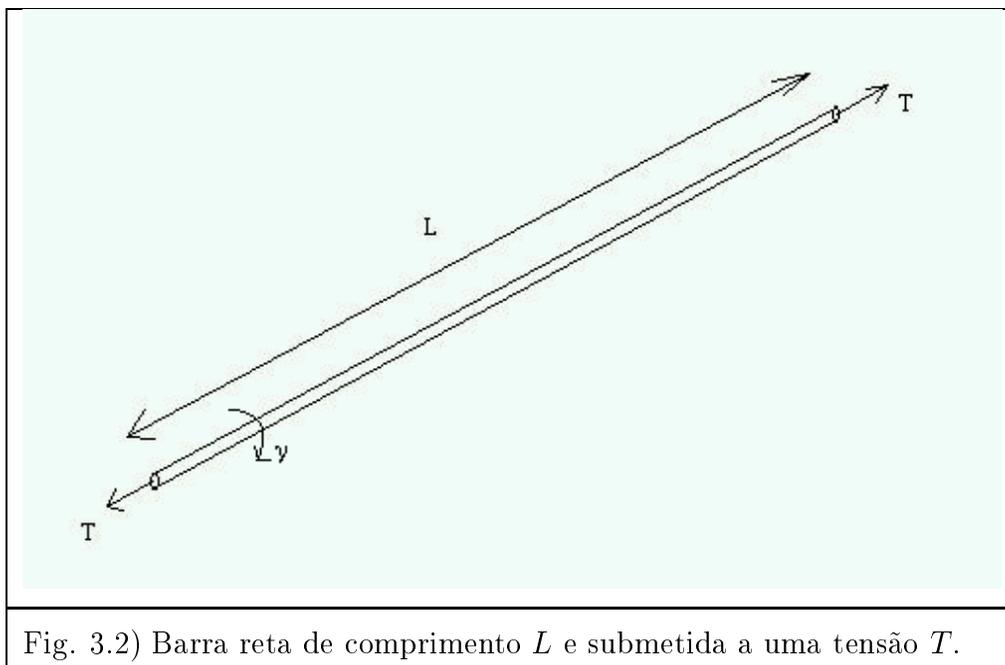
3.1.2 Barra reta

A solução estacionária para a barra reta torcida é dada pela seguinte expressão para os vetores `twist` e força resultante, escritos na base diretora:

$$\mathbf{k}(s) = (0, 0, \gamma), \quad (3.4)$$

$$\mathbf{F}(s) = (0, 0, T), \quad (3.5)$$

onde γ é a densidade de torção como no caso anterior e T representa a tensão ou compressão sobre a barra. A figura 3.2 mostra a barra reta.



3.1.3 Hélice

A solução estacionária para a hélice é dada pela seguinte expressão para os vetores 'twist' e força resultante, escritos na base diretora:

$$\mathbf{k}(s) = (k_F \sin \gamma s, k_F \cos \gamma s, \tau_F + \gamma), \quad (3.6)$$

$$\mathbf{F}(s) = (f_0 \sin \gamma s, f_0 \cos \gamma s, \frac{\tau_F}{k_F} f_0), \quad (3.7)$$

onde k_F e τ_F são a curvatura e a torção da hélice dadas pelas expressões

$$k_F = \frac{R_{hélice}}{P_{hélice}^2 + R_{hélice}^2} \quad (3.8)$$

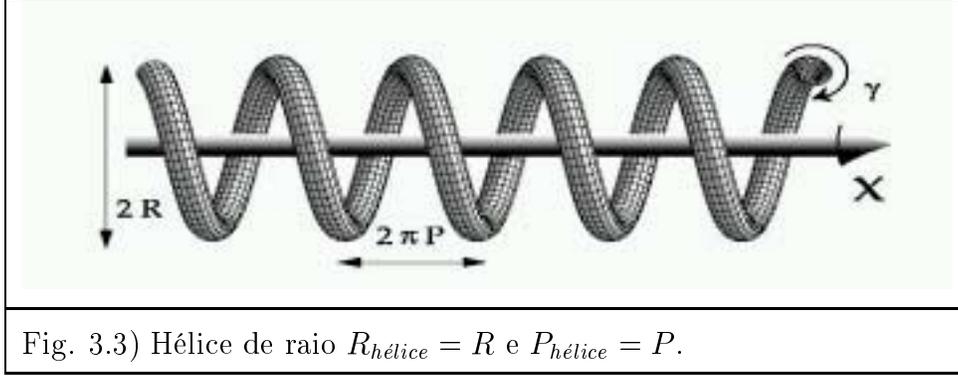
e

$$\tau_F = \frac{P_{hélice}}{P_{hélice}^2 + R_{hélice}^2}, \quad (3.9)$$

onde $R_{hélice}$ e $P_{hélice}$ são o raio e o 'pitch', ou passo, da hélice. γ é a densidade de torção e f_0 é dado por:

$$f_0 = (\Gamma - 1)k_F\tau_F. \quad (3.10)$$

A figura 3.3 mostra a hélice com o raio e o 'pitch' definidos acima.



A estabilidade destas soluções foi analisada por Alain Goriely e Michel Tabor no artigo da referência [29].

3.2 Ângulos de Euler

Neste capítulo introduziremos novas coordenadas materiais, chamadas de ângulos de Euler. Elas relacionam a base diretora $\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3\}$ à base cartesiana fixa $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ através da relação:

$$\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^3 S_{ij} \mathbf{e}_j, \quad (3.11)$$

onde

$$S = \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \theta \cos \phi - \sin \psi \sin \phi & \sin \psi \cos \theta \cos \phi + \cos \psi \sin \phi & -\sin \theta \cos \phi \\ -\cos \psi \cos \theta \sin \phi - \sin \psi \cos \phi & -\sin \psi \cos \theta \sin \phi + \cos \psi \cos \phi & \sin \theta \sin \phi \\ \cos \psi \sin \theta & \sin \psi \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

A figura 3.4 mostra como os ângulos de Euler relacionam a base diretora à base cartesiana.

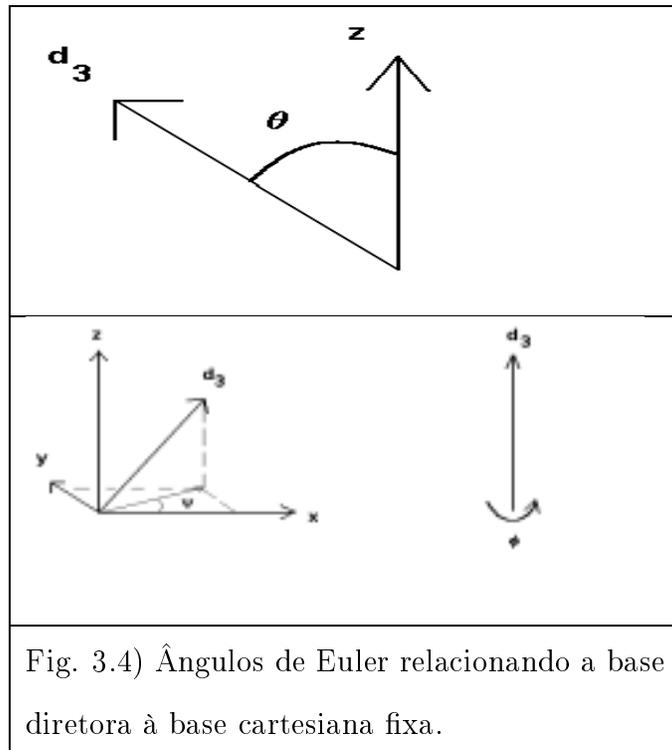


Fig. 3.4) Ângulos de Euler relacionando a base diretora à base cartesiana fixa.

A força resultante \mathbf{F} pode ser escrita na base $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ como:

$$\mathbf{F} = F_1 \mathbf{e}_1 + F_2 \mathbf{e}_2 + F_3 \mathbf{e}_3. \quad (3.13)$$

Assim, as equações de Kirchhoff estacionárias (Eqs. 3.1), em componentes,

após a substituição das relações anteriores, ficam na seguinte forma¹:

$$\begin{aligned}
F_1' &= 0, & (a) \\
F_2' &= 0, & (b) \\
F_3' &= 0, & (c) \\
\psi'' \sin \theta + 2\psi'\theta' \cos \theta - \Gamma(\psi' \cos \theta + \phi')\theta' &= F_1 \sin \psi - F_2 \cos \psi, & (d) \\
\theta'' - (\psi')^2 \sin \theta \cos \theta + \Gamma(\psi' \cos \theta + \phi')\psi' \sin \theta &= -(F_1 \cos \psi + F_2 \sin \psi) \cos \theta + F_3 \sin \theta, & (e) \\
\psi'' \cos \theta &= \psi' \sin \theta \theta' - \phi'', & (f).
\end{aligned}
\tag{3.14}$$

Após obtermos qualquer solução destas equações, basta integrarmos o versor \mathbf{d}_3 para obtermos a curva $\mathbf{x}(s)$. Em ângulos de Euler a Eq. 2.42 pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}(s) &= \int_0^s \mathbf{d}_3(s') ds' \\
\mathbf{x}(s) &= \int_0^s [\sin \theta(s') \cos \psi(s') \mathbf{e}_1 + \sin \theta(s') \sin \psi(s') \mathbf{e}_2 + \cos \theta(s') \mathbf{e}_3] ds'.
\end{aligned}
\tag{3.15}$$

A primeira solução de equilíbrio, o anel planar torcido, pode ser escrita, em ângulos de Euler, como:

$$\begin{aligned}
\theta &= \frac{\pi}{2}, & \phi &= \gamma s + \frac{\pi}{2}, & \psi &= \kappa s, & (a) \\
F_1 &= 0, & F_2 &= 0, & F_3 &= \Gamma \kappa \gamma, & (b)
\end{aligned}
\tag{3.16}$$

onde κ é o inverso do raio do anel e γ é a densidade de torção. A torção total T_W do anel é dada por:

$$T_W = \frac{\gamma}{\kappa}. \tag{3.17}$$

¹Ver Apêndice B para a dedução destas equações.

A barra reta é dada por:

$$\begin{aligned} \theta = 0, \quad \phi = \gamma s, \quad \psi = 0, & \quad (a) \\ F_1 = 0, \quad F_2 = 0, \quad F_3 = T, & \quad (b) \end{aligned} \tag{3.18}$$

onde T é a tensão sobre a corda e γ é a densidade de torção.

A hélice é obtida pela solução:

$$\begin{aligned} \theta = \theta_{hélice}, \quad \phi = \gamma s, \quad \psi = \omega_\psi s, & \quad (a) \\ F_1 = 0, \quad F_2 = 0, \quad F_3 = T, & \quad (b) \end{aligned} \tag{3.19}$$

onde $\theta_{hélice} = \text{constante}$ é a inclinação da hélice, γ é a densidade de torção e T é a força resultante constante sobre a hélice na direção z . ω_ψ é a frequência de rotação que define o comprimento de uma volta da hélice. Mais adiante veremos como o raio $R_{hélice}$ e o 'pitch' $P_{hélice}$ da hélice são escritos em termos da solução em ângulos de Euler.

3.3 Formulação Hamiltoniana

Nesta seção demonstraremos que o sistema de equações de Kirchhoff estacionárias podem ser escritas numa formulação análoga à uma formulação hamiltoniana, isto é, sendo formadas por uma função hamiltoniana, que corresponde a energia elástica da corda, e três momentos conjugados às variáveis de Euler, θ , ψ e ϕ . As soluções de equilíbrio poderão ser obtidas de forma

análoga às soluções de um sistema dinâmico usual (através das equações de Hamilton) mas com o arco comprimento s fazendo o papel da variável tempo t . Como veremos, o sistema será integrável no caso de cordas homogêneas. Seguiremos a apresentação feita no artigo da referência [30]. Vamos obter as três primeiras integrais necessárias para demonstrarmos que o sistema é integrável.

A Eq. 3.1a) expressa o fato de que a tensão sobre a corda \mathbf{F} é constante. Vamos escolher o eixo z como sendo a direção desta força:

$$\mathbf{F} = F \mathbf{e}_3. \quad (3.20)$$

A força F será considerada como um parâmetro. Inserindo a Eq. 3.20 na Eq. 3.1b) e projetando-a na direção z encontramos:

$$\mathbf{M}' \cdot \mathbf{e}_3 = 0. \quad (3.21)$$

Isso nos leva a

$$M'_Z = 0, \quad (3.22)$$

onde M_Z é a componente z do torque resultante. Esta é a primeira integral do sistema. Projetando, agora, a Eq. 3.1b) na direção \mathbf{d}_3 obtemos:

$$\mathbf{M}' \cdot \mathbf{d}_3 = (\mathbf{M} \cdot \mathbf{d}_3)' - \mathbf{M} \cdot \mathbf{d}'_3 = 0. \quad (3.23)$$

Usando o fato de que $\mathbf{d}'_3 = \mathbf{k} \times \mathbf{d}_3 = \mathbf{M} \times \mathbf{d}_3$ nós vemos que o segundo termo da equação acima é identicamente nulo levando à segunda integral:

$$M'_3 = 0. \quad (3.24)$$

Finalmente tomemos o produto escalar da Eq. 3.1b) com o vetor \mathbf{k} :

$$\mathbf{M}' \cdot \mathbf{k} + (\mathbf{d}_3 \times \mathbf{F}) \cdot \mathbf{k} = \mathbf{M}' \cdot \mathbf{k} + \mathbf{F} \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{d}_3) = 0. \quad (3.25)$$

Usando a Eq. 3.1c) e a Eq. 2.7 a equação anterior se reduz a

$$k_1 k'_1 + k_2 k'_2 + \mathbf{F} \cdot \mathbf{d}'_3 = \left(\frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{F} \cdot \mathbf{d}_3 \right)' = 0, \quad (3.26)$$

que provê a última primeira integral

$$\frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{F} \cdot \mathbf{d}_3 = H. \quad (3.27)$$

Onde H é interpretada como a energia elástica por unidade de comprimento da corda.

Usando as Eqs. B.15-B.17 podemos escrever \mathbf{k} em termos dos ângulos de Euler e escrever o hamiltoniano na forma:

$$H = \frac{P_\theta^2}{2} + \frac{P_\phi^2}{2\Gamma} + \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2}{2 \sin^2 \theta} + F \cos \theta, \quad (3.28)$$

onde

$$P_\theta = \theta', \quad (3.29)$$

$$P_\phi = \Gamma(\phi' + \psi' \cos \theta), \quad (3.30)$$

$$P_\psi = P_\phi \cos \theta + \psi' \sin^2 \theta. \quad (3.31)$$

P_ϕ e P_ψ nada mais são do que M_3 e M_Z , respectivamente, sendo, portanto, constantes de integração. Podemos definir o potencial efetivo $V(\theta)$:

$$V(\theta) = \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2}{2 \sin^2 \theta} + F \cos \theta. \quad (3.32)$$

O ponto de mínimo deste potencial define a solução para a hélice (Eqs. 3.19):

$$V'(\theta_{hélice}) = 0. \quad (3.33)$$

Logicamente, $P_\theta = 0$, já que $\theta_{hélice} = \text{constante}$. Podemos também, definir a energia elástica total E_T da corda como sendo:

$$E_T = \int_0^L H(s') ds', \quad (3.34)$$

onde L é o comprimento total da corda. Note que no caso da corda homogênea a energia elástica total da corda é, simplesmente, $E_T = HL$. No entanto, esse não será o caso quando considerarmos cordas não-homogêneas, que será tratado no capítulo 5 em diante.

O raio $R_{hélice}$ e o 'pitch' $P_{hélice}$ podem ser escritos em termos dos ângulos de Euler da seguinte maneira:

$$R_{hélice} = \left| \frac{\sin^3 \theta_{hélice}}{(P_\psi - P_\phi \cos \theta_{hélice})} \right|, \quad (3.35)$$

$$P_{hélice} = \frac{\cos \theta_{hélice}}{\omega_\psi}, \quad (3.36)$$

onde ω_ψ é obtido a partir da Eq. 3.31:

$$\omega_\psi = \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta_{hélice})}{\sin^2 \theta_{hélice}}. \quad (3.37)$$

De uma forma geral podemos resolver as equações de movimento relativas ao hamiltoniano da Eq. 3.28 a partir da seguinte sequência: primeiro fixamos os valores para P_ϕ e P_ψ e escolhemos as condições iniciais para θ_0 e P_{θ_0} . Em seguida aplicamos as clássicas relações $P_\theta' = -\frac{\partial H}{\partial \theta'}$ e $\theta' = \frac{\partial H}{\partial P_\theta'}$ para obtermos as soluções $(\theta(s), P_\theta(s))$. Depois usamos a Eq. 3.31 para obter $\psi(s)$. As soluções para $\theta(s)$ e $\psi(s)$ são suficientes para se construir a corda conforme a Eq. 3.15.

Com isso fechamos o capítulo sobre as soluções de equilíbrio das equações de Kirchhoff. No que se segue, consideraremos cordas não-homogêneas e mostraremos como as equações de Kirchhoff se apresentam em cada caso. Adiantamos que o hamiltoniano acima exposto, que representa as soluções estacionárias das equações de Kirchhoff, não mais será integrável no caso de cordas não-homogêneas e comportamentos complexos poderão surgir. Nos

capítulos seguintes, ênfase será dada nas aplicações do modelo à molécula do DNA, porém o modelo de Kirchhoff pode ser usado numa ampla faixa de sistemas, conforme comentado na Introdução.

Capítulo 4

Anel planar torcido com densidade de massa não-homogênea

Neste capítulo apresentaremos o primeiro resultado deste trabalho de tese, publicado no *Physical Review E* [31]¹. Trata-se do estudo da dinâmica perto do equilíbrio de anéis planares instáveis com densidade de massa não-homogênea variando ao longo do anel. A análise é feita levando-se em consideração a presença da corda em um meio viscoso. Utilizamos o método de análise dinâmica de estabilidade de soluções de equilíbrio desenvolvida por Alain Goriely e Michael Tabor [29], descrita em detalhes no Apêndice C.

¹Ver Apêndice D

Basicamente, este método, em sua aproximação linear, consta da expansão em primeira ordem, num parâmetro de perturbação ϵ , da base diretora e de todas as grandezas envolvidas no sistema como a força e o torque resultantes. Em particular definimos

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon \mathbf{d}_i^{(1)} = \mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon (\vec{\alpha} \times \mathbf{d}_i^{(0)}) \quad (4.1)$$

e

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{(0)} + \epsilon \mathbf{F}^{(1)} = \sum_i f_i^{(0)} \mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon \sum_i \left(f_i^{(1)} + (\vec{\alpha} \times \mathbf{F}^{(0)})_i \right) \mathbf{d}_i^{(0)}, \quad (4.2)$$

onde as grandezas com os índices superiores $^{(0)}$ e $^{(1)}$ são as soluções de equilíbrio e as correções em primeira ordem, respectivamente. Os vetores $\vec{\alpha}$ e $\vec{f}^{(1)} \equiv (f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)})$ serão obtidos resolvendo-se as equações de Kirchhoff e a dedução sobre como eles aparecem nas equações acima é apresentada no Apêndice C. Portanto, obtém-se daí um conjunto de equações diferenciais lineares no tempo e no arco comprimento para $\vec{\alpha}$ e $\vec{f}^{(1)}$ que regem a evolução temporal do anel após a perturbação. Por estarmos considerando a aproximação linear, os resultados são válidos apenas para tempos muito curtos, na vizinhança do sistema pós-perturbação. No entanto, isso é suficiente para se saber que forma o anel assumirá, preferencialmente, nos instantes iniciais, se ele estiver em condições instáveis.

A apresentação deste capítulo será feita da seguinte maneira. Na seção

4.1 analisaremos o anel homogêneo num meio viscoso. Mostraremos como a viscosidade é incorporada ao modelo agindo como uma força externa. Na seção 4.2 incluiremos a não-homogeneidade através de uma pequena variação na densidade de massa ao longo do anel. Mostraremos um resultado geral e, na seção 4.3, uma aplicação à molécula do DNA.

4.1 Efeito da viscosidade sobre a corda homogênea

Nesta seção apresentaremos as equações de Kirchhoff para uma corda imersa num meio viscoso. Mostraremos como a viscosidade pode ser incorporada às equações, pela consideração de que ela atua como uma força externa. Usaremos um clássico resultado para a força de resistência que um cilindro reto e infinito sente quando se move em relação ao fluido que o envolve[32, 33]. Mostraremos como um expoente característico das soluções instáveis σ (ver o significado de σ no Apêndice C) se altera em função da intensidade do parâmetro que representará a viscosidade do meio.

Na apresentação das equações de Kirchhoff, Eqs 2.41, feita no capítulo 2, não consideramos a ação de forças externas por simplicidade. Isso não impediu a demonstração dos passos fundamentais para se chegar até elas. Neste capítulo, é conveniente considerarmos a viscosidade como uma força

externa agindo sobre cada ponto da corda e por isso o nosso ponto de partida será as Eqs. 2.21 e 2.35, agora, com uma força externa, que representaremos aqui pelo vetor \mathbf{f} :

$$\mathbf{F}' + \int_{S(s)} \mathbf{f} dS = \int_{S(s)} \rho \ddot{\mathbf{X}} dS. \quad (4.3)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{x}' \times \mathbf{F} + \int_{S(s)} \mathbf{r} \times \mathbf{f} dS = \int_{S(s)} \rho \mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}} dS. \quad (4.4)$$

Assumindo que a corda se move relativamente devagar, de modo a não criar turbulências no fluido em que está imersa, nós aproximaremos a força de resistência da corda por aquela sentida por um cilindro infinito quando o fluido se move em relação a ele. Portanto, a força por unidade de comprimento na direção de movimento do fluido (que é perpendicular ao cilindro) é dada por[32, 33]:

$$f_v = \frac{-4\pi\eta}{0.5 - c - \ln \frac{Ua\rho_m}{4\eta}} U, \quad (4.5)$$

onde η é a viscosidade do meio, a é o raio do cilindro, ρ_m é a densidade do meio, U é a velocidade relativa entre o cilindro e o fluido e $c \simeq 0.577$ é o chamado número de Euler . A razão

$$\frac{Ua\rho_m}{\eta} \quad (4.6)$$

é o número de Reynolds R_e do sistema. Quanto mais baixo for o número de Reynolds, mais intenso será o efeito da viscosidade sentida pelo corpo. Comparando-se um ser humano nadando numa piscina com o movimento de uma molécula de DNA, por exemplo, imersa em água, podemos ver que

a razão entre o número de Reynolds do sistema DNA+água e o sistema humano+água, se eles se movessem com a mesma velocidade média, seria:

$$\frac{R_{e_{DNA}}}{R_{e_{humano}}} = \frac{a_{DNA}}{a_{humano}} \sim \frac{10 \times 10^{-10}m}{10 \times 10^{-2}m} \sim 10^{-8}, \quad (4.7)$$

o que significa que para a molécula do DNA um meio como a água torna a dinâmica extremamente viscosa. Sabemos que nestas circunstâncias os efeitos devido à inércia são, em geral, desprezíveis[34]. No entanto, como iremos ver adiante na seção 4.3, mesmo em um meio viscoso, a dinâmica após a perturbação de uma molécula de DNA circular pode depender de como a distribuição de massa ocorre ao longo dela, se a sua densidade de torção for relativamente alta.

Como as forças devido à viscosidade agem apenas na superfície externa da corda nós impomos a condição de que a força total \mathbf{f} integrada sobre o volume da corda seja a mesma força por unidade de comprimento, dada acima, integrada sobre todo o comprimento da corda, ou seja, $\int_V \mathbf{f}dV = \int_L \mathbf{f}_v ds$. Nós encontramos que a força externa que deve ser inserida nas Eqs. 4.3 e 4.4 tem que ser escrita como:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_v \frac{\delta(r - a)}{2\pi r}, \quad (4.8)$$

onde r , aqui, é a distância de cada ponto material do cilindro ao seu eixo.

Usando as Eqs. 2.22 e 2.23 e assumindo que a corda possui uma seção

transversal circular de raio constante A , as Eqs. 4.3 e 4.4 e a relação constitutiva Eq. 2.39 podem ser simplificadas da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}'' - bA\dot{\mathbf{d}}_3 &= \frac{\rho'(s)}{\rho(s)} (\mathbf{F}' - bA\dot{\mathbf{x}}) + \rho(s)A\ddot{\mathbf{d}}_3, \quad (a) \\
\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} - 2bI(\mathbf{d}_1 \times \dot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \dot{\mathbf{d}}_2) &= \rho(s)I(\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2), \quad (b) \\
\mathbf{M} &= EIk_1\mathbf{d}_1 + EIk_2\mathbf{d}_2 + 2\mu k_3\mathbf{d}_3, \quad (c)
\end{aligned}
\tag{4.9}$$

onde nós escrevemos explicitamente a densidade de massa da corda $\rho(s)$ dependente da posição, I é o momento de inércia principal da seção transversal e a terceira equação é a relação constitutiva que completa o sistema com E e μ sendo o módulo de Young e de cisalhamento, respectivamente, do material que compõe a corda. O parâmetro b é obtido a partir da Eq. 4.5:

$$b = \frac{1}{A} \left(\frac{4\pi\eta}{0.5 - c - \ln \frac{R_c}{4}} \right). \tag{4.10}$$

Como feito na seção 2.5 do capítulo 2, podemos simplificar as equações de Kirchhoff introduzindo um padrão de escala para as variáveis. Primeiramente, vamos escrever a densidade de massa como:

$$\rho = \rho_0(1 + \delta\rho), \tag{4.11}$$

onde ρ_0 é constante e $\delta\rho$ conterà a informação sobre as variações na densidade de massa ao longo da corda. De maneira análoga à Eq. 2.40 nós fazemos as

seguintes alterações:

$$\begin{aligned}
t &\rightarrow t\sqrt{\frac{I\rho_0}{AE}}, & s &\rightarrow s\sqrt{\frac{I}{A}}, & \mathbf{F} &\rightarrow \mathbf{F}AE, & b &\rightarrow b\sqrt{\frac{AE\rho_0}{I}}, \\
\mathbf{M} &\rightarrow \mathbf{M}E\sqrt{AI}, & \mathbf{k} &\rightarrow \mathbf{k}\sqrt{\frac{A}{I}}, & \mathbf{w} &\rightarrow \mathbf{w}\sqrt{\frac{AE}{I\rho_0}}, & \rho &\rightarrow \frac{\rho}{\rho_0}.
\end{aligned}
\tag{4.12}$$

Nas novas variáveis, as equações de Kirchhoff se tornam:

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}'' - b\dot{\mathbf{d}}_3 &= \frac{\rho'(s)}{\rho(s)}(\mathbf{F}' - b\dot{\mathbf{x}}) + \rho(s)\ddot{\mathbf{d}}_3, & (a) \\
\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} - 2b(\mathbf{d}_1 \times \dot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \dot{\mathbf{d}}_2) &= \rho(s)(\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2), & (b) \\
\mathbf{M} &= k_1\mathbf{d}_1 + k_2\mathbf{d}_2 + \Gamma k_3\mathbf{d}_3, & (c)
\end{aligned}
\tag{4.13}$$

onde, agora, $\rho = 1 + \delta\rho$ é uma função adimensional do arco comprimento s e $\Gamma = 2\mu/E$ é o parâmetro elástico adimensional da corda e varia entre $\frac{2}{3}$ (caso incompressível) e 1 (caso hiperelástico).

É importante observar que eliminando os termos proporcionais à derivada temporal, o que nos leva às equações de Kirchhoff estacionárias, elimina-se tanto os termos que envolvem a densidade de massa quanto os que envolvem a viscosidade. Portanto, ambos não afetam as soluções de equilíbrio possíveis. Isso significa que a corda pode ser levada a uma configuração de equilíbrio diferente se imersa em um meio diferente ou se a densidade de massa variar ao longo dela. Nesta seção consideraremos a densidade de massa constante ($\delta\rho \equiv 0$) e vários valores para o parâmetro de viscosidade b . Na seção seguinte, consideraremos ambos os efeitos.

Conforme já comentado anteriormente, as equações acima formam um conjunto de seis equações diferenciais parciais não-lineares de segunda ordem no tempo e no arco comprimento para seis incógnitas: três componentes da força e três do vetor 'twist'. Assim consideremos a solução de equilíbrio para o anel planar torcido dado pelas Eqs. 3.2 e 3.3. O método de análise dinâmica em primeira ordem nos leva² a um conjunto de equações que pode ser escrito formalmente como:

$$L_E(\mathbf{k}_{anel}, \mathbf{F}_{anel}) \cdot \xi = 0, \quad (4.14)$$

onde $\xi = \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)}\}$ (ver Apêndice C) L_E é um operador linear de segunda ordem em s e em t cujos coeficientes dependem de s através da solução de equilíbrio \mathbf{k}_{anel} e \mathbf{F}_{anel} obtida a partir das Eqs. 3.2 e 3.3. A equação acima pode ser simplificada com a ajuda de novas variáveis:

$$\vec{\beta} = R_\gamma \cdot \vec{\alpha}, \quad (4.15)$$

$$\vec{g} = R_\gamma \cdot \vec{f}^{(1)}, \quad (4.16)$$

onde

$$R_\gamma = \begin{pmatrix} \cos \gamma s & \sin \gamma s & 0 \\ -\sin \gamma s & -\cos \gamma s & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

²Ver os passos no Apêndice C

e os vetores $\vec{\alpha}$ e $f^{(1)}$ são formados a partir dos três primeiros e três últimos componentes de ξ , respectivamente. Esta transformação leva a um conjunto de equações autônomas, isto é, de coeficientes constantes, nas variáveis $\vec{\beta}$ e \vec{g} :

$$\begin{aligned}
\ddot{\beta}_1 + b\dot{\beta}_1 &= g_2'', \\
\ddot{\beta}_2 + b\dot{\beta}_2 + g_1'' + 2\kappa g_3' - \Gamma\gamma\kappa\beta_3'' + 2\kappa^2\Gamma\gamma\beta_1' &= \kappa^2 g_1 - \kappa^3\Gamma\gamma\beta_3, \\
\Gamma\gamma\kappa\beta_1'' + g_3'' + 2\kappa^2\Gamma\gamma\beta_3' - 2\kappa g_1' &= \kappa^2 g_3 + \kappa^3\Gamma\gamma\beta_1, \\
\ddot{\beta}_1 + 2b\dot{\beta}_1 - \beta_1'' + \Gamma y\beta_2' - \Gamma\kappa\beta_3' &= (1 - \Gamma)\kappa^2\beta_1 + g_2, \\
\ddot{\beta}_2 + 2b\dot{\beta}_2 - \beta_2'' - \Gamma\gamma\beta_1' &= -g_1 + \Gamma\gamma\kappa\beta_3, \\
2\ddot{\beta}_3 + 4b\dot{\beta}_3 &= \Gamma\beta_3'' - \Gamma\kappa\beta_1'
\end{aligned} \tag{4.18}$$

As soluções, ou modos fundamentais, normais do sistema de equações acima podem ser escritas na forma:

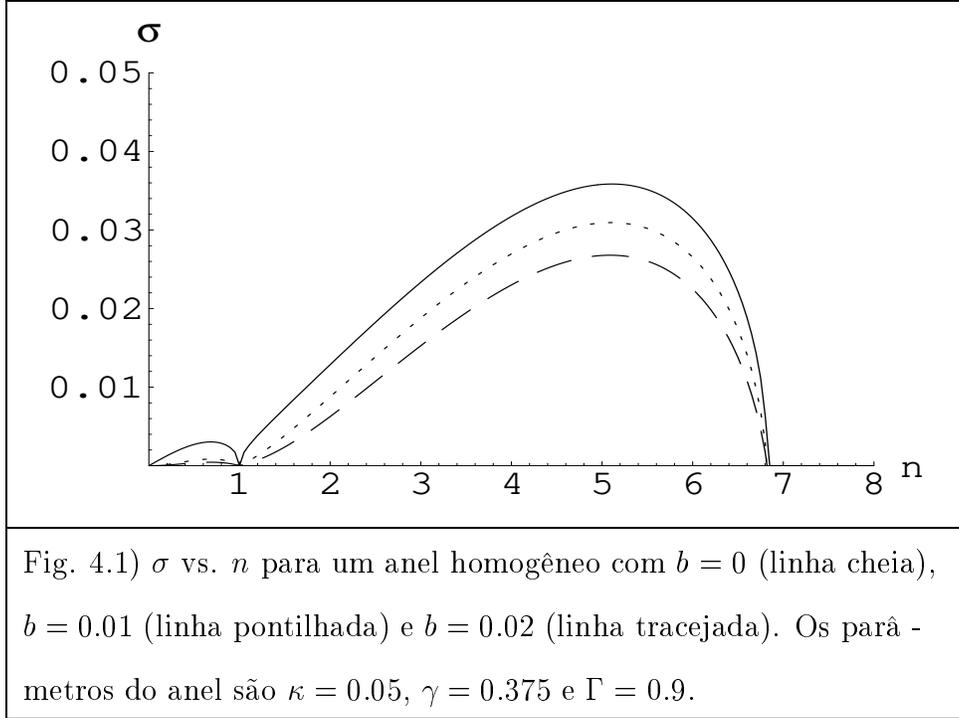
$$\beta_j = e^{\sigma t} \left(Ax_j e^{in\kappa s} + A^* x_j^* e^{-in\kappa s} \right), \quad j = 1, 2, 3, \tag{4.19}$$

$$g_j = e^{\sigma t} \left(Ax_{j+3} e^{in\kappa s} + A^* x_{j+3}^* e^{-in\kappa s} \right), \quad j = 1, 2, 3, \tag{4.20}$$

onde A é a amplitude das soluções, * significa “complexo conjugado” e n é um inteiro que define o modo fundamental das soluções para o anel planar torcido. Substituindo estas soluções nas Eqs. 4.18 ficamos com um problema linear na forma $L \cdot \vec{x} = 0$ onde L é dado por:

$$L = \begin{pmatrix} -2i\kappa^3\Gamma\gamma n & -\sigma^2 - b\sigma & -\kappa^3\Gamma\gamma(1+n^2) & \kappa^2(1+n^2) & 0 & -2in\kappa^2 \\ \sigma^2 + b\sigma & 0 & 0 & 0 & n^2\kappa^2 & 0 \\ \kappa^3\Gamma\gamma(1+n^2) & 0 & -2i\kappa^3\Gamma\gamma n & 2in\kappa^2 & 0 & \kappa^2(1+n^2) \\ \kappa^2(1-\Gamma-n^2) - \sigma^2 - 2b\sigma & -i\kappa\Gamma\gamma n & i\Gamma\kappa^2 n & 0 & 1 & 0 \\ -i\kappa\Gamma\gamma n & n^2\kappa^2 + \sigma^2 + 2b\sigma & -\kappa\Gamma\gamma & 1 & 0 & 0 \\ i\Gamma\kappa^2 n & 0 & \Gamma n^2\kappa^2 + 2\sigma^2 + 4b\sigma & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

O auto-vetor relativo ao autovalor nulo de L determina os coeficientes de \vec{x} . A imposição de que o determinante de L deva ser nulo, para que existam soluções diferentes da trivial $\vec{x} = 0$, determina o expoente característico de estabilidade σ . Soluções com σ real e positivo identificam os modos instáveis. Estes são os mais relevantes desde que eles crescem exponencialmente, mesmo para pequenas perturbações. Embora a solução geral das equações de movimento seja uma combinação linear destes modos, aquele com o maior expoente característico dominará a dinâmica e nós o chamaremos de *modo principal*. Na figura 4.1 nós vemos o gráfico de σ vs. n para $b = 0$ (linha cheia), $b = 0.01$ (linha pontilhada) e $b = 0.02$ (linha tracejada). Os parâmetros escolhidos foram $\kappa = 0.05$ (um anel de raio $R = 20$ em unidades escalonadas), $\gamma = 0.375$ (o que corresponde a 7.5 voltas de torção em todo o anel) e $\Gamma = 0.9$ (o que corresponde a um material bem elástico).



Em todos os casos nós vemos que o máximo valor para σ corresponde ao modo $n = 5$. Este modo é o *modo principal*. Para valores grandes de n os modos são amortecidos. Note que o valor de σ decresce com b . Para obtermos a corda, basta integarmos o versor $\mathbf{d}_3(s, t)$ através da equação:

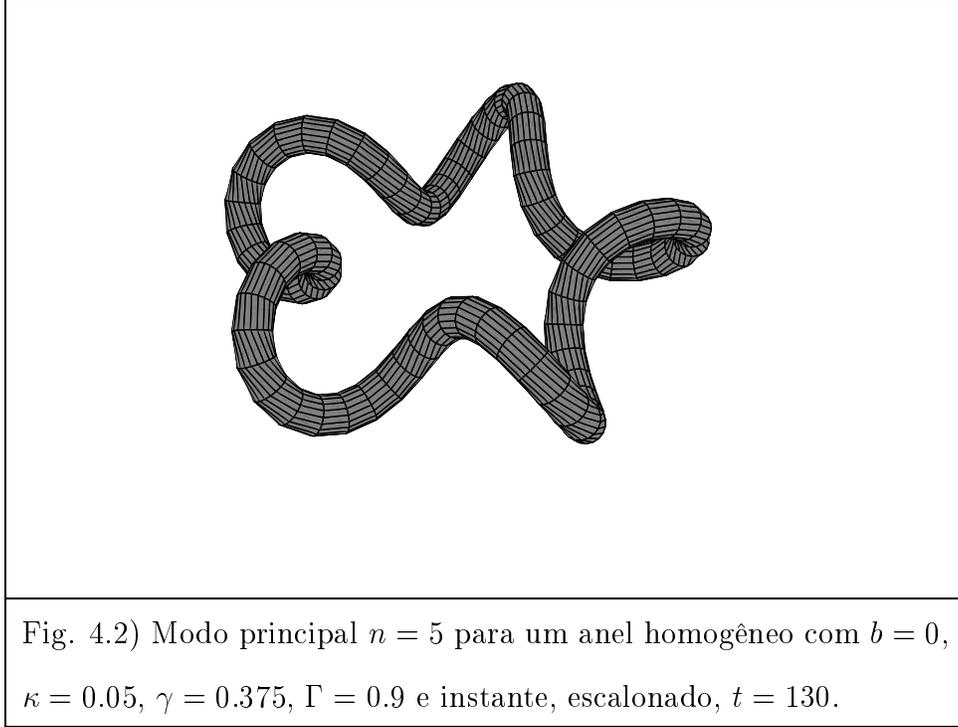
$$\mathbf{x}(s, t) = \int_0^s \mathbf{d}_3 ds' = \int_0^s [\mathbf{d}_3^{(0)} + \epsilon(\alpha_2 \mathbf{d}_1^{(0)} - \alpha_1 \mathbf{d}_2^{(0)})] ds', \quad (4.22)$$

onde α_i são escritos em termos dos β_i usando-se a Eq. 4.15:

$$\alpha_1 = -\beta_2 \cos \gamma s - \beta_1 \sin \gamma s, \quad (4.23)$$

$$\alpha_1 = \beta_1 \cos \gamma s - \beta_2 \sin \gamma s. \quad (4.24)$$

A figura 4.2 mostra o anel para o modo principal para $n = 5$ e $b = 0$.



Nesta figura, o anel evoluiu a partir da sua posição de equilíbrio instável de acordo com as equações lineares para um tempo escalonado de $t = 130$. Note que a figura é totalmente simétrica com respeito a rotações de $2\pi/5$ em torno do eixo z . Para $b \neq 0$ a forma do modo principal é idêntica à da figura 4.2, porém o tempo necessário para se chegar até ela é maior. Isto significa que o único efeito da viscosidade sobre o anel homogêneo é retardar a sua evolução temporal. Na próxima seção vamos considerar que o anel das figuras 4.1 e 4.2 possui densidade de massa dependente da posição.

4.2 Anel não-homogêneo

Na seção anterior nós verificamos o efeito geral da viscosidade do meio sobre a dinâmica pós perturbação do anel instável. Vamos agora considerar que a densidade de massa do anel varia ligeiramente ao longo da posição. Isto pode simular pequenas diferenças na densidade de massa que aparecem no limite de cordas longas, devido a não uniformidades em sua composição, ou à ligação de alguma partícula externa ao anel homogêneo. A condição de contorno requerida pelo anel é que a sua densidade de massa variável seja uma função periódica do arco comprimento s . Nós consideraremos a forma mais simples de variação periódica dada pela equação abaixo:

$$\rho(s) = 1 + \zeta \cos Q\kappa s, \quad (4.25)$$

onde ζ é a amplitude da perturbação na densidade de massa ($\zeta \ll 1$) e Q é um parâmetro inteiro que define o número de oscilações completas da densidade de massa ao longo do anel de raio $R = 1/\kappa$ e comprimento $L = 2\pi/\kappa$.

Vamos reescrever as Eqs. 4.13, multiplicando a Eq. 4.13a) por $\rho(s)$:

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{F}'' - \rho b \dot{\mathbf{d}}_3 &= \rho' (\mathbf{F}' - b \dot{\mathbf{x}}) + \rho^2 \ddot{\mathbf{d}}_3, \quad (a) \\ \mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} - 2b(\mathbf{d}_1 \times \dot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \dot{\mathbf{d}}_2) &= \rho(\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2), \quad (b) \\ \mathbf{M} &= k_1 \mathbf{d}_1 + k_2 \mathbf{d}_2 + \Gamma k_3 \mathbf{d}_3, \quad (c) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Seguindo os mesmos passos da seção anterior obteremos o conjunto de equações diferenciais lineares em segunda ordem no tempo e no arco comprimento nas variáveis $\vec{\beta}$ e \vec{g} . Essas equações não são mais autônomas como no caso do anel homogêneo e o termo proporcional a $\dot{\mathbf{x}}$ na equação acima as torna excessivamente complicada. Por essa razão as equações finais estão apresentadas no Apêndice C. Porém podemos escrever a forma geral das soluções para $\vec{\beta}$ e \vec{g} :

$$\beta_j = e^{\sigma t} \left(\sum_{n=0}^{\infty} A x_{j,n} e^{in\kappa s} + A^* x_{j,n}^* e^{-in\kappa s} \right), \quad j = 1, 2, 3, \quad (4.27)$$

$$g_j = e^{\sigma t} \left(\sum_{n=0}^{\infty} A x_{j+3,n} e^{in\kappa s} + A^* x_{j+3,n}^* e^{-in\kappa s} \right), \quad j = 1, 2, 3. \quad (4.28)$$

A substituição destas soluções nas equações diferenciais para $\vec{\beta}$ e \vec{g} nos leva a um sistema linear de dimensão infinita cuja matriz é formada por blocos 6×6 rotulados pela variável n . Da mesma forma impondo que o determinante desta matriz seja nulo determina-se o valor de σ e o autovetor correspondente ao autovalor nulo determina os coeficientes $x_{j,n}$. Se o parâmetro de perturbação na densidade de massa ζ for nulo esses blocos se desacoplam e nós obtemos o resultado anterior. Para $\zeta \neq 0$ o bloco n se acopla com os blocos $n \pm Q$, $n \pm 2Q$, ..., etc. Cada modo desacoplado n é alterado pela influência dos outros modos na solução. Para encontrar esse novo modo n , numericamente,

nós consideraremos apenas os dois blocos que são os vizinhos mais próximos: $n - Q$ e $n + Q$. Isto reduz o sistema a um conjunto de 18 equações lineares. Nesta aproximação nós desprezamos todos os termos proporcionais a ζ^2 .

A figura 4.3 mostra os efeitos da variação na densidade de massa na dinâmica do modo principal $n = 5$ (caso anterior) de um anel num meio viscoso. Os parâmetros do anel são $\kappa = 0.05$, $\gamma = 0.375$, $\Gamma = 0.9$ e usamos $Q = 1$. Cada conjunto de anéis numa mesma linha possui o mesmo valor de b , sendo $b = 0$ na primeira linha, $b = 0.01$ na segunda e $b = 0.02$ na terceira. Para cada valor de b nós mostramos o efeito da não-uniformidade na densidade de massa para $\zeta = 0.03, 0.07$ e 0.1 (da esquerda para a direita). Em todos os anéis nós usamos tonalidades da cor cinza indicando a densidade de massa. Partes mais *escuras* (preto) representam densidades *menores* e vice-versa. Para $\zeta = 0$ a forma do modo $n = 5$ é simétrica com relação rotações de $2\pi/5$ radianos em torno do eixo z . À medida que a variação na densidade de massa cresce, a quebra nesta simetria se torna mais visível no sentido de que partes com densidade de massa maior tendem a se deformar menos que as de densidade menor.

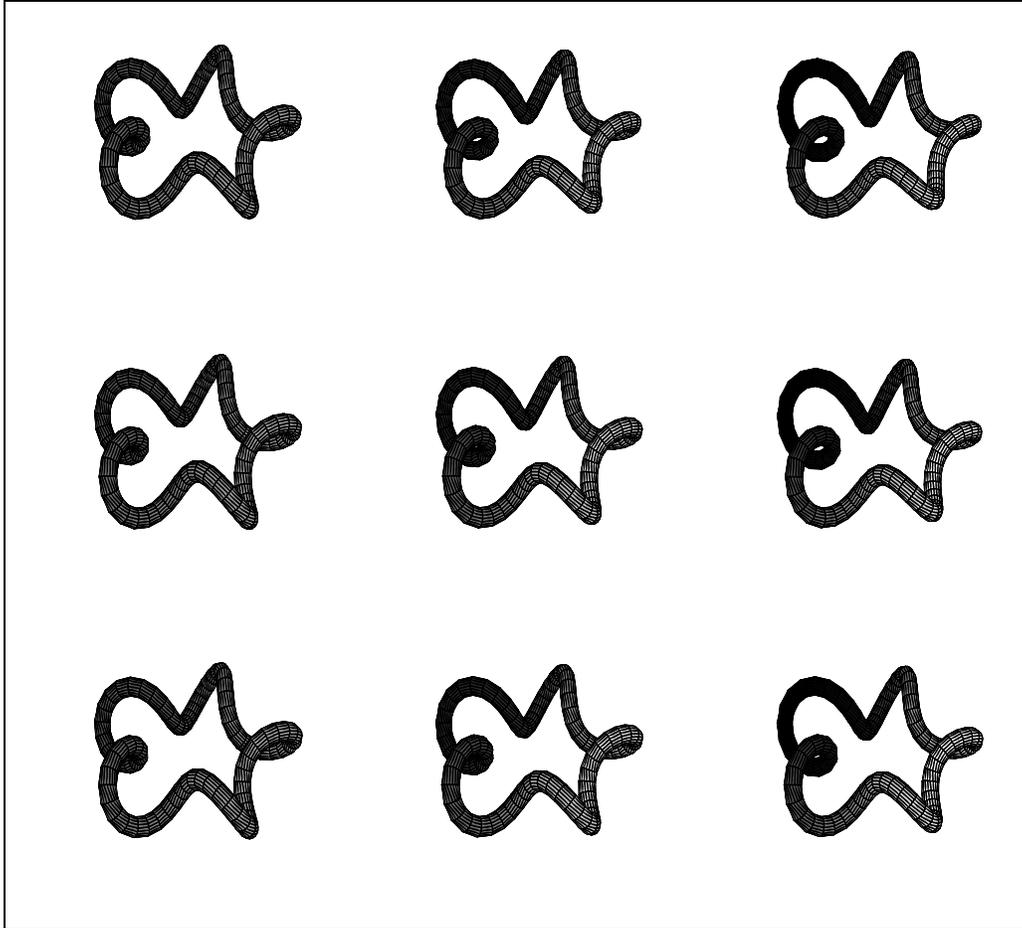


Fig 4.3) Modo principal $n = 5$ para um anel com $\kappa = 0.05$, $\gamma = 0.375$, $\Gamma = 0.9$ e $Q = 1$. O coeficiente de viscosidade b vale 0(para os aneis da primeira linha), $b = 0.01$ (segunda linha) e $b = 0.02$ (terceira linha). Em cada uma delas, da esquerda para a direita, ζ vale 0.03, 0.07 e 0.1. O instante escalonado vale $t = 130$ para $b = 0$, $t = 150$ para $b = 0.01$ e $t = 180$ para $b = 0.02$. As tonalidades de cinza indicam o gradiente de massa ao longo do anel. Partes claras correspondem a densidades de massa maiores e vice-versa.

Por outro lado, com o aumento de b a quebra de simetria se torna menor a ponto de para valores de $b > \sigma$ este efeito se torna desprezível.

A figura 4.4 mostra a evolução temporal do anel com $b = 0$ e $\zeta = 0.1$, para os parâmetros das figuras anteriores.

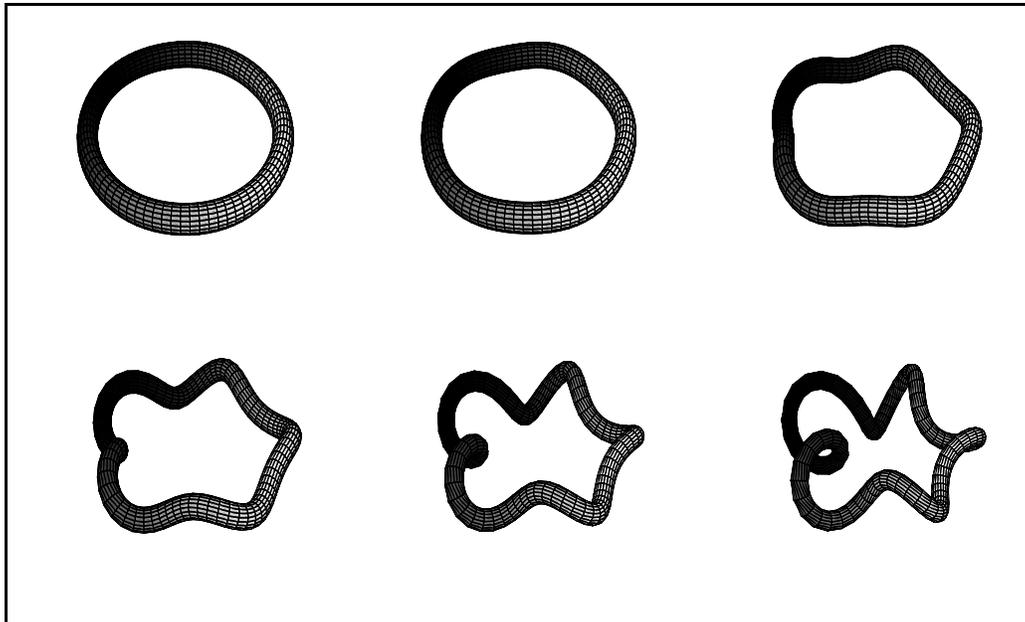
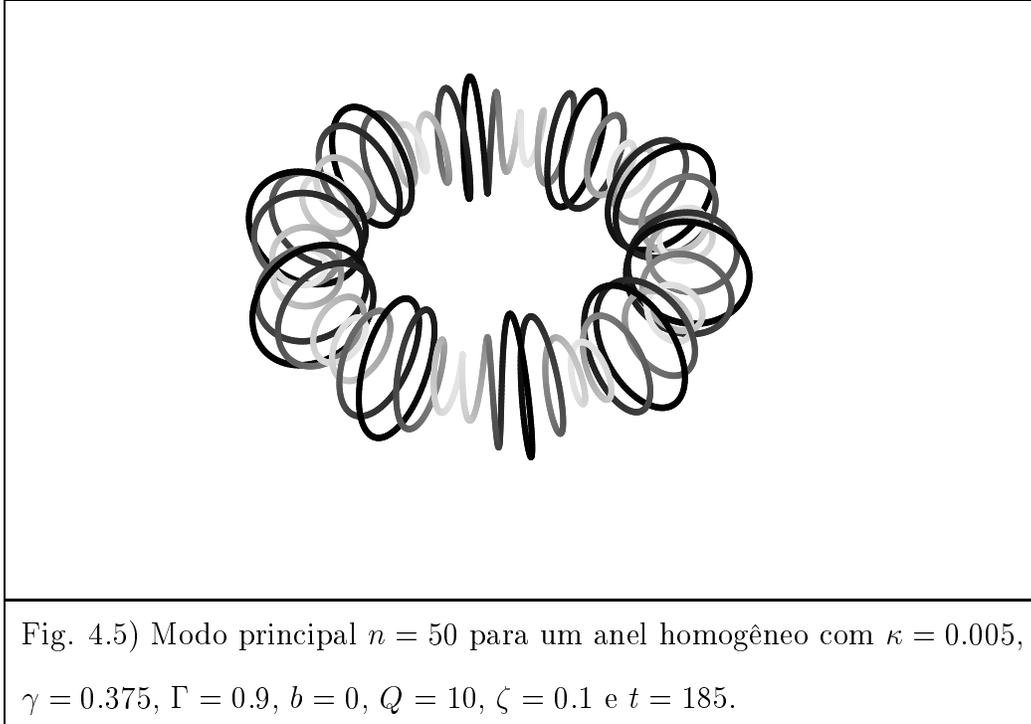


Fig 4.4) Evolução temporal do modo principal $n = 5$ para um anel com $\kappa = 0.05$, $\gamma = 0.375$, $\Gamma = 0.9$, $Q = 1$ e $\zeta = 0.1$. Da esquerda para a direita e de cima para baixo: $t = 0$, $t = 40$, $t = 80$, $t = 105$, $t = 120$ e $t = 130$. As tonalidades em cinza são as mesmas que na figura anterior.

Podemos ver com clareza que conforme o tempo passa a parte mais leve (parte mais escura) do anel se enrola mais do que a parte mais pesada (parte mais clara).

A figura 4.5 mostra um anel de raio 10 vezes maior ($\kappa = 0.005$) que o das figuras anteriores, mas com os mesmos parâmetros: $\gamma = 0.375$, $\Gamma = 0.9$, $\zeta = 0.1$ e $b = 0$. Neste caso o modo principal é $n = 50$ e nós estamos mostrando o efeito de uma oscilação periódica com $Q = 10$. Como o anel é bem mais longo, estamos mostrando apenas o seu eixo.



4.3 Aplicação à molécula do DNA

Nesta seção nós aplicaremos a teoria descrita acima a uma molécula de DNA circular de comprimento $L = 168bps$ ($bp =$ `basepair` ou par de base)

imersa em água. A escolha deste sistema é motivada por um experimento recente realizado por Han *et al.* em pequenos anéis de DNA[26], onde sequências de pares de base com curvatura intrínseca foram sintetizadas. Por curvatura intrínseca nós entendemos a curvatura e/ou torção que uma corda pode apresentar em seu estado natural relaxado, livre de forças e torques. Os anéis foram imersos em solução contendo Zn^{2+} e/ou Mg^{2+} . Os autores encontraram que os anéis de DNA estavam sempre estáveis quando usavam solução com Mg^{2+} , mas exibia pontas quando a concentração de Zn^{2+} atingia um determinado valor crítico.

Embora as instabilidades observadas podem ter-se originado a partir de excessos na curvatura do anel, conforme sugerem alguns autores[35], e não a partir de excessos na torção, nós notamos que a massa atômica do íon Zn^{2+} é, justamente, 10% da massa total de um par de base, enquanto que o íon Mg^{2+} é apenas 4%. Portanto a ligação do íon Zn^{2+} à molécula do DNA é um exemplo da situação que o nosso modelo pode descrever. Nós veremos que, mesmo para um sistema onde o número de Reynolds R_e é extremamente baixo, torções suficientemente grandes podem fazer ressaltar os efeitos inerciais originados de uma distribuição de massa não-homogênea.

O número de Reynolds para a molécula do DNA pode ser calculado usando a Eq. 4.6. A razão η/ρ_m para a água é $10^{-2}cm^2s^{-1}$ [34]. O raio da seção transversal do DNA é $a = 10\text{\AA}$. Assumindo uma velocidade média de $0.1\text{\AA}s^{-1}$, o número de Reynolds vale $R_e = 10^{-14}$. Usando a Eq. 4.10 nós podemos calcular o valor da constante b que vale $b \simeq 1.12 \times 10^{14}Nm^{-1}s$. O

próximo passo é calcular o valor das variáveis escalonadas. O inverso do raio κ e a constante b são dados por:

$$\kappa_{escalonado} = \kappa_{SI} \sqrt{\frac{I}{A}}, \quad e \quad b_{escalonado} = b_{SI} \sqrt{\frac{I}{AE\rho_0}}.$$

Para o DNA de comprimento $L = 168bps$ nós temos $L = 168 \times l_0$, onde $l_0 = 3.3\text{\AA}$ é o comprimento de um par de bases[36]. Portanto $\kappa = 2\pi/L \simeq 113 \times 10^6 m^{-1}$. Como a razão

$$\sqrt{\frac{I}{A}} = \sqrt{\frac{\pi a^4/4}{\pi a^2}} = \frac{a}{2} = 5 \times 10^{-10} m,$$

nós encontramos que $\kappa_{escalonado} = 0.057$. A densidade de massa do DNA é $m_{bp}/V_{disco} = 929 kgm^{-3}$ [36] e o módulo de Young $E = 4 \times 10^8 Nm^{-2}$ [37], de modo que $b_{escalonado} = 0.098$ (omitiremos o índice `escalonado' daqui por diante). O parâmetro elástico adimensional da molécula do DNA é tomado como sendo $\Gamma = 2/3$ [27]. Finalmente, a densidade de torção pode ser calculada a partir da relação: $\gamma = T_W \kappa$, onde T_W é a torção total do anel que é , exatamente, o número de voltas em torno da direção tangente ao anel. A maioria dos sistemas formados por moléculas de DNA possui a torção total T_W em torno de 5% acima da situação relaxada(curvatura intrínseca) devido a flutuações do meio[38]. A forma conhecida como *forma-B* da molécula do DNA possui uma densidade de torção de $10.5bps$ por volta como torção intrínseca. Nós teremos, então, aproximadamente, 16 voltas de torção total num anel com $168bps$ de comprimento. 5% de 16 vale 0.8 que

está abaixo do valor crítico para instabilidade que é $\sqrt{3}$ (ver Apêndice C). Portanto, o DNA circular é estável segundo o nosso modelo. Na verdade Haijun e Zhong-can[35] mostraram que a instabilidade neste caso ocorreria devido ao aumento da curvatura e não da torção.

Os efeitos devidos a inércia são percebidos quando o anel está instável. Portanto vamos considerar uma situação em que a torção total aumenta ou diminui justamente de um valor igual a sua torção intrínseca natural e nenhuma curvatura ocorre. Esta situação não representa o experimento da referência [26], onde os íons da solução que contém o DNA impõem variações na sua curvatura, mas é inspirada nela. Na verdade, uma situação em que o DNA sofre uma torção tal que a sua torção intrínseca é totalmente removida ocorre quando um processo de duplicação da molécula ou transcrição(processo pelo qual as proteínas se formam) se inicia.

A figura 4.6 mostra o gráfico do expoente característico σ vs n para os parâmetros da molécula de DNA acima definida sem a perturbação na densidade de massa. Nós vemos que o modo principal neste caso é $n = 8$. A figura 4.7 mostra o efeito da variação na densidade de massa no modo principal da molécula de DNA circular para $Q = 1$ e $\zeta = 0.1$. Nós vemos que apesar de o sistema possuir um número de Reynolds bem baixo, os efeitos devido à inércia aparecem como descrito na seção anterior.

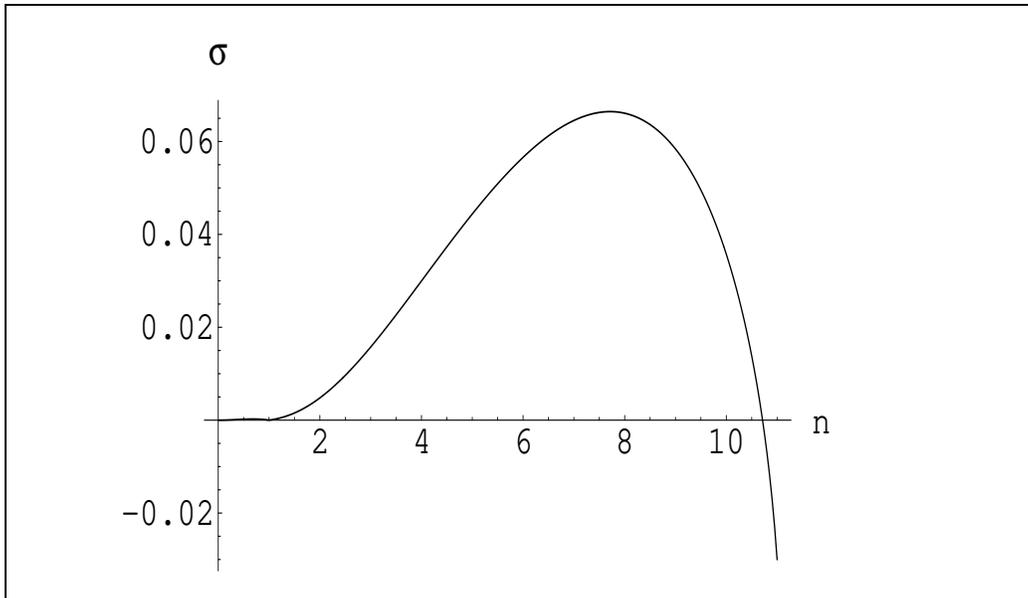


Fig. 4.6) σ vs. n para um anel de DNA com $\kappa = 0.057$, $\gamma = 16\kappa$, $\Gamma = 2/3$ e $b = 0.098$.

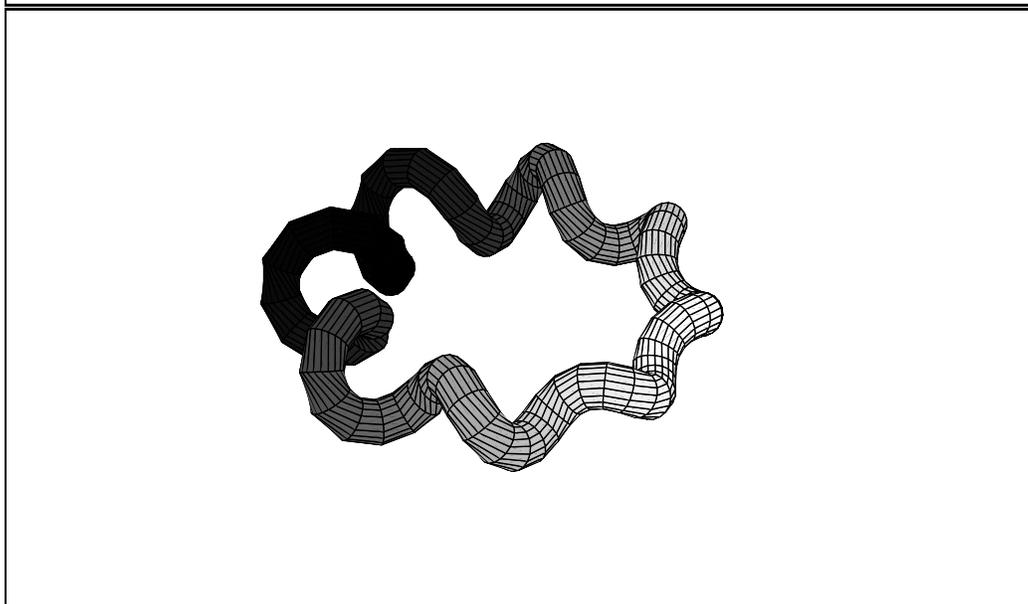


Fig. 4.7) DNA circular para $t = 70$, $Q = 1$ e $\zeta = 0.1$. $\kappa = 0.057$, $\gamma = 16\kappa$, $\Gamma = 2/3$ e $b = 0.098$.

Finalmente, nós ressaltamos que embora a teoria apresentada no artigo da referência [35] aponta as causas da instabilidade em anéis como no experimento de Han *et al.* ela não explica as formas assimétricas que aparecem no artigo da referência [26]. Nossos resultados sugerem que essas assimetrias ocorrem devido a não-uniformidades nos anéis devidos às próprias características ou devido à ligação de outras partículas a eles.

Neste capítulo, portanto, apresentamos o estudo da dinâmica perto do equilíbrio de anéis instáveis em meios viscosos. Utilizamos um método de expansão dinâmico em sua aproximação linear e mostramos que mesmo numa situação onde o número de Reynolds é extremamente baixo, torções relativamente altas fazem com que efeitos inerciais sejam relevantes na dinâmica pós-perturbação. Aplicamos a teoria ao caso de uma molécula de DNA circular de comprimento 168bps e verificamos o efeito acima descrito.

Nos próximos capítulos, estudaremos as soluções de equilíbrio das equações de Kirchhoff que correspondem a possíveis configurações da corda. Analisaremos o caso de cordas abertas onde uma de suas soluções de menor energia é a hélice. Vamos comparar esta conhecida solução com aquelas devidas a outro tipo de não-homogeneidade que é a variação dos módulos de Young e de cisalhamento ao longo da corda. No capítulo 5 mostraremos a partir da formulação hamiltoniana, demonstrada no capítulo 3, que tais cordas apresentam um comportamento caótico. No capítulo 6 desenvolvemos um método de resolução do problema de condições de contorno que é encontrar a confi-

guração de equilíbrio cujos pontos inicial e final da corda são escolhidos.

Capítulo 5

Caos espacial em filamentos

Nos capítulos anteriores apresentamos o modelo de Kirchhoff para cordas e filamentos e estudamos a dinâmica próxima ao equilíbrio de um anel instável não-homogêneo em meios viscosos. Concluímos que não-homogeneidades ao longo da corda podem levar o sistema a configurações diferentes das soluções bem conhecidas, quais sejam, o anel circular, a barra reta torcida e a hélice, conforme descritos no capítulo 3. Com o objetivo de investigar melhor esta influência vamos nos fixar no problema estacionário. Conforme estudado no capítulo 3, as equações de Kirchhoff estacionárias, ou de equilíbrio, regem as possíveis soluções de equilíbrio que a corda pode assumir. Vimos, no capítulo anterior, que a densidade de massa somente tem influência na dinâmica da corda e não aparece nas equações estacionárias. Portanto, daqui por diante, consideraremos a não-homogeneidade ao longo da corda através de duas ca-

racterísticas elásticas do material que a compõe: o módulo de Young E e o módulo de cisalhamento μ ¹.

Neste capítulo, vamos explorar o efeito destas não-homogeneidades na conformação de cordas abertas. A barra reta é a solução mais simples para uma corda aberta. Ela será solução das equações de Kirchhoff estacionárias mesmo no caso não-homogêneo. Como vimos, a hélice é a solução que minimiza o potencial efetivo da energia elástica total da corda, Eq. 3.32, e por isso vamos estudar como a não-homogeneidade ao longo da corda afeta, particularmente, este tipo de solução. Mostraremos como a formulação hamiltoniana das equações de Kirchhoff se altera para incluir a não-homogeneidade adiantando que o sistema de equações não é mais integrável, podendo apresentar comportamento caótico. Calcularemos a energia elástica total da corda em função das condições iniciais e veremos que ela possuirá, em alguns casos, além do ponto de mínimo global, pelo menos um mínimo local.

É importante comentar que a existência de soluções espaciais complexas ou caóticas para cordas elásticas foi demonstrada por Mielke e Holmes[39], e que Davies e Moon[40] calcularam alguns exemplos onde o raio da seção transversal variava periodicamente ao longo da corda demonstrando a presença do caos espacial. Neste capítulo apresentaremos a nossa contribuição em analisar algumas soluções caóticas em filamentos de DNA cuja não-homogeneidade ocorre devido a variações nos módulos de Young e de cisa-

¹Na seção 2.4 do capítulo 2, o leitor pode rever as definições para os módulos de Young e de cisalhamento.

lhamento. Este trabalho foi apresentado numa conferência nos Estados Unidos².

Este capítulo está organizado da seguinte maneira. Na seção 5.1 comentaremos as motivações deste estudo na aplicação à molécula de DNA. Na seção 5.2 rescreveremos as equações de Kirchhoff estacionárias na formulação hamiltoniana, incluindo a não-homogeneidade ao longo da corda. Na seção 5.3 faremos a análise da estabilidade calculando a energia elástica total da corda e os mapas estroboscópicos associados ao sistema. Mostraremos, por fim, algumas conformações de equilíbrio comparando-as com a solução do caso homogêneo que chamaremos, daqui por diante, de *hélice homogênea*.

5.1 Motivação: molécula do DNA

Uma das questões mais importantes e fundamentais da Biologia Estrutural é o entendimento da relação entre a chamada estrutura terciária, ou conformação tridimensional, da molécula de DNA, e sua estrutura primária ou sequência de pares de base[13]. Na década de 80, Hogan e Austin [27] demonstraram que as características elásticas da molécula de DNA dependem da sua sequência de pares de bases. Recentemente Gromiha[41] obteve uma tabela com os valores para o módulo de Young de cada um dos 32 trinucleotídeos obtidos a partir de dados experimentais de cristalografia de várias

²Poster apresentado em `Sixth SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems', de 20 a 24 de maio de 2001 em Snowbird, Utah, USA. O título é ``New Equilibrium Solutions and Chaotical Behavior of Kirchhoff Filaments''.

moléculas de DNA. Um trinucleotídeo é uma sequência formada de três pares de base. A partir dos quatro tipos de bases que formam a molécula do DNA, A-adenina, T-timina, C-citosina e G-guanina, as possíveis combinações de 4 objetos 3 a 3 dá um conjunto de 64. Como a molécula de DNA é formada por pares de bases da forma A-T ou C-G, a sequência, por exemplo, ATC é equivalente à sequência GAT, lendo a sequência no sentido inverso, e, portanto, temos, ao todo, 32 trinucleotídeos diferentes. Nós transcrevemos esses valores na tabela 5.1.

No entanto, o estudo da relação entre a sequência de pares de base e a estrutura tridimensional da molécula do DNA tem sido feito em termos de curvatura intrínseca. Sabe-se[12, 13] que por causa das interações moleculares entre os átomos de um par de base e os do par seguinte, a geometria de cada dinucleotídeo (uma sequência de 2 pares de base) depende da sequência. Isso, junto com outros fatores³, faz com que a molécula de DNA possua uma conformação de equilíbrio bem definida, quando livre de forças e torques externos como tensões e torções, por exemplo. Isso origina a conhecida razão de 10.5 pares de bases para cada volta que a dupla fita de DNA faz sobre o seu eixo que é conhecida como a sua *torção intrínseca*. É por causa disto que algumas moléculas circulares de DNA, como a que consideramos no capítulo 4, são configurações de equilíbrio independentes de forças externas que a mantenham na forma circular. Em outras palavras elas possuem *curvatura intrínseca*.

³Como a interação entre os átomos de um mesmo par de bases.

Tabela 5.1) Módulo de Young E para cada um dos 32 trinucleotídeos. Dados retirados da referência [41]

Trinucleotídeo	$E (\times 10^8 Nm^{-2})$	Trinucleotídeo	$E (\times 10^8 Nm^{-2})$
AAA/TTT	4.80	CAG/CTG	2.40
AAC/GTT	3.90	CCA/TGG	3.25
AAG/CTT	1.91	CCC/GGG	6.07
AAT/ATT	2.96	CCG/CGG	2.40
ACA/TGT	4.70	CGA/TCG	2.82
ACC/GGT	1.57	CGC/GCG	3.33
ACG/CGT	7.09	CTA/TAG	4.75
ACT/AGT	3.63	CTC/GAG	4.03
AGA/TCT	4.03	GAA/TTC	2.70
AGC/GCT	4.58	GAC/GTC	7.83
AGG/CCT	4.34	GCA/TGC	3.75
ATA/TAT	2.36	GCC/GGC	3.16
ATC/GAT	1.83	GGA/TCC	3.69
ATG/CAT	3.19	GTA/TAC	2.19
CAA/TTG	2.53	TAA/TTA	2.72
CAC/GTG	3.36	TCA/TGA	2.97

Portanto, no estudo de conformações de equilíbrio da molécula de DNA, a literatura apresenta trabalhos, como o de Manning *et al.*[42], onde uma curvatura intrínseca média, em função da posição da corda, é considerada, mas

suas propriedades mecânicas como os módulos de Young e de cisalhamento, são considerados constantes. Neste capítulo, consideraremos o contrário: cordas com curvatura intrínseca nula mas com módulos de Young e de cisalhamento dependentes da posição. Note que isto só será válido se as cordas estiverem sujeitas a forças e torques que a mantenham sob tensão pois a influência dos módulos de Young e de cisalhamento só se dá nesses casos. Uma corda livre de tensões permanecerá no seu estado relaxado que depende da curvatura intrínseca que ela tiver.

Neste capítulo, vamos ainda analisar o caso onde os módulos de Young e de cisalhamento variam periodicamente com a posição da corda. A motivação é o fato de que pedaços de DNA formados por sequências repetidas (portanto periódicas) constituem uma fração significativa dos genomas de grande parte dos organismos, incluindo o genoma humano[43, 44]. O DNA repetitivo é formado por sequências de diferentes tamanhos e composições que se repetem muitas vezes, podendo chegar a ter um comprimento total de 100 milhões de pares de base[44]. Pelo fato de estes longos pedaços de DNA parecerem não ter nenhuma função biológica, eles são comumente apelidados de `selfish` ou `junk` DNA (DNA egoísta ou imprestável).

5.2 Formulação hamiltoniana da corda não homogênea

Nesta seção vamos rever a formulação hamiltoniana das equações de Kirchhoff estacionárias incluindo, agora, a não-homogeneidade ao longo da corda. Como dissemos acima, nós consideraremos uma corda com os módulos de Young $E(s)$ e de cisalhamento $\mu(s)$ dependentes da posição da corda. Vamos reescrever as equações de Kirchhoff, Eqs. 2.39, com as derivadas com relação ao tempo anuladas:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}' &= 0, \quad (a) \\ \mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} &= 0, \quad (b) \\ \mathbf{M} &= E_{SI} I k_1 \mathbf{d}_1 + E_{SI} I k_2 \mathbf{d}_2 + 2\mu_{SI} k_3 \mathbf{d}_3, \quad (c) \end{aligned} \tag{5.1}$$

onde E_{SI} e μ_{SI} são os módulos de Young e de cisalhamento, respectivamente, em unidades do sistema internacional. Agora, além do padrão de escala definido pela Eq. 2.40, vamos considerar que:

$$E_{SI}(s) = E_0 E(s), \tag{5.2}$$

$$\mu_{SI}(s) = \mu_0 \mu(s), \tag{5.3}$$

onde E_0 e μ_0 são valores médios para os módulos de Young e de cisalhamento, respectivamente, e $E(s)$ $\mu(s)$ são grandezas adimensionais que

os representarão nas equações de Kirchhoff escalonadas. Escolhendo $E_0 = 4.62 \times 10^8 Nm^{-2}$, que é o valor médio entre os valores mínimo e máximo da tabela 5.1, o módulo de Young periódico em unidades escalonadas que cobre toda a faixa de valores possíveis pode ser escrito como:

$$E(s) = 1 + \alpha \cos \frac{9.52}{Per}s, \quad (5.4)$$

onde α é um parâmetro de perturbação que tem como limite máximo o valor de $\alpha_{MAX} = 0.66$ e Per é o período da perturbação, ou período de oscilação da sequência que se repete, em unidades de pares de bases. Aplicando-se essas equações junto com o padrão de escala, definido pela Eq. 2.40, às Eqs. 5.1 nós obtemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}' &= 0, \quad (a) \\ \mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} &= 0, \quad (b) \\ \mathbf{M} &= E(s)k_1\mathbf{d}_1 + E(s)k_2\mathbf{d}_2 + \Gamma_0\mu(s)k_3\mathbf{d}_3, \quad (c) \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde $\Gamma_0 = 2\mu_0/E_0$ é o parâmetro elástico médio do material que compõe a corda. Usaremos o valor $\Gamma_0 = 2/3$ para a molécula do DNA[27]. Como não existem dados experimentais para $\mu(s)$ vamos supor que $\mu(s) = E(s)$ de modo que o parâmetro elástico total $\Gamma = \Gamma_0\mu(s)/E(s)$ seja constante e igual a $2/3$. A partir da equação anterior podemos calcular a energia elástica por

unidade de comprimento dada pela Eq. 3.27:

$$H = \frac{1}{2}\mathbf{M} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{F} \cdot \mathbf{d}_3, \quad (5.6)$$

o que dá:

$$H = H(s) = \frac{P_\theta^2}{2E(s)} + \frac{P_\phi^2}{2\Gamma_0\mu(s)} + \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2}{2E(s) \sin^2 \theta} + F \cos \theta, \quad (5.7)$$

onde

$$P_\theta = E(s)\theta', \quad (5.8)$$

$$P_\phi = \Gamma_0\mu(s)(\phi' + \psi' \cos \theta), \quad (5.9)$$

$$P_\psi = P_\phi \cos \theta + E(s)\psi' \sin^2 \theta. \quad (5.10)$$

Note que o hamiltoniano não é mais uma constante de movimento. Porém, P_ϕ e P_ψ ainda são constantes. Da mesma forma como explicado no capítulo 3 podemos resolver as equações de movimento relativas ao hamiltoniano da Eq. 5.7 a partir da seguinte sequência: primeiro fixamos os valores para P_ϕ e P_ψ e escolhemos as condições iniciais para θ_0 e P_{θ_0} . Em seguida resolvemos as equações $P_\theta' = -\frac{\partial H}{\partial \theta'}$ e $\theta' = \frac{\partial H}{\partial P_\theta}$ para obtermos as soluções $(\theta(s), P_\theta(s))$. Depois usamos a Eq. 5.10 para obtermos $\psi(s)$. As soluções para $\theta(s)$ e $\psi(s)$ são suficientes para se construir a corda conforme a Eq. 3.15. Na próxima seção vamos calcular a energia elástica total e o mapa estroboscópico do sistema para alguns exemplos de moléculas de DNA.

5.3 Energia elástica total e caos espacial

Nesta seção vamos estudar algumas cordas não-homogêneas com o módulo de Young variando segundo a Eq. 5.4. Vamos considerar, diretamente, cordas com os parâmetros da molécula de DNA, conforme apresentado na seção 4.3. Analisaremos dois casos onde a força resultante vale $F = 20pN$ e $F = -10pN$. O primeiro caso significa uma força de compressão que corresponde ao máximo valor que nós encontramos na literatura com respeito à pressão sobre a molécula de DNA[46]. O segundo corresponde à máxima força de tensão que a molécula do DNA pode suportar e comportar-se como uma corda elástica inextensível[47, 48].

A escolha das constantes P_ϕ e P_ψ é feita da seguinte forma. Como P_ϕ está relacionado com o torque em relação ao versor \mathbf{d}_3 que é o versor tangente à corda, P_ϕ está relacionado com a torção da corda. No capítulo 3 comentamos que a torção total da molécula de DNA sofre uma variação de 5% do seu valor intrínseco devido a flutuações térmicas do meio[38]. Isso corresponde a termos $P_\phi = 0.043$, já em unidades escalonadas. Adotaremos este valor daqui por diante. Não temos nenhuma referência a respeito de P_ψ e, por isso, adotaremos valores equivalentes ao de P_ϕ . Escolheremos, então, $P_\psi = 0.043$ para o caso onde $F = 20pN$ e $P_\psi = 2P_\phi = 0.086$ para $F = -10pN$. No que se segue, vamos calcular a energia elástica total E_T da corda por unidade de comprimento(em bps^{-1}). Para isso, após obtermos a solução para

$(\theta(s), P_\theta(s))$, nós integramos o hamiltoniano $H(s)$ por todo o comprimento L da corda através da Eq. 3.34:

$$E_T = \frac{\int_0^L H(s') ds'}{L}. \quad (5.11)$$

Desde que a energia de vibração na curvatura ou ‘bending’ da molécula de DNA devido a flutuações térmicas é estimado ser $0.5k_B T$ por unidade de par de base (k_B é a constante de Boltzmann, e T a temperatura do sistema)[49], nós calculamos a energia elástica total da corda, por unidade de par de bases, em unidades de $0.5k_B T$ para $T = 300K$. Assim, se um ponto de mínimo local tiver uma profundidade maior que 1 nesta escala, a solução de equilíbrio correspondente será estável com relação a flutuações.

O estudo de configurações de equilíbrio de moléculas de DNA utilizando-se um modelo elástico contínuo é considerado como uma primeira aproximação no entendimento de como a molécula se curva e torce no espaço tridimensional[13]. Portanto, as soluções apresentadas no capítulo 3 constituem soluções gerais, definindo comportamentos gerais que a molécula de DNA pode estar obedecendo. No entanto, após a constatação de que a estrutura tridimensional do DNA também depende da sua sequência de pares de bases cresceu o interesse no estudo destes efeitos. Neste trabalho de tese, estamos contribuindo para demonstrar que um modelo elástico para cordas pode incorporar algumas propriedades que variam com a sequência e que, nesse nível, podemos obter um pouco mais de informações sobre o compor-

tamento elástico da molécula do DNA. Geralmente, conforme veremos no capítulo seguinte, a molécula de DNA, em experimentos ou *in vivo*, possui pedaços relativamente curtos sujeitos às condições de contorno. Entretanto, a forma de análise que estamos realizando neste capítulo envolve a obtenção de soluções de equilíbrio a partir de condições iniciais para as equações de Kirchhoff estacionárias e portanto seriam válidas no limite de comprimentos muito longos. Por isso a nossa análise sobre o comportamento caótico e demais efeitos da não-homogeneidade no módulo de Young será feita levando-se em consideração que desejamos obter comportamentos gerais que não dependam do comprimento total da corda. Por isso, nos gráficos da energia elástica total nós mostramos o resultado para diferentes comprimentos e nos fixaremos nos resultados que independam do comprimento total da corda.

De modo a podermos comparar o resultado com o caso homogêneo, mostramos na figura 5.1 a solução da corda homogênea, a hélice homogênea, para uma molécula de DNA cujos parâmetros são: $E_0 = 4.62 \times 10^8 Nm^{-2}$, $\Gamma_0 = 2/3$, $F = 20pN$, $P_\psi = P_\phi = 0.043$ e $L = 1515bps$. O valor de θ_0 que minimiza o potencial efetivo da Eq. 3.32, é $\theta_0 \simeq 2.25$. Adiantamos que os resultados para a corda não-homogênea são mais intensos se o período da perturbação no módulo de Young for ressonante com um período natural do caso homogêneo que é o comprimento de uma volta na hélice da figura 5.1. Este comprimento, que chamaremos de τ , é dado por $\tau = 2\pi/\omega_\psi$, onde ω_ψ é obtida usando a Eq. 3.37. O resultado para os parâmetros acima é $\tau = 81bps$.

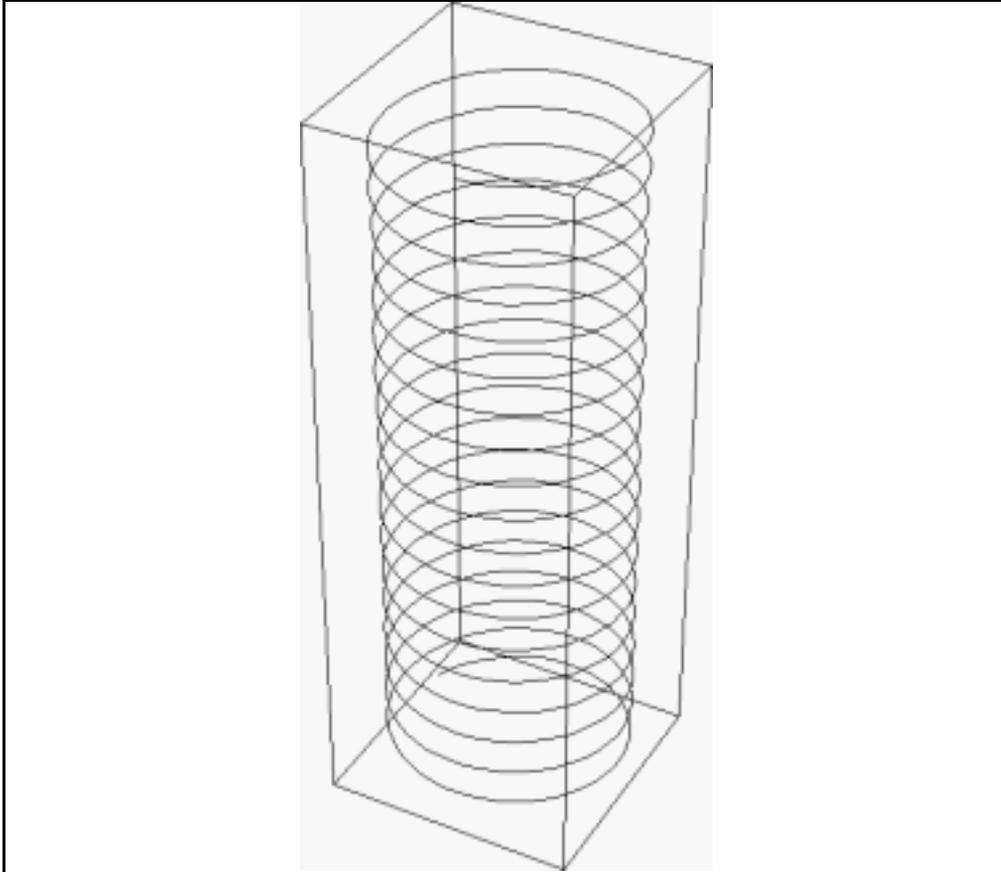
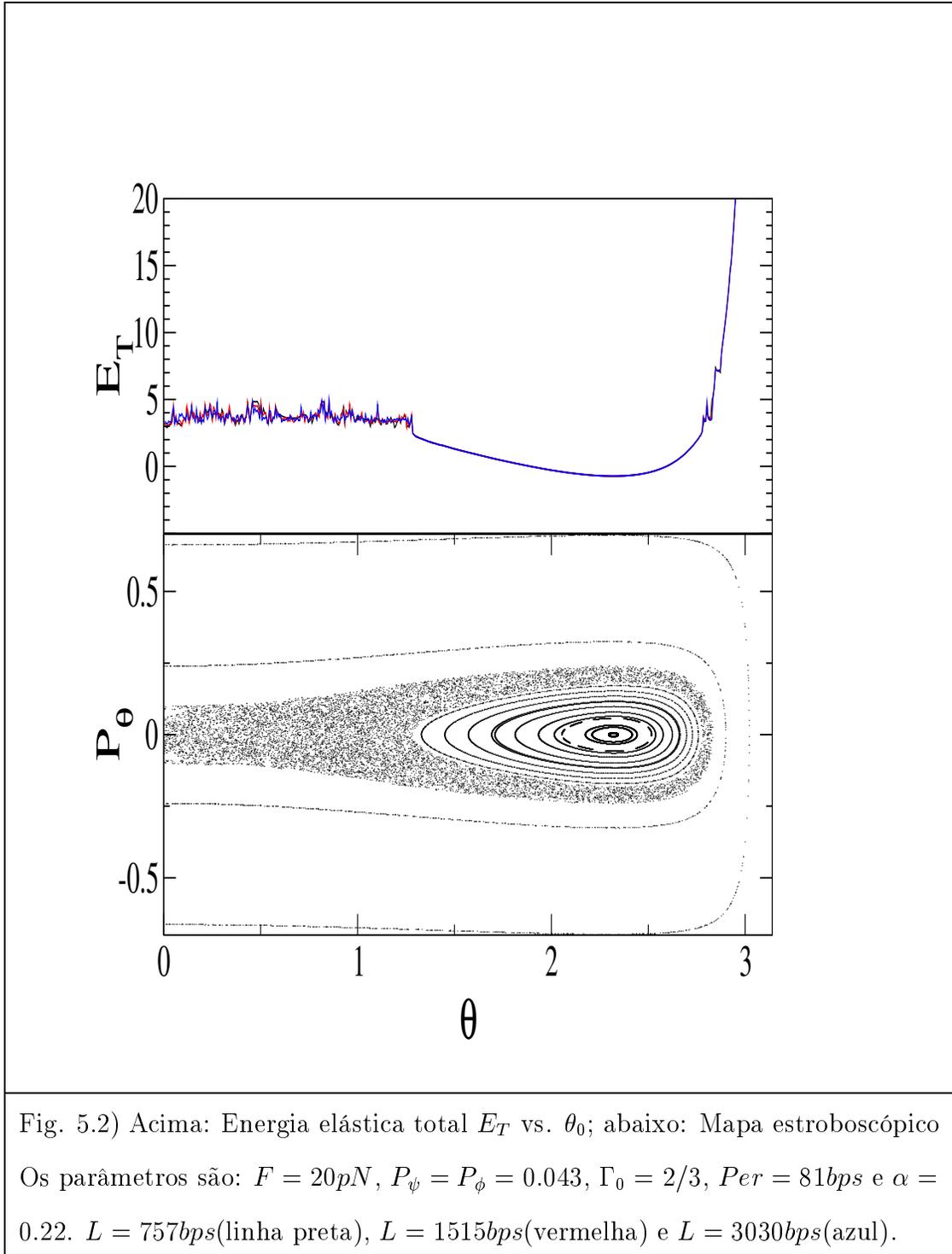
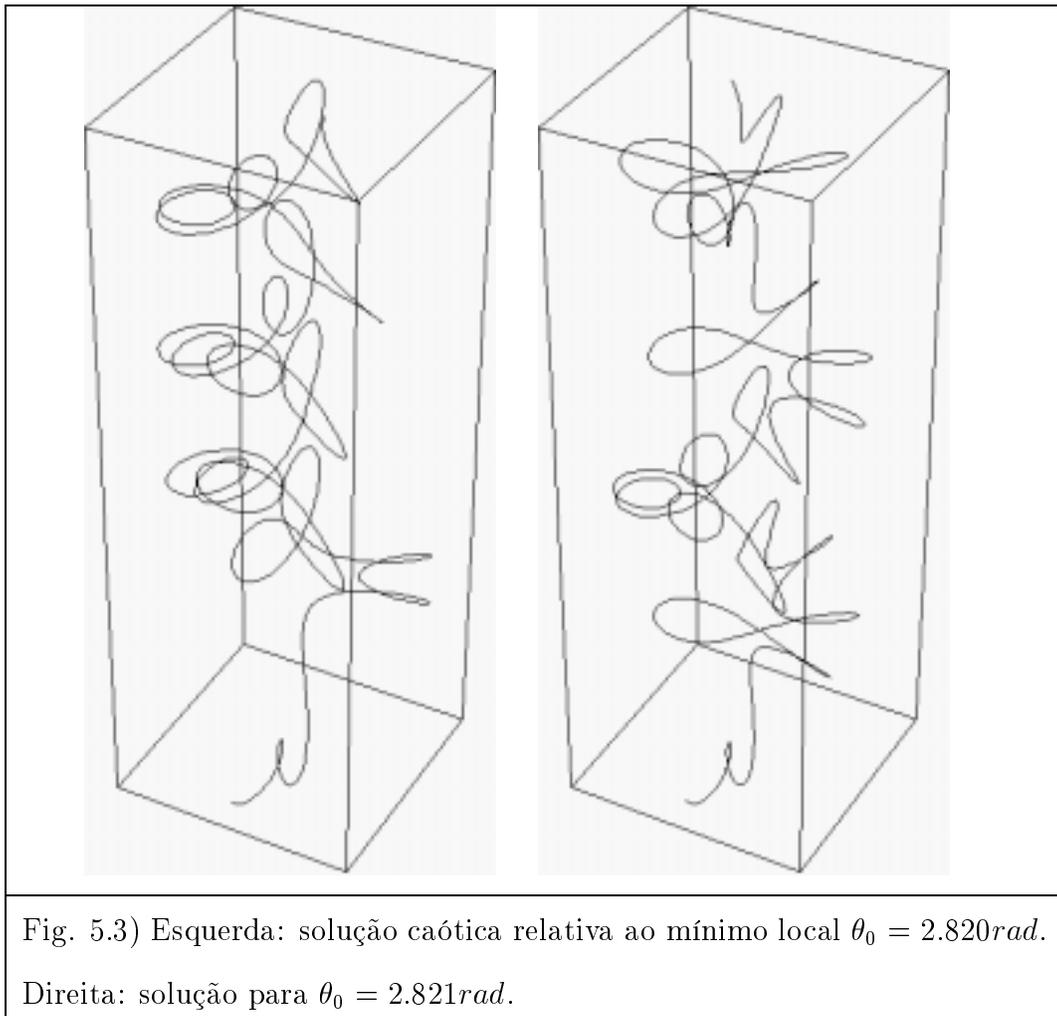


Fig. 5.1) Hélice homogênea para o DNA com $F = 20pN$, $L = 1515bps$, $P_\psi = P_\phi = 0.043$, $\Gamma_0 = 2/3$ e $\tau = 81bps$. Ver texto para a explicação sobre τ .

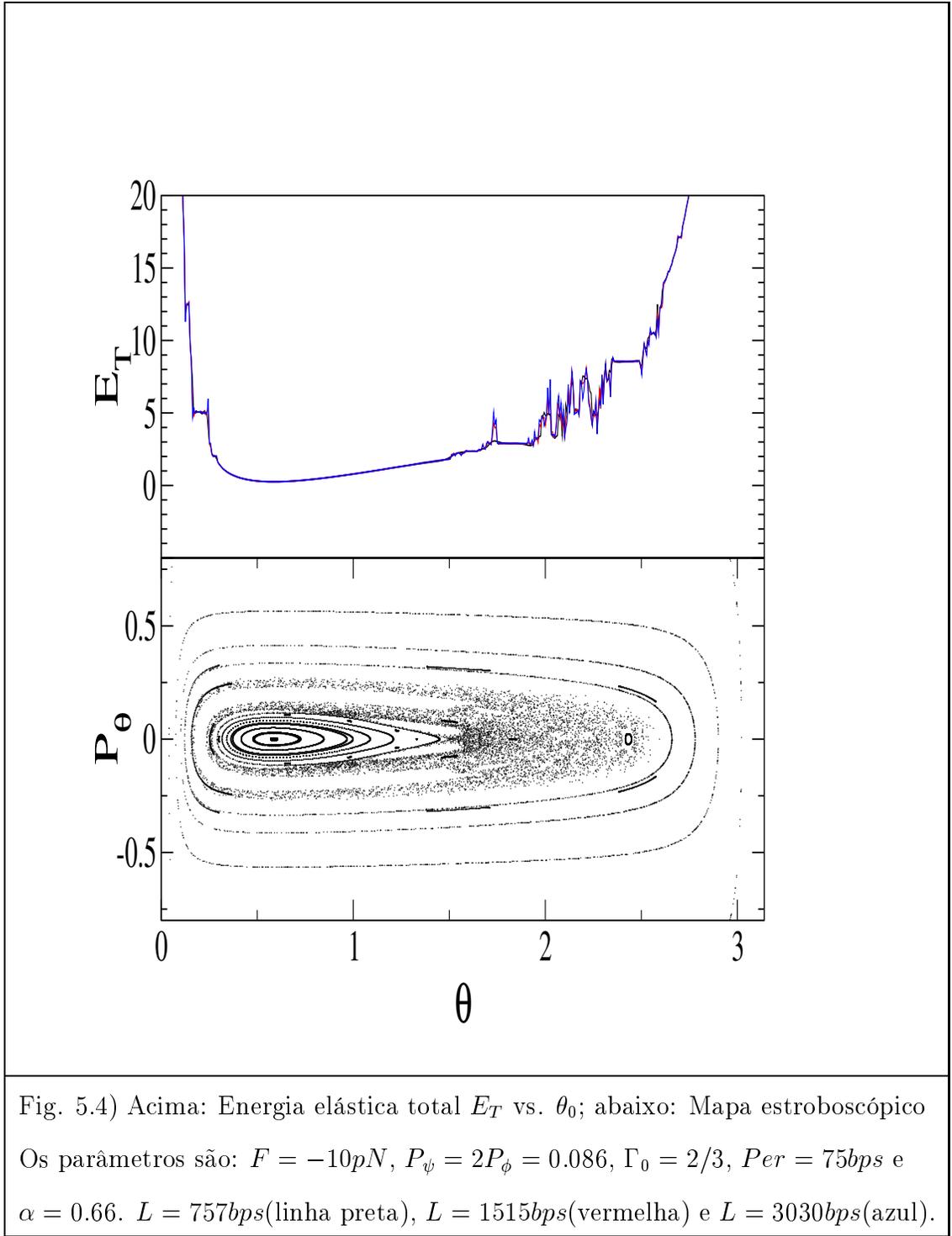
Na figura 5.2 mostramos dois gráficos. Acima apresentamos a energia elástica total da corda em função das condições iniciais utilizadas para integrar as equações de Hamilton. Em todos os cálculos fixamos $P_{\theta_0} = 0$, de forma que a energia é mostrada apenas em função de θ_0 . São mostrados resultados para três cordas de comprimentos $L = 757bps$ (linha preta),

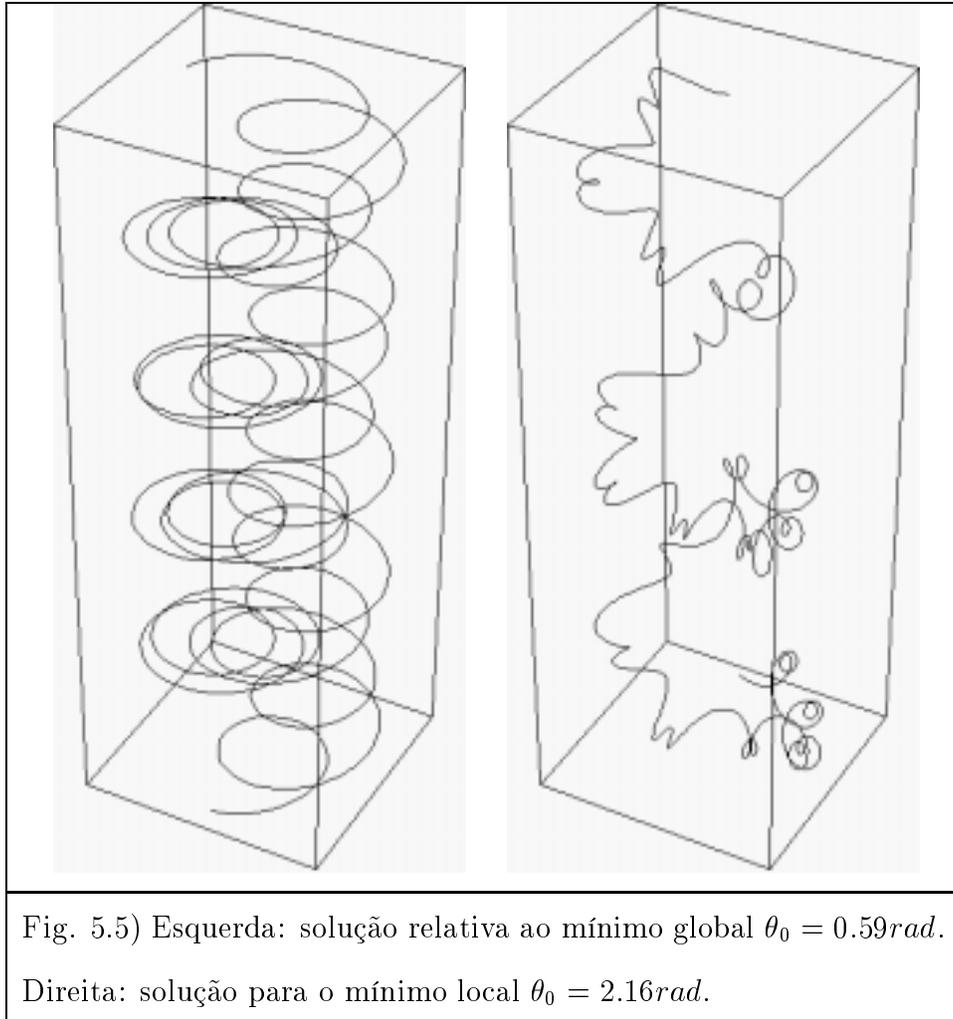
$L = 1515bps$ (vermelha) e $L = 3030bps$ (azul). Abaixo mostramos um mapa estroboscópico onde plotamos um ponto $(\theta(s), P_\theta(s))$ a cada variação na posição da corda de $\Delta s = Per$ que é um período da perturbação no módulo de Young. Os parâmetros da corda são $F = 20pN$, $P_\psi = P_\phi = 0.043$, $Per = \tau = 81bps$ e $\alpha = 0.22$. No gráfico da energia elástica total, vemos três regiões distintas: $R_1 : 0 < \theta_0 < 1.3rad$, $R_2 : 1.3 < \theta_0 < 2.7rad$ e $R_3 : 2.7 < \theta_0 < \pi rad$. A região R_1 é formada por oscilações de máximos e mínimos que não se repetem quando o comprimento é alterado. As regiões R_2 e R_3 mostram um comportamento contrário. Para os comprimentos considerados a energia elástica total por unidade de par de base não diferiu sugerindo que os mínimos global e local presentes nestas regiões representam comportamentos gerais da corda não-homogênea. Observando o mapa estroboscópico, notamos que as regiões R_1 e R_3 estão associadas às soluções estacionárias que apresentam comportamento caótico. Na região R_3 observamos a presença de um mínimo local, em $\theta_0 \simeq 2.82rad$, que não se altera por causa do comprimento. Apenas a profundidade deste mínimo local se altera mas a sua posição permanece a mesma. A figura 5.3 mostra a configuração de equilíbrio para este mínimo local e mostra, também, que esta solução é caótica no sentido de que uma pequena mudança na condição inicial leva a grandes diferenças na estrutura tridimensional da corda. A região R_2 está relacionada com a região periódica do mapa. A configuração relativa ao mínimo global presente nesta região não será mostrada porque ela é uma hélice praticamente idêntica a da figura 5.1.





Na figura 5.4 mostramos os mesmos dois gráficos para uma corda com os seguintes parâmetros: $F = -10pN$, $P_\psi = 2P_\phi = 0.086$, $Per = 75bps$ ($\tau = 75bps$ neste caso) e $\alpha = 0.66$. No gráfico da energia elástica total vemos, também, regiões associadas ao comportamento caótico e periódico do mapa estroboscópico. Notamos que as regiões periódicas sempre se relacionam com





soluções que não dependem do comprimento. Observamos, também que em algumas partes da região caótica vemos que as soluções também não dependem do comprimento. Na figura 5.5 mostramos a solução correspondente ao mínimo global $\theta_0 = 0.59rad$ (esquerda) e ao mínimo local $\theta_0 = 2.16rad$ (direita). Vemos que a solução que minimiza a energia elástica total não é mais uma hélice apesar de ter um comportamento periódico.

Concluimos, portanto, dois efeitos gerais devido à não-homogeneidade nos módulos de Young e de cisalhamento em cordas sujeitas a tensões. O primeiro deles é a presença de comportamento caótico nas soluções de equilíbrio. Podemos perceber que as soluções caóticas tendem a ser mais compactadas do que a solução periódica. Portanto, dependendo da energia elástica total que a corda tiver, ela pode, naturalmente, se enrolar e compactar apenas como um efeito da não-homogeneidade. O segundo efeito é que, em alguns casos, a solução que minimiza a energia elástica total corresponde a uma figura semelhante a uma hélice distorcida. Este efeito é interessante pois hélices perfeitas não existem na natureza. Mostramos, com isso, que uma razão natural para essas deformações é a não-homogeneidade ao longo da molécula. No capítulo seguinte, apresentaremos um método para obtenção da solução do problema de condições de contorno onde os pontos inicial e final da corda são escolhidos e mantidos fixos. Compararemos as soluções de cordas com os mesmos pontos inicial e final para diferentes parâmetros como a força F e o momento P_ψ . Compararemos, também, as soluções da corda homogênea com cordas não-homogêneas com os mesmos pontos final e inicial.

Capítulo 6

Método de resolução do problema de condições de contorno

Nos capítulos 3 e 5, vimos como obter soluções de equilíbrio para as equações de Kirchhoff estacionárias. Vimos que uma simples análise de estabilidade fornece várias informações sobre o comportamento elástico de cordas homogêneas e não-homogêneas. Neste capítulo apresentaremos um método desenvolvido para obter as soluções de equilíbrio das equações de Kirchhoff, para cordas homogêneas ou não, cujas posições das extremidades, pontos inicial e final, são escolhidas. Desde que as soluções das equações diferenciais dependem de condições iniciais, basicamente, o método fornece os valores destas tais que a correspondente configuração de equilíbrio possui as extremidades localizadas nas posições escolhidas. Na seção 6.1 comentamos as

motivações deste estudo. Na seção 6.2 nós explicamos o método e apresentamos alguns exemplos. Na seção 6.3 discutimos a existência de soluções e sua influência na resolução do problema geral de condições de contorno. Na seção 6.4 nós tomamos um dos exemplos apresentados na seção 6.2 e variamos outros parâmetros como a força resultante F e o momento P_ψ de modo a compararmos as diferentes configurações de equilíbrio, com os mesmos pontos inicial e final. Calculamos, também, a energia elástica total verificando qual delas possui a menor energia. Na seção 6.5, faremos a comparação entre cordas homogêneas e não-homogêneas, também, com os mesmos pontos final e inicial.

6.1 Motivações

Conforme comentado na Introdução, o estudo da conformação de filamentos e cordas possui aplicações em vários ramos da ciência. Estudamos o chamado modelo de Kirchhoff para filamentos que se aplica a cordas finas sujeitas a curvaturas relativamente pequenas, quando comparado com o raio médio da seção transversal. Além das soluções mais simples apresentadas no capítulo 3, as equações de Kirchhoff foram resolvidas para vários outros casos não tão triviais como as soluções analíticas obtidas por Nizette e Goriely[30] para cordas fechadas e abertas. É interessante comentar o trabalho de Tobias *et al.*[16] onde os autores desenvolveram critérios necessários e suficientes

para a estabilidade de configurações de equilíbrio de cordas fechadas e abertas sujeitas a condições de contorno, chamada por eles, *fortes* nas extremidades. Essas condições são a fixação dos pontos final e inicial da corda e do versor tangente à corda nestes pontos. No entanto, estes autores aplicaram esses critérios no estudo de cordas fechadas e não há, ainda, um método geral onde uma dada solução é obtida com as posições inicial e final escolhidas.

Apesar dos resultados já obtidos e encontrados na literatura, o estudo de problemas sujeitos às condições de contorno (que vamos abreviar aqui como PCC e usar daqui por diante)¹ é um desafio para os pesquisadores de todas as áreas e vem sendo resolvidos para alguns casos específicos. Gottlieb e Perkins[50] investigaram conformações complexas em um PCC governando o equilíbrio de cabos finos sujeitos a forças de tensão, torção e à força da gravidade. Tobias *et al.*[17], em outro artigo, estudaram a estrutura de moléculas de DNA, num caso específico onde o filamento tinha os pontos inicial e final em posições simétricas, e a dependência com a direção tangente à corda nestes pontos.

Neste capítulo, como já mencionado, vamos apresentar um método para obtenção de soluções de equilíbrio com as posições inicial e final escolhidas. Desejamos ressaltar que é a primeira vez que o PCC para filamentos é resolvido de forma mais geral. Discutiremos os limites de resolução deste PCC e estudaremos como algumas variações em alguns parâmetros da corda influ-

¹Em inglês isto é conhecido pela expressão 'Boundary Value Problem' ou pela sigla BVP.

encia o resultado. Finalmente vamos aplicar o método na comparação entre cordas homogêneas e não-homogêneas.

Por fim, desejamos comentar, rapidamente, exemplos onde o estudo de PCC se aplica ao caso da molécula de DNA. Sabe-se [12] que a molécula de DNA possui um comprimento relativamente muito longo, da ordem de grandeza de 1 metro no ser humano. Isso significa que a molécula de DNA é extremamente enrolada e compactada de modo a caber num núcleo com tamanho da ordem de grandeza de $1\mu m = 10^{-6}m$. Sabe-se que algumas estruturas formadas por várias proteínas, como a chamada histona, ajudam neste processo de empacotamento da molécula de DNA. Partes da molécula de DNA se enrolam em torno destas estruturas sobrando pedaços lineares entre elas. Estas partes, digamos, centrais ficam suspensas com suas extremidades fixas pelas histonas. O posicionamento das histonas pode inserir tensões e torções sobre este pedaço solto e as conformações de equilíbrio se caracterizam por ser um PCC. Num outro tipo de interação com proteínas, existe um processo onde uma dada proteína inibe a ativação² de algum gene impondo sobre o correspondente pedaço da molécula de DNA, curvaturas e torções. Um exemplo é a atuação do chamado *lac repressor* onde o gene a ser ativado ou desativado regula a produção de uma enzima que digere a lactose[51]. Portanto, estes exemplos servem de motivação para estudar o caso geral de PCC onde filamentos com os parâmetros da molécula de DNA

²Por ativação de um gene queremos dizer que o processo pelo qual ele é codificado na produção de uma proteína, processo conhecido como Transcrição, não está sendo inibido ou impedido.

são considerados.

6.2 Método linear de solução do PCC para filamentos

Nesta seção nós apresentaremos um método para encontrar a configuração de equilíbrio de uma corda com os pontos inicial e final escolhidos, $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ e $\mathbf{r}_f = (x_f, y_f, z_f)$, respectivamente. De fato, como as equações de Kirchhoff são invariantes ante a translações no espaço, nós sempre podemos escolher \mathbf{r}_0 como a origem do sistema de coordenadas cartesianas. O problema, portanto, se reduz a encontrarmos a solução que inicia na origem e termina num ponto desejado \mathbf{r}_f . Este método é baseado numa série de pequenas deformações feitas sobre uma dada solução inicial das equações de Kirchhoff que não possui a posição final no ponto desejado. Vamos chamar esta solução de *solução tentativa*(ST). A idéia principal do método é usar a dinâmica linearizada para levar o ponto final da solução ST até o a posição desejada, passo por passo. A figura 6.1 mostra uma solução ST e como o método caminha em direção à solução com o ponto final desejado, já levando-se em conta que a posição inicial é mantida na origem.

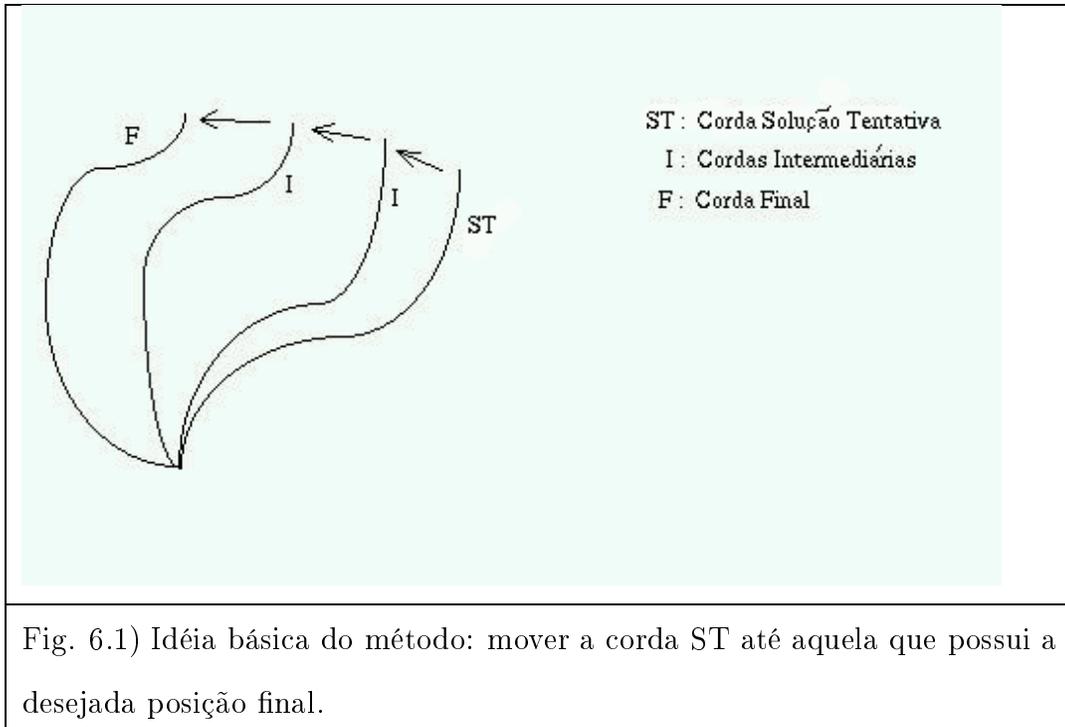


Fig. 6.1) Idéia básica do método: mover a corda ST até aquela que possui a desejada posição final.

Para obtermos o resultado, nós empregamos uma variação do chamado método da matriz de monodromia, desenvolvido por Baranger e Davis[52], para obtenção de soluções periódicas em sistemas Hamiltonians caóticos com N graus de liberdade. Xavier e de Aguiar[53] estenderam o método para obtenção de quaisquer trajetórias com posições e momentos inicial e final escolhidos ($2N$ graus de liberdade).

No caso de cordas e filamentos, o PCC apresenta uma dificuldade extra que é o fato de que as variáveis que se deseja fixar, a posição final \mathbf{r}_f , não são as variáveis que aparecem nas equações diferenciais que descrevem a corda, que são os ângulos de Euler. As variáveis que desejamos fixar são integrais

das variáveis dinâmicas, conforme a Eq. 3.15. Em componentes, a posição de cada ponto da corda é dada por:

$$x(s) = \int_0^s \sin \theta(s') \cos \psi(s') ds', \quad (6.1)$$

$$y(s) = \int_0^s \sin \theta(s') \sin \psi(s') ds', \quad (6.2)$$

$$z(s) = \int_0^s \cos \theta(s') ds'. \quad (6.3)$$

Podemos ver, diretamente, que para $s = 0$ a posição $\mathbf{r}_0 = (x(0), y(0), z(0)) = 0$.

Em ângulos de Euler, as soluções para $\theta(s)$, $P_\theta(s)$ e $\psi(s)$, para os casos homogêneo ou não-homogêneo, são obtidas a partir das Eqs. 5.7, 5.8 e 5.10, e são dadas por:

$$\theta' = \frac{P_\theta}{E(s)}, \quad (6.4)$$

$$P_\theta' = -\frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta) P_\phi}{E(s) \sin \theta} + \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2 \cos \theta}{E(s) \sin^3 \theta} + F \sin \theta \quad (6.5)$$

e

$$\psi(s) = \psi_0 + \int_0^s \frac{P_\psi - P_\phi \cos \theta(s')}{E(s') \sin^2 \theta(s')} ds'. \quad (6.6)$$

Se nós integrarmos as Eqs. 6.4-6.6 com as condições iniciais de uma dada solução ST e, em seguida, integrarmos as Eqs. 6.1-6.3, obteremos, é claro, a corda solução tentativa ST, cujo ponto final designaremos por \mathbf{r}_{ST} . Variações nestas condições iniciais produzirão variações na configuração da

corda e, conseqüentemente, na posição do seu ponto final. A seguir, nós deduziremos uma relação linear explícita entre uma pequena variação nas condições iniciais dadas por θ_0 , $P_{\theta 0}$ e ψ_0 e as componentes do ponto final da corda x_f , y_f e z_f . Isto é feito pela matriz B tal que:

$$\begin{pmatrix} \delta x_f \\ \delta y_f \\ \delta z_f \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \delta \theta_0 \\ \delta P_{\theta 0} \\ \delta \psi_0 \end{pmatrix}. \quad (6.7)$$

Uma vez obtida a matriz B podemos obter a relação inversa, se ela for inversível:

$$\begin{pmatrix} \delta \theta_0 \\ \delta P_{\theta 0} \\ \delta \psi_0 \end{pmatrix} = B^{-1} \begin{pmatrix} \delta x_f \\ \delta y_f \\ \delta z_f \end{pmatrix}. \quad (6.8)$$

Podemos, então, caminhar a partir da solução ST, cujo ponto final é \mathbf{r}_{ST} , até a solução com o ponto final desejado \mathbf{r}_f , lembrando de que, por causa da expansão linear, devemos dividir o 'caminho' numa série de pequenos passos, onde em cada um deles usamos a solução convergida anterior como solução tentativa ST, levando o ponto final da corda, suavemente, até seu destino final.

O próximo passo, agora, é escrevermos as relações entre pequenas vari-

ações nas coordenadas da posição final e os ângulos de Euler:

$$\delta x_f \equiv \delta x(L) = \int_0^L \cos \theta(s) \cos \psi(s) \delta \theta(s) ds - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) \delta \psi(s) ds, \quad (6.9)$$

$$\delta y_f \equiv \delta y(L) = \int_0^L \cos \theta(s) \sin \psi(s) \delta \theta(s) ds + \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) \delta \psi(s) ds, \quad (6.10)$$

$$\delta z_f \equiv \delta z(L) = - \int_0^L \sin \theta(s) \delta \theta(s) ds. \quad (6.11)$$

Usando a Eq. 6.6 nós podemos obter $\delta \psi(s)$ em termos de $\delta \theta(s)$:

$$\delta \psi(s) = \delta \psi_0 + \int_0^s A(\theta(s')) \delta \theta(s') ds', \quad (6.12)$$

onde $A(\theta)$ é dado por:

$$A(\theta) = \frac{P_\phi}{E(s) \sin \theta} - \frac{2(P_\psi - P_\phi \cos \theta) \cos \theta}{E(s) \sin^3 \theta}. \quad (6.13)$$

Para encontrar a relação entre as variações $\delta \theta(s)$ e $\delta P_\theta(s)$ e seus valores iniciais (para $s = 0$) nós consideraremos pequenas variações das Eqs. 6.4 e 6.5 em torno da solução ST:

$$\delta \theta' = \frac{\delta P_\theta}{E(s)}, \quad (6.14)$$

$$\delta P'_\theta = C(\theta) \delta \theta, \quad (6.15)$$

onde $C(\theta)$, que é dado por:

$$C(\theta) = -\frac{P_\phi^2}{E(s)} - \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)(P_\psi - 4P_\phi \cos \theta)}{E(s) \sin^2 \theta} - \frac{3(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2 \cos^2 \theta}{E(s) \sin^4 \theta} + F \cos \theta, \quad (6.16)$$

é calculado na solução ST.

A solução destas equações diferenciais pode ser escrita em termos matriciais na forma:

$$\begin{pmatrix} \delta\theta(s) \\ \delta P_\theta(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(s) & M_{12}(s) \\ M_{21}(s) & M_{22}(s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\theta_0 \\ \delta P_{\theta 0} \end{pmatrix}, \quad (6.17)$$

onde M é a *matriz tangente* satisfazendo a condição $M(s=0) = 1$. No caso especial onde a solução ST é periódica, M é chamada *matriz de monodromia*.

Vamos escrever $\delta\theta(s)$ explicitamente:

$$\delta\theta(s) = M_{11}(s)\delta\theta_0 + M_{12}(s)\delta P_{\theta 0}. \quad (6.18)$$

Usando as Eqs. 6.9 - 6.12 nós podemos, finalmente, escrever os elementos de

matriz B_{ij} como:

$$\begin{aligned}
B_{11} &= \int_0^L \cos \theta(s) \cos \psi(s) M_{11}(s) ds - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{11}(s') ds' ds, \\
B_{12} &= \int_0^L \cos \theta(s) \cos \psi(s) M_{12}(s) ds - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{12}(s') ds' ds, \\
B_{13} &= - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) ds = -y(L), \\
B_{21} &= \int_0^L \cos \theta(s) \sin \psi(s) M_{11}(s) ds + \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{11}(s') ds' ds, \\
B_{22} &= \int_0^L \cos \theta(s) \sin \psi(s) M_{12}(s) ds + \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{12}(s') ds' ds, \\
B_{23} &= \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) ds = x(L), \\
B_{31} &= - \int_0^L \sin \theta(s) M_{11}(s) ds, \\
B_{32} &= - \int_0^L \sin \theta(s) M_{12}(s) ds, \\
B_{33} &= 0.
\end{aligned} \tag{6.19}$$

Destes nove elementos de matriz, três são triviais: $B_{13} = -y(L)$, $B_{23} = x(L)$ e $B_{33} = 0$. As integrais que aparecem nos outros seis elementos de matriz ocorrem devido ao fato de que desejamos fixar a posição final x_f , y_f e z_f , ao invés de θ , P_θ e ψ .

Desde que nós linearizamos as equações de movimento em primeira ordem nas variações de θ , P_θ e ψ , nós temos que verificar se a nova solução, para as novas condições iniciais $\theta_1 = \theta_0 + \delta\theta_0$, $P_{\theta 1} = P_{\theta 0} + \delta P_{\theta 0}$ e $\psi_1 = \psi_0 + \delta\psi_0$, é uma corda com o ponto final na posição desejada, com um erro menor que uma dada precisão. Se a precisão não é atingida, nós podemos usar esta nova solução θ_1 , $P_{\theta 1}$ e ψ_1 como a nova ST, usando novamente a Eq. 6.8, agora com $(\delta x(L), \delta y(L), \delta z(L))$ sendo a distância entre a posição desejada e a da

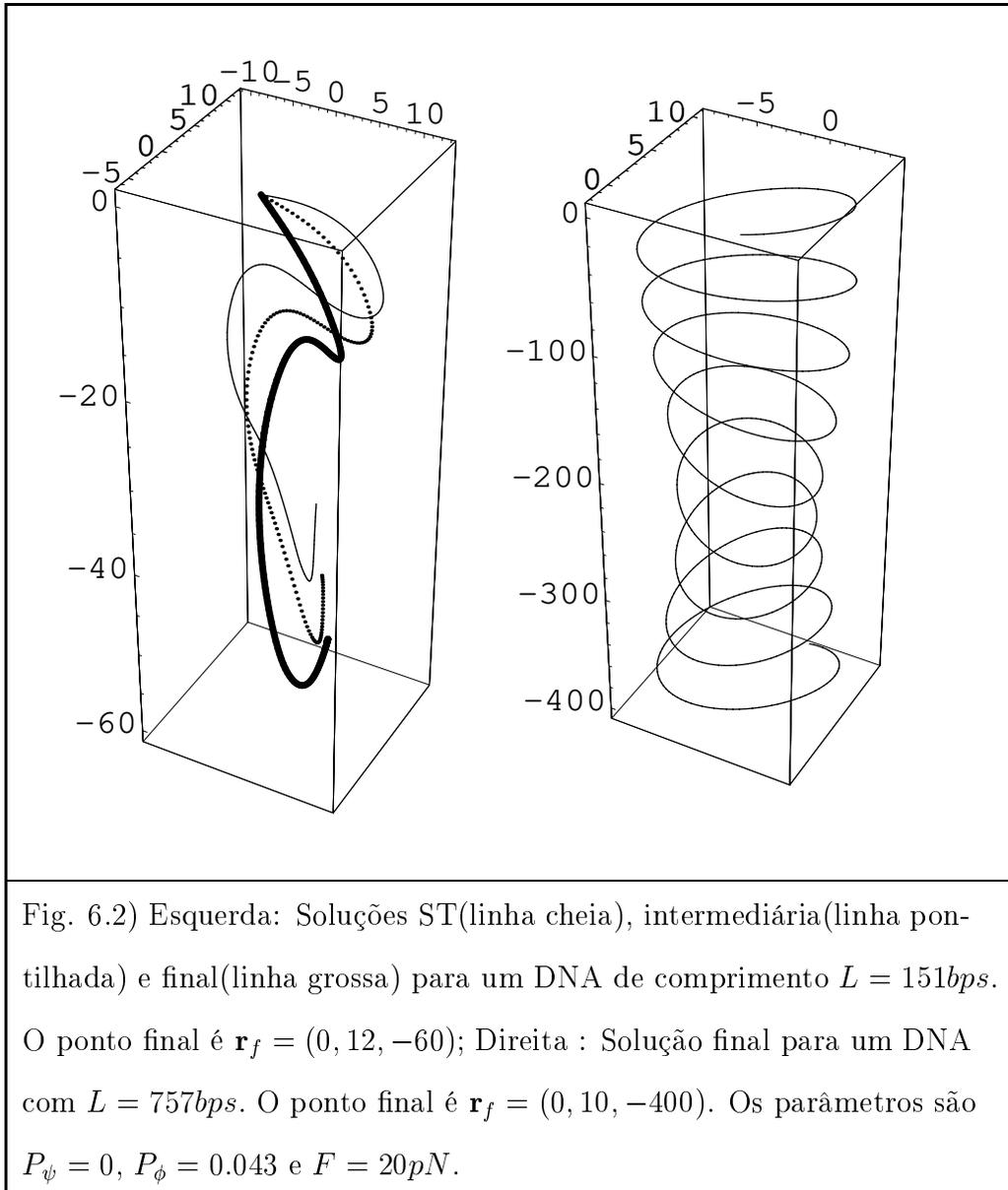
solução calculada anterior. O processo pode ser repetido até atingirmos a precisão desejada.

Finalmente, os elementos da matriz M podem ser obtidos resolvendo-se as equações lineares, Eqs. 6.14 e 6.15 para determinadas condições iniciais. Na verdade, fazendo $\delta\theta_0 = 1$ e $\delta P_{\theta_0} = 0$, a Eq. 6.17 nos dá $M_{11}(s) = \delta\theta(s)$ e $M_{21}(s) = \delta P_{\theta}(s)$. Se, por outro lado, nós fizermos $\delta\theta_0 = 0$ e $\delta P_{\theta_0} = 1$, nós obtemos $M_{12}(s) = \delta\theta(s)$ e $M_{22}(s) = \delta P_{\theta}(s)$. Portanto, $M_{11}(s)$ e $M_{21}(s)$ são soluções das equações linearizadas 6.14 e 6.15 com condições iniciais $\delta\theta_0 = 1$ e $\delta P_{\theta_0} = 0$ enquanto que $M_{12}(s)$ e $M_{22}(s)$ são soluções das equações com condições iniciais $\delta\theta_0 = 0$ e $\delta P_{\theta_0} = 1$.

No caso da hélice homogênea, solução mostrada no capítulo 3, é possível calcular-se analiticamente os elementos da matriz B e, por conseguinte, o seu determinante. Verificamos que $\det B = 0$ para a hélice homogênea. Portanto, B não pode ser invertida neste caso e hélice homogênea não pode ser usada como uma solução tentativa. Porém qualquer outra solução, diferente de $\theta_0 = \theta_{hélice}$, $P_{\theta_0} = 0$ pode ser usada como ST.

É possível que se deseje obter a solução de equilíbrio cujo ponto final $\mathbf{r}_f = (x_f, y_f, z_f)$ está numa posição relativamente distante daquela da solução tentativa $\mathbf{r}_{ST} = (x_{ST}, y_{ST}, z_{ST})$. Nós podemos, então dividir a linha que conecta \mathbf{r}_f a \mathbf{r}_{ST} em N segmentos e aplicar o método linear N vezes, movendo a corda em pequenos deslocamentos em cada vez. O número de passos necessários dependerá da solução tentativa.

A figura 6.2 mostra dois exemplos do método. Nós escolhemos parâmetros típicos da molécula de DNA, como utilizados nos capítulos anteriores.



Os parâmetros mecânicos são $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ e $F = 20pN$. Nós

mostramos os resultados para um DNA *curto*, $L = 151\text{bps}$, e outro *longo*, $L = 757\text{bps}$. A posição escolhida para os pontos finais, em unidades escalonadas, é $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$, para o DNA curto, e $\mathbf{r}_f = (0, 10, -400)$, para o DNA longo. Para o DNA curto, nós mostramos juntos a solução ST, uma solução intermediária e a final. Podemos, ver, portanto, o ‘caminho’ percorrido pelo método, a partir da ST, até encontrar a solução desejada. A solução tentativa foi escolhida integrando as equações de Kirchhoff com $\theta_0 = 1.5\text{rad}$, $P_{\theta_0} = 0$ e $\psi_0 = 0$, que corresponde a uma corda com um ponto final na posição $\mathbf{r}_{ST} = (1.23, 7.73, -38.3)$. A solução intermediária é dada por $\theta_0 = 1.7\text{rad}$, $P_{\theta_0} = -0.009$ e $\psi_0 = -0.17\text{rad}$, que corresponde a uma corda com um ponto final na posição $\mathbf{r}_i = (0.63, 9.86, -49.2)$. Para o DNA longo, apenas a solução final foi mostrada. Neste caso a solução tentativa é dada por $\theta_0 = 2.2\text{rad}$, $P_{\theta_0} = 0$ e $\psi_0 = 0$, resultando numa posição final $\mathbf{r}_{ST} = (8.09, 2.15, -347.7)$. Em todos os casos, a distância entre os pontos finais das ST e final foi dividida em $N = 20$ segmentos e as soluções convergiram para as posições desejadas com uma precisão melhor que 10^{-5} em cada componente x , y e z . As condições iniciais obtidas para as soluções convergidas são $\theta_0 = 1.888\text{rad}$, $P_{\theta_0} = 0.0069$ e $\psi_0 = -0.447\text{rad}$ para o DNA curto; $\theta_0 = 2.396\text{rad}$, $P_{\theta_0} = -0.0132$ e $\psi_0 = 0.683\text{rad}$, para o DNA longo.

6.3 Existência de soluções

As soluções tentativas usadas nos exemplos mostrados na figura 6.2 fizeram o método convergir suavemente às soluções finais desejadas. No entanto, em alguns casos, uma dada solução ST não converge na solução destino, não importando em quantos passos intermediários são divididos a diferença entre \mathbf{r}_{ST} e \mathbf{r}_f . Como nós veremos nesta seção, este problema está ligado à questão sobre a existência ou não de soluções de equilíbrio para uma escolhida posição final \mathbf{r}_f . Para um corda de comprimento L , é óbvio que não existe solução se o ponto final estiver numa posição $\mathbf{r}_f^2 > L^2$. Na verdade, veremos que as restrições são mais complicadas do que esta simples regra e que elas dependem dos valores para os parâmetros mecânicos P_ψ , P_ϕ e F . É possível, que uma solução para uma desejada posição \mathbf{r}_f exista, mas a linha reta que liga \mathbf{r}_f a \mathbf{r}_{ST} pode passar por uma região *proibida*, impedindo a convergência do método. Neste caso a solução seria tentar usar outras soluções ST até o método convergir. De qualquer modo, é interessante investigar o espaço total com as possíveis soluções de modo a termos idéia se a escolha de uma posição para o ponto final da corda existe ou não.

Como discutido anteriormente, cada combinação de θ_0 , P_{θ_0} e ψ_0 leva a uma posição do ponto final x_f , y_f e z_f . A maneira mais simples de fazermos um mapa com todas as possíveis posições finais é calculá-los variando-se as condições iniciais em todos os valores possíveis. Portanto, dados os parâmetros P_ψ , P_ϕ e F , nós calculamos $\mathbf{r}_f = \mathbf{r}_f(\theta_0, P_{\theta_0}, \psi_0)$ e mostramos o resultado no espaço x_f , y_f e z_f . Os pontos que estiverem fora do volume formado pelo conjunto de posições finais são inatingíveis pelo ponto final da corda.

Entretanto, a alteração de algum dos parâmetros mecânicos, como a força de tensão, faz com que a região de possíveis posições finais se altere em tamanho e localização, incluindo pontos que eram proibidos no primeiro caso e excluindo outros.

A figura 6.3 mostra dois desses gráficos para os parâmetros $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ e $F = 20pN$. A figura da esquerda corresponde ao DNA curto, $L = 151bps$, e a da direita, ao DNA longo, $L = 757bps$. Cada figura foi gerada variando-se as condições iniciais em intervalos de $I_\theta : 0 < \theta_0 < \pi$, $I_P : -0.1 < P_{\theta_0} < 0.1$ e $I_\psi : -\pi < \psi_0 < \pi$. Dividimos o intervalo I_θ em 100 pontos, I_P em 10 pontos e I_ψ em 10 pontos, de modo que obtivemos um gráfico com 10000 possíveis posições finais. Nós vemos que os gráficos formam estruturas sólidas com simetria cilíndrica. Isto ocorre pois a coordenada z não depende da variável ψ . Vemos que a figura composta por esse sólido não é uniforme mostrando regiões mais `finas` (onde a distância ao eixo z de cada ponto é menor) e mais `grossas` (vice-versa). Valores elevados de P_{θ_0} significam elevados valores para a energia elástica total da corda e valores maiores dos que foram considerados no intervalo I_P levam a posições finais com a coordenada z próxima de zero. Podemos ver, facilmente, os limites externos do sólido que se formou, mas não está claro se a figura é completamente densa em seu interior. Para verificarmos isso, vamos aproveitar a simetria cilíndrica do sólido e definir um *mapa parcial* onde fixamos um valor para a variável ψ_0 , em $\psi_0 = 0$, e variamos as outras duas, θ_0 e P_{θ_0} . Podemos reconstruir os mapas originais através da revolução do mapa parcial em torno

do eixo z .

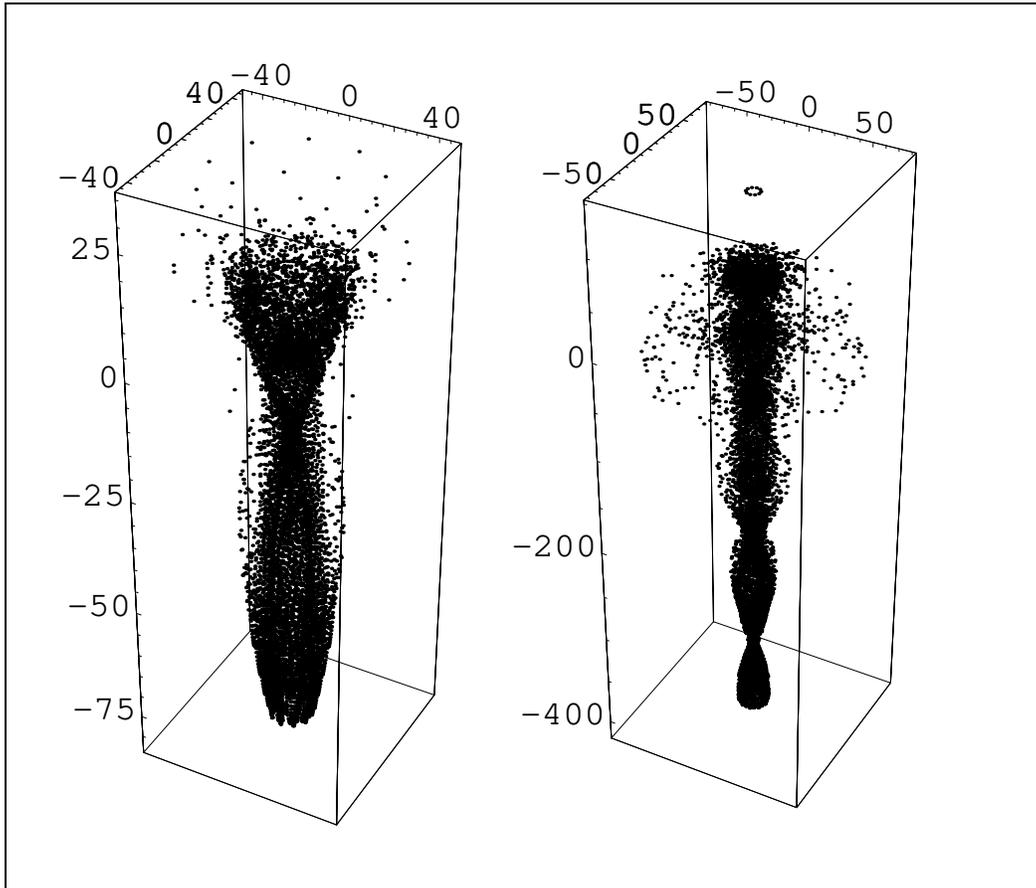


Fig. 6.3) Dois mapas mostrando a região formada pelas posições finais existentes. Os parâmetros são $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $F = 20pN$, $L = 151bps$ (esquerda) e $L = 757bps$ (direita). Ver detalhes no texto.

A figura 6.4 mostra dois mapas parciais com os mesmos parâmetros da figura 6.3. ψ_0 foi mantido constante e igual a zero enquanto que os intervalos I_θ e I_P são os mesmos da figura anterior, porém dividimo-los em muito mais pontos. Para o intervalo I_θ usamos 250 pontos e para I_P usamos 20 pontos,

de modo que o total de pontos calculados foi de 5000 pontos. As figuras da esquerda e da direita correspondem a DNA curto, $L = 151bps$, e longo, $L = 757bps$, respectivamente. Podemos ver que ambas as figuras formarão sólidos ocos se girados em torno do eixo z , mostrando que os gráficos da figura 6.2 não são completamente densos.

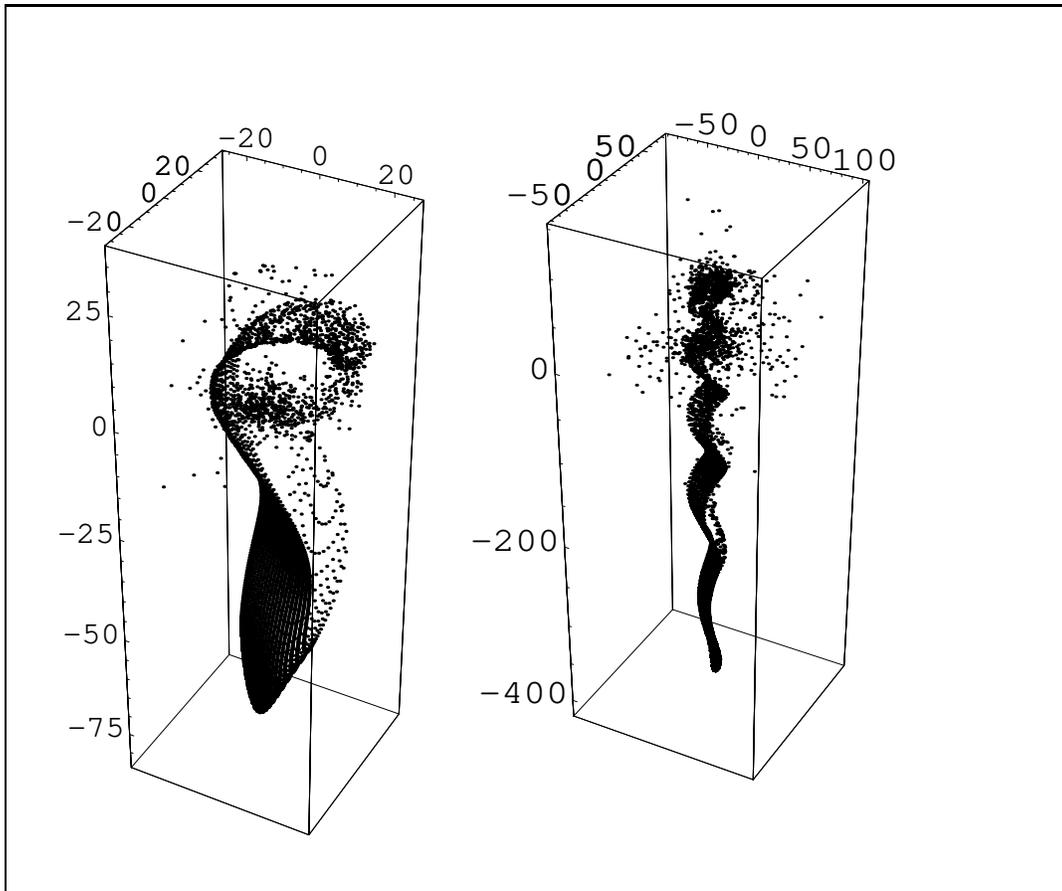


Fig. 6.4) Dois mapas parciais mostrando a região formada pelas posições finais existentes. Os parâmetros são $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $F = 20pN$, $L = 151 bps$ (esquerda) e $L = 757bps$ (direita). Ver detalhes no texto.

As figuras 6.3 e 6.4 mostraram os limites da região formada pelas possíveis posições finais da corda. Para vermos como esses limites variam com os parâmetros mecânicos, vamos calcular vários mapas para diferentes valores da força de tensão F . A figura 6.5 mostra vários mapas para os parâmetros $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ e DNA curto, $L = 151bps$. De cima para baixo e da esquerda para a direita as forças de tensão são: $F = 15pN$ (superior esquerda), $F = 7pN$ (superior direita), $F = -5pN$ (inferior esquerda) e $F = -10pN$ (inferior direita). Os intervalos e o número de pontos em cada um são os mesmos usados na figura 6.3. Cada um dos mapas mostra o mesmo comportamento geral discutido anteriormente para os mapas da figura 6.3. No entanto, vemos uma grande variação com a força de tensão, da região formada pelas possíveis posições finais de uma corda de comprimento $L = 151bps$. Inspeccionando e comparando estes mapas podemos fazer uma idéia de que forças de tensão usar para se obter uma corda em uma determinada posição final. Por exemplo, se nós desejarmos encontrar uma solução onde a posição final da corda possui um alto valor negativo da coordenada z , como a solução escolhida e mostrada na figura 6.2, nós devemos considerar cordas sujeitas a forças de compressão³ e se desejarmos, também, que as coordenadas x e y possuam valores maiores que zero nós devemos escolher forças próximas a $F \simeq 15pN$ ao invés de $F \simeq 7pN$.

³Lembramos que o sinal positivo na força de tensão significa compressão sobre a corda e o sinal negativo significa tensão.

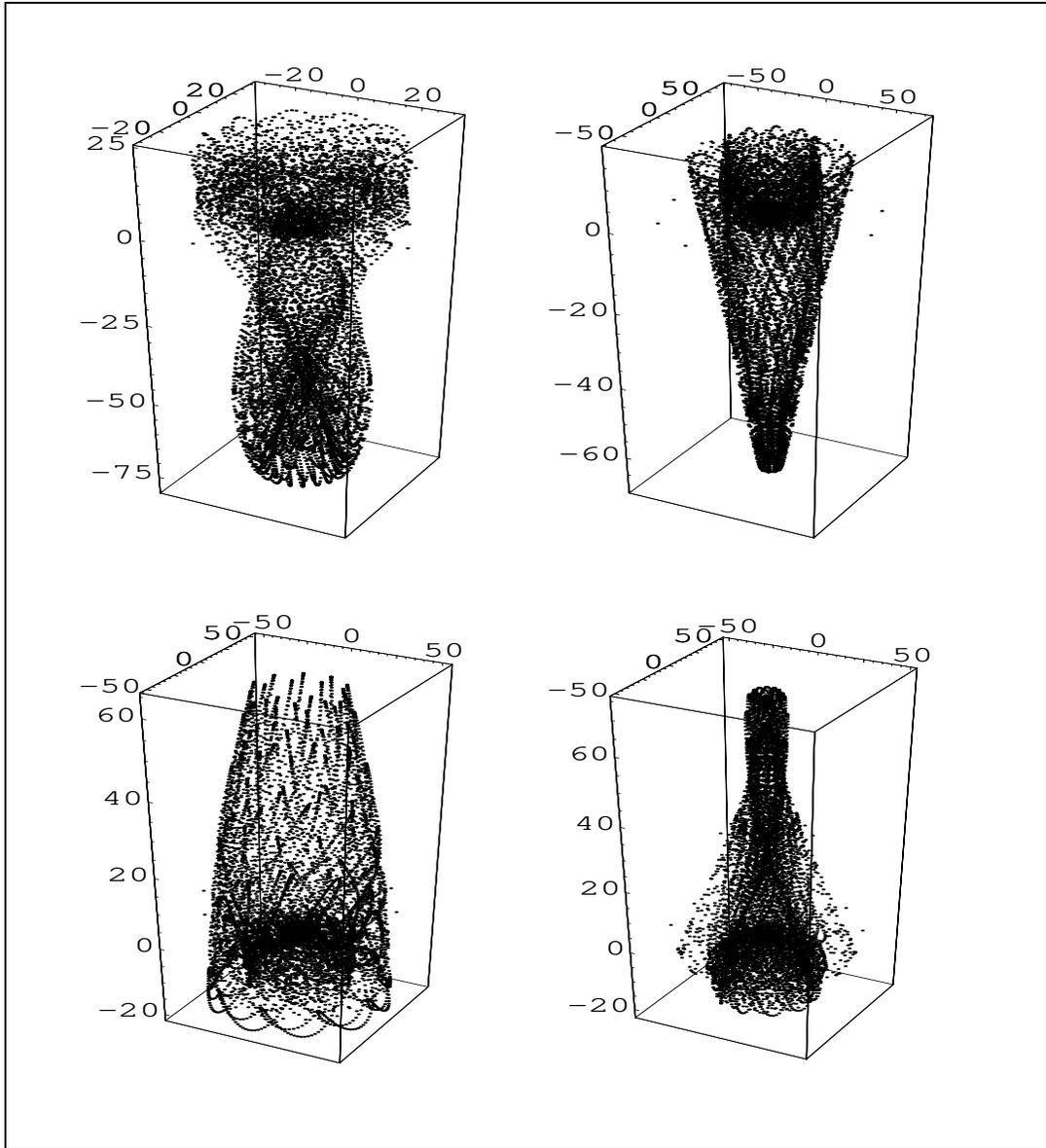


Fig. 6.5) Vários mapas mostrando a região formada pelas posições finais existentes. Os parâmetros são $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $L = 151bps$. De cima para baixo e da esquerda para a direita: $F = 15pN$, $F = 7pN$, $F = -5pN$ e $F = -10pN$. Ver detalhes no texto.

6.4 Variação com os parâmetros mecânicos

Na seção 6.2 apresentamos um método geral para a obtenção de soluções de equilíbrio das equações de Kirchhoff com a posição final, ou posição do ponto final da corda, escolhida. Vimos, também, os limites impostos pela existência das soluções para determinados parâmetros mecânicos. Nesta seção, vamos mostrar outra aplicação do método que é a comparação entre cordas com a mesma posição final, mas sujeitas a diferentes parâmetros mecânicos.

A figura 6.6 mostra três configurações de DNA curtos, $L = 151bps$, e a energia elástica total da corda E_T , em unidades escalonadas, como função da força de tensão F , para cordas com a mesma posição para o ponto final $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$. $F = 21.5pN$ (linha cheia), corresponde ao mínimo de energia, enquanto que $F = 23pN$ (linha pontilhada) e $F = 15pN$ (linha grossa) correspondem aos extremos mostrados no gráfico da energia. Os momentos P_ψ e P_ϕ são os mesmos da figura 6.2. Usamos a solução para $F = 20pN$, mostrada na figura 6.2, como solução ST para obtermos a solução para $F = 19pN$ e $F = 21.5pN$. Usamos estas como ST para as soluções para $F = 18pN$ e $F = 23pN$, e assim por diante, até que não mais pudéssemos fazer o método convergir. Nós podemos comparar a forma das soluções relativas aos extremos $F = 15pN$ e $F = 23pN$, que correspondem aos máximos valores da

energia elástica total com aquela relacionada ao mínimo de energia. Podemos concluir que a solução para $F = 21.5pN$ é a mais estável quando a corda está sujeita a condições de contorno dados pela posição final acima escolhida.

A figura 6.7 mostra três configurações de DNA curtos, $L = 151bps$, com a mesma posição final $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$ e a energia elástica total E_T , em unidades escalonadas, em função do momento P_ψ . Os outros parâmetros estão fixos em $F = 21pN$ e $P_\phi = 0.043$. Os três DNAs correspondem a $P_\psi = 0$ (linha cheia), $P_\psi = -0.015$ (linha pontilhada) e $P_\psi = 0.03$ (linha grossa). A corda mostrada pela linha cheia corresponde à solução de menor energia como função da força de tensão, vista no caso anterior, figura 6.6. Agora, vamos ver como esta solução varia com o momento P_ψ . Nós seguimos a mesma regra de usar uma solução convergida como ST para o cálculo da próxima. Lembramos que P_ψ é a componente na direção z do torque resultante sobre cada seção transversal da corda. A energia elástica total não possui um mínimo local bem definido como na figura anterior, porém, desde que não existem soluções para P_ψ menores que -0.015 ou maiores que 0.03 , para os parâmetros fixos acima e para a posição final escolhida, a solução de menor energia é aquela onde $P_\psi = -0.015$ que será, portanto, a mais estável.

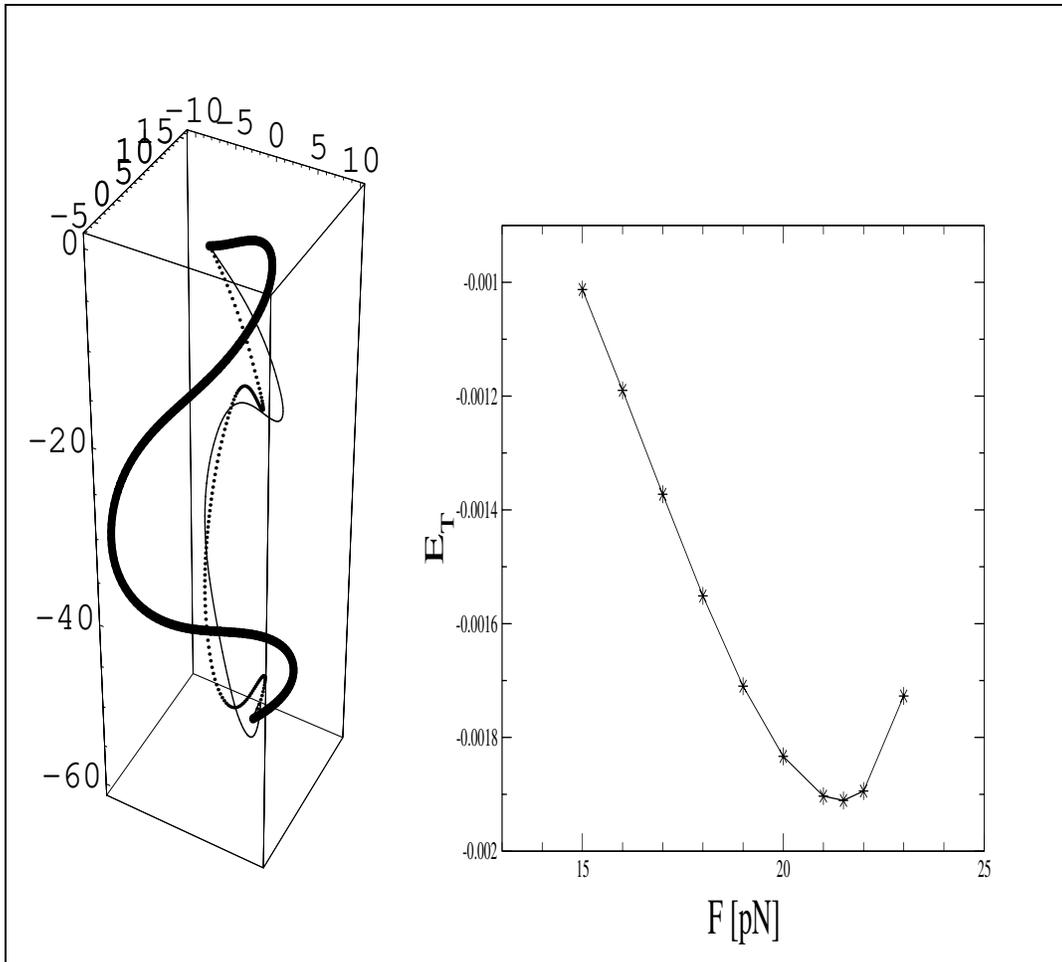


Fig. 6.6) Esquerda: três DNAs curtos, $L = 151bps$, para $F = 21.5pN$ (linha cheia), $F = 23pN$ (linha pontilhada) e $F = 15pN$ (linha grossa). Direita: Energia elástica total vs. força de tensão. A posição final é dada por $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$. Os parâmetros são $P_\psi = 0$ e $P_\phi = 0.043$.

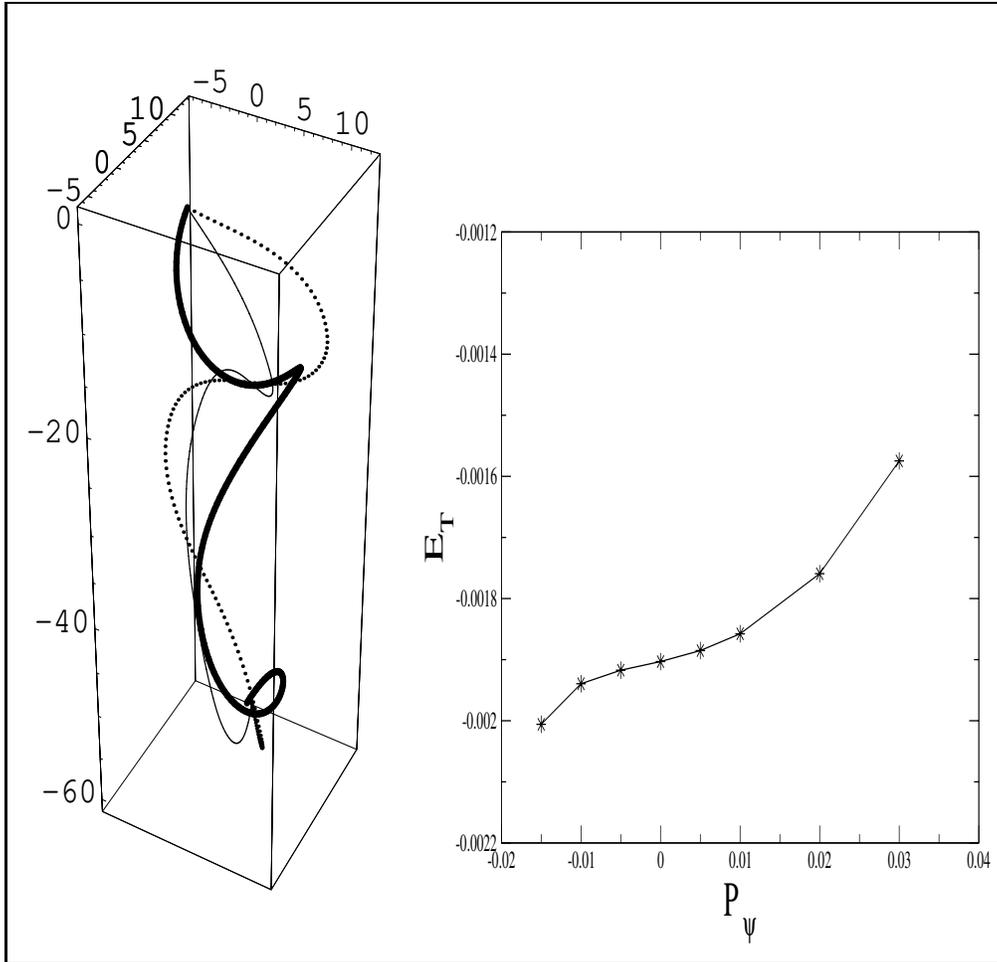


Fig. 6.7) Esquerda: três DNAs curtos, $L = 151bps$, para $P_\psi = 0$ (linha cheia), $P_\psi = -0.015$ (linha pontilhada) e $P_\psi = 0.03$ (linha grossa). Direita: Energia elástica total vs. momento P_ψ . A posição final é dada por $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$. Os parâmetros são $F = 21pN$ e $P_\phi = 0.043$.

6.5 Cordas não-homogêneas

No capítulo 5 nós estudamos algumas configurações de equilíbrio para cordas não-homogêneas. Vimos que se os módulos de Young e de cisalhamento variarem com a posição na corda, efeitos caóticos podem surgir já que as equações de Kirchhoff estacionária deixam de ser integráveis. Um outro efeito é o de deformar a solução correspondente ao mínimo global da energia elástica total da corda em função das condições iniciais. Esta solução, apesar de periódica, não mais é regular como a hélice e isto decorre apenas de não-homogeneidades nas propriedades elásticas ao longo da corda.

Nesta seção, vamos estudar, novamente, o efeito da não-homogeneidade num contexto de PCC. Vamos comparar as formas das configurações de equilíbrio de cordas homogêneas com não-homogêneas sujeitas aos mesmos parâmetros mecânicos e fixas nas mesmas posições inicial e final. Como vimos, podemos escolher a origem do sistema de coordenadas na posição inicial da corda, de modo que devemos fixar apenas a posição final.

Vamos considerar a mesma variação periódica para o módulo de Young aplicada à molécula de DNA como considerado no capítulo 5. Vamos reescrever, por simplicidade a relação para o módulo de Young, Eq. 5.4:

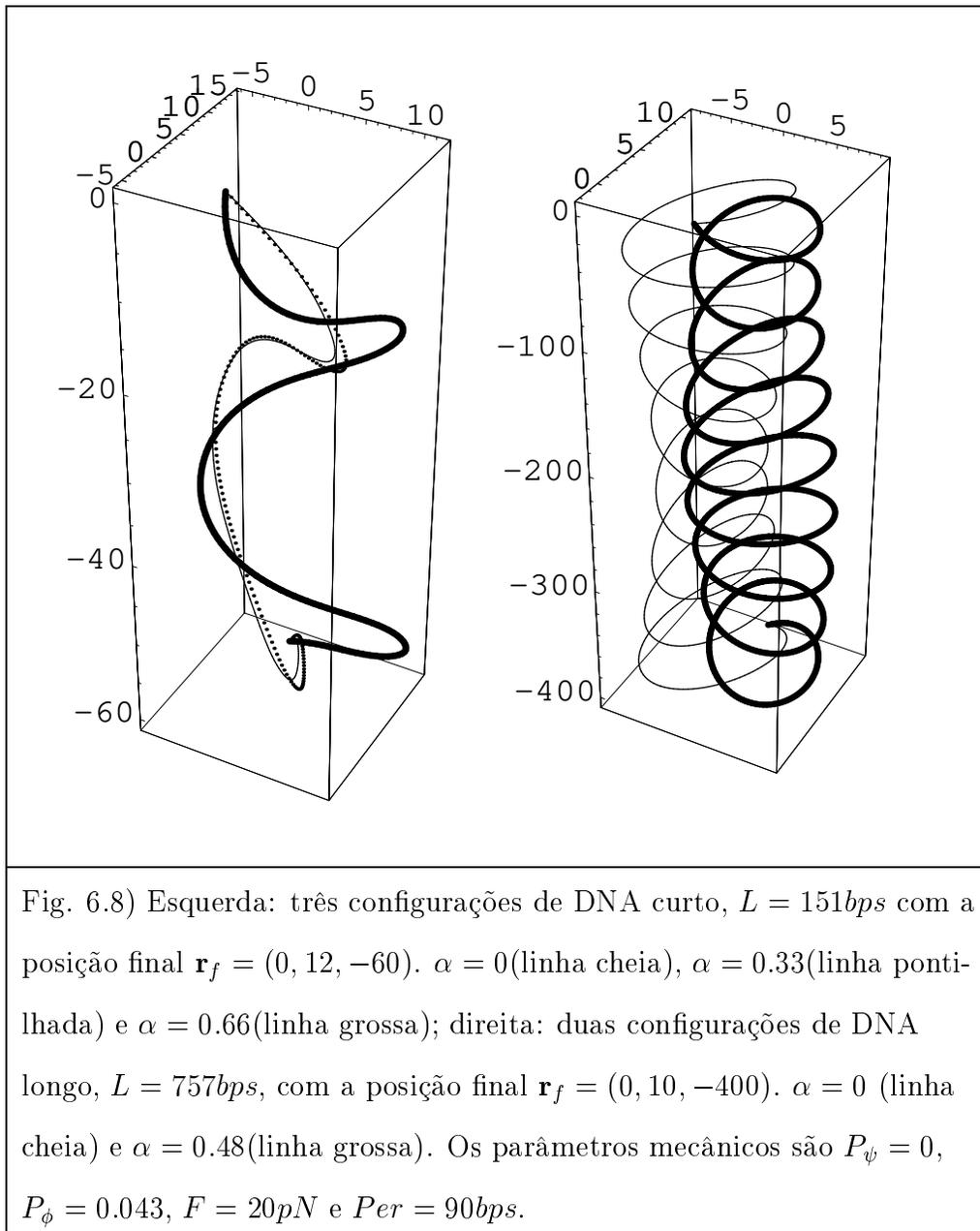
$$E(s) = 1 + \alpha \cos \frac{9.52}{Per} s, \quad (6.20)$$

onde Per é o período da oscilação do módulo de Young ao longo do DNA em unidades de pares de bases e α é um parâmetro de perturbação que não pode ser maior que 0.66.

A figura 6.8 mostra três DNA curtos, $L = 151bps$, e dois DNA longos, $L = 757bps$. Os parâmetros mecânicos são: $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ e $F = 20pN$. Usamos $Per = 90bps$ que corresponde ao comprimento de uma volta na hélice homogênea com os mesmos parâmetros mecânicos. Para o DNA curto, figura 6.8 à esquerda, as configurações foram calculadas com $\alpha = 0$ (linha cheia), $\alpha = 0.33$ (linha pontilhada) e $\alpha = 0.66$ (linha grossa). A posição final escolhida é a mesma das figuras anteriores e vale $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$. Da mesma forma como no cálculo das soluções na seção anterior, a solução previamente convergida era usada como solução ST para o próximo cálculo. Assim, a solução para $\alpha = 0$ (já obtida antes) foi a ST para o cálculo daquela com $\alpha = 0.33$, que por sua vez, foi a ST para o cálculo da solução com $\alpha = 0.66$. Para o DNA longo, figura 6.8 à direita, as configurações foram calculadas com $\alpha = 0$ (linha cheia) e $\alpha = 0.48$ (linha grossa). A posição final escolhida, também, é a mesma usada na figura 6.2, $\mathbf{r}_f = (0, 10, -400)$.

Podemos ver, claramente, os efeitos da não-homogeneidade na conformação das moléculas constatando que eles são significativos. Estes resultados devem ser entendidos não como a solução exata para as conformações reais da molécula de DNA mas sim como a contribuição da não-homogeneidade à sua estrutura tridimensional. O sistema completo, DNA + meio que a envolve, é relativamente complexo e efeitos como a concentração de íons na solução e

a interação com outras partículas são fatores determinantes da estrutura.



Em trabalhos futuros pretendemos explorar um pouco mais esses aspec-

tos, lembrando que o modelo de Kirchhoff permite a inclusão destes fatores através de forças externas. A seguir, apresentaremos as conclusões finais deste trabalho de tese e comentamos as perspectivas futuras.

Capítulo 7

Conclusões

O modelo de Kirchhoff constitui uma poderosa ferramenta teórica para a investigação do comportamento elástico de filamentos. Apesar de ser um modelo bem antigo[54], datando da época de Euler e Lagrange[30], somente nesta última década ele tem sido considerado no estudo destes sistemas[25, 55], especialmente, em aplicações à molécula do DNA[13].

Neste trabalho de tese utilizamos o modelo de Kirchhoff para estudar o comportamento elástico da molécula do DNA ao nível dos modelos elásticos ideais. Até então, longos pedaços da molécula do DNA tem sido estudados neste nível na aproximação de que a molécula é perfeitamente uniforme e homogênea. Por esta razão, os resultados obtidos são considerados como primeiras aproximações para o comportamento elástico da molécula e modelagens aos níveis de todos-os-átomos e de pares de bases, tem sido usadas

para estudar os efeitos devido às propriedades mecânicas que variam com a sequência de pares de base da molécula. O máximo que encontramos na literatura, é o uso do modelo de Kirchhoff para a molécula do DNA com curvatura intrínseca dependente da sequência[42]. A nossa principal contribuição, portanto, se dá em considerarmos a dependência com a sequência de algumas propriedades mecânicas, como a densidade de massa e os módulos de Young e de cisalhamento. Isto permitiu o estudo destes efeitos no comportamento elástico da molécula ao nível dos modelos elásticos ideais. Nossos principais resultados estão resumidos abaixo.

Primeiramente, gostaríamos de enfatizar a versatilidade do modelo de Kirchhoff para filamentos. É possível considerar-se uma ampla gama de situações tais como a presença de forças externas e de não-homogeneidades. Podemos introduzir forças como a gravidade e a interação eletromagnética com partículas externas, bem como considerar a interação entre as várias partes da corda. É possível considerar-se, por exemplo, a força de contato entre duas partes da corda, conforme estudado por Tobias *et al*[16]. Como vimos no capítulo 4, uma força de atrito devido à viscosidade do meio foi incorporada às equações de Kirchhoff como uma força externa, proporcional à velocidade relativa de movimento da corda. Não-homogeneidades podem ser incorporadas ao modelo de maneira direta conforme estudado no capítulo 4, através da densidade de massa, e nos capítulos 5 e 6, através dos módulos de Young e de cisalhamento.

Vimos que o anel planar torcido, a barra reta torcida e a hélice são

as soluções de equilíbrio mais simples das equações de Kirchhoff. Apesar de o conjunto de todas as possíveis soluções de equilíbrio para cordas homogêneas de seção transversal circular ter sido obtido e classificado por Nizette e Goriely[30] as três soluções acima constituem as soluções padrões de comportamento elástico para cordas homogêneas. Todo o trabalho realizado nesta tese, portanto, é feito em comparação a estas soluções, especificamente o anel planar e a hélice, onde podemos ver, claramente, o efeito da não-homogeneidade nas conformações dos filamentos.

Um problema dinâmico foi estudado, qual seja, o estudo da dinâmica, próximo ao equilíbrio, de anéis planares torcidos com densidade de massa variando periodicamente ao longo da posição, em meios viscosos. Aplicamos este estudo a um exemplo de molécula de DNA circular. O primeiro efeito estudado foi o da viscosidade. Concluímos que ela retarda a dinâmica após perturbação de um anel instável. Depois consideramos a não-homogeneidade na densidade de massa e concluímos que, mesmo num meio viscoso, a dinâmica do anel sentiu o efeito da diferença na densidade de massa quando a instabilidade é relativamente alta, isto é, quando o expoente característico da instabilidade é da mesma ordem que o coeficiente que representa o atrito devido ao meio. O efeito da variação na densidade de massa foi a quebra da simetria na deformação do anel, onde as partes mais leves deformaram muito mais do que as partes mais pesadas. Consideramos um exemplo, onde uma molécula de DNA circular é considerada na presença de um meio aquoso com íons de Zn^{2+} que, ao se ligarem à molécula, simulariam a situação estudada

onde a diferença entre a parte mais pesada e a mais leve é da ordem de 10% do peso total de um par de bases. Este trabalho foi publicado no Physical Review E[31]¹.

Os problemas estáticos, ou de equilíbrio, que estudamos foram as soluções possíveis para cordas não-homogêneas e o desenvolvimento de um método de resolução do problema de condições de contorno. No capítulo 5 verificamos a presença de caos espacial devido à não-homogeneidade nos módulos de Young e de cisalhamento, escrevendo as equações de Kirchhoff estacionárias numa formulação hamiltoniana. Utilizamos uma escala de valores para o módulo de Young que retratasse as possíveis variações desta propriedade mecânica em função da sequência de pares de bases da molécula de DNA. Vimos que uma análise estacionária em termos do cálculo da energia elástica total da corda como função das condições iniciais necessárias à resolução das equações diferenciais, resultou na presença de novas soluções de equilíbrio estáveis que apresentaram comportamento caótico, conforme observado nos respectivos mapas estroboscópicos. Portanto, concluímos que os efeitos básicos principais devido a esta não-homogeneidade nas soluções de equilíbrio são: 1) o comportamento caótico espacial de algumas soluções que se apresentam em formas muito mais compactadas do que as do caso homogêneo e; 2) a deformação da solução de menor energia, que no caso homogêneo é a hélice homogênea. Esta solução, apesar de apresentar comportamento periódico, conforme análise do respectivo mapa estroboscópico, não mais

¹Ver Apêndice D

possui o padrão uniforme que a hélice homogênea apresenta. Este trabalho foi apresentado na conferência “Sixth SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems” [56].

No capítulo 6 apresentamos um método para a obtenção de soluções de equilíbrio das equações de Kirchhoff onde as extremidades do filamento são mantidas fixas em posições escolhidas. O método consta de levar uma solução de equilíbrio conhecida, que não apresenta as extremidades nas posições desejadas, até uma solução que satisfaça às equações de Kirchhoff estacionárias e que possuam as extremidades nas posições escolhidas. Desde que podemos escolher a origem como sendo a posição inicial da corda, o problema se reduz a fixarmos apenas a posição da extremidade final da corda. Para resolvermos este problema linearizamos as equações diferenciais que regem a estática do sistema e obtivemos uma relação linear entre uma pequena variação na posição final da corda em função de uma pequena variação nas condições iniciais necessárias para resolver-se o sistema de equações diferenciais. O resultado é um método numérico onde utilizamos uma solução considerada *solução tentativa*, ST, e calculamos a correção linear para que ela tenha a posição final deslocada numa dada quantidade. Testa-se a precisão da solução obtida e, caso esta esteja acima da precisão desejada, usamo-la como ST para a obtenção da solução desejada. Repetimos o processo até atingirmos a precisão escolhida. Mostramos alguns exemplos, onde já consideramos os parâmetros que definem uma molécula de DNA, e verificamos que existem limites para a existência de soluções, e, conseqüentemente, para a resolução

do problema geral de condições de contorno, que são mais complicadas do que o simples requisito de que o módulo do vetor que liga a origem ao ponto final da corda seja menor ou igual ao comprimento total da mesma. Definimos e mostramos um mapa formado por todos os pontos finais possíveis para uma dada corda em função, apenas, das condições iniciais necessárias à resolução das equações diferenciais, e notamos que a região ocupada por esses pontos é relativamente complicada, com simetria cilíndrica, que revela os limites de resolução do problema. Estudamos, portanto, como esses limites variam com a força de tensão sobre a corda concluindo que esses parâmetros mecânicos são de extrema importância na existência de soluções. Analisamos, em seguida, como varia a conformação de uma corda sujeita às mesmas condições de contorno, mas sob a ação de forças e torques diferentes. Calculamos a energia elástica total e obtivemos a solução referente ao valor de menor energia, que será a conformação de equilíbrio mais estável quando a corda estiver sujeita às respectivas condições de contorno. Por fim, estudamos, novamente, o efeito da não-homogeneidade agora sobre uma corda sujeita às mesmas condições de contorno, e aos mesmos parâmetros mecânicos como a força de tensão e o torque. Concluimos que o método é extremamente útil no estudo do comportamento elástico de filamentos sujeitos a condições de contorno dadas pela fixação das suas extremidades. Este trabalho foi submetido para publicação no Physical Review E[57]².

Em resumo, este trabalho de tese apresenta algumas contribuições para o

²Ver Apêndice D

estudo do comportamento elástico de filamentos, especialmente, a molécula de DNA. Estudamos problemas dinâmicos e estáticos de grande relevância nesta área e gostaríamos de mencionar que este assunto é relativamente novo, que possui alguns poucos grupos que o estudam com competência no exterior³ e que é pioneiro no Brasil.

As perspectivas que se abrem são numerosas. Conforme mencionado anteriormente, o modelo de Kirchhoff permite o estudo e a análise de muitas situações em que um filamento pode se apresentar. Podemos investigar, por exemplo, problemas onde interações com partículas externas ou com as outras partes da corda são consideradas; incluir não-homogeneidades no problema dinâmico; e, ainda, considerar cordas com curvatura intrínseca. Podemos estudar o problema dinâmico exato, numericamente, já que, conforme comentado por Alain Goriely[58], ainda não existem trabalhos sobre caos na evolução temporal de filamentos. Pretendemos investigar de forma mais profunda o comportamento caótico das soluções de equilíbrio obtidas no capítulo 5. Todas estas propostas são feitas pensando-se num filamento elástico inextensível. Podemos considerar, também, com o modelo de Kirchhoff, filamentos onde a relação constitutiva seja não-linear, ou, ainda, que a corda possa ser extensível, caso este em que o seu comprimento total deixa de ser uma constante. Por fim, podemos, ainda, aplicar o modelo de Kirchhoff no estudo de sistemas diferentes do que foi considerado nesta tese, que

³Os artigos citados na referência, mostram os grupos que atualmente estudam o modelo de Kirchhoff com aplicações em Engenharia, Física, Matemática e Biologia.

foi a molécula do DNA. Ele se aplica, conforme já mencionado, à problemas de Engenharia, Química e outros sistemas Biológicos como estruturas filamentárias de bactérias e plantas.

Apêndice A

Introdução à Mecânica dos Meios Contínuos

A.1 Introdução

Neste apêndice apresentaremos uma introdução à mecânica dos meios contínuos. O objetivo desta apresentação é a obtenção das equações que representam as clássicas leis de conservação para os momentos linear e angular para um corpo tridimensional. Estas equações são usadas no capítulo 1 desta tese na dedução do modelo de Kirchhoff para cordas. Seguiremos as definições e formulações utilizadas nos textos de mecânica do Symon[28] e do Sommerfeld[24].

A.2 Definições Preliminares

Nesta seção apresentaremos as definições iniciais necessárias à dedução das equações de balanço para os momentos linear e angular.

A.2.1 Configurações de referência e deformada

Consideremos um corpo ocupando uma região do espaço tridimensional. Vamos definir a *configuração de referência* como sendo a configuração do corpo em relação a qual o corpo será deformado. Defini-se, então, a *configuração deformada* como aquela que sofreu uma deformação a partir da configuração de referência. Seja \vec{R} a posição de um ponto material do corpo na configuração de referência. Quando o corpo é deformado pela ação das forças, a posição deste ponto muda. Seja \vec{Q} a posição deste mesmo ponto após a deformação (i.e., na configuração deformada).

Um ponto vizinho a este, com posição de referência $\vec{R} + d\vec{R}$, será deformado para a posição $\vec{Q} + d\vec{Q}$. Como os vetores \vec{R} e \vec{Q} estão ligados por uma deformação do corpo podemos escrever $\vec{Q} = \vec{Q}(\vec{R})$. A figura A1 mostra esses vetores.

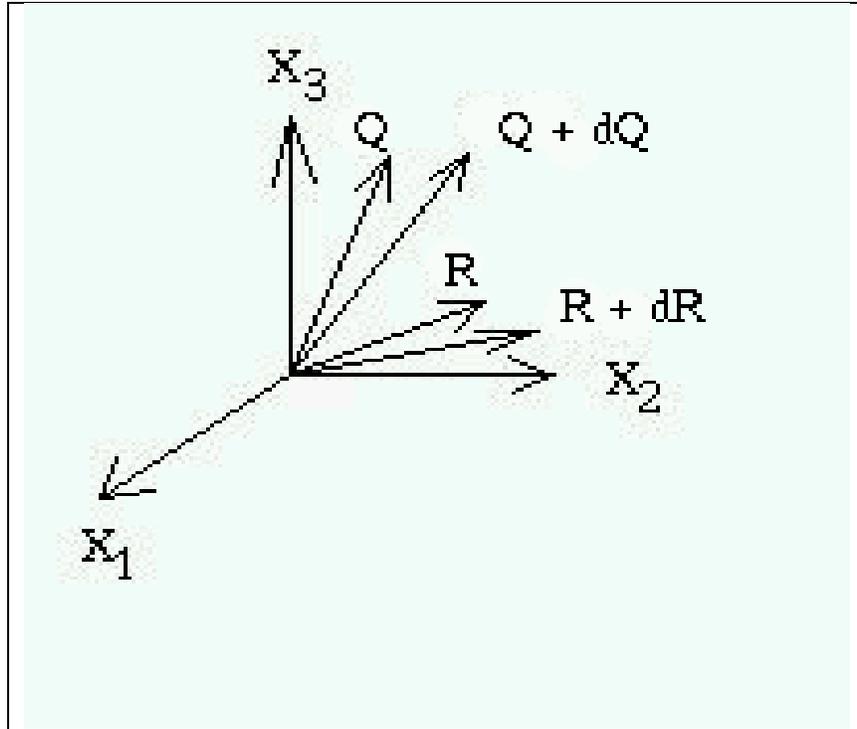


Fig. A1) Vetores \vec{Q} e $\vec{Q} + d\vec{Q}$ em função de \vec{R} e $\vec{R} + d\vec{R}$.

A.2.2 Vetor Gradiente Covariante e Contra-variante

Os vetores \vec{R} e \vec{Q} podem ser expressos em vários sistemas de coordenadas. Como vimos no capítulo 2, é conveniente introduzir sistemas curvilíneos. Vamos, então, considerar o espaço tridimensional representado por dois sistemas de coordenadas \vec{X} e \vec{x} :

$$\vec{X} = (X_1, X_2, X_3) = \text{coordenadas cartesianas}$$

$\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) =$ coordenadas curvilíneas.

O Jacobiano da transformação $X_l = X_l(\vec{x})$ é definido por:

$$J = \frac{\partial (X_1, X_2, X_3)}{\partial (x_1, x_2, x_3)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial X_1}{\partial x_1} & \frac{\partial X_2}{\partial x_1} & \frac{\partial X_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial X_1}{\partial x_2} & \frac{\partial X_2}{\partial x_2} & \frac{\partial X_3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial X_1}{\partial x_3} & \frac{\partial X_2}{\partial x_3} & \frac{\partial X_3}{\partial x_3} \end{vmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Assim a integral de uma função qualquer da posição calculada em um sistema de coordenadas, pode ser escrita em termos de outros sistemas de coordenadas pela igualdade:

$$\int f(\vec{X})d^3X = \int f(\vec{X}(\vec{x}))Jd^3x. \quad (\text{A.2})$$

Se \vec{R} é o vetor posição de um ponto material do corpo, definimos o Vetor Gradiente *Covariante* \vec{G}_k da seguinte forma:

$$\vec{G}_k = \frac{\partial \vec{R}}{\partial x_k} = \left(\frac{\partial R_1}{\partial x_k}, \frac{\partial R_2}{\partial x_k}, \frac{\partial R_3}{\partial x_k} \right) \quad k = 1, 2, 3 \quad (\text{A.3})$$

e o Vetor Gradiente *Contra-variante*:

$$\vec{G}^k = \frac{\partial x_k}{\partial \vec{R}} = \left(\frac{\partial x_k}{\partial R_1}, \frac{\partial x_k}{\partial R_2}, \frac{\partial x_k}{\partial R_3} \right) \quad k = 1, 2, 3. \quad (\text{A.4})$$

A.2.3 Tensor Métrico

Para definirmos o *Tensor Métrico* vamos escrever o elemento de distância em coordenadas cartesianas:

$$ds^2 = dX_1^2 + dX_2^2 + dX_3^2. \quad (\text{A.5})$$

Cada elemento dX_l acima pode ser escrito em termos do elemento dx_k em coordenadas curvilíneas, da seguinte maneira:

$$dX_l = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial X_l}{\partial x_k} dx_k. \quad (\text{A.6})$$

Substituindo na equação A.5 temos:

$$\begin{aligned} ds^2 &= \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial X_1}{\partial x_k} dx_k \right)^2 + \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial X_2}{\partial x_k} dx_k \right)^2 + \left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial X_3}{\partial x_k} dx_k \right)^2 \\ &\equiv \sum_{mn} G_{nm} dx_n dx_m, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

onde \mathbf{G} é o Tensor Métrico que, explicitamente, é dado por:

$$\begin{aligned} G_{ll} &= \left(\frac{\partial X_1}{\partial x_l} \right)^2 + \left(\frac{\partial X_2}{\partial x_l} \right)^2 + \left(\frac{\partial X_3}{\partial x_l} \right)^2 \quad l = 1, 2, 3 \\ G_{nm} &= \sum_l \frac{\partial X_l}{\partial x_n} \frac{\partial X_l}{\partial x_m} \quad G_{nm} = G_{mn}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Se considerarmos que $G \equiv \det \mathbf{G}$, é possível demonstrar que:

$$G = J^2. \quad (\text{A.9})$$

A equação A.2 pode ser rescrita como:

$$\int f(\vec{X})d^3 X = \int f(\vec{x})\sqrt{G}d^3 x. \quad (\text{A.10})$$

Em relação às configurações de referência e deformada temos a seguinte situação:

Configuração de referência	Configuração deformada
$\vec{G}_k = \frac{\partial \vec{R}}{\partial x_k}$	$\vec{g}_k = \frac{\partial \vec{Q}}{\partial x_k}$
$G_{mn} = \sum_l \frac{\partial R_l}{\partial x_m} \frac{\partial R_l}{\partial x_n}$	$g_{mn} = \sum_l \frac{\partial Q_l}{\partial x_m} \frac{\partial Q_l}{\partial x_n}$
$J = \sqrt{G}$	$j = \sqrt{g}$
ρ_0 : densidade de massa na conf. de referência	ρ : ídem na conf. deformada
V_0 : Volume do corpo na conf. de referência	V : ídem na conf. deformada

Um elemento de massa do corpo, em ambas as configurações, pode ser escrito em qualquer sistema de coordenadas pela relação abaixo:

$$dm = \rho_0 dV_0 = \rho_0 \sqrt{G} d^3 x, \quad (\text{A.11})$$

na configuração de referência e

$$dm = \rho dV = \rho \sqrt{g} d^3 x. \quad (\text{A.12})$$

na configuração deformada. Unindo as equações A.11 e A.12 chegamos a uma equação que é consequência da conservação de massa no processo de deformação do corpo:

$$\rho_0 \sqrt{G} = \rho \sqrt{g}. \quad (\text{A.13})$$

A.2.4 Tensor Gradiente de Deformação

O tensor gradiente de deformação, \mathbf{A} , é definido pelo produto abaixo:

$$\mathbf{A}(\vec{x}) \equiv \sum_k \vec{g}_k \otimes \vec{G}^k = \sum_k \begin{pmatrix} \frac{\partial Q_1}{\partial x_k} \\ \frac{\partial Q_2}{\partial x_k} \\ \frac{\partial Q_3}{\partial x_k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial x_k}{\partial R_1} & \frac{\partial x_k}{\partial R_2} & \frac{\partial x_k}{\partial R_3} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

com

$$A_{ij} = \sum_k \frac{\partial Q_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial R_j} = \frac{\partial Q_i}{\partial R_j}. \quad (\text{A.15})$$

Se não há deformação, $\vec{R} = \vec{Q}$ e $\mathbf{A} = 1$ (ver a figura A1).

Conforme dito anteriormente, os vetores \vec{Q} e \vec{R} estão ligados por uma deformação do corpo, $\vec{Q} = \vec{Q}(\vec{R})$, e, portanto, podemos escrever o deslocamento dQ_i da seguinte forma:

$$dQ_i = Q_i(\vec{R} + d\vec{R}) - Q_i(\vec{R}) = \sum_j \frac{\partial Q_i}{\partial R_j} dR_j, \quad (\text{A.16})$$

que pela equação A.15 pode ser escrita como:

$$dQ_i = \sum_j A_{ij} dR_j, \quad (\text{A.17})$$

ou

$$d\vec{Q} = \mathbf{A}(\vec{R}) \cdot d\vec{R}. \quad (\text{A.18})$$

Ou seja, o tensor \mathbf{A} fornece o deslocamento infinitesimal na configuração deformada a partir do deslocamento na configuração de referência.

A.2.5 Vetores Diretores

Voltemos às coordenadas definidas na subseção A.2.1:

$$\vec{X} = (X_1, X_2, X_3) = \text{coordenadas cartesianas}$$

$$\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) = \text{coordenadas curvilíneas.}$$

Sejam $\{\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3\}$ os versores da base no sistema de coordenadas carte-

sianas. O deslocamento de um vetor posição \vec{R} em coordenadas cartesianas é dado por:

$$d\vec{R} = dR_1 \hat{X}_1 + dR_2 \hat{X}_2 + dR_3 \hat{X}_3, \quad (\text{A.19})$$

que pode ser escrito, em coordenadas curvilíneas, utilizando a seguinte relação:

$$dR_i = \frac{\partial R_i}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial R_i}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial R_i}{\partial x_3} dx_3 \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{A.20})$$

Mantendo x_2 e x_3 fixos, temos:

$$\left(d\vec{R} \right)_{x_2, x_3} = \left(\frac{\partial R_1}{\partial x_1} \hat{X}_1 + \frac{\partial R_2}{\partial x_1} \hat{X}_2 + \frac{\partial R_3}{\partial x_1} \hat{X}_3 \right) dx_1, \quad (\text{A.21})$$

ou

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial x_1} = \frac{\partial R_1}{\partial x_1} \hat{X}_1 + \frac{\partial R_2}{\partial x_1} \hat{X}_2 + \frac{\partial R_3}{\partial x_1} \hat{X}_3 \equiv \vec{g}_1. \quad (\text{A.22})$$

Este vetor nada mais é que o vetor gradiente covariante definido pela equação A.3, na subseção A.2.1 . Desde que fixamos x_2 e x_3 , a direção do vetor \vec{g}_1 é a direção de crescimento da coordenada x_1 . Da mesma forma, $\vec{g}_2 = \frac{\partial \vec{R}}{\partial x_2}$ e $\vec{g}_3 = \frac{\partial \vec{R}}{\partial x_3}$ estão nas direções x_2 e x_3 , respectivamente. Podemos definir, então, os versores em coordenadas curvilíneas como sendo:

$$\hat{x}_i = \frac{\vec{g}_i}{|\vec{g}_i|} = \frac{1}{|\vec{g}_i|} \left(\frac{\partial R_1}{\partial x_i} \hat{X}_1 + \frac{\partial R_2}{\partial x_i} \hat{X}_2 + \frac{\partial R_3}{\partial x_i} \hat{X}_3 \right) \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{A.23})$$

Como $|\vec{g}_i| = \sqrt{\left(\frac{\partial R_1}{\partial x_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial R_2}{\partial x_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial R_3}{\partial x_i}\right)^2} = \sqrt{g_{ii}}$, ver equação A.8, então:

$$\hat{x}_i = \frac{\vec{g}_i}{\sqrt{g_{ii}}} \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{A.24})$$

A condição de ortonormalidade $\hat{x}_i \cdot \hat{x}_j = \delta_{ij}$ implica em:

$$\frac{\vec{g}_i \cdot \vec{g}_j}{\sqrt{g_{ii}g_{jj}}} = \delta_{ij}, \quad (\text{A.25})$$

o que, pela equação A.22, leva a seguinte relação:

$$\frac{\partial R_1}{\partial x_i} \frac{\partial R_1}{\partial x_j} + \frac{\partial R_2}{\partial x_i} \frac{\partial R_2}{\partial x_j} + \frac{\partial R_3}{\partial x_i} \frac{\partial R_3}{\partial x_j} = 0 \quad \text{se } i \neq j, \quad (\text{A.26})$$

ou

$$\sum_l \frac{\partial R_l}{\partial x_i} \frac{\partial R_l}{\partial x_j} \underbrace{=}_{\text{eq A.8}} G_{ij} = 0 \quad \text{se } i \neq j. \quad (\text{A.27})$$

Isto significa que o tensor métrico definido anteriormente é diagonal.

A.2.6 O Tensor de Tensão (“Stress”)

Dado um elemento de área orientado $d\vec{S}$ de um corpo tratado como um meio contínuo, a força exercida sobre $d\vec{S}$ é:

$$\vec{F} = P d\vec{S}. \quad (\text{A.28})$$

Onde P é a força por unidade de área ou pressão. Esta força não depende só do módulo de $d\vec{S}$, dS , mas também de sua orientação. O Symon[28] mostra que essa é uma aplicação linear e a escreve como:

$$Pd\vec{S} = \mathbf{T} \cdot d\vec{S} = (\mathbf{T} \cdot \hat{n}) dS. \quad (\text{A.29})$$

Onde \mathbf{T} é o *tensor de tensão* e \hat{n} é o vetor unitário normal ao elemento de superfície dS . A força total sobre uma superfície de área A é $\int_A \mathbf{T} \cdot d\vec{S}$.

No livro do Sommerfeld[24] a demonstração de que o tensor de tensão é simétrico é baseada na condição de equilíbrio com torque = 0. Considere a figura A2.

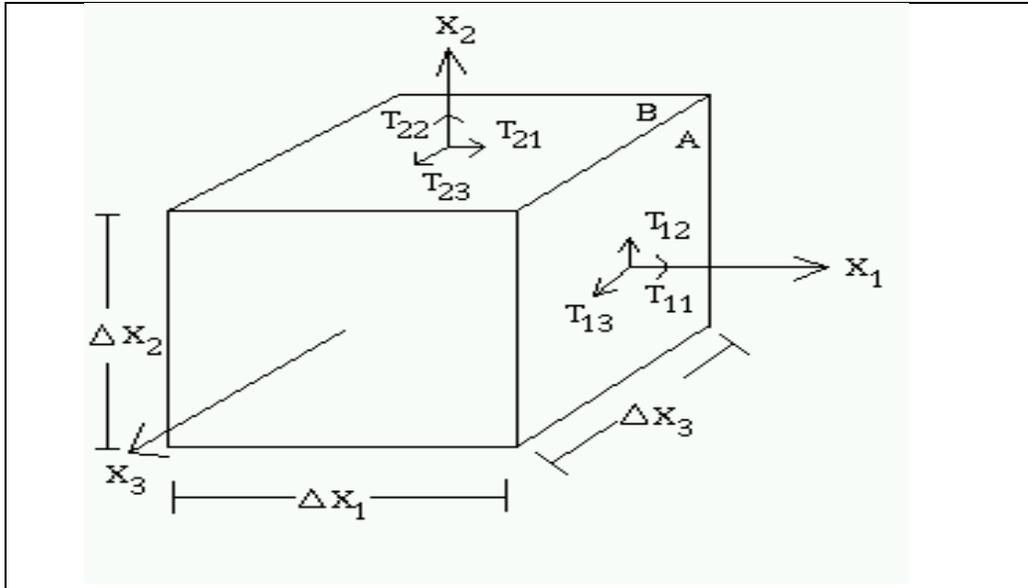


Fig. A2) Elemento de volume, ΔV , em coordenadas cartesianas. As faces A e B são perpendiculares aos eixos X_1 e X_2 respectivamente. $\Delta V = \Delta X_1 \Delta X_2 \Delta X_3$. T_{ij} são componentes do tensor de tensão.

T_{ij} é a força de contato por unidade de área na direção “ X_j ” agindo na face orientada na direção “ X_i ”. Por exemplo, T_{12} é a força por unidade de área na direção “ X_2 ” agindo na face orientada na direção “ X_1 ”, que é a face A conforme a figura A2.

O torque resultante em relação ao eixo X_3 , τ_3 , tem contribuições a partir das forças de contato sobre as faces A e B, e das faces opostas a elas. Da face A e da face oposta a A temos que o torque (torque = força por unidade de área \times área \times distância ao eixo) τ_3 vale: $T_{12} \Delta X_3 \Delta X_2 \Delta X_1$. Da face B e oposta a B o torque vale: $-T_{21} \Delta X_1 \Delta X_3 \Delta X_2$. Somando as contribuições

temos:

$$\tau_3 = \Delta V (T_{12} - T_{21}), \quad (\text{A.30})$$

e, analogamente

$$\tau_1 = \Delta V (T_{23} - T_{32}), \quad (\text{A.31})$$

$$\tau_2 = \Delta V (T_{31} - T_{13}).$$

Como o torque resultante tem que ser nulo em cada uma de suas componentes, no equilíbrio, obtemos que

$$T_{ij} = T_{ji}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (\text{A.32})$$

Vamos definir agora um vetor força por unidade de área resultante sobre uma face do cubo da figura A2, da seguinte forma:

$$\vec{p}_i \equiv T_{i1}\hat{X}_1 + T_{i2}\hat{X}_2 + T_{i3}\hat{X}_3 \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{A.33})$$

Note que este vetor é uma contração do tensor \mathbf{T} com o versor \hat{X}_i : $\vec{p}_i = \hat{X}_i \cdot \mathbf{T}$.

Como o tensor \mathbf{T} é simétrico então:

$$\vec{p}_i = \hat{X}_i \cdot \mathbf{T} = \mathbf{T} \cdot \hat{X}_i. \quad (\text{A.34})$$

Consideremos os seguintes produtos vetoriais:

$$\hat{X}_1 \times \vec{p}_1 = \begin{vmatrix} \hat{X}_1 & \hat{X}_2 & \hat{X}_3 \\ 1 & 0 & 0 \\ T_{11} & T_{12} & T_{13} \end{vmatrix} = T_{12}\hat{X}_3 - T_{13}\hat{X}_2, \quad (\text{A.35})$$

$$\hat{X}_2 \times \vec{p}_2 = \begin{vmatrix} \hat{X}_1 & \hat{X}_2 & \hat{X}_3 \\ 0 & 1 & 0 \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \end{vmatrix} = T_{23}\hat{X}_1 - T_{21}\hat{X}_3, \quad (\text{A.36})$$

$$\hat{X}_3 \times \vec{p}_3 = \begin{vmatrix} \hat{X}_1 & \hat{X}_2 & \hat{X}_3 \\ 0 & 0 & 1 \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{vmatrix} = T_{31}\hat{X}_2 - T_{32}\hat{X}_1. \quad (\text{A.37})$$

Utilizando a equação A.32, o resultado da soma das três equações acima é nula:

$$\sum_i \hat{X}_i \times \vec{p}_i = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{A.38})$$

Essa relação é válida em qualquer sistema de coordenadas. No sistema de coordenadas curvilíneas, que foi considerado na subseção A.2.2, teremos:

$$\sum_i \hat{x}_i \times \vec{p}_i = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (\text{A.39})$$

onde \vec{p}_i é a força por unidade de área na face orientada na direção \hat{x}_i , escrita, agora, na base $\{x_1, x_2, x_3\}$.

Consideremos que o cubo da figura A2 seja bem pequeno. Seja \mathbf{R} a sua posição. Além das forças de tensão, consideremos, também, uma força externa \vec{f} por unidade de volume (por exemplo, a gravidade, $\vec{f} = \vec{g}$). Esta força age em cada ponto do volume ΔV do cubo, sempre no mesmo sentido, fazendo com que o torque resultante, em relação ao seu centro, devido a essa força seja nulo. No entanto, a força resultante não é nula. Na direção X_1 temos:

$$\begin{aligned} & \left[T_{11}(X_1 + \frac{\Delta X_1}{2}) - T_{11}(X_1 - \frac{\Delta X_1}{2}) \right] \Delta X_2 \Delta X_3 + \\ & \left[T_{21}(X_2 + \frac{\Delta X_2}{2}) - T_{21}(X_2 - \frac{\Delta X_2}{2}) \right] \Delta X_1 \Delta X_3 + \\ & \left[T_{31}(X_3 + \frac{\Delta X_3}{2}) - T_{31}(X_3 - \frac{\Delta X_3}{2}) \right] \Delta X_1 \Delta X_2 + f_1 \Delta V = \rho \Delta V \ddot{X}_1 \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Dividindo por ΔV e fazendo o limite de $\Delta V \rightarrow 0$ ficamos com:

$$\frac{\partial T_{11}}{\partial X_1} + \frac{\partial T_{21}}{\partial X_2} + \frac{\partial T_{31}}{\partial X_3} + f_1 = \rho \ddot{X}_1. \quad (\text{A.41})$$

Em forma vetorial fica:

$$\nabla \cdot \mathbf{T} + \vec{f} = \rho \ddot{\mathbf{R}}, \quad (\text{A.42})$$

onde \mathbf{R} é o vetor posição do elemento de volume. Integrando sobre o volume finito V do corpo obtemos:

$$\int_V (\nabla \cdot \mathbf{T}) dV + \int_V \vec{f} dV = \int_V \rho \ddot{\mathbf{R}} dV. \quad (\text{A.43})$$

Podemos usar o teorema de Gauss na equação acima:

$$\int_V (\nabla \cdot \mathbf{T}) dV = \int_A (\mathbf{T} \cdot \hat{n}) dS. \quad (\text{A.44})$$

Onde A é a superfície que envolve o volume V . Utilizando a equação A.34 e substituindo a igualdade acima na equação A.43 chegamos à equação de balanço para o momento linear do corpo:

$$\int_A \vec{p}_n dS + \int_V \vec{f} dV = \int_V \rho \ddot{\mathbf{R}} dV. \quad (\text{A.45})$$

Note que esta equação é válida para qualquer sistema de coordenadas, cartesianas ou curvilíneas.

O torque provocado pela ação conjunta das forças de tensão e das forças externas em relação à origem (não em relação ao centro do elemento de volume) pode ser obtida fazendo-se o produto vetorial entre o vetor posição \mathbf{R} do elemento de volume e a equação A.42:

$$\mathbf{R} \times \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{R} \times \vec{f} = \rho \mathbf{R} \times \ddot{\mathbf{R}}. \quad (\text{A.46})$$

Utilizando a relação vetorial :

$$\mathbf{R} \times \nabla \cdot \mathbf{T} = \nabla \cdot (\mathbf{R} \times \mathbf{T}), \quad (\text{A.47})$$

chegamos à seguinte expressão, análoga à equação A.43:

$$\int_V \nabla \cdot (\mathbf{R} \times \mathbf{T}) dV + \int_V \mathbf{R} \times \vec{f} dV = \int_V \rho \mathbf{R} \times \ddot{\mathbf{R}} dV. \quad (\text{A.48})$$

Podemos aplicar, novamente, o teorema de Gauss no primeiro termo da equação acima obtendo:

$$\int_V \nabla \cdot (\mathbf{R} \times \mathbf{T}) dV = \int_A (\mathbf{R} \times \mathbf{T}) \cdot \hat{n} dS. \quad (\text{A.49})$$

Utilizando, agora, a relação vetorial :

$$\int_A (\mathbf{R} \times \mathbf{T}) \cdot \hat{n} dS = \int_A (\mathbf{R} \times \mathbf{T} \cdot \hat{n}) dS, \quad (\text{A.50})$$

e usando a equação A.34, chegamos à equação de balanço para o momento angular do corpo:

$$\int_A (\mathbf{R} \times \vec{p}_n) dS + \int_V (\mathbf{R} \times \vec{f}) dV = \int_V \rho (\mathbf{R} \times \ddot{\mathbf{R}}) dV. \quad (\text{A.51})$$

A.3 Relações Vetoriais

Para fazer a dedução das relações vetoriais dadas pelas equações A.47 e A.50, vamos utilizar o tensor de Levi-Civita ϵ_{ijk} .

A primeira relação vetorial é:

$$\int_V (\mathbf{R} \times \nabla \cdot \mathbf{T}) dV = \int_V \nabla \cdot (\mathbf{R} \times \mathbf{T}) dV. \quad (\text{A.52})$$

A dedução segue os passos abaixo:

$$\begin{aligned} (\mathbf{R} \times \nabla \cdot \mathbf{T})_i &= \epsilon_{ijk} R_j \partial_l T_{lk} = \epsilon_{ijk} [\partial_l (R_j T_{lk}) - T_{lk} \partial_l R_j] \\ &= \partial_l (\epsilon_{ijk} R_j T_{lk}) - \epsilon_{ijk} T_{lk} \delta_{lj} \\ &= (\nabla \cdot (\mathbf{R} \times \mathbf{T}))_i - \underbrace{\epsilon_{ijk} T_{jk}}_{=0} \end{aligned}$$

A segunda relação vetorial é:

$$\int_A (\mathbf{R} \times \mathbf{T}) \cdot \hat{n} dS = \int_A (\mathbf{R} \times \mathbf{T} \cdot \hat{n}) dS. \quad (\text{A.53})$$

A dedução segue os passos abaixo:

$$\begin{aligned} [(\mathbf{R} \times \mathbf{T}) \cdot \hat{n}]_i &= \epsilon_{ijk} R_j T_{lk} n_l \\ &= \epsilon_{ijk} R_j (T_{lk} n_l) = [\mathbf{R} \times (\mathbf{T} \cdot \hat{n})]_i. \end{aligned}$$

Apêndice B

Equações de Kirchhoff em ângulos de Euler

Neste Apêndice, apresentaremos os passos necessários para escrevermos as equações de Kirchhoff estacionárias em ângulos de Euler. Primeiramente, vamos reescrever as equações de Kirchhoff na base diretora, Eq. 3.1:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}' &= 0, & (a) \\ \mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} &= 0 & (b) \\ \mathbf{M} &= k_1 \mathbf{d}_1 + k_2 \mathbf{d}_2 + \Gamma k_3 \mathbf{d}_3 . & (c) \end{aligned} \tag{B.1}$$

Vamos escrever essas equações em componentes. Na base cartesiana fixa a Eq. B.1 a) nos fornece:

$$F'_1 = 0, \tag{B.2}$$

$$F'_2 = 0, \quad (\text{B.3})$$

$$F'_3 = 0. \quad (\text{B.4})$$

Da equação B.1b) usando a B.1c) temos:

$$(k_1 \mathbf{d}_1 + k_2 \mathbf{d}_2 + \Gamma k_3 \mathbf{d}_3)' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = 0. \quad (\text{B.5})$$

Usando a definição do vetor 'twist', Eq. 2.6 e a Eq. 2.7, obtemos:

$$k'_1 + (\Gamma - 1)k_2 k_3 = f_2, \quad (\text{B.6})$$

$$k'_2 - (\Gamma - 1)k_1 k_3 = -f_1, \quad (\text{B.7})$$

$$k'_3 = 0. \quad (\text{B.8})$$

Onde f_i são as componentes da força resultante \mathbf{F} escritas na base diretora. Os f_i se relacionam com os F_i a partir da relação $f_i = \sum_j S_{ij} F_j$, com S_{ij} dado pela Eq. 3.12. Para escrevermos o vetor 'twist' em termos dos ângulos de Euler, primeiramente, obtemos uma expressão para o vetor \mathbf{k} . A partir da Eq. 2.7:

$$\mathbf{d}'_i = -\mathbf{d}_i \times \mathbf{k} \quad (\text{B.9})$$

$$\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}'_i = -\mathbf{d}_i \times (\mathbf{d}_i \times \mathbf{k}) = \mathbf{k} - (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{k}) \mathbf{d}_i \quad (\text{B.10})$$

$$\sum_i \mathbf{d}_i \times \mathbf{d}'_i = 3\mathbf{k} - \sum_i (\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{k}) \mathbf{d}_i = 2\mathbf{k} \quad (\text{B.11})$$

ou

$$\mathbf{k} = \frac{1}{2} \sum_i \mathbf{d}_i \times \mathbf{d}'_i. \quad (\text{B.12})$$

Usando a Eq. 3.11 duas vezes nós obtemos:

$$\mathbf{d}'_i = \sum_j S'_{ij} \mathbf{e}_j = \sum_{j,k} S'_{ij} S_{kj} \mathbf{d}_k \quad (\text{B.13})$$

e, finalmente,

$$\mathbf{k} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k} S'_{ij} S_{kj} (\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_k). \quad (\text{B.14})$$

Usando a matriz S explicitamente, Eq. 3.12, obtemos:

$$k_1 = \theta' \sin \phi - \psi' \sin \theta \cos \phi, \quad (\text{B.15})$$

$$k_2 = \theta' \cos \phi + \psi' \sin \theta \sin \phi, \quad (\text{B.16})$$

$$k_3 = \psi' \cos \theta + \phi'. \quad (\text{B.17})$$

Podemos, agora, substituir essas equações nas Eqs. B.6, B.7 e B.8 onde usamos a seguinte regra para as duas primeiras: [(primeira)*sin ϕ + (segunda)*cos ϕ] e [(primeira)*cos ϕ - (segunda)*sin ϕ] O resultado final são as Eqs. 3.14.

Apêndice C

Método linear de análise dinâmica de soluções de equilíbrio

Neste Apêndice apresentaremos a dedução do método de análise dinâmica de soluções de equilíbrio das equações de Kirchhoff em primeira ordem num parâmetro de perturbação ϵ . Consideraremos, na dedução e explicação do método, somente o caso homogêneo. Os resultados para o caso não-homogêneo seguem os mesmos passos mas somente apresentaremos as equações finais, ao final deste Apêndice, quando necessário. A dedução seguirá os passos apresentados nos artigos da referência [29].

C.1 O método

A idéia principal da análise dinâmica de soluções de equilíbrio é fazermos a expansão da base diretora em potências de um certo parâmetro de perturbação ϵ e assumirmos que a nova base forma uma triáde ortonormal. Vamos definir os termos $\mathbf{d}_i^{(0)}$ e $\mathbf{d}_i^{(1)}$ ($i=1,2,3$) como sendo a *base não-perturbada* e a *correção da base*, respectivamente. Assim, a nova base, que designaremos apenas como \mathbf{d}_i , sem o índice superior, fica definida por:

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon \mathbf{d}_i^{(1)} + O(\epsilon^2), \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{C.1})$$

Outro detalhe importante é que podemos escrever a correção $\mathbf{d}_i^{(1)}$ na base não-perturbada:

$$\mathbf{d}_i^{(1)} = \sum_{j=1}^3 A_{ij} \mathbf{d}_j^{(0)}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{C.2})$$

Nós queremos que a nova base \mathbf{d}_i permaneça ortonormal até primeira ordem na expansão, ou seja, $\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j = \delta_{ij} + O(\epsilon^2)$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon \mathbf{d}_i^{(1)}) \cdot (\mathbf{d}_j^{(0)} + \epsilon \mathbf{d}_j^{(1)}) &= \delta_{ij} + \epsilon (\mathbf{d}_i^{(0)} \cdot \mathbf{d}_j^{(1)} + \mathbf{d}_j^{(0)} \cdot \mathbf{d}_i^{(1)}) + O(\epsilon^2) \\ &= \delta_{ij} + \epsilon \left(\sum_k A_{jk} \mathbf{d}_i^{(0)} \cdot \mathbf{d}_k^{(0)} + \sum_k A_{ik} \mathbf{d}_j^{(0)} \cdot \mathbf{d}_k^{(0)} \right) + O(\epsilon^2) \\ &= \delta_{ij} + \epsilon (A_{ji} + A_{ij}) + O(\epsilon^2), \quad i, j = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

A matriz A tem que ser anti-simétrica para que a nova base permaneça

ortonormal. Ela pode, então, ser escrita como:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_3 & -\alpha_2 \\ -\alpha_3 & 0 & \alpha_1 \\ \alpha_2 & -\alpha_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.4})$$

Desta maneira, podemos rescrever a nova base (equação C.1) em função da base não-perturbada:

$$\mathbf{d}_i^{(1)} = (\vec{\alpha} \times \mathbf{d}_i^{(0)}), \quad (\text{C.5})$$

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon (\vec{\alpha} \times \mathbf{d}_i^{(0)}) + O(\epsilon^2), \quad = 1, 2, 3, \quad (\text{C.6})$$

onde o vetor $\vec{\alpha}(s, t) = (\alpha_1(s, t), \alpha_2(s, t), \alpha_3(s, t))$ contém a informação sobre como a base foi perturbada, a partir de $\vec{\alpha}(s, 0) = (\alpha_1(s, 0), \alpha_2(s, 0), \alpha_3(s, 0))$, ao longo da corda. A partir desta última relação é possível escrever a perturbação de algum vetor escrito em função da base diretora. Seja \mathbf{V} tal vetor. Na base nova ele é escrito como:

$$\mathbf{V} = \sum_i v_i \mathbf{d}_i. \quad (\text{C.7})$$

Nós queremos calcular a perturbação em primeira ordem de \mathbf{V} :

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}^{(0)} + \epsilon \mathbf{V}^{(1)} + O(\epsilon^2), \quad (\text{C.8})$$

isto é, queremos calcular $\mathbf{V}^{(1)}$, já que

$$\mathbf{V}^{(0)} = \sum_i v_i^{(0)} \mathbf{d}_i^{(0)}, \quad (\text{C.9})$$

e v_i , da equação C.7, é escrito como:

$$v_i = v_i^{(0)} + \epsilon v_i^{(1)}. \quad (\text{C.10})$$

Igualando as equações C.7 e C.8 e utilizando as equações C.6, C.9 e C.10 chegamos à seguinte expressão final:

$$\mathbf{V}^{(1)} = \sum_i \left(v_i^{(1)} + (\vec{\alpha} \times \mathbf{V}^{(0)})_i \right) \mathbf{d}_i^{(0)}. \quad (\text{C.11})$$

A equação acima permitirá escrevermos todas as quantidades dinâmicas do sistema em primeira ordem na expansão. É conveniente escrevermos todas as quantidades envolvidas em termos da base estacionária $\mathbf{d}_i^{(0)}$ como fizemos com a expansão da base diretora, e do vetor $\vec{\alpha}$. Se este é conhecido, então podemos reconstruir a corda perturbada integrando o versor \mathbf{d}_3 através da Eq. 2.42 que, usando a equação C.6 com $i=3$, fica:

$$\mathbf{x}(s) = \int^s \left[\mathbf{d}_3^{(0)} + \epsilon \left(\alpha_2 \mathbf{d}_1^{(0)} - \alpha_1 \mathbf{d}_2^{(0)} \right) \right] ds. \quad (\text{C.12})$$

Podemos expressar, agora, os vetores twist e spin em primeira ordem na

expansão:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}^{(0)} + \epsilon \mathbf{k}^{(1)} + O(\epsilon^2), \quad (\text{C.13})$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}^{(0)} + \epsilon \mathbf{w}^{(1)} + O(\epsilon^2). \quad (\text{C.14})$$

Para estes vetores, consideraremos válida, em primeira ordem, as relações dadas pelas equações 2.7 e 2.8. A primeira será utilizada para obtermos $\mathbf{k}^{(1)}$ seguindo a sequência abaixo:

$$\mathbf{d}'_i = (\mathbf{d}_i^{(0)})' + \epsilon (\mathbf{d}_i^{(1)})'. \quad (\text{C.15})$$

O segundo termo da equação acima pode ser escrito utilizando-se a equação C.6:

$$(\mathbf{d}_i^{(1)})' = (\vec{\alpha} \times \mathbf{d}_i^{(0)})' = \vec{\alpha}' \times \mathbf{d}_i^{(0)} + \vec{\alpha} \times (\mathbf{d}_i^{(0)})' \quad (\text{C.16})$$

$$= \vec{\alpha}' \times \mathbf{d}_i^{(0)} + \vec{\alpha} \times (\mathbf{k}^{(0)} \times \mathbf{d}_i^{(0)}). \quad (\text{C.17})$$

Mas, a partir de $\mathbf{d}'_i = \mathbf{k} \times \mathbf{d}_i$ e das equações C.6 e C.13 temos:

$$(\mathbf{d}_i^{(1)})' = \mathbf{k}^{(1)} \times \mathbf{d}_i^{(0)} + \mathbf{k}^{(0)} \times (\vec{\alpha} \times \mathbf{d}_i^{(0)}). \quad (\text{C.18})$$

Igualando as equações C.17 e C.18 e aplicando identidades vetoriais obtemos a seguinte equação para $\mathbf{k}^{(1)}$:

$$\mathbf{k}^{(1)} = \vec{\alpha}' - \mathbf{k}^{(0)} \times \vec{\alpha}. \quad (\text{C.19})$$

Analogamente, utilizando a equação 2.8 chegamos a uma equação para $\omega^{(1)}$:

$$\mathbf{w}^{(1)} = \dot{\vec{\alpha}} - \mathbf{w}^{(0)} \times \vec{\alpha}. \quad (\text{C.20})$$

Mas $\mathbf{w}^{(0)} = 0$ para a solução não-perturbada e, portanto:

$$\mathbf{w}^{(1)} = \dot{\vec{\alpha}}. \quad (\text{C.21})$$

Consideremos a equação de Newton 2.41(a):

$$\mathbf{F}'' = \ddot{\mathbf{d}}_3. \quad (\text{C.22})$$

Utilizando a equação C.11 podemos escrever a força \mathbf{F} expandida até primeira ordem em ϵ :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{(0)} + \epsilon \mathbf{F}^{(1)} = \sum_i f_i^{(0)} \mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon \sum_i \left(f_i^{(1)} + (\vec{\alpha} \times \mathbf{F}^{(0)})_i \right) \mathbf{d}_i^{(0)} + O(\epsilon^2). \quad (\text{C.23})$$

A equação de Newton C.22, em primeira ordem na expansão, é dada por:

$$\left(\mathbf{F}^{(1)} \right)'' = \ddot{\mathbf{d}}_3^{(1)}. \quad (\text{C.24})$$

Ambos os lados desta equação podem ser escritos em termos de α_i e $f_i^{(1)}$.

Utilizando a Eq. C.5 e sabendo que a solução de equilíbrio ou não-perturbada

é independente do tempo, $\dot{\mathbf{d}}_3^{(0)} = 0$, o lado direito da equação acima fica:

$$\ddot{\mathbf{d}}_3^{(1)} = \ddot{\alpha}_2 \mathbf{d}_1^{(0)} + \ddot{\alpha}_1 \mathbf{d}_2^{(0)}. \quad (\text{C.25})$$

Já o lado esquerdo da equação C.24 é mais elaborado. Derivando $\mathbf{F}^{(1)}$ com relação à s duas vezes e separando o resultado por componentes nas direções $\{\mathbf{d}_1^{(0)}, \mathbf{d}_2^{(0)}, \mathbf{d}_3^{(0)}\}$, chegamos a três equações de segunda ordem em s e t para seis variáveis independentes $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)}\}$:

$$\begin{aligned} \ddot{\alpha}_2 = & \left(f_1^{(1)}\right)'' - 2 \left(f_2^{(1)}\right)' k_3^{(0)} + 2 \left(f_3^{(1)}\right)' k_2^{(0)} - f_1^{(1)} \left((k_2^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2\right) \\ & + f_2^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} - (k_3^{(0)})'\right) + f_3^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} + (k_2^{(0)})'\right) \\ & + f_1^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_3 - k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_2 - 2k_2^{(0)} \alpha_2' - 2k_3^{(0)} \alpha_3' - (k_2^{(0)})' \alpha_2 - (k_3^{(0)})' \alpha_3\right) \\ & + f_2^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_1 + \alpha_3 \left((k_2^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2\right) + \alpha_1 (k_2^{(0)})' + 2\alpha_1' k_2^{(0)} - \alpha_3''\right) \\ & + f_3^{(0)} \left(-k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_1 - \alpha_2 \left((k_2^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2\right) + \alpha_1 (k_3^{(0)})' + 2\alpha_1' k_3^{(0)} + \alpha_2''\right) \\ & - 2 \left(f_1^{(0)}\right)' \left(k_2^{(0)} \alpha_2 + k_3^{(0)} \alpha_3\right) + 2 \left(f_2^{(0)}\right)' \left(k_2^{(0)} \alpha_1 - \alpha_3'\right) \\ & + 2 \left(f_3^{(0)}\right)' \left(k_3^{(0)} \alpha_1 + \alpha_2'\right) - \left(f_2^{(0)}\right)'' \alpha_3 + \left(f_3^{(0)}\right)'' \alpha_2, \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

$$\begin{aligned}
-\ddot{\alpha}_1 = & \left(f_2^{(1)}\right)'' - 2\left(f_3^{(1)}\right)' k_1^{(0)} + 2\left(f_1^{(1)}\right)' k_3^{(0)} - f_2^{(1)} \left(\left(k_1^{(0)}\right)^2 + \left(k_3^{(0)}\right)^2\right) \\
& + f_3^{(1)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} - \left(k_1^{(0)}\right)'\right) + f_1^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} + \left(k_3^{(0)}\right)'\right) \\
& + f_2^{(0)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_1 - k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_3 - 2k_3^{(0)} \alpha_3' - 2k_1^{(0)} \alpha_1' - \left(k_3^{(0)}\right)' \alpha_3 - \left(k_1^{(0)}\right)' \alpha_1\right) \\
& + f_3^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_2 + \alpha_1 \left(\left(k_1^{(0)}\right)^2 + \left(k_3^{(0)}\right)^2\right) + \alpha_2 \left(k_3^{(0)}\right)' + 2\alpha_2' k_3^{(0)} - \alpha_1''\right) \\
& + f_1^{(0)} \left(-k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_2 - \alpha_3 \left(\left(k_1^{(0)}\right)^2 + \left(k_3^{(0)}\right)^2\right) + \alpha_2 \left(k_1^{(0)}\right)' + 2\alpha_2' k_1^{(0)} + \alpha_3''\right) \\
& - 2\left(f_2^{(0)}\right)' \left(k_3^{(0)} \alpha_3 + k_1^{(0)} \alpha_1\right) + 2\left(f_3^{(0)}\right)' \left(k_3^{(0)} \alpha_2 - \alpha_1'\right) \\
& + 2\left(f_1^{(0)}\right)' \left(k_1^{(0)} \alpha_2 + \alpha_3'\right) - \left(f_3^{(0)}\right)'' \alpha_1 + \left(f_1^{(0)}\right)'' \alpha_3,
\end{aligned} \tag{C.27}$$

$$\begin{aligned}
0 = & \left(f_3^{(1)}\right)'' - 2\left(f_1^{(1)}\right)' k_2^{(0)} + 2\left(f_2^{(1)}\right)' k_1^{(0)} - f_3^{(1)} \left(\left(k_1^{(0)}\right)^2 + \left(k_2^{(0)}\right)^2\right) \\
& + f_1^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} - \left(k_2^{(0)}\right)'\right) + f_2^{(1)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} + \left(k_1^{(0)}\right)'\right) \\
& + f_3^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_2 - k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_1 - 2k_1^{(0)} \alpha_1' - 2k_2^{(0)} \alpha_2' - \left(k_1^{(0)}\right)' \alpha_1 - \left(k_2^{(0)}\right)' \alpha_2\right) \\
& + f_1^{(0)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_3 + \alpha_2 \left(\left(k_1^{(0)}\right)^2 + \left(k_2^{(0)}\right)^2\right) + \alpha_3 \left(k_1^{(0)}\right)' + 2\alpha_3' k_1^{(0)} - \alpha_2''\right) \\
& + f_2^{(0)} \left(-k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_3 - \alpha_1 \left(\left(k_1^{(0)}\right)^2 + \left(k_2^{(0)}\right)^2\right) + \alpha_3 \left(k_2^{(0)}\right)' + 2\alpha_3' k_2^{(0)} + \alpha_1''\right) \\
& - 2\left(f_3^{(0)}\right)' \left(k_1^{(0)} \alpha_1 + k_2^{(0)} \alpha_2\right) + 2\left(f_1^{(0)}\right)' \left(k_1^{(0)} \alpha_3 - \alpha_2'\right) \\
& + 2\left(f_2^{(0)}\right)' \left(k_2^{(0)} \alpha_3 + \alpha_1'\right) - \left(f_1^{(0)}\right)'' \alpha_2 + \left(f_2^{(0)}\right)'' \alpha_1.
\end{aligned} \tag{C.28}$$

Para fechar o sistema vamos considerar as equações de torque 2.41 (b) e (c):

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = \mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2, \tag{C.29}$$

$$\mathbf{M} = k_1 \mathbf{d}_1 + k_2 \mathbf{d}_2 + \Gamma k_3 \mathbf{d}_3. \tag{C.30}$$

Calculando cada parcela da equação C.29 utilizando-se as equações C.30 e C.19, em componentes, nós chegamos a mais três equações de segunda ordem

em s e t para seis variáveis independentes $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)}\}$:

$$\begin{aligned} f_2^{(1)} + \ddot{\alpha}_1 &= -\alpha_3 f_1^{(0)} + \alpha_1 (1 - \Gamma) \left((k_2^{(0)})^2 - (k_3^{(0)})^2 \right) \\ &\quad - \alpha_2 (1 - \Gamma) \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} + (k_3^{(0)})' \right) (\Gamma - 2) \alpha_2' k_3^{(0)} + \Gamma \alpha_3' k_2^{(0)} + \alpha_1'', \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

$$\begin{aligned} -f_1^{(1)} + \ddot{\alpha}_2 &= -\alpha_3 f_2^{(0)} + \alpha_2 (1 - \Gamma) \left((k_1^{(0)})^2 - (k_3^{(0)})^2 \right) \\ &\quad - \alpha_1 (1 - \Gamma) \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} - (k_3^{(0)})' \right) - (\Gamma - 2) \alpha_1' k_3^{(0)} - \Gamma \alpha_3' k_1^{(0)} + \alpha_2'', \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

$$\begin{aligned} 2\ddot{\alpha}_3 - \Gamma \alpha_3'' &= \alpha_1 f_1^{(0)} + \alpha_2 f_2^{(0)} \\ &\quad + \alpha_1 (1 - \Gamma) \left((k_1^{(0)} k_3^{(0)} + (k_2^{(0)})' \right) + \alpha_2 (1 - \Gamma) \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} - (k_1^{(0)})' \right) \\ &\quad - \Gamma \left(\alpha_1' k_2^{(0)} - \alpha_2' k_1^{(0)} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

Estas equações podem ser reescritas da seguinte forma:

$$L_E(\mathbf{k}^{(0)}, \mathbf{F}^{(0)}) \cdot \xi = 0, \quad (\text{C.34})$$

onde $\xi = \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)}\}$ e L_E é um operador linear de segunda ordem em s e em t cujos coeficientes dependem dos componentes da solução não-perturbada ou de equilíbrio dadas pelos vetores 'twist' e força resultante $\mathbf{k}^{(0)}$ e $\mathbf{F}^{(0)}$. A escolha destes vetores depende da solução que desejamos analisar. Podemos, por exemplo utilizar algumas das soluções de equilíbrio obtidas no capítulo 3, dadas pelas Eqs. de 3.2 a 3.7. Como neste capítulo analisaremos o anel planar, escolheremos as Eqs. 3.2 e 3.3.

A solução destas seis equações diferenciais controlam a estabilidade, ou

a falta dela, das soluções estacionárias com respeito dependência temporal linear. Como as equações diferenciais para a evolução temporal do anel apresentam termos dependentes do arco comprimento s , é conveniente introduzir uma transformação linear R_γ que leva estas equações a um novo conjunto de equações diferenciais lineares autônomas nas variáveis $\vec{\beta}$ e \vec{g} :

$$\vec{\beta} = R_\gamma \cdot \vec{\alpha} \quad (\text{C.35})$$

e

$$\vec{g} = R_\gamma \cdot \vec{f}^{(1)} : \quad (\text{C.36})$$

$$\begin{aligned} \ddot{\beta}_1 &= g_2'', \\ \ddot{\beta}_2 + g_1'' + 2\kappa g_3' - \Gamma\gamma\kappa\beta_3'' + 2\kappa^2\Gamma\gamma\beta_1' &= \kappa^2 g_1 - \kappa^3\Gamma\gamma\beta_3, \\ \Gamma\gamma\kappa\beta_1'' + g_3'' + 2\kappa^2\Gamma\gamma\beta_3' - 2\kappa g_1' &= \kappa^2 g_3 + \kappa^3\Gamma\gamma\beta_1, \\ \ddot{\beta}_1 - \beta_1'' + \Gamma\gamma\beta_2' - \Gamma\kappa\beta_3' &= (1 - \Gamma)\kappa^2\beta_1 + g_2, \\ \ddot{\beta}_2 - \beta_2'' - \Gamma\gamma\beta_1' &= -g_1 + \Gamma\gamma\kappa\beta_3, \\ 2\ddot{\beta}_3 &= \Gamma\beta_3'' - \Gamma\kappa\beta_1' \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

onde κ é o inverso do raio do anel conforme explicado no capítulo 3. A transformação linear R_γ é o produto de uma reflexão sobre o eixo \mathbf{d}_1 por uma rotação de ângulo γs em torno do eixo \mathbf{d}_3 :

$$R_\gamma = \begin{pmatrix} \cos \gamma s & \sin \gamma s & 0 \\ -\sin \gamma s & -\cos \gamma s & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.38})$$

e os vetores $\vec{\alpha}$ e $\vec{f}^{(1)}$ são $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ e $\vec{f}^{(1)} = (f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)})$.

As soluções normais do sistema de equações C.37 podem ser escritas na forma:

$$\beta_j = e^{\sigma t} \left(Ax_j e^{in\kappa s} + A^* x_j^* e^{-in\kappa s} \right), \quad j = 1, 2, 3, \quad (\text{C.39})$$

$$g_j = e^{\sigma t} \left(Ax_{j+3} e^{in\kappa s} + A^* x_{j+3}^* e^{-in\kappa s} \right), \quad j = 1, 2, 3, \quad (\text{C.40})$$

onde A é a amplitude das soluções, $*$ significa tomar o “complexo conjugado” e n é um inteiro que define o modo fundamental das soluções para o anel planar torcido. Conforme podemos ver nas equações C.39 e C.40, σ é um *expoente característico* da (in)estabilidade destas soluções. O valor de σ determinará se o sistema é estável ou não. Se σ for diferente para cada modo n , então haverá um modo fundamental mais instável, correspondente a σ de maior valor positivo. Substituindo estas soluções nas equações C.37 ficamos com um problema linear na forma $L \cdot \vec{x} = 0$ onde L é dado por:

$$L = \begin{pmatrix} 2i\kappa^3\Gamma\gamma n & \sigma^2 & \kappa^3\Gamma\gamma(1+n^2) & -\kappa^2(1+n^2) & 0 & 2in\kappa^2 \\ -\sigma^2 & 0 & 0 & 0 & -n^2\kappa^2 & 0 \\ -\kappa^3\Gamma\gamma(1+n^2) & 0 & 2i\kappa^3\Gamma\gamma n & -2in\kappa^2 & 0 & -\kappa^2(1+n^2) \\ -\kappa^2(\Gamma+n^2-1) - \sigma^2 & -i\kappa\Gamma\gamma n & i\Gamma\kappa^2 n & 0 & 1 & 0 \\ i\kappa\Gamma\gamma n & -n^2\kappa^2 - \sigma^2 & \kappa\Gamma\gamma & -1 & 0 & 0 \\ -i\Gamma\kappa^2 n & 0 & -\Gamma n^2\kappa^2 - 2\sigma^2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.41})$$

A partir desta matriz podemos estudar a (in)estabilidade do anel planar sob certas condições de torção. Como explicado acima, o valor de σ nas soluções dadas pelas equações C.39 e C.40 informa se a solução é estável (σ

real e menor que zero), oscilatória (σ imaginário puro) e instável (σ real maior que zero). Para determinarmos o valor de σ basta fazermos $\Delta = \det L = 0$:

$$\begin{aligned}
\Delta = & -2\kappa^2(n^4\kappa^2 - 2n^2\kappa^2 + n^2 + 1 + \kappa^2)(n^2\kappa^2 + 1)\sigma^6 \\
& -\kappa^4n^2(2\Gamma\kappa^4 + 2n^4\Gamma\kappa^2 - 2\kappa^4 + \Gamma n^2 - 10n^4\kappa^4 + 3\Gamma\kappa^2 - 3\Gamma\kappa^4n^2 - 4n^2\kappa^2 \\
& \quad + 4n^6\kappa^4 + 8\kappa^4n^2 + \Gamma + \Gamma n^2\kappa^2 + 4n^4\kappa^2 + \Gamma n^6\kappa^4)\sigma^4 \\
& -\kappa^8n^4(n-1)(1+n)(2n^4\kappa^2 + 2n^4\Gamma\kappa^2 + 2\Gamma n^2 - 4n^2\kappa^2 - 2\Gamma^2\gamma^2n^2 \\
& \quad -\Gamma n^2\kappa^2 + 2\Gamma^2\gamma^2 + 2\kappa^2 - \Gamma\kappa^2)\sigma^2 \\
& -\kappa^{10}\Gamma n^6(n-1)^2(1+n)^2(n^2\kappa^2 - \Gamma^2\gamma^2 - \kappa^2).
\end{aligned} \tag{C.42}$$

Esta relação, chamada *relação de dispersão* é um polinômio de grau 3 em σ^2 como função de n . Os resultados numéricos serão considerados diretamente no texto principal.

Podemos ainda obter o valor crítico acima do qual a instabilidade ocorrerá. Este limite ocorre quando $\sigma = 0$. Substituindo na equação acima obtemos e fazendo $\Delta = 0$ obtemos:

$$T_W \equiv \frac{\gamma}{\kappa} = \frac{\sqrt{n^2 - 1}}{\Gamma}, \tag{C.43}$$

onde T_W é a torção total da corda. O menor valor possível de γ ocorre para $n = 2$:

$$\gamma_c = \kappa\sqrt{3}, \tag{C.44}$$

onde usamos $\Gamma = 1$.

C.2 Equações para o caso não-homogêneo

Nesta seção apresentaremos as equações finais nas variáveis $\vec{\beta}$ e \vec{g} para o anel não-homogêneo imerso num meio viscoso. Antes vamos rescrever a Eq. 4.22:

$$\mathbf{x}(s, t) = \int_0^s \mathbf{d}_3 ds' = \int_0^s [\mathbf{d}_3^{(0)} + \epsilon(\alpha_2 \mathbf{d}_1^{(0)} - \alpha_1 \mathbf{d}_2^{(0)})] ds', \quad (\text{C.45})$$

que pode ser rescrita como:

$$\mathbf{x}(s, t) = \mathbf{x}^{(0)} + \epsilon \mathbf{x}^{(1)}. \quad (\text{C.46})$$

Conforme as Eqs 4.23 e 4.24 $\mathbf{x}^{(1)}$ pode ser escrito em termos das soluções para os β_i dados pela Eq. 4.27 onde consideramos apenas os termos $n - Q$, n e $n + Q$ (ver seção 4.2 para maiores esclarecimentos):

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)}(s) = & \frac{e^{\sigma t}}{2} \left\{ -\frac{a_{2,n-Q}}{(n-Q+1)\kappa} e^{i(n-Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n-Q}}{(n-Q-1)\kappa} e^{i(n-Q-1)\kappa s} - \frac{a_{2,n}}{(n+1)\kappa} e^{i(n+1)\kappa s} \right. \\ & + \frac{a_{2,n}}{(n-1)\kappa} e^{i(n-1)\kappa s} - \frac{a_{2,n+Q}}{(n+Q+1)\kappa} e^{i(n+Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n+Q}}{(n+Q-1)\kappa} e^{i(n+Q-1)\kappa s} + c.c. \left. \right\} \mathbf{e}_1 \\ & - \frac{e^{\sigma t}}{2} \left\{ \frac{a_{2,n-Q}}{i(n-Q+1)\kappa} e^{i(n-Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n-Q}}{i(n-Q-1)\kappa} e^{i(n-Q-1)\kappa s} + \frac{a_{2,n}}{i(n+1)\kappa} e^{i(n+1)\kappa s} \right. \\ & + \frac{a_{2,n}}{i(n-1)\kappa} e^{i(n-1)\kappa s} + \frac{a_{2,n+Q}}{i(n+Q+1)\kappa} e^{i(n+Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n+Q}}{i(n+Q-1)\kappa} e^{i(n+Q-1)\kappa s} + c.c. \left. \right\} \mathbf{e}_2 \\ & + e^{\sigma t} \left\{ \frac{a_{1,n-Q}}{i(n-Q)\kappa} e^{i(n+Q)\kappa s} + \frac{a_{1,n}}{in\kappa} e^{in\kappa s} + \frac{a_{1,n+Q}}{i(n+Q)\kappa} e^{i(n+Q)\kappa s} + c.c. \right\} \mathbf{e}_3. \end{aligned} \quad (\text{C.47})$$

As equações finais estão escritas em dois blocos dados por:

$$\begin{pmatrix} -B \sin \kappa s + C \cos \kappa s \\ B \cos \kappa s + C \sin \kappa s \\ A \end{pmatrix} = -\sigma \rho' b \mathbf{x}^{(1)}, \quad (\text{C.48})$$

e

$$\begin{aligned} \rho \ddot{\beta}_1 + 2b \dot{\beta}_1 - \beta_1'' + \Gamma y \beta_2' - \Gamma \kappa \beta_3' &= (1 - \Gamma) \kappa^2 \beta_1 + g_2, \\ \rho \ddot{\beta}_2 + 2b \dot{\beta}_2 - \beta_2'' - \Gamma \gamma \beta_1' &= -g_1 + \Gamma \gamma \kappa \beta_3, \\ 2\rho \ddot{\beta}_3 + 4b \dot{\beta}_2 &= \Gamma \beta_3'' - \Gamma \kappa \beta_1', \end{aligned} \quad (\text{C.49})$$

onde A , B e C são dados por:

$$A \equiv \rho^2 \ddot{\beta}_1 + \rho b \dot{\beta}_1 - \rho g_2'' + \rho' g_2', \quad (\text{C.50})$$

$$\begin{aligned} B \equiv \rho^2 \ddot{\beta}_2 + \rho b \dot{\beta}_2 + \rho g_1'' + 2\rho \kappa g_3' - \Gamma \gamma \kappa \rho \beta_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \rho \beta_1' + \Gamma \gamma \kappa \rho' \beta_3' - \rho' g_1' \\ - \kappa^2 \rho g_1 + \kappa^3 \Gamma \gamma \rho \beta_3 - \Gamma \gamma \kappa^2 \rho' \beta_1 - \kappa \rho' g_3, \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

$$\begin{aligned} C \equiv \Gamma \gamma \kappa \rho \beta_1'' + \rho g_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \rho \beta_3' - 2\kappa \rho g_1' - \Gamma \gamma \kappa \rho' \beta_1' - \rho' g_3' - \kappa^2 \rho g_3 \\ - \kappa^3 \Gamma \gamma \rho \beta_1 - \Gamma \gamma \kappa^2 \rho' \beta_3 + \kappa \rho' g_1. \end{aligned} \quad (\text{C.52})$$

Estas são, portanto as equações que serão resolvidas numericamente para se

encontrar o efeito da variação da densidade de massa ao longo da corda na dinâmica pós-perturbação.

Apêndice D

Artigos publicados e submetidos à publicação

Neste Apêndice apresentaremos os artigos publicados e submetidos à publicação correspondentes aos resultados deste trabalho de tese. Na ordem, estão impressos o artigo da referência [31] (Physical Review E**63**, art. n. 016611, 2001) e, logo em seguida, o “preprint” do artigo da referência [57](submetido para publicação no Physical Review E). O primeiro corresponde aos resultados apresentados no capítulo 4 desta tese e o segundo corresponde ao capítulo 6. Lembramos que os resultados apresentados no capítulo 5 foram apresentados num congresso realizado nos Estados Unidos[56].

**Near equilibrium dynamics of non-homogeneous Kirchhoff
filaments in viscous media**
Physical Review E63 (2001) 016611

A.F. Fonseca and M.A.M. de Aguiar

*Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas, Unicamp,
13083-970, Campinas, São Paulo, Brasil*

Abstract

We study the near equilibrium dynamics of non-homogeneous elastic filaments in viscous media using the Kirchhoff model of rods. Viscosity is incorporated in the model as an external force, that we approximate by the resistance felt by an infinite cylinder immersed in a slowly moving fluid. We use the recently developed method of Goriely and Tabor [1,2] to study the dynamics in the vicinity of the simplest equilibrium solution for a closed rod with non-homogeneous distribution of mass, namely, the planar ring configuration. We show that small variations of the mass density along the rod is sufficient to couple the symmetric modes of the homogeneous rod problem, producing asymmetric deformations that modify substantially the dynamical coiling, even at quite low Reynolds number. The higher density segments of the rod tend to become more rigid and less coiled. We comment possible applications to DNA.

Typeset using REVTeX

I. INTRODUCTION

A rod, or filament, is a tridimensional object with two of its dimensions much smaller than the third, i.e., with its length much larger than its cross section. The study of the mechanical properties of rods is of interest in many fields of science. Examples are the motion of vortex tubes in hydrodynamics [3] and the shapes and dynamics of biomolecules [4–6] and bacterial fibers [7,8]. In engineering, the theory of rods has been applied to the study of sub-oceanic cables [9–11] and has led to important applications in the installation process and stability of optical fibers [12,13].

The dynamics of inextensible rods is governed by the Kirchhoff equations. These equations, to be described in detail in section 2, form a set of nine partial differential equations in the time and arc length of the rod, involving the force, torque and a triad of vectors describing the rod itself. These equations are the result of Newton’s second law for the linear and angular momentum applied to the thin body plus a linear constitutive relation between torque and twist. The Kirchhoff model holds true in the approximation of small curvatures of the rod, as compared to the radius of the local cross section.

In most of the cases found in the literature, thin elastic structures are modeled by uniform filaments. In some problems, however, it is important to take into account the non-uniformities of the structure, like its mass density or its bending and twisting stiffness. Going down to microscopic details, some authors [14–16] have applied the so-called Sequence Dependent Anisotropic Bendability models to study local bending of DNA. In these models, the rod is divided into small discs, each corresponding to a DNA base pair. The mechanical properties of the discs are assigned according to the base pair it is supposed to represent. This procedure, however, is computationally applicable only to small molecules.

In this work we give a step towards incorporating fine structure properties into the continuous rod model [17,1,2]. The main advantage of a continuous treatment of non-uniformities is that they can be included directly into the differential equations describing the dynamics, allowing for the modeling of long non-homogeneous filaments. In this article

we shall restrict ourselves to the study of *closed* rods whose *mass density* vary periodically, simulating either fine scale properties that have survived the large scale average or the binding of external particles to the filament. More specifically, we study the dynamics of such rods near their most simple equilibrium configuration, the so called planar ring solution.

Non-uniformities in the distribution of mass changes the local inertial forces. The effective role of these forces, however, depends crucially on the medium where the rod is immersed. In the case of biomolecules, for instance, inertial forces are not usually considered due to the very small values attained by the Reynolds number in typical biological media. Goldstein and Langer [6] developed a formalism to treat the case where inertial forces are totally discarded. In fact, inertial forces are irrelevant when compared to external forces like gravity or electromagnetic forces if the body is immersed in a very viscous fluid [18]. In this paper, however, we are concerned with internal forces. In particular we wish to answer the question of how a flexible polymer react when submitted to a large torsion if its mass distribution is non-uniform. In order to answer this question we generalize the Kirchhoff's equations to model rods immersed in viscous fluids. With these new equations we are able to study the balance between inertial forces, partly due to internal elastic forces, and viscous forces in the framework of the Kirchhoff rod model.

The dynamics in the vicinity of a homogeneous planar ring was first studied by Zajac [11], who showed the existence of perturbed solutions for the planar ring with total twist larger than a certain critical value. The Zajac solutions are similar to the (symmetric) normal modes of a string or membrane. In this work we show that the introduction of small periodic non-homogeneities into an initially uniform rod may produce important changes in the shape and symmetry of its near equilibrium dynamics, depending on the periodicity of the perturbation as compared to the linear instability modes (the Zajac modes) of the uniform rod. We also show that, if the total twist of the rod is relatively large, than, even at quite low Reynolds numbers, a non-homogeneous distribution of mass can change qualitatively the dynamics.

This work is organized as follow. In Section 2, we extend the Kirchhoff model for rods to

include mass non-uniformities and the viscous medium. Non-uniformities in the mass density can be easily included in the Kirchhoff equations, although it complicates the analysis of the near equilibrium dynamics. Viscous forces are incorporated as external forces. These are modeled by the resistance felt by an infinite cylinder in a slowly moving fluid (creeping motion) [19]. Non-uniform bending or twisting stiffness can also be introduced in the model, but that will be the subject of a future publication. In Section 3 we describe the famous *twisted planar ring equilibrium solution* of the Kirchhoff equations. In Section 4, we apply the method of Goriely and Tabor [2] to study the dynamics in the vicinity of the planar ring configuration for a homogeneous closed rod in a viscous medium. In Section 5, we consider the non-homogeneous rod and compare its dynamical evolution with the case of zero viscosity, for the same parameters used in Section 4. In Section 6, we apply this model to a closed DNA with 168 basepairs. At typical linking number deficit of 5% [21] this closed DNA is stable. But for a total twist deficit (or excess) of the order of 100% the near equilibrium dynamics of the DNA does feel the effects of the mass distribution even at realistic Reynolds numbers. In Section 7 we summarize our conclusions.

II. THE KIRCHHOFF MODEL FOR RODS IN A VISCOUS MEDIUM

The Kirchhoff model describes the dynamics of thin elastic filaments within the approximation of linear elasticity theory [17]. The Kirchhoff's equations result from the application of Newton's laws of mechanics to the thin rod, and consist of two equations describing the balance of force and angular momentum and a third equation containing a constitutive relationship of linear elasticity theory, relating moments to strains. These equations are non-linear and of difficult solution.

We introduce the Kirchhoff's model following closely the presentation of reference [17]. The classical conservation laws of linear and angular momentum for a tridimensional body of volume V and enclosed area A are:

$$\int_A \mathbf{p}_n dS + \int_V \mathbf{f} dV = \int_V \rho \ddot{\mathbf{X}} dV. \quad (1)$$

$$\int_A (\mathbf{X} \times \mathbf{p}_n) dS + \int_V (\mathbf{X} \times \mathbf{f}) dV = \int_V \rho (\mathbf{X} \times \ddot{\mathbf{X}}) dV. \quad (2)$$

where \mathbf{p}_n is the contact force per unit area exerted on the oriented surface element $d\mathbf{S} = \mathbf{n} dS$, ρ is the mass density and \mathbf{X} is the position with respect to a fixed origin. External forces per unit volume acting on the body are represented by the vector \mathbf{f} .

We want to apply these equations to the particular case of a rod. For that, we consider the rod as a thin tube whose axis is a smooth curve x in the 3-D space parametrized by arc length, s , and whose position depends on time: $\mathbf{x} = \mathbf{x}(s, t)$. A *local orthonormal basis*, (or *director basis*) $\mathbf{d}_i = \mathbf{d}_i(s, t)$, $i = 1, 2, 3$, is defined at each point of the curve, with \mathbf{d}_3 chosen as the tangent vector, $\mathbf{d}_3 = \mathbf{x}'$. In this paper we shall use primes to denote differentiation with respect to s and dots to denote differentiation with respect to time. The two orthonormal vectors, \mathbf{d}_1 and \mathbf{d}_2 , lie in the plane normal to \mathbf{d}_3 , for example along the principal axes of the cross section of the rod. We choose these vectors in such a way that $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3$ form a right-handed orthonormal basis for each value of s and t . The space and time evolution of the director basis along the curve are controlled by *spin* and *twist equations*

$$\mathbf{d}_i' = \mathbf{k} \times \mathbf{d}_i, \quad \dot{\mathbf{d}}_i = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{d}_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (3)$$

which follow from the orthonormality relations $\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j = \delta_{ij}$. The components of $\boldsymbol{\kappa}$ and $\boldsymbol{\omega}$ in the director basis are defined as $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 k_i \mathbf{d}_i$ and $\boldsymbol{\omega} = \sum_{i=1}^3 \omega_i \mathbf{d}_i$. k_1 and k_2 are the components of the curvature and k_3 is the twist density of the rod. The solution of the spin and twist equations determines $\mathbf{d}_3(s, t)$, which can be integrated to give the space curve $\mathbf{x}(s, t)$. The Kirchhoff model assumes that the filament is thin and weakly bent (*i.e.* its cross-section radius is much smaller than its length and its curvature at all points). In this approximation it is possible to derive a one-dimensional theory where forces and moments are averaged over the cross-sections perpendicular to the central axis (the curve \mathbf{x}) of the filament.

Let the material points on the rod be labeled by

$$\mathbf{X}(s, t) = \mathbf{x}(s, t) + \mathbf{r}(s, t), \quad (4)$$

where

$$\mathbf{r}(s, t) = x_1 \mathbf{d}_1(s, t) + x_2 \mathbf{d}_2(s, t). \quad (5)$$

gives the position of the point on the cross section \mathcal{S} , perpendicular to \mathbf{x}' , with respect to the central axis. The total force $\mathbf{F} = \mathbf{F}(s, t)$ and the total moment $\mathbf{M} = \mathbf{M}(s, t)$ on the cross section are defined by

$$\mathbf{F} = \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{p}_s dS. \quad (6)$$

$$\mathbf{M} = \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{r} \times \mathbf{p}_s dS, \quad (7)$$

where \mathbf{p}_s is the contact force per unit area exerted on the cross section \mathcal{S} . In terms of the director basis we write $\mathbf{F} = \sum_{i=1}^3 f_i \mathbf{d}_i$ and $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^3 M_i \mathbf{d}_i$.

In order to derive a set of equations describing the rod as a one-dimensional object, the rod is divided into thin discs of length ds and cross section $\mathcal{S}(s)$, and Eqs. (1) and (2) are applied to each of these discs. The result is

$$\mathbf{F}' + \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{f} dS = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho \ddot{\mathbf{X}} dS, \quad (8)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{x}' \times \mathbf{F} + \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{r} \times \mathbf{f} dS = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho \mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}} dS. \quad (9)$$

where we have written $dV = ds dS$ and used the fact that \mathbf{p}_n is non-zero only at the sections $\mathcal{S}(s)$ and $\mathcal{S}(s + ds)$.

In this article we are interested in the dynamics of rods immersed in viscous fluids. We therefore incorporate the viscous friction through the external force f . Assuming that the rod moves slowly in the fluid we approximate the resistance felt by the rod by that felt by an infinite cylinder in a viscous fluid flow. This is a well known result [19,20] and gives the resistance force per unit length in the direction of the flow as:

$$f_v = \frac{-4\pi\eta}{0.5 - c - \ln\left(\frac{UR\rho_m}{4\eta}\right)} U, \quad (10)$$

where η is the viscosity of the medium, R is the radius of the cylinder, ρ_m is the density of the medium, U is the velocity of the fluid with respect to the cylinder and c is the Euler's number. The ratio

$$\frac{UR\rho_m}{\eta} \quad (11)$$

is the Reynolds number R_e of the system.

Since viscous forces act only on the external surface of the rod, we impose that the total external force integrated on the volume to be the same as the force per unit length integrated on ds , i.e., $\int_V \mathbf{f}dV = \int_L \mathbf{f}_v ds$. We find that the external force in Eqs. (8) and (9) has to be written as

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_v \frac{\delta(r - R)}{2\pi r}, \quad (12)$$

Using Eqs. (4) and (5) and assuming that the rod has a uniform circular cross section of area A , Eqs. (8) and (9) can be simplified to yield:

$$\mathbf{F}'' - bA\dot{\mathbf{d}}_3 = \frac{\rho'(s)}{\rho(s)} (\mathbf{F}' - bA\dot{\mathbf{x}}) + \rho(s)A\ddot{\mathbf{d}}_3, \quad (13)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} - 2bI (\mathbf{d}_1 \times \dot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \dot{\mathbf{d}}_2) = \rho(s)I (\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2). \quad (14)$$

where I is the principal moment of inertia of the cross section and b is obtained from Eq. 10:

$$b = \frac{1}{A} \left(\frac{4\pi\eta}{0.5 - c - \ln \frac{R_e}{4}} \right). \quad (15)$$

Notice that Eq. 8 was differentiated with respect to s . In the case of constant mass density, $\rho' = 0$, this has the effect of removing \mathbf{x} from the system of equations, leaving only the director basis vectors as variables. To get rid of the $\dot{\mathbf{x}}$ in the term with ρ' , one has to differentiate this equation once more. We shall get back to this point later on.

In order to close the system of equations we need a *constitutive relation* relating the local forces and moments (stresses) to the elastic deformations of the body (strains). In linear

theory of elasticity, for a homogeneous elastic material, the stress is proportional to the deformation if this deformation is small. The Young's modulus (E) and the Shear modulus (μ) characterize the elastic properties of the material. Therefore, it is possible to obtain, for small deformation, a constitutive relation for the moment. In the director basis the relation is [17]:

$$\mathbf{M} = EI(k_1 - k_1^u) \mathbf{d}_1 + EI(k_2 - k_2^u) \mathbf{d}_2 + 2\mu I(k_3 - k_3^u) \mathbf{d}_3, \quad (16)$$

where k_i are the components of the twist vector and k_i^u are the components of the twist vector in the unstressed configuration. The case $k_i^u = 0$ corresponds to the case of a naturally straight and untwisted rod. We shall assume $k_i^u = 0$.

Eqs. (13), (14) and (16) can be further simplified by the introduction of scaled variables. We first write the mass density in the form

$$\rho = \rho_0(1 + \delta\rho) \quad (17)$$

where ρ_0 is constant and $\delta\rho$ carries the fluctuations of ρ along the rod. Following [1] we make the changes:

$$t \rightarrow t\sqrt{\frac{I\rho_0}{AE}}, \quad s \rightarrow s\sqrt{\frac{I}{A}}, \quad \mathbf{F} \rightarrow AE\mathbf{F}, \quad b \rightarrow \sqrt{\frac{AE\rho_0}{I}}b, \quad (18)$$

$$\mathbf{M} \rightarrow \mathbf{M}E\sqrt{AI}, \quad \kappa \rightarrow \kappa\sqrt{\frac{A}{I}}, \quad \omega \rightarrow \omega\sqrt{\frac{AE}{I\rho_0}}, \quad \rho \rightarrow \rho/\rho_0.$$

In the new variables the Kirchhoff equations become

$$\mathbf{F}'' - b\dot{\mathbf{d}}_3 = \frac{\rho'(s)}{\rho(s)}(\mathbf{F}' - b\dot{\mathbf{x}}) + \rho(s)A\ddot{\mathbf{d}}_3, \quad (19)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} - 2b(\mathbf{d}_1 \times \dot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \dot{\mathbf{d}}_2) = \rho(s)(\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2), \quad (20)$$

$$\mathbf{M} = k_1\mathbf{d}_1 + k_2\mathbf{d}_2 + \Gamma k_3\mathbf{d}_3. \quad (21)$$

where $\rho = 1 + \delta\rho$ is now a dimensionless function of arc length s and $\Gamma = 2\mu/E$ varies between $\frac{2}{3}$ (incompressible material) and 1 (hyperelastic material).

These nine equations form a set of nonlinear, partial differential equations of second order in time and in arc length for nine unknowns: force, moment and director basis vectors. The simplest stationary solution is the well known twisted planar ring [1], that we discuss briefly in the next section. In sections 4 to 6 we shall analyse the dynamics of rods near this equilibrium configuration following the proposition of Goriely and Tabor in reference [1]. In sections 4 and 5 we study the cases: i) $\rho = 1$ and $b = 0$; ii) $\rho = 1$ and $b \neq 0$; iii) $\rho = \rho(s)$ and $b = 0$; and iv) $\rho = \rho(s)$ and $b \neq 0$. Before we do that we briefly review the twisted planar ring solution.

III. THE PLANAR RING CONFIGURATION

The stationary solutions of Eqs. (19)-(21) are obtained by setting the time derivatives equal to zero in the first two of these equations:

$$\mathbf{F}'' - \frac{\rho'(s)}{\rho(s)}\mathbf{F}' = 0 \quad (22)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = 0 \quad (23)$$

The only acceptable solution of Eq. (22) is $F = \text{constant}$ (see the original Eq. (8)). Differentiating (21) with respect to s and using that $\mathbf{d}'_i = \mathbf{k} \times \mathbf{d}_i$ gives

$$\mathbf{M}' = [k'_1 + (\Gamma - 1)k_2k_3]\mathbf{d}_1 + [k'_2 - (\Gamma - 1)k_1k_3]\mathbf{d}_2 + \Gamma k'_3\mathbf{d}_3 \quad (24)$$

Replacing (24) in (23) and recalling that $\mathbf{F} = \sum f_i \mathbf{d}_i$ gives

$$\begin{aligned} k'_1 + (\Gamma - 1)k_2k_3 &= f_2 \\ k'_2 - (\Gamma - 1)k_1k_3 &= -f_1 \\ k'_3 &= 0 \end{aligned} \quad (25)$$

These equations can be solved in terms of Euler angles. Let \mathbf{e}_i be a set of orthonormal cartesian basis vectors and

$$\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^3 S_{ij} \mathbf{e}_j \quad (26)$$

with

$$S = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi \cos \psi - \sin \phi \sin \psi & \cos \theta \cos \phi \sin \psi + \sin \phi \cos \psi & -\cos \phi \sin \theta \\ -\cos \theta \sin \phi \cos \psi - \cos \phi \sin \psi & -\cos \theta \sin \phi \sin \psi + \cos \phi \cos \psi & \sin \phi \sin \theta \\ \sin \theta \cos \psi & \sin \theta \sin \psi & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (27)$$

In terms of the Euler angles θ , ϕ and ψ , Eqs. (25) become

$$\begin{aligned} \theta'' - (\psi')^2 \sin \theta \cos \theta + \Gamma \psi' (\phi' + \psi' \cos \theta) &= -(F_1 \cos \psi + F_2 \sin \psi) \cos \theta + F_3 \sin \theta \\ \psi'' \sin \theta + 2\psi' \theta' \cos \theta - \Gamma \theta' (\phi' + \psi' \cos \theta) &= F_1 \sin \psi - F_2 \cos \psi \\ \psi'' \cos \theta &= \psi' \theta' \sin \theta - \phi'' \end{aligned} \quad (28)$$

where we have defined $\mathbf{F} = \sum f_i \mathbf{d}_i = \sum F_i \mathbf{e}_i$ and used the relation $\mathbf{k} = \frac{1}{2} \sum \mathbf{d}_i \times \mathbf{d}'_i$.

The most simple solution to these equations is

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \Gamma \gamma \kappa \mathbf{e}_3 \\ \theta &= \pi/2 \\ \phi &= \gamma s + \pi/2 \\ \psi &= \kappa s \end{aligned} \quad (29)$$

for $0 \leq s \leq 2\pi/\kappa$. The director basis vectors in the cartesian basis are given by

$$\mathbf{d}_1 = \begin{pmatrix} -\cos \gamma s \sin \kappa s \\ \cos \gamma s \cos \kappa s \\ \sin \gamma s \end{pmatrix} \quad \mathbf{d}_2 = \begin{pmatrix} \sin \gamma s \sin \kappa s \\ -\sin \gamma s \cos \kappa s \\ \cos \gamma s \end{pmatrix} \quad \mathbf{d}_3 = \begin{pmatrix} \cos \kappa s \\ \sin \kappa s \\ 0 \end{pmatrix} \quad (30)$$

and the central curve is

$$\mathbf{x}(s) = \frac{1}{\kappa} (\sin \kappa s \mathbf{e}_1 - \cos \kappa s \mathbf{e}_2). \quad (31)$$

This solution is the famous planar ring configuration. The meaning of the integration constants γ and κ is clear: $R = 1/\kappa$ is the radius of the ring and $2\pi\gamma/\kappa$ is the total twist, i.e., the number of turns of the vectors \mathbf{d}_1 and \mathbf{d}_2 about the tangent vector \mathbf{d}_3 .

The twist and spin vectors can be readily computed and are given bellow, together with the expression for the force in the \mathbf{d}_i basis:

$$\begin{aligned}
\mathbf{k} &= \kappa \sin \gamma s \mathbf{d}_1 + \kappa \cos \gamma s \mathbf{d}_2 + \gamma \mathbf{d}_3 \\
&= \gamma \cos \kappa s \mathbf{e}_1 + \gamma \sin \kappa s \mathbf{e}_2 + \kappa \mathbf{e}_3 \\
\mathbf{F} &= \Gamma \gamma \kappa (\sin \gamma s \mathbf{d}_1 + \cos \gamma s \mathbf{d}_2) \\
&= \Gamma \gamma \kappa \mathbf{e}_3 \\
\omega &= 0
\end{aligned} \tag{32}$$

We remark that all stationary solutions of the Kirchhoff equations (19)-(21) are independent of b or any fluctuation that might exist in the distribution of mass along the rod. The dynamics, however, does depend on these elements. This means, for instance, that the rod may be driven to different equilibria if immersed in different media or had different mass distribution. We investigate the effects of viscosity and mass distribution in the next sections.

IV. EFFECT OF VISCOSITY IN THE HOMOGENEOUS ROD

As we mentioned in the Introduction, the effects of non-homogeneities in the mass distribution along a rod can be drastically reduced if the Reynolds number of the system is too small. In this section we shall study the effects of viscosity alone in the rod dynamics. Non-uniformities in the mass density will be treated in the next section. Here we shall adopt the analysis proposed by Goriely and Tabor [2] and focus on the time-dependent behavior of homogeneous rods in the vicinity of the planar ring equilibrium.

Goriely and Tabor present in great detail the method of linear analysis of Eqs. (19)-(21). Here we briefly summarize the main steps of the procedure. The basic idea is to expand the director basis (and all dynamical quantities related to the system) in terms of the director basis of the equilibrium position, the *unperturbed basis*.

Let $\mathbf{d}_i^{(0)}$, $i = 1, 2, 3$, be the solution of the stationary Kirchhoff equations for the twisted planar ring, Eq. (30). The perturbed basis, \mathbf{d}_i , is written as:

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{d}_i^{(0)} + \epsilon \mathbf{d}_i^{(1)} + O(\epsilon^2), \quad i = 1, 2, 3. \tag{33}$$

where ϵ is a small parameter. The corrections $\mathbf{d}_i^{(1)}$ are obtained from the Kirchhoff equations and from the requirement that the perturbed basis remains orthonormal to order ϵ , i.e. $\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j = \delta_{ij} + O(\epsilon^2)$. This implies that the vectors $\mathbf{d}_i^{(1)}$ can be written as

$$\mathbf{d}_i^{(1)} = \alpha \times \mathbf{d}_i^{(0)}, \quad (34)$$

where α is a vector to be determined. The perturbed rod can be reconstructed by integrating the tangent vector:

$$\mathbf{x}(s) = \int^s \mathbf{d}_3 ds = \int^s \left[\mathbf{d}_3^{(0)} + \epsilon \left(\alpha_2 \mathbf{d}_1^{(0)} - \alpha_1 \mathbf{d}_2^{(0)} \right) \right] ds. \quad (35)$$

All dynamical quantities are likewise expanded to first order in the perturbation parameter ϵ . For any such quantity \mathbf{G} we write

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \mathbf{G}^{(0)} + \epsilon \mathbf{G}^{(1)} + O(\epsilon^2) \\ &= (G_i^0 + \epsilon G_i^1) \mathbf{d}_i \end{aligned} \quad (36)$$

and, in terms of \mathbf{d}_i^0 ,

$$\mathbf{G}^{(0)} = \sum_i g_i^{(0)} \mathbf{d}_i^{(0)}, \quad (37)$$

$$\mathbf{G}^{(1)} = \sum_i \left(g_i^{(1)} + (\alpha \times \mathbf{G}^{(0)})_i \right) \mathbf{d}_i^{(0)}. \quad (38)$$

In this section we consider only the case of constant density, $\rho' = 0$ and $\rho = 1$. Applying this perturbation expansion to the Kirchhoff equations we obtain a system of six equations of second order in s and t for the six independent variables $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)}$:

$$\begin{aligned} \ddot{\alpha}_2 + b\dot{\alpha}_2 &= \left(f_1^{(1)} \right)'' - 2 \left(f_2^{(1)} \right)' k_3^{(0)} + 2 \left(f_3^{(1)} \right)' k_2^{(0)} - f_1^{(1)} \left((k_2^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2 \right) \\ &+ f_2^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} - (k_3^{(0)})' \right) + f_3^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} + (k_2^{(0)})' \right) \\ &+ f_1^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_3 - k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_2 - 2k_2^{(0)} \alpha_2' - 2k_3^{(0)} \alpha_3' - (k_2^{(0)})' \alpha_2 - (k_3^{(0)})' \alpha_3 \right) \\ &+ f_2^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_1 + \alpha_3 \left((k_2^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2 \right) + \alpha_1 (k_2^{(0)})' + 2\alpha_1' k_2^{(0)} - \alpha_3'' \right) \\ &+ f_3^{(0)} \left(-k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_1 - \alpha_2 \left((k_2^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2 \right) + \alpha_1 (k_3^{(0)})' + 2\alpha_1' k_3^{(0)} + \alpha_2'' \right) \\ &- 2 \left(f_1^{(0)} \right)' \left(k_2^{(0)} \alpha_2 + k_3^{(0)} \alpha_3 \right) + 2 \left(f_2^{(0)} \right)' \left(k_2^{(0)} \alpha_1 - \alpha_3' \right) \\ &+ 2 \left(f_3^{(0)} \right)' \left(k_3^{(0)} \alpha_1 + \alpha_2' \right) - \left(f_2^{(0)} \right)'' \alpha_3 + \left(f_3^{(0)} \right)'' \alpha_2, \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned}
-\ddot{\alpha}_1 - b\dot{\alpha}_1 &= \left(f_2^{(1)}\right)'' - 2\left(f_3^{(1)}\right)' k_1^{(0)} + 2\left(f_1^{(1)}\right)' k_3^{(0)} - f_2^{(1)} \left((k_1^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2\right) \\
&+ f_3^{(1)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} - (k_1^{(0)})'\right) + f_1^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} + (k_3^{(0)})'\right) \\
&+ f_2^{(0)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_1 - k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_3 - 2k_3^{(0)} \alpha_3' - 2k_1^{(0)} \alpha_1' - (k_3^{(0)})' \alpha_3 - (k_1^{(0)})' \alpha_1\right) \\
&+ f_3^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} \alpha_2 + \alpha_1 \left((k_1^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2\right) + \alpha_2 (k_3^{(0)})' + 2\alpha_2' k_3^{(0)} - \alpha_1''\right) \\
&+ f_1^{(0)} \left(-k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_2 - \alpha_3 \left((k_1^{(0)})^2 + (k_3^{(0)})^2\right) + \alpha_2 (k_1^{(0)})' + 2\alpha_2' k_1^{(0)} + \alpha_3''\right) \\
&- 2\left(f_2^{(0)}\right)' \left(k_3^{(0)} \alpha_3 + k_1^{(0)} \alpha_1\right) + 2\left(f_3^{(0)}\right)' \left(k_3^{(0)} \alpha_2 - \alpha_1'\right) \\
&+ 2\left(f_1^{(0)}\right)' \left(k_1^{(0)} \alpha_2 + \alpha_3'\right) - \left(f_3^{(0)}\right)'' \alpha_1 + \left(f_1^{(0)}\right)'' \alpha_3,
\end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned}
0 &= \left(f_3^{(1)}\right)'' - 2\left(f_1^{(1)}\right)' k_2^{(0)} + 2\left(f_2^{(1)}\right)' k_1^{(0)} - f_3^{(1)} \left((k_1^{(0)})^2 + (k_2^{(0)})^2\right) \\
&+ f_1^{(1)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} - (k_2^{(0)})'\right) + f_2^{(1)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} + (k_1^{(0)})'\right) \\
&+ f_3^{(0)} \left(k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_2 - k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_1 - 2k_1^{(0)} \alpha_1' - 2k_2^{(0)} \alpha_2' - (k_1^{(0)})' \alpha_1 - (k_2^{(0)})' \alpha_2\right) \\
&+ f_1^{(0)} \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_3 + \alpha_2 \left((k_1^{(0)})^2 + (k_2^{(0)})^2\right) + \alpha_3 (k_1^{(0)})' + 2\alpha_3' k_1^{(0)} - \alpha_2''\right) \\
&+ f_2^{(0)} \left(-k_1^{(0)} k_3^{(0)} \alpha_3 - \alpha_1 \left((k_1^{(0)})^2 + (k_2^{(0)})^2\right) + \alpha_3 (k_2^{(0)})' + 2\alpha_3' k_2^{(0)} + \alpha_1''\right) \\
&- 2\left(f_3^{(0)}\right)' \left(k_1^{(0)} \alpha_1 + k_2^{(0)} \alpha_2\right) + 2\left(f_1^{(0)}\right)' \left(k_1^{(0)} \alpha_3 - \alpha_2'\right) \\
&+ 2\left(f_2^{(0)}\right)' \left(k_2^{(0)} \alpha_3 + \alpha_1'\right) - \left(f_1^{(0)}\right)'' \alpha_2 + \left(f_2^{(0)}\right)'' \alpha_1.
\end{aligned} \tag{41}$$

$$\begin{aligned}
f_2^{(1)} + \ddot{\alpha}_1 + 2b\dot{\alpha}_1 &= -\alpha_3 f_1^{(0)} + \alpha_1 (1 - \Gamma) \left((k_2^{(0)})^2 - (k_3^{(0)})^2\right) \\
&- \alpha_2 (1 - \Gamma) \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} + (k_3^{(0)})'\right) (\Gamma - 2) \alpha_2' k_3^{(0)} + \Gamma \alpha_3' k_2^{(0)} + \alpha_1'',
\end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned}
-f_1^{(1)} + \ddot{\alpha}_2 + 2b\dot{\alpha}_2 &= -\alpha_3 f_2^{(0)} + \alpha_2 (1 - \Gamma) \left((k_1^{(0)})^2 - (k_3^{(0)})^2\right) \\
&- \alpha_1 (1 - \Gamma) \left(k_1^{(0)} k_2^{(0)} - (k_3^{(0)})'\right) - (\Gamma - 2) \alpha_1' k_3^{(0)} - \Gamma \alpha_3' k_1^{(0)} + \alpha_2'',
\end{aligned} \tag{43}$$

$$\begin{aligned}
2\ddot{\alpha}_3 + 4b\dot{\alpha}_3 - \Gamma \alpha_3'' &= \alpha_1 f_1^{(0)} + \alpha_2 f_2^{(0)} \\
&+ \alpha_1 (1 - \Gamma) \left((k_1^{(0)} k_3^{(0)} + (k_2^{(0)})'\right) + \alpha_2 (1 - \Gamma) \left(k_2^{(0)} k_3^{(0)} - (k_1^{(0)})'\right) \\
&- \Gamma \left(\alpha_1' k_2^{(0)} - \alpha_2' k_1^{(0)}\right).
\end{aligned} \tag{44}$$

In these equations $f_i^{(1)}$ is the term $g_i^{(1)}$ of Eq. (38) for $\mathbf{G} = \mathbf{F}$, and $f_i^{(0)}$ and $k_i^{(0)}$ are the i -th component of the force and the twist vector, respectively, in the equilibrium configuration.

These equations can be formally written as

$$L_E \left(k^{(0)}, f^{(0)} \right) \cdot \mu = 0 \quad (45)$$

where $\mu \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, f_1^{(1)}, f_2^{(1)}, f_3^{(1)})$ and L_E is a linear, second-order differential operator in s and t whose coefficients depend on s through the stationary solution $(k^{(0)}, f^{(0)})$.

For the planar ring solution, the vectors \mathbf{k} , ω and \mathbf{F} are given, in the $\mathbf{d}_i^{(0)}$ basis by, $k^{(0)} = (\kappa \sin \gamma s, \kappa \cos \gamma s, \gamma)$, $\omega^{(0)} = 0$ and $F^{(0)} = (\Gamma \gamma \kappa \sin \gamma s, \Gamma \gamma \kappa \cos \gamma s, 0)$, where γ is twist density, $\kappa = 1/R$ and R is the radius of the rod (see Eq. (32)). Eqs. (39) to (44) can be further simplified with the help of new variables [2]

$$\beta = R_\gamma \cdot \alpha, \quad (46)$$

and

$$g = R_\gamma \cdot f^{(1)} \quad (47)$$

where

$$R_\gamma = \begin{pmatrix} \cos \gamma s & -\sin \gamma s & 0 \\ -\sin \gamma s & -\cos \gamma s & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (48)$$

This transformation leads to an autonomous set of differential equations for β and g :

$$\begin{aligned} \ddot{\beta}_1 + b\dot{\beta}_1 &= g_2'', \\ \ddot{\beta}_2 + b\dot{\beta}_2 + g_1'' + 2\kappa g_3' - \Gamma \gamma \kappa \beta_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \beta_1' &= \kappa^2 g_1 - \kappa^3 \Gamma \gamma \beta_3, \\ \Gamma \gamma \kappa \beta_1'' + g_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \beta_3' - 2\kappa g_1' &= \kappa^2 g_3 + \kappa^3 \Gamma \gamma \beta_1, \\ \ddot{\beta}_1 + 2b\dot{\beta}_1 - \beta_1'' + \Gamma \gamma \beta_2' - \Gamma \kappa \beta_3' &= (1 - \Gamma) \kappa^2 \beta_1 + g_2, \\ \ddot{\beta}_2 + 2b\dot{\beta}_2 - \beta_2'' - \Gamma \gamma \beta_1' &= -g_1 + \Gamma \gamma \kappa \beta_3, \\ 2\ddot{\beta}_3 + 4b\dot{\beta}_3 &= \Gamma \beta_3'' - \Gamma \kappa \beta_1'. \end{aligned} \quad (49)$$

The general form of periodic solutions for β and g can be obtained in terms of a Fourier analysis:

$$\beta_j = e^{\sigma t} \left(a_j e^{i n \kappa s} + c.c. \right) \quad j = 1, 2, 3, \quad (50)$$

$$g_j = e^{\sigma t} (a_{j+3} e^{in\kappa s} + c.c.) \quad j = 1, 2, 3, \quad (51)$$

where *c.c.* stands for *complex conjugate*, n is an integer which defines the mode of the fundamental solutions and σ is the characteristic exponent of each mode. Substituting these expressions into the differential equations for β and g leads to a 6×6 linear system

$$L \cdot a = 0, \quad (52)$$

where

$$L = \begin{pmatrix} 2i\kappa^3\Gamma\gamma n & \sigma^2 + b\sigma & \kappa^3\Gamma\gamma(1+n^2) & -\kappa^2(1+n^2) & 0 & 2in\kappa^2 \\ -\sigma^2 - b\sigma & 0 & 0 & 0 & -n^2\kappa^2 & 0 \\ -\kappa^3\Gamma\gamma(1+n^2) & 0 & 2i\kappa^3\Gamma\gamma n & -2in\kappa^2 & 0 & -\kappa^2(1+n^2) \\ -\kappa^2(\Gamma+n^2-1) - \sigma^2 - 2b\sigma & -i\kappa\Gamma\gamma n & i\Gamma\kappa^2 n & 0 & 1 & 0 \\ i\kappa\Gamma\gamma n & -n^2\kappa^2 - \sigma^2 - 2b\sigma & \kappa\Gamma\gamma & -1 & 0 & 0 \\ -i\Gamma\kappa^2 n & 0 & -\Gamma n^2\kappa^2 - 2\sigma^2 + 4b\sigma & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (53)$$

The eigenvector corresponding to the null eigenvalue determines the coefficients a_j . The imposition that $\Delta \equiv \det L$ is zero determines σ . The determinant can be computed analytically and gives

$$\begin{aligned}
\Delta = & -2\kappa^2(n^4\kappa^2 - 2n^2\kappa^2 + n^2 + 1 + \kappa^2)(n^2\kappa^2 + 1)\sigma^6 \\
& -2b\kappa^2(6\kappa^4n^2(-1 + n^2)^2 + 4(1 + n^2) + 5\kappa^2(1 - n^2 + 2n^4))\sigma^5 \\
& -\kappa^2(2b^2(12\kappa^4n^2(-1 + n^2)^2 + 5(1 + n^2) + 8\kappa^2(1 - n^2 + 2n^4)) \\
& +\kappa^2n^2(2\Gamma\kappa^4 + 2n^4\Gamma\kappa^2 - 2\kappa^4 + \Gamma n^2 - 10n^4\kappa^4 + 3\Gamma\kappa^2 - 3\Gamma\kappa^4n^2 \\
& -4n^2\kappa^2 + 4n^6\kappa^4 + 8\kappa^4n^2 + \Gamma + \Gamma n^2\kappa^2 + 4n^4\kappa^2 + \Gamma n^6\kappa^4))\sigma^4 \\
& -b\kappa^2(4b^2(1 + n^2 + 4\kappa^4n^2(-1 + n^2)^2 + \kappa^2(2 - 2n^2 + 4n^4)) \\
& +\kappa^2n^2(4\kappa^2(-1 + n^2)(2\kappa^2 + 3n^2 - 6\kappa^2n^2 + 4\kappa^2n^4) \\
& +\Gamma(2 + 9\kappa^2 + 8\kappa^4 + 2n^2 + 3\kappa^2n^2 - 12\kappa^4n^2 + 6\kappa^2n^4 + 4\kappa^4n^6)))\sigma^3 \\
& -\kappa^4n^2(\kappa^4n^2(-1 + n^2)(2\kappa^2 - \Gamma\kappa^2 + 2\Gamma n^2 - 4\kappa^2n^2 - \Gamma\kappa^2n^2 \\
& +2\kappa^2n^4 + 2\Gamma\kappa^2n^4 - 2\gamma^2\Gamma^2(-1 + n^2)) + b^2(8\kappa^2(-1 + n^2)(\kappa^2 + n^2 - 3\kappa^2n^2 \\
& +2\kappa^2n^4) + \Gamma(1 + 6\kappa^2 + 8\kappa^4 + n^2 + 2\kappa^2n^2 - 12\kappa^4n^2 + 4\kappa^2n^4 + 4\kappa^4n^6)))\sigma^2 \\
& +2b\kappa^8n^4(-1 + n^2)(-\Gamma n^2 + 2\gamma^2\Gamma^2(-1 + n^2) \\
& -\kappa^2(-1 + n^2)(-2 + \Gamma + 2n^2 + 2\Gamma n^2))\sigma \\
& +\Gamma\kappa^{10}n^6(-1 + n^2)^2(\gamma^2\Gamma^2 - \kappa^2(-1 + n^2)).
\end{aligned} \tag{54}$$

Solutions with real positive σ identify the unstable modes. These are the most relevant modes, since they grow exponentially even for small perturbations. Although the general solution of the equations of motion is a linear combination of these modes, the one with the largest exponent dominates the dynamics and we call it *the principal mode*.

If we set $b = 0$ we recover the *dispersion relation* that is presented in reference [2]. We see that the viscosity do not change the critical value of the twist Tw for which the stationary solution first becomes unstable. Setting $\sigma = 0$ in the above relation we obtain:

$$Tw = \frac{\gamma}{\kappa} = \pm \frac{\sqrt{n^2 - 1}}{\Gamma} \tag{55}$$

which is independent of b . The lowest mode for which we have a unstable solution is $n = 2$ and this leads to Zajac's critical twist: $Tw_c = \sqrt{3}/\Gamma$ [11].

In Figure 1 we see typical plots of σ versus n for $b = 0, 5$ and 10 with the same parameters used by Goriely and Tabor [2], namely, $\kappa = 2$, $\gamma = 15$ and $\Gamma = 1$. In all cases we see that the maximum value for σ corresponds to the mode $n = 4$. This mode, for the above parameters

is, then, the *principal mode*. For large n all modes are damped. Notice that $\sigma(n = 4)$ decreases with b . Figure 2 shows on the left the principal mode $n = 4$ for $b = 0$. In this figure the rod has been slightly moved from its unstable equilibrium position and evolved according to the linearized equations for a (scaled) time $t = 1.0$. For $b \neq 0$ the shape of the evolved rod is identical to that shown in this figure for $b = 0$. The only effect of the viscous medium is to slow down the dynamics. At $b = 5$, for instance, it takes $t = 1.86$ to reach the same configuration and for $b = 10$ it takes $t = 3.0$. The shape is symmetric with respect to rotations of $\pi/2$ about the z-axis for all values of b .

The component k_3 of the twist vector is the twist density, $\gamma_p(s)$, along the closed rod in the perturbed configuration. The expression for $\gamma_p(s)$ is:

$$\gamma_p(s) = \gamma + \epsilon \left(\alpha'_3 + \alpha_2 k_1^{(0)} - \alpha_1 k_2^{(0)} \right). \quad (56)$$

Using equations (46), (47) and (48) this can be written as:

$$\gamma_p(s) = \gamma + \epsilon (\beta'_3 - \kappa \beta_1). \quad (57)$$

It is interesting to calculate the so called *Linking Number* Lk of the perturbed closed rod. The White's formula defines [22,23] the Lk as

$$Lk = Tw + W, \quad (58)$$

where Tw is the *Total Twist* of the rod,

$$Tw = \frac{1}{2\pi} \int_0^L k_3(s) ds, \quad (59)$$

and W is the *Writhing Number* of a closed space curve. Despite the existence of an explicit formula for the writhing number [22] of any space curve, we calculate it using the White's formula (58) because of the topological invariance of the linking number, i. e., the linking number is a constant for closed rods. Thus, the linking number of the unperturbed configuration (planar ring) is the sum of its total twist and its writhing number. The writhing number of a planar ring is zero [23]:

$$W^{(0)} = 0. \quad (60)$$

The total twist is calculated using the Eq. (59) and for $k_3^{(0)} = \gamma$ and $L = \frac{2\pi}{\kappa}$. We obtain

$$Tw^{(0)} = \frac{\gamma}{\kappa}. \quad (61)$$

Then, the linking number is:

$$Lk = Tw^{(0)} + W^{(0)} = \frac{\gamma}{\kappa}. \quad (62)$$

We now can calculate the total twist of the perturbed configuration through the Eq. (57). Since the $\beta_i(s)$ are oscillatory functions of the arc length s (see the Eqs. (50) and (51)) the integral in Eq. (59) is null for the term in order $O(\epsilon)$ and the total twist of the perturbed rod is the same of the planar ring:

$$Tw = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\kappa}} \gamma_p(s) ds = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\kappa}} \gamma ds = \frac{\gamma}{\kappa}. \quad (63)$$

The writhing number of the perturbed rod is:

$$W = Lk - Tw = 0. \quad (64)$$

Therefore, we choose the twist density, as a function of arc length s , as the main quantity to show how each cross section deforms along the closed rod. Figure 2 shows on the right that the twist density $\gamma_p(s)$ has also period $\pi/2$, as we could guess from the shape of the rod on the left.

V. EFFECT OF VISCOUSITY IN THE NON-HOMOGENEOUS ROD

After having studied how the viscosity affects the near equilibrium dynamics of the twisted planar ring we introduce non-uniformities in the rod, allowing for small variations in the mass density ρ , simulating either fine scale properties that have survived the large scale limit or the binding of external particles to the filament. For closed rods ρ must be a periodic function of s . Here we consider only the simplest type of periodic dependence, namely,

$$\rho(s) = 1 + \zeta \cos Q\kappa s \quad (65)$$

where ζ is the perturbation amplitude ($\zeta \ll 1$) and Q is an integer parameter that fixes the number of complete oscillations of the density along the rod length $L = 2\pi/\kappa = 2\pi R$ (see Eq. (17) .

We start from Eqs. (19)-(21). Since $\rho(s) \neq 0$ we multiply Eq. (19) by $\rho(s)$:

$$\rho \mathbf{F}'' - \rho b \dot{\mathbf{d}}_3 = \rho' (\mathbf{F}' - b \dot{\mathbf{x}}) + \rho^2 \ddot{\mathbf{d}}_3. \quad (66)$$

We re-write the other two Kirchhoff equations for the sake of clarity:

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} - 2b (\mathbf{d}_1 \times \dot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \dot{\mathbf{d}}_2) = \rho(s) (\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2), \quad (67)$$

$$\mathbf{M} = k_1 \mathbf{d}_1 + k_2 \mathbf{d}_2 + \Gamma k_3 \mathbf{d}_3. \quad (68)$$

Let us first study the case $b = 0$. Eqs. (66) and (67) become:

$$\rho \mathbf{F}'' = \rho' \mathbf{F}' + \rho^2 \ddot{\mathbf{d}}_3, \quad (69)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = \rho(s) (\mathbf{d}_1 \times \ddot{\mathbf{d}}_1 + \mathbf{d}_2 \times \ddot{\mathbf{d}}_2). \quad (70)$$

Following the same steps of Section 3 we obtain the equations for g_i and β_i for this case:

$$\begin{aligned} \rho^2 \ddot{\beta}_1 - \rho g_2'' + \rho' g_2' &= 0, \\ \rho^2 \ddot{\beta}_2 + \rho g_1'' + 2\rho \kappa g_3' - \Gamma \gamma \kappa \rho \beta_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \rho \beta_1' + \Gamma \gamma \kappa \rho' \beta_3' - \rho' g_1' &= \\ &= \kappa^2 \rho g_1 - \kappa^3 \Gamma \gamma \rho \beta_3 + \Gamma \gamma \kappa^2 \rho' \beta_1 + \kappa \rho' g_3, \\ \Gamma \gamma \kappa \rho \beta_1'' + \rho g_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \rho \beta_3' - 2\kappa \rho g_1' - \Gamma \gamma \kappa \rho' \beta_1' - \rho' g_3' &= \\ &= \kappa^2 \rho g_3 + \kappa^3 \Gamma \gamma \rho \beta_1 + \Gamma \gamma \kappa^2 \rho' \beta_3 - \kappa \rho' g_1, \\ \rho \ddot{\beta}_1 - \beta_1'' + \Gamma \gamma \beta_2' - \Gamma \kappa \beta_3' &= (1 - \Gamma) \kappa^2 \beta_1 + g_2, \\ \rho \ddot{\beta}_2 - \beta_2'' - \Gamma \gamma \beta_1' &= -g_1 + \Gamma \gamma \kappa \beta_3, \\ 2\rho \ddot{\beta}_3 &= \Gamma \beta_3'' - \Gamma \kappa \beta_1' \end{aligned} \quad (71)$$

For the case of constant density this constitutes a set of autonomous differential equations for β and g . In the present case these equations are still non-autonomous, since $\rho = \rho(s)$. However, the general form of periodic solutions for β and g can still be obtained as a linear combination of Fourier components:

$$\beta_j = e^{\sigma t} \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_{j,n} e^{in\kappa s} + c.c. \right) \quad j = 1, 2, 3, \quad (72)$$

$$g_j = e^{\sigma t} \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_{j+3,n} e^{in\kappa s} + c.c. \right) \quad j = 1, 2, 3. \quad (73)$$

where *c.c.* stands for *complex conjugate* and σ is characteristic exponent of the solution. Substituting these expressions into the differential equations for β and g leads to an infinite dimensional linear system whose matrix is composed of 6×6 blocks labeled by n . Once again, the imposition that the determinant of this matrix is zero determines σ , and the eigenvector corresponding to the null eigenvalue determines the coefficients $a_{j,n}$. If we set the density perturbation parameter ζ to zero, these blocks decouple from each other and the results of ref. [2] are recovered. For nonzero ζ the block n couples to the blocks $n \pm Q$, $n \pm 2Q, \dots$, etc (see Eqs. (65) and (69)). Each previously decoupled mode n changes into a new, modified mode. In order to find this new mode n numerically we have considered only the two nearest blocks to n , namely, $n - Q$ and $n + Q$, reducing the system to a set of 18 linear equations. In this approximation all terms in ζ^2 are neglected.

Before we show the numerical results for this case, let us consider the general situation where $b \neq 0$. In this case, Eq. (66) presents a technical problem, since it has a term proportional to $\dot{\mathbf{x}}$. The vector \mathbf{x} is the space curve of the rod, with the property that $\mathbf{x}' = \mathbf{d}_3$. One possible approach to treat this equation is to differentiate it once more with respect to s and write it entirely in terms of the \mathbf{d}_i vectors. This, however, leads to third order derivatives of F and introduces spurious solutions that are hard to control. To avoid these complications, we opt for writing Eq. (66) in the fixed cartesian basis $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$. For that, we use the relation between the vectors $\mathbf{d}_i^{(0)}$ and \mathbf{e}_i given by Eqs. (26), (27) and (29).

To calculate $\dot{\mathbf{x}}$ we consider Eq. (35)

$$\mathbf{x}(s) = \int^s \mathbf{d}_3 ds = \int^s \left[\mathbf{d}_3^{(0)} + \epsilon \left(\alpha_2 \mathbf{d}_1^{(0)} - \alpha_1 \mathbf{d}_2^{(0)} \right) \right] ds \equiv \mathbf{x}^0(s) + \mathbf{x}^1(s) \quad (74)$$

where α_i is written in terms of β_i using Eq. (46)

$$\alpha_1 = -\beta_2 \cos \gamma s - \beta_1 \sin \gamma s, \quad (75)$$

$$\alpha_2 = \beta_1 \cos \gamma s - \beta_2 \sin \gamma s. \quad (76)$$

Using the series expansion for β and g , Eqs. (72) and (73), we can perform the integral in Eq. (74) explicitly. We obtain the following result for $\mathbf{x}^{(1)}$, considering only the two nearest exponents to n , namely, $n - Q$ and $n + Q$:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)}(s) = & \frac{e^{\sigma t}}{2} \left\{ -\frac{a_{2,n-Q}}{(n-Q+1)\kappa} e^{i(n-Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n-Q}}{(n-Q-1)\kappa} e^{i(n-Q-1)\kappa s} - \frac{a_{2,n}}{(n+1)\kappa} e^{i(n+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n}}{(n-1)\kappa} e^{i(n-1)\kappa s} \right. \\ & \left. - \frac{a_{2,n+Q}}{(n+Q+1)\kappa} e^{i(n+Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n+Q}}{(n+Q-1)\kappa} e^{i(n+Q-1)\kappa s} + c.c. \right\} \mathbf{e}_1 \\ & - \frac{e^{\sigma t}}{2} \left\{ \frac{a_{2,n-Q}}{i(n-Q+1)\kappa} e^{i(n-Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n-Q}}{i(n-Q-1)\kappa} e^{i(n-Q-1)\kappa s} + \frac{a_{2,n}}{i(n+1)\kappa} e^{i(n+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n}}{i(n-1)\kappa} e^{i(n-1)\kappa s} \right. \\ & \left. + \frac{a_{2,n+Q}}{i(n+Q+1)\kappa} e^{i(n+Q+1)\kappa s} + \frac{a_{2,n+Q}}{i(n+Q-1)\kappa} e^{i(n+Q-1)\kappa s} + c.c. \right\} \mathbf{e}_2 \\ & + e^{\sigma t} \left\{ \frac{a_{1,n-Q}}{i(n-Q)\kappa} e^{i(n+Q)\kappa s} + \frac{a_{1,n}}{i n \kappa} e^{i n \kappa s} + \frac{a_{1,n+Q}}{i(n+Q)\kappa} e^{i(n+Q)\kappa s} + c.c. \right\} \mathbf{e}_3. \end{aligned} \quad (77)$$

Then, $\dot{\mathbf{x}}^{(1)} = \sigma \mathbf{x}^{(1)}$. To write the other terms of Eq. (66) in the $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ basis we define the following quantities:

$$A \equiv \rho^2 \ddot{\beta}_1 + \rho b \dot{\beta}_1 - \rho g_2'' + \rho' g_2', \quad (78)$$

$$\begin{aligned} B \equiv & \rho^2 \ddot{\beta}_2 + \rho b \dot{\beta}_2 + \rho g_1'' + 2\rho \kappa g_3' - \Gamma \gamma \kappa \rho \beta_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \rho \beta_1' + \Gamma \gamma \kappa \rho' \beta_3' - \rho' g_1' \\ & - \kappa^2 \rho g_1 + \kappa^3 \Gamma \gamma \rho \beta_3 - \Gamma \gamma \kappa^2 \rho' \beta_1 - \kappa \rho' g_3, \end{aligned} \quad (79)$$

$$\begin{aligned} C \equiv & \Gamma \gamma \kappa \rho \beta_1'' + \rho g_3'' + 2\kappa^2 \Gamma \gamma \rho \beta_3' - 2\kappa \rho g_1' - \Gamma \gamma \kappa \rho' \beta_1' - \rho' g_3' - \kappa^2 \rho g_3 \\ & - \kappa^3 \Gamma \gamma \rho \beta_1 - \Gamma \gamma \kappa^2 \rho' \beta_3 + \kappa \rho' g_1. \end{aligned} \quad (80)$$

The new three equations for the case $\rho' \neq 0$ and $b \neq 0$ are the three components of the following vector equation:

$$\begin{pmatrix} -B \sin \kappa s + C \cos \kappa s \\ B \cos \kappa s + C \sin \kappa s \\ A \end{pmatrix} = -\sigma \rho' b x^{(1)}. \quad (81)$$

To complete the set of equations we add the last three of Eqs. (71), modified by the addition of terms proportional to b :

$$\begin{aligned} \rho \ddot{\beta}_1 + 2b \dot{\beta}_1 - \beta_1'' + \Gamma y \beta_2' - \Gamma \kappa \beta_3' &= (1 - \Gamma) \kappa^2 \beta_1 + g_2, \\ \rho \ddot{\beta}_2 + 2b \dot{\beta}_2 - \beta_2'' - \Gamma \gamma \beta_1' &= -g_1 + \Gamma \gamma \kappa \beta_3, \\ 2\rho \ddot{\beta}_3 + 4b \dot{\beta}_3 &= \Gamma \beta_3'' - \Gamma \kappa \beta_1' \end{aligned} \quad (82)$$

Since we only consider terms with exponents n , $n - Q$ and $n + Q$ in Eqs. (72) and (73), we again have a system of 18 equations for 18 variables $a_{j,p}$ with $j = 1$ to 6 and $p = n - Q, n, n + Q$.

Figure 3 shows the principal mode $n = 4$ for the parameters $\kappa = 2$, $\gamma = 15$, $\Gamma = 1$, $Q = 1$ and $b = 0, 5$ and 10 . For each value of b we show the effect of non-uniformities in the mass density for $\zeta = 0.03, 0.07$ and 0.10 . The time necessary for the unstable rod with $b \neq 0$ to attain the same amplitude as for $b = 0$ with $t = 1$ is obtained through the numerical relation $\sigma t = \sigma(b = 0)t(b = 0) = 7.46$. As b increases σ decreases and t , therefore, also increases. In all figures showing rods with non-homogeneous distribution of mass we use a grayscale along the rod to indicate the density: black represents places where the density is small, whereas white indicates regions of high density. For $\zeta = 0$ the shape is symmetric with respect to rotations of $\pi/2$ about the z-axis for all values of b as shown in Section 3. As the density gradient increases the $\pi/2$ symmetry is broken and the more massive regions of the rod tend to restore the original planar circular shape, decreasing the writhing. Notice that the substantial difference in the shapes of the figures from left to right is caused by a change of just ten percent in the local density. Nevertheless, when b becomes much larger than σ this effect is strongly dumped. For $b = 20$ (not shown) the effect of the non-uniform density is negligible.

Figure 4 shows the time evolution of the ring with $b = 0$ and $\zeta = 0.1$. It is clear from

this figure that, as time passes, the part of ring with lower mass density pops out of the plane and bends while the more massive part stays almost static. In this case, as in Section 3, the writhing number of these curves is null. Figure 5 shows the plot of the twist density $\gamma_p(s)$ versus arc length s for $\zeta = 0.1$ and $b = 0, 5,$ and 10 . In these plots we see the variation of the local twist density with the arc length s . The variation is smaller where the mass density is larger, but this effect decreases as b increases.

Figure 6 shows a rod with $b = 20$ and $\gamma = 30$, twice as twisted as before. We see that, now, the symmetry break occurs even at high viscosity, showing that the asymmetric deformation does not depends only on the medium but also on the applied stresses on the rod.

Figure 7 shows a much larger ring, with radius $R = 1/\kappa = 5$. Here, $\gamma = 15$, $\Gamma = 1$ and $b = 0$. In this case the principal mode is $n = 40$ and we show the effect of a periodic oscillation of the density with $Q = 10$. For the sake of clarity, only the central curve of the rod is drawn. The case $Q = 10$ replicates the effect shown in figure 3: each high density segment of the ring tends to a more flat position while the small density parts coil in large loops. Figure 8 shows the effect for $b = 5$ and $b = 10$.

We have also considered the case where the frequency of the density oscillations, Q , is much higher than the frequency of the last unstable mode, $\sqrt{1 + \Gamma\gamma^2/\kappa^2}$. In this case the ring behaves as if the density were constant. This is an interesting result that might be used as a quantitative criterion for neglecting the structural details of the filament and treat it as a uniform rod approach.

VI. APPLICATION TO DNA

In this section, we apply the theory described above to a circular DNA with 168 base pairs (bps) immersed in water. The choice of this system is motivated by a recent experiment by W. Han et al in short DNA rings [24], where sequences of base pairs with intrinsic bending tendency were synthesized. The rings were immersed in a solution containing Zn^{2+}

and/or Mg^{2+} . The authors found that the DNA rings were always stable in a pure Mg^{2+} solution, but exhibited *kinks* above a critical concentration of Zn^{2+} ions (either alone or in combination with Mg^{2+}). This experiment was analysed theoretically by Z. Haijun and O. Zhong-can [25] who showed that a possible explanation for these results is that the Zn^{2+} ions enhance the intrinsic curvature of the ring by binding directly to the base pairs, destabilizing the ring. The Mg^{2+} ions, on the other hand, have the opposite effect due to their binding to the phosphate back-bone.

Although the instabilities observed in these rings apparently originate from an excess of bending, and not from an excess of twist, we notice that the atomic mass of Zn is of the order of 10% of the total base pair mass (including the phosphates), while that of Mg is only about 4%. Therefore, the binding of Zn^{2+} ions to the DNA provides a neat example of the type of situation our model may describe. In what follows we wish to show that even at low Reynolds number, a sufficiently large stress, like a large twist, can enhance the effects of the inertial forces deriving from such a non-homogeneous distribution of mass.

The Reynolds number for DNA rings in water can be calculated from Eq. (11). The ratio η/ρ_m for water is $10^{-2}cm^2s^{-1}$ [18]. The radius of the cross section of the DNA is $R = 10\text{\AA}$. Assuming an average velocity U for the DNA of order $0.1\text{\AA}s^{-1}$, the Reynolds number becomes $Re = 10^{-14}$. Using the Eq. (15) we can calculate the constant b and we obtain $b \simeq 1.12 \times 10^{14}Nm^{-1}s$.

The next step is to apply Eqs.(18) to obtain scaled variables. The scaled κ and b are given by $\kappa = \kappa_{esc}\sqrt{\frac{A}{I}}$ and $b = \sqrt{\frac{AE\rho_0}{I}}b_{esc}$. For a DNA of length 168 bps we have $L = 168 \times l_0$, where $l_0 = 3.3\text{\AA}$ is the length of a basepair [26]. Then $\kappa = \frac{2\pi}{L} \simeq 113 \times 10^6m^{-1}$. Since the ratio $\sqrt{\frac{A}{I}} = \sqrt{\frac{\pi R^2}{\pi R^4}} = \frac{2}{R} = \frac{1}{5\text{\AA}}$, we find $\kappa_{esc} = 0.057$. The mass density of the DNA is $\rho_0 = \frac{m_{bp}}{V_{disc}} = 929kgm^{-3}$ [26] and the Young's modulus $E = 4 \times 10^8Nm^{-2}$ [14], so that $b_{esc} = 0.098$. The dimensionless elastic parameter of the DNA can be taken as $\Gamma = 2/3$ [27]. Finally the twist density γ can be calculated from $\gamma_{esc} = Tw \kappa_{esc}$.

Most plasmids have linking numbers that are about 5% away from elastic equilibrium [21]. Since the B-form of DNA has an approximate twist of 10.5 bps per turn when relaxed,

we have $Lk \simeq 16$ for the DNA with 168 bps. From Eq. (55) we see that, even for $\Gamma = 1$, the minimum value of Tw for which the ring is unstable is $\sqrt{3} \simeq 1.73$ for the mode $n = 2$. On the other hand, 5% of $Tw = 16$ is $0.8 < \sqrt{3}$ and, therefore, this DNA minicircle is stable. Indeed, Zhou Haijun and Ou-Yang Zhong-can [25] showed that the kink deformations observed in this DNA are caused by bending, and not by twisting.

The effects of inertial forces, however, are better visualized on unstable rings. We therefore consider here an artificial excess of linking number equal to 16, corresponding to 100% of the natural twist, and a zero spontaneous curvature. Such a ring does not represent those in the experiment of ref. [24], but is just inspired by it.

Figure 9 shows on the left the plot of σ versus n for the above parameters. We see that the principal mode is $n = 8$. Figure 10 shows the principal mode of the perturbed DNA minicircle for various values of the perturbation amplitude ζ (0, 0.03, 0.07 and 0.1). We see that, despite the very low value of Reynolds number, the same effect produced by the inertial forces are the same as in section 5. The regions with larger mass density deform less than those with smaller densities. Figure 8 also shows on the right the twist density of the perturbed rod $\gamma_p(s)$. Again, the amplitude of variation of $\gamma_p(s)$ is of the same order as in the examples considered in section 5.

We finally notice that, although the theory in ref. [25] does account for the onset of instability of the DNA rings in the experiment of Han et al, it does not explain the asymmetric shapes exhibited by most of the kinked rings shown in ref. [24]. Our results suggest that this asymmetry is due to non-uniformities in the rings, either intrinsic or induced by the binding of ions.

VII. CONCLUSIONS

The Kirchhoff model of rods is a very powerful framework to study the dynamics of elastic filaments. It allows one to treat a large variety of situations where the rod might be subjected to external forces and non-homogeneities. In many cases of interest, including

biological molecules, the filaments are immersed in a viscous medium with small Reynolds number. In this work, we start from the general form of the Kirchhoff equations and we incorporate external viscous forces explicitly. In this framework, we have studied the balance between viscosity and the inertial forces induced by a non-homogeneous distribution of mass along the rod. We showed that the equations determining the equilibrium configurations are independent of both the viscosity and the mass distribution, although the dynamics does usually depend on these elements. Instead of solving the full nonlinear partial equations of the model, we restricted ourselves to the study of the dynamics in the vicinity of the simplest equilibrium configuration of the system, the so called twisted planar ring. This was done using the method developed by Goriely and Tabor. The results we obtained are summarized below.

The main effect of viscosity on a homogeneous rod, in the vicinity of the planar ring configuration, is to slow down motion. The unstable modes of the near equilibrium dynamics keep the same symmetry for all values of the viscous parameter b studied and the dynamics is almost identical to that without viscosity, only in slow motion.

This effect is also important for rods with varying mass density. In this case, however, the unstable modes of the homogeneous rod problem couple to each other and the shape of the rod changes qualitatively, breaking the symmetry of the individual modes. We observe that the higher density segments of the rod coil less than the lower density parts.

The inertial effects generated by the varying mass distribution competes, however, with those of the viscous forces. When the viscous parameter b is larger than the unstable exponent σ the symmetry break is negligible and the rod behaves just like a uniform filament in a very viscous medium. We found, however, that even at very low Reynolds number, a large value of the twist density of the rod tends to enhance the effect of the inertial forces, reviving the coupling between modes and the symmetry breaking. We therefore conclude that *the asymmetric deformations resulting from inertial forces induced by a non-uniform distribution of mass do not depend exclusively on the Reynolds number, but also on the applied stresses on the rod.*

As an interesting example, we applied our model to a DNA minicircle of 168 basepairs (bps) with zero intrinsic curvature and 100% of twisting excess. In DNA molecules, the difference in mass between the basepairs is always less than 0.5%. The DNA, therefore, has an approximate uniform mass density. Non-uniform mass distribution may, however, result from the binding of proteins [14,28,29] or ions [25] to the DNA. Since the interaction of DNAs with these particles are very important in processes like transcription, replication [26] and in the action of the repressors [30], our approach might bring new insights to the dynamics of these processes when the DNA is subjected to large stresses.

In macroscopic systems, like those found in engineering, the Reynolds number is much larger than those found in biological systems. The results described here are then directly applicable with $b \approx 0$. We finally notice that, when the frequency of oscillations in the mass density is larger than the last unstable mode, $n = \sqrt{1 + \Gamma\gamma^2/\kappa^2} \approx \sqrt{\Gamma}\gamma/\kappa$, the rod behaves as if the density was constant.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by the Brazilian agencies FAPESP, CNPq and FINEP. It is a pleasure to thank Prof. O. Teschke for his suggestions and critical reading of this manuscript.

REFERENCES

- [1] A. Goriely and M. Tabor, Phys. Rev. Lett. **77**, 3537 (1996)
- [2] A. Goriely and M. Tabor, Physica D **105** 20 (1997); Physica D **105**, 45 (1997).
- [3] J. P. Keener, J. Fluid Mech. **211**, 629 (1990). S. Da Silva and A.R. Chouduri, Astron. Astrophys. **272**, 621 (1993).
- [4] M. D. Barkley and B. H. Zimm, J. Chem. Phys. **70**, 2991 (1979); Y. Yang, I. Tobias and W. K. Olson, J. Chem. Phys. **98**, 1673 (1993); Y. Shi and J. E. Hearst, J. Chem. Phys. **101**, 5186 (1994); J. F. Marko and E. D. Siggia, Phys Rev. E **52**, 2912 (1995).
- [5] T. Schlick, Curr. Opin. Struct. Biol. **5**, 245 (1995). W. K. Olson, Curr. Opin. Struct. Biol. **6**, 242 (1996).
- [6] R. E. Goldstein and S. A. Langer, Phys. Rev. Lett. **75**, 1094 (1995);
- [7] C. W. Wolgemuth, T. R. Powers and R. E. Goldstein, Phys. Rev. Lett. **84**, 1623 (2000).
- [8] I. Kappler, J. Comput. Phys. **125**, 325 (1996).
- [9] J. Coyne, IEE Journal of Oceanic Engineering **15**, 72 (1990).
- [10] E. E. Zajac, Bell Sys. Tech. Journal **36**, 1129 (1957).
- [11] E. E. Zajac, Trans. ASME, 136 (1962).
- [12] Y. Sun and J. W. Leonard, Ocean Engineering **25**, 443 (1997).
- [13] M. A. Vaz and M. H. Patel, Appl. Ocean Res. **22**, 45 (2000).
- [14] M. M. Gromiha, M. G. Munteanu, I. Simon and S. Pongor, Bioph. Chem. **69**, 153 (1997).
- [15] M.G. Munteanu et al, TIBS **23**, 341 (1998).
- [16] R.S. Manning, J.H. Maddocks and J.D. Kahn, J. Chem. Phys. **105**, 5626 (1996).

- [17] E. H. Dill, Arch. Hist. Exact. Sci. **44**, 2 (1992). B. D. Coleman *et al.*, Arch Rational Mech. Anal. **121**, 339 (1993).
- [18] E. M. Purcell, Am. J. Phys. **45**, 3 (1977).
- [19] L. Landau and E. Lifchitz, *Mécanique des fluides*, Editions Mir, Moscow, 1971;
- [20] R. Kh. Zeytounian, *Les modèles asymptotiques de la mécanique des fluides II*, Lecture Notes in Physics, vol. 276, Springer-Verlag, 1987.
- [21] J. F. Marko and E. D. Siggia Phys. Rev. E **52**, 2912 (1995).
- [22] J. H. White, Am. J. Math. **91**, 693 (1969).
- [23] F. B. Fuller, Proc. Natl. Acad. USA **75**, 3557 (1978).
- [24] W. Han, S.M. Lindsay, M. Dlakic, and R.E. Harrington, Nature (London) **386**, 563 (1997); W. Han, M. Dlakic, Y.-J. Zhu, S.M. Lindsay and R.E. Harrington, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **94** 10565 (1997).
- [25] Zhou Haijun and Ou-Yang Zhong-can, J. Chem. Phys. **110**, 1247 (1999).
- [26] T. Lipniacki, Phys. Rev. E **60**, 7253 (1999).
- [27] M. E. Hogan and H. Austin, Nature **329**, 263 (1987).
- [28] R. A. Grayling, K. Sandman and J. Reeve, FEMS Microbiol. Rev. **18**, 203 (1996).
- [29] H. Robinson *et al.*, Nature **392**, 202 (1998).
- [30] A. Balaeff, L. Mahadevan and K. Schulten, Phys. Rev. Lett. **83**, 4900 (1999).

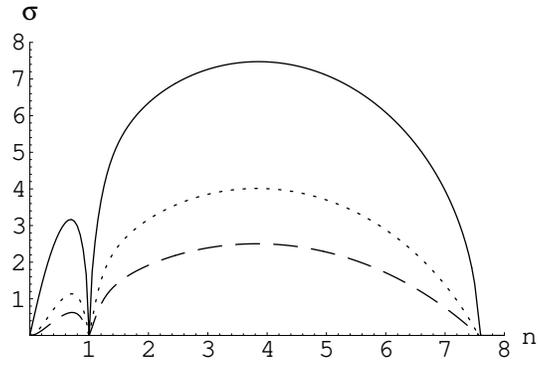


FIG. 1. σ versus n for a homogeneous rod with $b = 0$ (full line), $b = 5$ (dotted line) and $b = 10$ (dashed line). In all cases $\kappa = 2$, $\gamma = 15$ and $\Gamma = 1$.

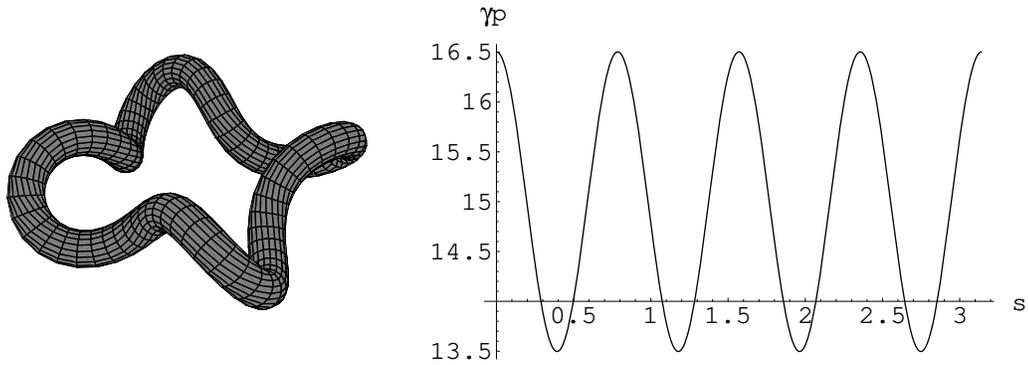


FIG. 2. Right: homogeneous rod with $\kappa = 2$, $\gamma = 15$, $\Gamma = 1$ and $b = 0$ evolved for $t = 1$. Left: twist density $\gamma_p(s)$ for the same rod.

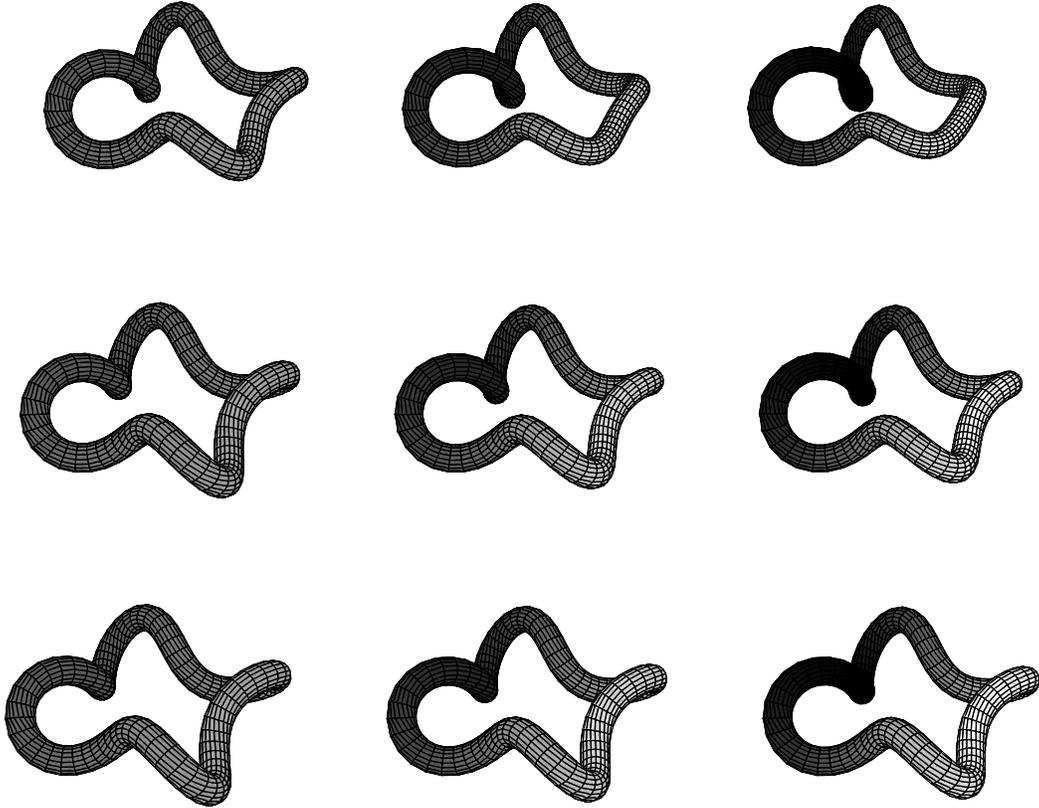


FIG. 3. Principal mode $n = 4$ for a rod with $\kappa = 2$, $\gamma = 15$, $\Gamma = 1$ and $Q = 1$. The viscous coefficient b is 0, 5 and 10 for the first, second and third lines respectively. Each line, from left to right, shows rods with non-uniformity parameter ζ equal to 0.03, 0.07 and 0.10. The evolution time in each case is $t = 1$ for $b = 0$, $t = 1.86$ for $b = 5$ and $t = 3.0$ for $b = 10$. The grayscale tones indicate the mass gradient along the rod, which is large when white and small when black.

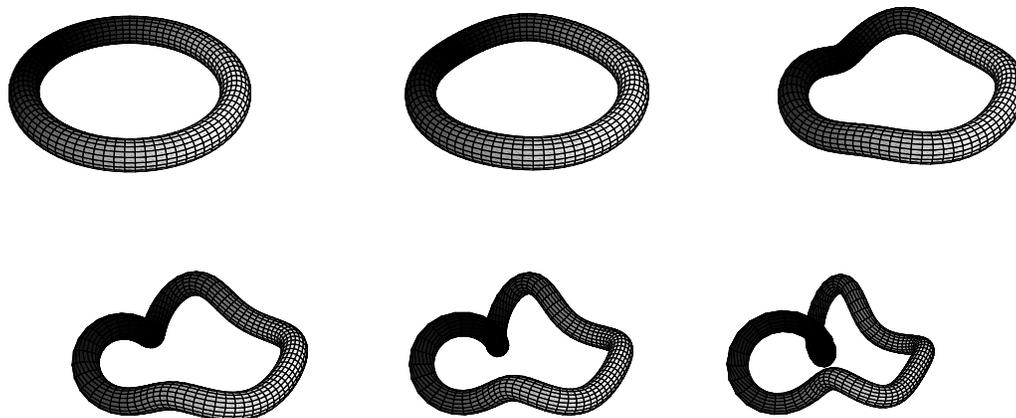


FIG. 4. *Time evolution of the principal mode $n=4$ for $\kappa = 2$, $\gamma = 15$, $Q = 1$ and $\zeta = 0.1$ (see rod on the right of the first line in figure 3). From top left to bottom right: (a) $t = 0$, (b) $t = 0.6$, (c) $t = 0.8$, (d) $t = 0.9$, (e) $t = 0.95$, (f) $t = 1$. The grayscale tones are the same as in figure 3.*

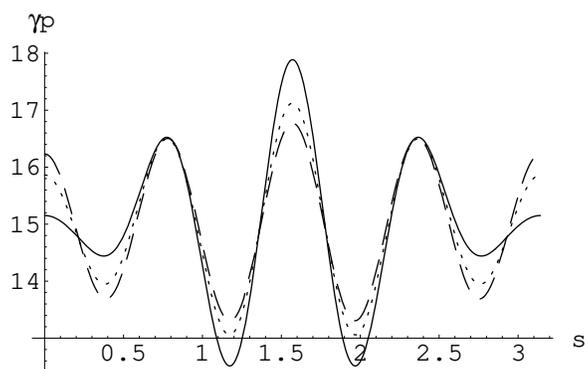


FIG. 5. *Twist density $\gamma_p(s)$ for $\zeta = 0.1$ and b equal 0, 5 and 10 (full, dotted and dashed lines respectively).*

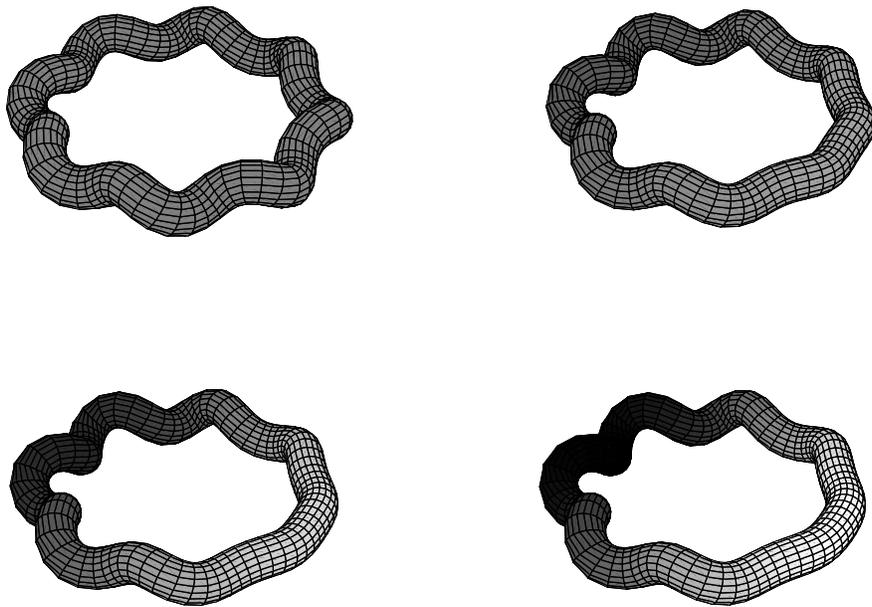


FIG. 6. Rod twice as twisted as those in previous figures. Here $\kappa = 2$, $\gamma = 30$, $Q = 1$, $t = 1.5$ and $b = 20$. The density parameter ζ , from top right to bottom left, is 0, 0.03, 0.07 and 0.10. The inertial effects would be invisible for $\gamma = 15$.

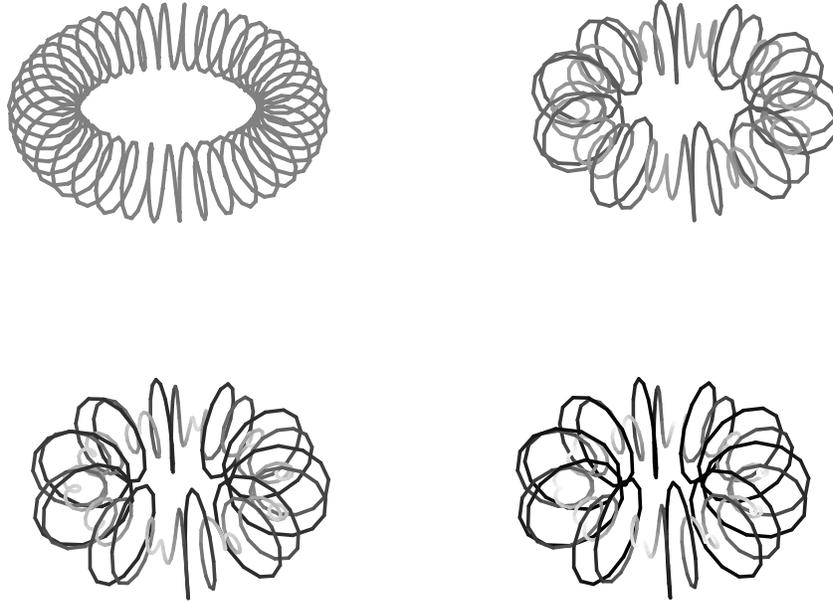


FIG. 7. Rings ten times larger than those in previous figures. Here $\kappa = 0.2$, $\gamma = 15$, $Q = 10$, $t = 1$, $b = 0$ and ζ , from top right to bottom left, is 0, 0.03, 0.07 and 0.10.

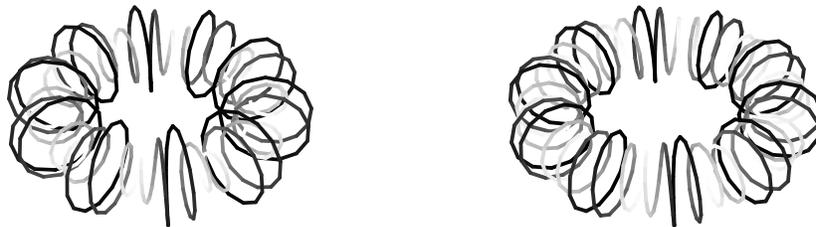


FIG. 8. Same as in figure 7 with $\zeta = 0.1$ and $b = 5$, $t = 1.86$ (left) and $b = 10$, $t = 3.0$ (right).

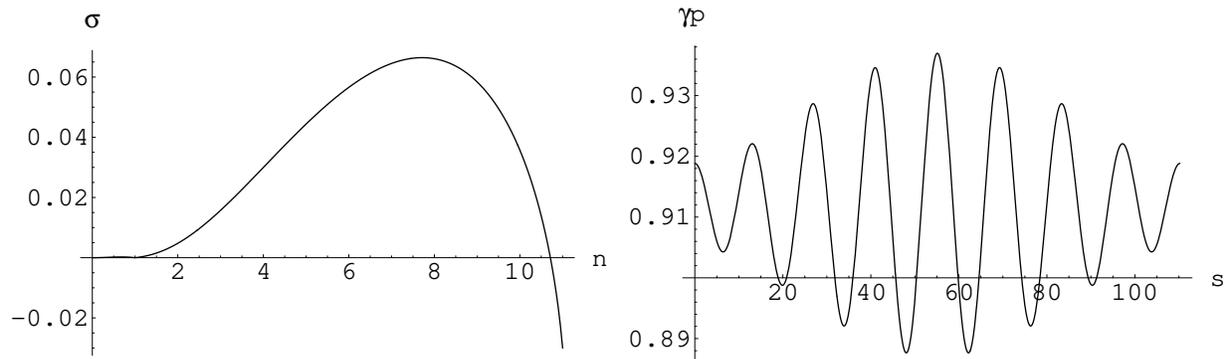


FIG. 9. *Right: σ versus n for a DNA ring with $\kappa = 0.057$, $\gamma = 16\kappa$ and $\Gamma = 2/3$. Left: twist density $\gamma_p(s)$ for this ring after a time $t = 70$ with $Q = 1$, $\zeta = 0.1$ and $b = 0.098$ (see next figure, bottom right).*

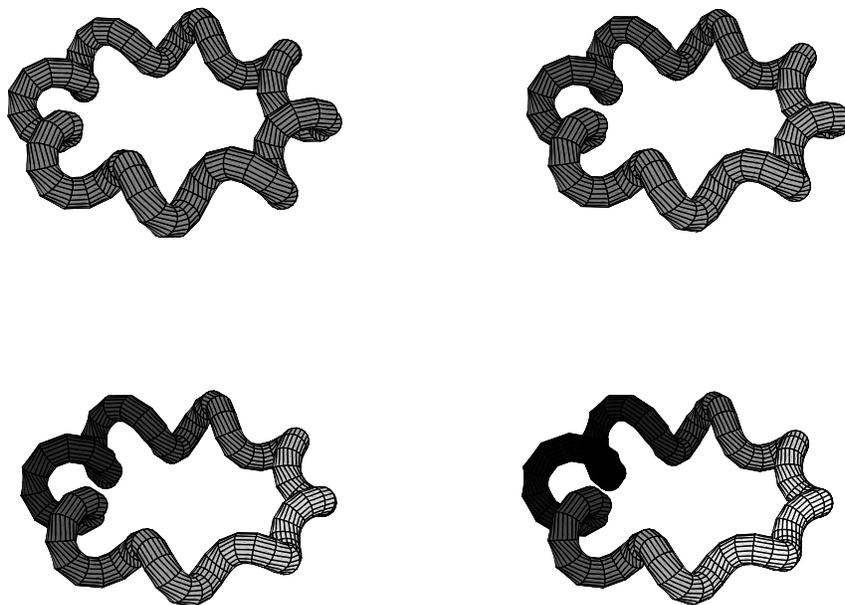


FIG. 10. *DNA ring with $b = 0.098$ evolved for $t = 70$ and mass non-uniformities of 0, 0.03, 0.07 and 0.10.*

Solving the boundary value problem for static Kirchhoff filaments

Physical Review E - submetido

A.F. da Fonseca and M.A.M. de Aguiar

Instituto de Física 'Gleb Wataghin',

Universidade Estadual de Campinas, Unicamp

13083-970, Campinas, SP, Brasil

Abstract

The Kirchhoff model describes the statics and dynamics of thin rods within the approximations of the linear elasticity theory. In this paper we develop a method to find the equilibrium configurations of such rods for given boundary conditions, where the end points are held fixed. The method consists in making a series of small changes on a *trial* solution satisfying the Kirchhoff equations but not the boundary conditions. We use the linearized dynamics to push the end point of the trial solution to the desired position, step by step. The method is also useful to find configurations of rods with fixed end points but different mechanical parameters, such as tension or components of the torque. We give several numerical examples using the parameters of DNA molecules.

PACS numbers: 02.60.Lj; 46.70.Hg; 87.15.He; 87.15.La

I. INTRODUCTION

The study of conformations of slender elastic rods is of substantial utility in several applications, ranging from the fields of structural mechanics and engineering to biochemistry and biology. Examples are the study of coiling and loop formation of sub-oceanic cables [1–4], filamentary structures of biomolecules [5–9] and bacterial fibers [10, 11] and the phenomenon of helix hand reversal in climbing plants [12].

The Kirchhoff model [13] provides a powerful approach to study the statics and dynamics of elastic thin rods [8, 14]. In this model the rod is described by a set of nine partial differential equations (the *Kirchhoff equations*) in the time and arclength of the rod. They contain the forces and torques plus a triad of vectors describing the deformations of the rod. These equations are the result of Newton’s second law for the linear and angular momentum applied to the thin rod plus a linear constitutive relationship between torque and twist. The Kirchhoff model holds true in the approximation of small curvatures of the rod, as compared to the radius of the local cross section [15]. An interesting characteristic of this model, known as *Kirchhoff kinetic analogy*, is that the equations governing the static problem are formally equivalent to the Euler equations describing the motion of spinning tops in a gravity field. The Kirchhoff equations for equilibrium configurations can, therefore, be written in Hamiltonian form.

The Kirchhoff equations have been solved for a number of simple situations. In the case of linear and circular rods Nizette and Goriely [16] obtained analytical equilibrium solutions. Goriely and Tabor [17, 18] developed a method to study the dynamical stability of these solutions and Fonseca and de Aguiar [19] applied this method to study the near equilibrium dynamics of nonhomogeneous closed rods in viscous media. Tobias *et al.* [20] developed the necessary and sufficient criteria for elastic stability of equilibrium configurations of closed rods.

In many cases of interest, including biological molecules, the filaments are subjected to boundary conditions. Examples are the problem of multiprotein structures, such as histones and gyrase, about which long pieces of DNA wrap [21], and multiprotein structures, such as the *lac repressor* complex [22]. Despite the many achievements described above, the study of the boundary value problem (BVP) associated with Kirchhoff filaments is still a big challenge. While the integration of differential equations from initial conditions is a relatively

simple numerical task, the difficulties of finding solutions for given boundary conditions is well known in classical mechanics, electromagnetism and quantum mechanics. Typical examples are classical trajectories connecting two given space points in the time t , electric potentials that vanish at given surfaces and eigenvalues of the Laplace operator defined inside a finite domain (quantum billiards). Because of the analogy with spinning tops, the case of trajectories of Hamiltonian systems is of particular interest here. The *monodromy method*, developed by Baranger and Davis [23] was designed specifically to find periodic solutions of Hamiltonian systems with N degrees of freedom. Xavier and de Aguiar [24] extended the method to find non-periodic trajectories with any given combination of $2N$ position and momenta at initial and/or final times.

In the case of Kirchhoff filaments, the BVP meets an extra difficulty, which is that the variables that one wants to hold fixed, the spatial position of the filament end points, are not the variables appearing in the differential equations describing the rod, which are Euler angles. The variables that are to be fixed are integrals of the dynamical variables.

In the case of open rods some specific cases were solved recently. Károlyi and Domokos [25], using symbolic dynamics, found global invariants for BVPs of elastic linkages, as natural discretization of continuous elastic beams, an old problem solved by Euler (see reference [25]). Gottlieb and Perkins [26] investigated spatially complex forms in a BVP governing the equilibrium of slender cable subject to thrust, torsion and gravity. Also, the criteria of Tobias *et al.* [20] was applied to linear segments subjected to *strong anchoring end conditions*, where not only the end points but also the tangent vector in its ends are held fixed. The dependence of DNA tertiary structure on end conditions was studied in [21], where explicit expressions for equilibrium configurations were obtained for a specific case with symmetric end conditions.

In this paper we develop a method to solve the BVP in the general case where the initial and final points of the rod are fixed. We do so by adapting the method of the monodromy matrix for non-periodic trajectories [24] to the Hamiltonian formulation of the static Kirchhoff equations. We show that there is a limitation in the possible solutions of this problem for given rod parameters, such as tension or length. As examples we consider the conformations of DNA molecules with a few hundreds of base pairs. The motivation for using the parameters of DNA's as examples comes both from experiments, where DNA molecules are manipulated by optical traps and atomic force microscopy [27–29], and from natural

situations, like the loops between multiprotein structures (such as the *lac* repressor-operator complex) [22, 30].

This work is organized as follows. In Sec. II we review the Kirchhoff equations and, in Sec. III, their Hamiltonian formulation. In Sec. IV we describe our method to solve the BVP and give some examples. In Sec. V we discuss the existence of solutions and the limitations of the method. In Sec. VI we apply the method to compare the equilibrium configurations of rods with the same end points but different mechanical parameters, such as tension or momentum. In Sec. VII we consider the equilibrium configurations of homogeneous and nonhomogeneous rods with the same end points and mechanical parameters. In Sec. VIII we summarize our conclusions.

II. THE KIRCHHOFF EQUATIONS

The Kirchhoff model describes the dynamics of inextensible thin elastic filaments within the approximation of linear elasticity theory [15]. They result from the application of Newton's laws of mechanics to a thin rod, and consist of two equations describing the balance of linear and angular momentum plus a constitutive relationship of linear elasticity theory, relating moments to strains. The Kirchhoff model assumes that the filament is thin and weakly bent (*i.e.* its cross-section radius is much smaller than its length and its curvature at all points). In this approximation it is possible to derive a one-dimensional theory where forces and moments are averaged over the cross-sections perpendicular to the central axis of the filament.

A thin tube can be described by a smooth curve \mathbf{x} in the 3D space parametrized by the arclength s , and whose position depends on the time: $\mathbf{x} = \mathbf{x}(s, t)$. A *local orthonormal basis*, (or *director basis*) $\mathbf{d}_i = \mathbf{d}_i(s, t)$, $i = 1, 2, 3$, is defined at each point of the curve, with \mathbf{d}_3 chosen as the tangent vector, $\mathbf{d}_3 = \mathbf{x}'$. In this paper we shall use primes to denote differentiation with respect to s and dots to denote differentiation with respect to time. The two orthonormal vectors, \mathbf{d}_1 and \mathbf{d}_2 , lie in the plane normal to \mathbf{d}_3 , for example along the principal axes of the cross section of the rod. These vectors are chosen such that $\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3\}$ form a right-handed orthonormal basis for all values of s and t . The space and time evolution of the director basis along the curve are controlled by *twist* and *spin equations*

$$\mathbf{d}_i' = \mathbf{k} \times \mathbf{d}_i, \quad \dot{\mathbf{d}}_i = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{d}_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (1)$$

which follow from the orthonormality relations $\mathbf{d}_i \cdot \mathbf{d}_j = \delta_{ij}$. The components of \mathbf{k} and ω in the director basis are defined as $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 k_i \mathbf{d}_i$ and $\omega = \sum_{i=1}^3 \omega_i \mathbf{d}_i$. k_1 and k_2 are the components of the curvature and k_3 is the twist density of the rod. The solution of the twist and spin equations determines $\mathbf{d}_3(s, t)$, which can be integrated to give the space curve $\mathbf{x}(s, t)$.

Let the material points on the rod be labeled by

$$\mathbf{X}(s, t) = \mathbf{x}(s, t) + \mathbf{r}(s, t), \quad (2)$$

where

$$\mathbf{r}(s, t) = x_1 \mathbf{d}_1(s, t) + x_2 \mathbf{d}_2(s, t) \quad (3)$$

gives the position of the point on the cross section $\mathcal{S}(s)$, perpendicular to $\mathbf{x}'(s)$, with respect to the central axis. The total force $\mathbf{F} = \mathbf{F}(s, t)$ and the total moment $\mathbf{M} = \mathbf{M}(s, t)$ (with respect to the axis of the rod) on the cross section are defined by

$$\mathbf{F} = \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{p}_s dS. \quad (4)$$

$$\mathbf{M} = \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{r} \times \mathbf{p}_s dS, \quad (5)$$

where \mathbf{p}_s is the contact force per unit area exerted on the cross section $\mathcal{S}(s)$. In terms of the director basis we write $\mathbf{F} = \sum_{i=1}^3 f_i \mathbf{d}_i$ and $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^3 M_i \mathbf{d}_i$.

In order to derive a set of equations describing the rod as a one-dimensional object, the rod is divided into thin discs of length ds and cross section $\mathcal{S}(s)$. To each of these discs the conservation laws of linear and angular momentum are applied [15]. The result is

$$\mathbf{F}' + \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{f}_{ext} dS = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho_0 \ddot{\mathbf{X}} dS, \quad (6)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{x}' \times \mathbf{F} + \int_{\mathcal{S}(s)} \mathbf{r} \times \mathbf{f}_{ext} dS = \int_{\mathcal{S}(s)} \rho_0 \mathbf{r} \times \ddot{\mathbf{X}} dS. \quad (7)$$

where \mathbf{f}_{ext} is an external force that will not be considered in our calculations ($\mathbf{f}_{ext} = 0$ in what follows).

In this article we are interested only in the equilibrium solutions and, therefore, we shall drop the derivatives with respect to time. Assuming that the rod has a uniform circular cross section of area A , Eqs. (6) and (7) can be simplified to yield

$$\mathbf{F}' = 0, \quad (8)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = 0 \quad (9)$$

which are a set of six equations for 9 variables: \mathbf{F} , \mathbf{M} and \mathbf{k} (from which we determine \mathbf{d}_i). In order to close the system of equations we need a *constitutive relation* relating the local forces and moments (stresses) to the elastic deformations of the body (strains). In the linear theory of elasticity, and for a homogeneous elastic material, the stress is proportional to the deformation. The Young's modulus E and the Shear modulus μ characterize the elastic properties of the material. Therefore, it is possible to obtain, for small deformations, a constitutive relation for the moment. In the director basis this relation is [15]:

$$\mathbf{M} = EI(k_1 - k_1^u) \mathbf{d}_1 + EI(k_2 - k_2^u) \mathbf{d}_2 + 2\mu I(k_3 - k_3^u) \mathbf{d}_3, \quad (10)$$

where I is the principal moment of inertia of the cross section, k_i are the components of the twist vector and k_i^u are the components of the twist vector in the unstressed configuration. The case $k_i^u = 0$ corresponds to a naturally straight and untwisted rod. We shall assume $k_i^u = 0$.

Eqs. (8), (9) and (10) can be further simplified by the introduction of scaled variables. Following [18] we make the changes:

$$s \rightarrow s\sqrt{\frac{I}{A}}, \quad \mathbf{F} \rightarrow AEF, \quad (11)$$

$$\mathbf{M} \rightarrow ME\sqrt{AI}, \quad \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}\sqrt{\frac{A}{I}}.$$

In the new variables the Kirchhoff equations become

$$\mathbf{F}' = 0, \quad (12)$$

$$\mathbf{M}' + \mathbf{d}_3 \times \mathbf{F} = 0, \quad (13)$$

$$\mathbf{M} = k_1 \mathbf{d}_1 + k_2 \mathbf{d}_2 + \Gamma k_3 \mathbf{d}_3. \quad (14)$$

where $\Gamma = 2\mu/E$ varies between $\frac{2}{3}$ (incompressible material) and 1 (hyperelastic material). From our assumption of a circular cross section it follows that $I = \pi a^4/4$ and $A = \pi a^2$, where a is the radius of the rod. Therefore, $\sqrt{A/I} = 2/a$, which means that the radius of the rod is 2 in the scaled variables.

III. HAMILTONIAN FORMULATION

In order to construct a Hamiltonian formulation of the Kirchhoff equations we first note that Eqs. (12)-(14) are integrable if E and μ are constant [16]. Eq. (12) shows that the tension \mathbf{F} is constant. Let us choose the direction of the force as the z direction:

$$\mathbf{F} = F \mathbf{e}_z. \quad (15)$$

In analogy to the spinning top, the tension \mathbf{F} corresponds to the gravity field $-mg$. Here, F can be considered as an external parameter and not as a first integral. Substituting Eq. (15) in Eq. (13) and projecting along \mathbf{e}_z we get

$$\mathbf{M}' \cdot \mathbf{e}_z \equiv M'_z = 0 \quad (16)$$

which does represent a first integral. By projecting the Eq. (13) along \mathbf{d}_3 we obtain another integral, M_3 , since

$$\mathbf{M}' \cdot \mathbf{d}_3 \equiv M'_3 = 0. \quad (17)$$

Finally, it is also possible to show that the elastic energy per unit arclength

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot \mathbf{k} + \mathbf{F} \cdot \mathbf{d}_3 \quad (18)$$

is constant, i.e., $H' = 0$. Therefore H is the last integral.

The orthonormal Cartesian basis can be connected to the director basis by Euler angles with

$$\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^3 S_{ij} \mathbf{e}_j \quad (19)$$

where

$$S = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi \cos \psi - \sin \phi \sin \psi & \cos \theta \cos \phi \sin \psi + \sin \phi \cos \psi & -\cos \phi \sin \theta \\ -\cos \theta \sin \phi \cos \psi - \cos \phi \sin \psi & -\cos \theta \sin \phi \sin \psi + \cos \phi \cos \psi & \sin \phi \sin \theta \\ \sin \theta \cos \psi & \sin \theta \sin \psi & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (20)$$

The static Kirchhoff equations (12)-(14) can then be written in terms of θ , ϕ and ψ . We get

$$\begin{aligned} \theta'' - (\psi')^2 \sin \theta \cos \theta + \Gamma \psi' (\phi' + \psi' \cos \theta) \sin \theta &= F \sin \theta \\ \psi'' \sin \theta + 2\psi' \theta' \cos \theta - \Gamma \theta' (\phi' + \psi' \cos \theta) &= 0 \\ \psi'' \cos \theta &= \psi' \theta' \sin \theta - \phi'' \end{aligned} \quad (21)$$

These equations can also be derived directly from Eqs. (16)-(18). In terms of the Euler angles the Hamiltonian becomes

$$H = \frac{P_\theta^2}{2} + \frac{P_\phi^2}{2\Gamma} + \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2}{2 \sin^2 \theta} + F \cos \theta, \quad (22)$$

where

$$P_\theta = \theta', \quad (23)$$

$$P_\phi \equiv M_3 = \Gamma(\phi' + \psi' \cos \theta), \quad (24)$$

$$P_\psi \equiv M_Z = \psi' \sin^2 \theta + P_\phi \cos \theta. \quad (25)$$

Eqs. (21) correspond to Hamilton's equations $P'_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial \alpha'}$ and $\alpha' = \frac{\partial H}{\partial P_\alpha}$ for $\alpha = \theta, \psi$ or ϕ . We see immediately that P_ϕ and P_ψ are constants and that θ is the only independent variable.

The total elastic energy of the rod can be calculated by the integration of the Eq. (22):

$$E_T = \int_0^L H(s) ds, \quad (26)$$

where L is the total length of the rod. The energy is a function of P_ψ , P_ϕ and F . It also depends on the initial conditions $\theta(s=0) \equiv \theta_0$ and $P_\theta(s=0) \equiv P_0$.

The procedure to construct equilibrium solutions for given constants P_ψ and P_ϕ and initial condition (θ_0, P_0) is as follows: first, we solve the equations $P'_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta'}$ and $\theta' = \frac{\partial H}{\partial P_\theta}$ to obtain $(\theta(s), P_\theta(s))$. Second, from Eq. (25), we obtain $\psi(s)$. The solutions $\theta(s)$ and $\psi(s)$ are sufficient to construct the rod by integrating the tangent vector \mathbf{d}_3 :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(s) &= \int_0^s \mathbf{d}_3(s') ds' \\ &= \int_0^s [(\sin \theta(s') \cos \psi(s')) \mathbf{e}_1 + ((\sin \theta(s') \sin \psi(s')) \mathbf{e}_2 + ((\cos \theta(s')) \mathbf{e}_3] ds' \end{aligned} \quad (27)$$

As a simple example we consider the helix, represented by the solution

$$\theta(s) = \theta_{helix} \quad (\text{constant}) \quad (28)$$

where θ_{helix} minimizes the 'potential energy' $V(\theta) = \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2}{2 \sin^2 \theta} + F \cos \theta$.

In this case, we get

$$\psi(s) = \psi_0 + \omega_\psi s, \quad (29)$$

where

$$\omega_\psi = \frac{P_\psi - P_\phi \cos \theta_{helix}}{\sin^2 \theta_{helix}}. \quad (30)$$

The radius and the pitch of the helix are, respectively

$$R_{Helix} = \left| \frac{\sin^3 \theta_{helix}}{P_\psi - P_\phi \cos \theta_{helix}} \right|, \quad (31)$$

$$P_{Helix} = \frac{2\pi \cos \theta_{helix}}{\omega_\psi}. \quad (32)$$

We can also calculate the length of one turn of the helix, which is the period of $\psi(s)$:

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega_\psi} = \frac{2\pi \sin^2 \theta_{helix}}{P_\psi - P_\phi \cos \theta_{helix}}. \quad (33)$$

Considering, for instance, a DNA molecule with radius of cross section $R = 10\text{\AA}$ [31], Young's modulus $E = 4.62 \times 10^8 Nm^{-2}$ [32] and the dimensionless elastic parameter $\Gamma = 2/3$ [33] and choosing the momenta and force as $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ and $F = +20pN$ we find $\theta_{helix} \simeq 2.52634 rad$, $R_{Helix} \simeq 27.4\text{\AA}$, $P_{Helix} \simeq 243\text{\AA}$ and $\tau \simeq 297\text{\AA}$. This value for the force (the plus sign means compressing) is the maximum that we found in the literature with respect to pressure on DNA [34]. $P_\phi = 0.043$ corresponds to a 5% excess of linking number due to thermal fluctuations [35].

IV. THE LINEARIZED METHOD

In this section we present a method to find the configuration of a rod with initial point at (x_0, y_0, z_0) and final point at (x_f, y_f, z_f) . In fact, since the Kirchhoff equations are invariant under space translations, we can always choose (x_0, y_0, z_0) to be the origin. The problem is then that of finding a solution that starts from the origin and ends at (x_f, y_f, z_f) . Our method is based on a series of small deformations made upon an initial solution of the Kirchhoff equations which, however, does not have the desired boundary values for x_f , y_f , and z_f . We call this initial solution the *trial solution*. The idea is to use the linearized dynamics to push the end point of the trial solution to the desired position, step by step.

In order to do so, we shall employ a variation of the Monodromy Method [23, 24], originally devised to calculate periodic solutions of chaotic Hamiltonian systems. As discussed in the introduction, the Kirchhoff equations pose an extra difficulty on the already hard problem of satisfying boundary conditions: the variables to be held fixed, x_f , y_f and z_f , are not the ones entering the equations of motion, namely, θ , ϕ and ψ . We shall see that this complicates the equations a great deal.

According to Eqs.(27) and (20), the rod can be obtained from the Euler angles by the relations

$$x(s) = \int_0^s \sin \theta(s') \cos \psi(s') ds', \quad (34)$$

$$y(s) = \int_0^s \sin \theta(s') \sin \psi(s') ds', \quad (35)$$

$$z(s) = \int_0^s \cos \theta(s') ds'. \quad (36)$$

The Euler angles, in their turn, obey the equations

$$\theta' = P_\theta \quad (37)$$

$$P_\theta' = -\frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)P_\phi}{\sin \theta} + \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2 \cos \theta}{\sin^3 \theta} + F \sin \theta \quad (38)$$

and

$$\psi(s) = \psi_0 + \int_0^s \frac{P_\psi - P_\phi \cos \theta(s')}{\sin^2 \theta(s')} ds'. \quad (39)$$

If we integrate Eqs.(37)-(39) using the initial condition provided by the trial solution and further integrate Eqs.(34)-(36) with the resulting Euler angles, we get, of course, the trial rod. Variations in these initial conditions will produce variations in the rod configuration, and, in particular, in its end point. In what follows we shall construct an explicit relation between a small variation in the initial variables θ , P_θ and ψ and the rod's end point x_f , y_f and z_f . Explicitly, we shall find the matrix B such that

$$\begin{pmatrix} \delta x(L) \\ \delta y(L) \\ \delta z(L) \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \delta \theta_0 \\ \delta P_{\theta 0} \\ \delta \psi_0 \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Once B is obtained (and if it can be inverted!) we can work our way from the trial solution, whose end point is at, say x_t , y_t and z_t , to the desired end point at x_f , y_f and z_f , provided we do that in a series of small steps. In each step we use the previous solution as the trial input, pushing the rod's end point slowly towards its final destination.

We start by writing down the relations between small variations of the end points and the Euler angles:

$$\delta x_f \equiv \delta x(L) = \int_0^L \cos \theta(s) \cos \psi(s) \delta \theta(s) ds - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) \delta \psi(s) ds, \quad (41)$$

$$\delta y_f \equiv \delta y(L) = \int_0^L \cos \theta(s) \sin \psi(s) \delta \theta(s) ds + \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) \delta \psi(s) ds, \quad (42)$$

$$\delta z_f \equiv \delta z(L) = - \int_0^L \sin \theta(s) \delta \theta(s) ds. \quad (43)$$

Using Eq.(39) we can write $\delta \psi(s)$ in terms of $\delta \theta(s)$:

$$\delta \psi(s) = \delta \psi_0 + \int_0^s A(\theta(s')) \delta \theta(s') ds', \quad (44)$$

where $A(\theta)$ is given by

$$A(\theta) = \frac{P_\phi}{\sin \theta} - \frac{2(P_\psi - P_\phi \cos \theta) \cos \theta}{\sin^3 \theta}. \quad (45)$$

To find the relation between the variations $\delta \theta(s)$ and $\delta P_\theta(s)$ and their values at the initial point $s = 0$ we consider small variations of Eqs.(37) and (38) around the trial solution :

$$\begin{aligned} \delta \theta' &= \delta P_\theta, \\ \delta P_\theta' &= C(\theta) \delta \theta, \end{aligned} \quad (46)$$

where $C(\theta)$, given by

$$C(\theta) = -P_\phi^2 - \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)(P_\psi - 4P_\phi \cos \theta)}{\sin^2 \theta} - \frac{3(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2 \cos^2 \theta}{\sin^4 \theta} + F \cos \theta, \quad (47)$$

is computed at the trial solution.

The solution to these linear equations can be written in matrix form as

$$\begin{pmatrix} \delta \theta(s) \\ \delta P_\theta(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(s) & M_{12}(s) \\ M_{21}(s) & M_{22}(s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \theta_0 \\ \delta P_0 \end{pmatrix}, \quad (48)$$

where M is the *tangent matrix*, satisfying $M(0) = 1$. In the special case where the trial solution is periodic, M is called the *monodromy matrix*.

Writing $\delta \theta(s)$ explicitly as

$$\delta \theta(s) = M_{11}(s) \delta \theta_0 + M_{12}(s) \delta P_0, \quad (49)$$

and using Eq.(44) and Eqs.(41)-(43) we can readily identify the matrix elements of B as:

$$\begin{aligned} B_{11} &= \int_0^L \cos \theta(s) \cos \psi(s) M_{11}(s) ds - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{11}(s') ds' ds \\ B_{12} &= \int_0^L \cos \theta(s) \cos \psi(s) M_{12}(s) ds - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{12}(s') ds' ds \\ B_{13} &= - \int_0^L \sin \theta(s) \sin \psi(s) ds = -y(L) \\ B_{21} &= \int_0^L \cos \theta(s) \sin \psi(s) M_{11}(s) ds + \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{11}(s') ds' ds \\ B_{22} &= \int_0^L \cos \theta(s) \sin \psi(s) M_{12}(s) ds + \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) \int_0^s A(\theta(s')) M_{12}(s') ds' ds \\ B_{23} &= \int_0^L \sin \theta(s) \cos \psi(s) ds = x(L) \\ B_{31} &= - \int_0^L \sin \theta(s) M_{11}(s) ds \\ B_{32} &= - \int_0^L \sin \theta(s) M_{12}(s) ds \\ B_{33} &= 0. \end{aligned} \quad (50)$$

Of these nine matrix elements, three are trivial, namely $B_{13} = -y(L)$, $B_{23} = x(L)$ and $B_{33} = 0$. The integrals appearing in the remaining six elements come from the fact that we must keep x_f , y_f , and z_f fixed, instead of θ , P_θ and ψ .

Since we linearized the equations of motion, we have to check if the new solution, starting from $\theta_1 = \theta_0 + \delta\theta_0$, $P_{\theta_1} = P_0 + \delta P_0$ and $\psi_1 = \psi_0 + \delta\psi_0$ generates a rod with the chosen final point, within a given precision. If the precision is not reached we can use the newly computed solution as a new trial one, using again Eq. (40), now with $(\delta x(L), \delta y(L), \delta z(L))$ corresponding to the distance between the fixed end point and the end point of the previously computed rod. The process can be repeated until the desired accuracy is obtained.

Finally we note that the elements $M_{ij}(s)$ can be computed by solving the linear equations (46) with proper initial conditions. Indeed, setting $\delta\theta_0 = 1$ and $\delta P_0 = 0$, Eq. (48) gives $M_{11}(s) = \delta\theta(s)$ and $M_{21}(s) = \delta P_\theta(s)$. If, on the other hand, we set $\delta\theta_0 = 0$ and $\delta P_0 = 1$ we get $M_{12}(s) = \delta\theta(s)$ and $M_{22}(s) = \delta P_\theta(s)$. Therefore, $M_{11}(s)$ and $M_{21}(s)$ are solutions of the linearized Eqs. (46) with the initial conditions $\delta\theta_0 = 1$ and $\delta P_0 = 0$ and $M_{12}(s)$ and $M_{22}(s)$ are the solutions of the same equations with $\delta\theta_0 = 0$ and $\delta P_0 = 1$.

For the case of the helix, discussed in the previous section, it is possible to calculate analytically the determinant of B , and it turns out to be zero. Therefore, B cannot be inverted and the helix cannot be used as a trial solution. To use the method we have to resort to other equilibrium solutions as starting points.

In many cases we might want to push the rod's end-point to a position $\mathbf{r}_f = (x_f, y_f, z_f)$ far from that of the initial trial solution, $\mathbf{r}_t = (x_t, y_t, z_t)$. To do that we can divide the line connecting \mathbf{r}_t to \mathbf{r}_f into N small segments and apply the linearized method N times, moving a small distance at each step. The number of steps required will depend on the particular configuration and possibly on the stability of the rod.

Figure 1 shows two examples of the method. We have chosen parameters typical of DNA molecules, i.e., we fixed radius of the cross section equal to the radius of the double strand DNA, $R \simeq 10\text{\AA}$ [31], Young's modulus $E = 4.62 \times 10^8 Nm^{-2}$ [32] and the dimensionless elastic parameter $\Gamma = 2/3$ [33]. We show results for a *short* DNA, with length $L = 151bps$ (bps =basepairs; $1bp=3.3\text{\AA}$), and a *long* DNA, with $L = 757bps$. The end points, in scaled units, were chosen to be $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$ for the short rod and $\mathbf{r}_f = (0, 10, -400)$ for the long rod (see caption for the values of the other parameters). For the short rod we plot the trial, an intermediary and the converged rods together, in order to show the process

of convergence from the trial to the desired solution. The trial solution was computed integrating the Kirchhoff equations starting from $\theta_0 = 1.5$, $P_0 = 0$ and $\psi_0 = 0$, which corresponds to a rod whose final point is $\mathbf{r}_t = (1.26, 7.73, -38.3)$. The intermediary solution was computed from $\theta_0 = 1.7$, $P_0 = -0.009$ and $\psi_0 = -0.17$, which corresponds to a rod whose final point is $\mathbf{r}_i = (0.63, 9.86, -49.2)$. For the long rod, only the final solution is shown. In this case, the trial solution started from $\theta_0 = 2.2$, $P_0 = 0$ and $\psi_0 = 0$, resulting in a final position at $\mathbf{r}_t = (8.09, 2.15, -374.7)$. In all integrations we used a fourth order Runge-Kuta method with fixed step. In both cases the distance between the end-point of the trial rod and the target position was divided into $N = 20$ segments and the solution converged to the desired boundary condition with a precision of 10^{-5} in each component x , y and z . The initial conditions obtained for the converged solutions are $\theta_0 = 1.888$, $P_0 = 0.0069$ and $\psi_0 = -0.447$ for the short DNA; $\theta_0 = 2.396$, $P_0 = -0.0132$ and $\psi_0 = 0.683$ for the long DNA.

V. EXISTENCE OF SOLUTIONS

The particular trial solutions used in the previous numerical example converged smoothly to their final positions. In some cases, however, a given trial solution does not converge to its destination no matter how many intermediate steps are used to divide the line between \mathbf{r}_t and \mathbf{r}_f . As we shall see, this problem has to do with the existence or not of solutions for a given \mathbf{r}_f . For a rod of length L it is obvious that there is no solution if $r_f > L$. The restrictions are actually much stronger than this simple 'length rule', and depend on the values of P_ϕ , P_ψ and F . It might also happen that the solution for a given \mathbf{r}_f does exist, but that the straight line connecting \mathbf{r}_t to \mathbf{r}_f passes through *forbidden* regions, hindering the convergence. In this section we investigate the space of possible solutions.

Each initial condition in Euler angles θ_0 , P_{θ_0} and ψ_0 leads to an end point \mathbf{r}_f . The easiest way to map all possible final points is to scan the space of all initial conditions. Therefore, for a fixed set of parameters P_ψ , P_ϕ and F we calculate $\mathbf{r}_f = \mathbf{r}_f(\theta_0, P_{\theta_0}, \psi_0)$ and plot the resulting three-dimensional figure in the x_f, y_f, z_f space. Points outside this volume are unreachable by the rod. Changing the parameters, such as the tension, changes the region of possible solutions, including end-points that were not previously present and excluding others.

Figure 2 shows two such plots for the same parameters used in Fig. 1, namely, $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $F = 20pN$. Part (a) corresponds to $L = 151bps$ and part (b) to $L = 757bps$. Both figures were generated by varying the initial condition in the intervals $0 < \theta_0 < \pi$ (100 points), $-0.1 < P_0 < 0.1$ (10 points) and $-\pi < \psi_0 < \pi$ (10 points). We see that the points form solid structures with cylindrical symmetry, since z is independent of ψ . It is interesting to note the variation with z of the distance from the external surface of the solid to the z axis. For larger values of P_0 the total elastic energy of the rod increases and the final points tend to concentrate in the region near $z = 0$ (data not shown). This figure shows clearly the external boundaries of the allowed end-points region, but it is not obvious whether the region is dense in its interior or not. In order to check that we define a partial map by fixing the variable ψ_0 and varying the other two, θ_0 and P_{θ_0} . Because of the cylindrical symmetry, the complete figure can be reconstructed by rotating the partial maps around the z axis.

Figure 3 shows two partial maps, corresponding to the two cases shown in Fig. 2, from two points of view. In these plots we used $\psi_0 = 0$, $0 < \theta_0 < \pi$ (250 points) and $-0.1 < P_0 < 0.1$ (20 points). Parts (a) and (b) correspond to $L = 151bps$ and (c) and (d) to $L = 757bps$. We see that both partial maps form hollow solids when rotated around the z axis. The regions of possible final points shown in Fig. 2 can be seen to be actually very complicated.

The dependence of this region with the other parameters of the problem is also non-trivial. Figure 4 shows plots similar to those of Figure 2, for $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ and $L = 151bps$, but with different values of the tension F . From (a) to (d) the forces are $F = 15pN$, $F = 7pN$, $F = -5pN$ and $F = -10pN$ (the minus sign means stretching). The value $F = -10pN$ is about the maximum force that a DNA can be stretched and still behave like an inextensible rod [36]. Again we used $0 < \theta_0 < \pi$ (100 points), $-0.1 < P_0 < 0.1$ (10 points) and $-\pi < \psi_0 < \pi$ (10 points). Although each individual plot shows the same general type of behavior, the actual region of final points changes a lot with the tension. These maps give us an idea of what final points can or cannot be reached using the static Kirchhoff equations. For example, if we want to find a solution for a rod with a given final point whose z coordinate has a large negative value, as the value chosen in Fig. 1, we have to consider the rod under positive tension (compressing). If we also want the other coordinates x and y not to be very closed to the z axis (x and y small) we have to choose $F \simeq 15pN$ instead of $F \simeq 7pN$.

The coordinate z_f gives a measure of how compressed the filament is. In figure 5 we plot

the minimum (dotted line) and maximum (full line) values of z_f as a function of the applied force F for the parameters used in Fig. 2, part (a) and Fig. 4. This gives a simplified view of the possible final points in terms of the rod extension.

VI. VARIATION OF PARAMETERS

In section IV we presented a method to solve the boundary value problem for a rod with given mechanical parameters P_ψ , P_ϕ and F . In this section, we show that the same ideas can be used to compare the equilibrium configurations of rods with the *same* end points but with different mechanical parameters. We pay particular attention to the tension F . For a rod with fixed end points (and fixed P_ψ and P_ϕ), the stable configuration is that which minimizes the energy, Eq.(26), with respect to F . We shall find this stable configuration and calculate the force of constraint that holds the rod fixed in this case.

The method for solving this particular BVP problem is the following: consider a solution extending from the origin to \mathbf{r}_f with $F = F_0$ and initial value of Euler angles θ_0 , P_0 and ψ_0 . Now integrate the Kirchhoff equations from the same initial condition but using $F = F_0 + \delta F$. This new solution, whose end point is $\mathbf{r}_f + \delta \mathbf{r}$, can be used as a trial solution for the rod with force $F_0 + \delta F$. Using the method of section IV we push the rod back to \mathbf{r}_f .

Figure 6(a) shows three configurations of short DNAs of length $L = 151bps$. The total elastic energy of the rods are shown as a function of the tension F in Fig.6(b). The other mechanical parameters were held fixed at $P_\psi = 0$ and $P_\phi = 0.043$. The end point of all equilibrium configurations is the same as in the Fig.1(a) ($\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$). Part (a) shows only three of the nine configurations plotted in (b), for $F = 21.5pN$ (full line), corresponding to the smallest total elastic energy, $F = 23pN$ (dotted line) and $F = 15pN$ (full thick line). We used the initial conditions of the solution for $F = 20pN$, shown in Fig. 1(a), as the trial solution for obtaining the configurations for $F = 21.5pN$ and $F = 19pN$. Each of these were trial solutions for $F = 22pN$ and $F = 18pN$, respectively, and so on. There are no solutions for this particular end point for forces greater than $F = 23pN$ and smaller than $F = 15pN$. In all cases the distance between the end-point of the trial orbit and the target position was divided into 20 segments and the solutions converged to the fixed end point with a precision of 10^{-5} in each component x , y and z .

Now we consider a rod in its stable equilibrium with end points at $\mathbf{r} = 0$ and $\mathbf{r} =$

\mathbf{r}_f . If the rod is compressed adiabatically in the z -direction, so that it is always in its stable configuration, the force at each time is that which minimizes the energy for that instantaneous end point. By calculating this force for each value of \mathbf{r}_f as we did in Fig.6(b), we may follow the deformation of the rod as it is compressed. Figure 7(a) shows an example of such deformation for rods with $x_f = 0$, $y_f = 12$ and different values of the z -coordinate: $z_f = -65$, $z_f = -55$, $z_f = -45$ and $z_f = -30$. Figure 7(b) shows the corresponding instantaneous force as a function of z_f . Approximating this curve by a straight line, its slope gives a measure of the DNA elastic constant k_e . We find $k_e \approx 170 \times 10^{-6} Nm^{-1}$.

Figure 8 is analogous to Figure 6, but with fixed force $F = 21pN$ and $P_\phi = 0.043$. The parameter being varied is now P_ψ . Part (a) shows three configurations, for $P_\psi = 0$ (full line), $P_\psi = -0.015$ (dotted line) and $P_\psi = 0.03$ (full thick line). Part (b) shows the elastic energy versus P_ψ . Notice that the elastic energy does not have a local minimum as a function of P_ψ . Since there are no solutions for P_ψ greater than 0.03 or smaller than -0.015 , the global minimum is at $P_\psi = -0.015$.

As a last remark we note that if we fix not only the end points, but also the tangent vector at the end points, as in the *strong anchoring end conditions* considered by Tobias *et al.* [20, 21], then all three parameters, F , P_ψ and P_ϕ , must be adjusted. We shall consider this case in a future work.

VII. APPLICATION TO NONHOMOGENEOUS DNA

As an application of the method described in section IV we shall consider the equilibrium configurations of *nonhomogeneous* rods. We shall restrict ourselves to the simplest case of periodic nonhomogeneities in the Young's modulus. The motivation for this study is the fact that repeated (and therefore periodic) DNA sequences form a substantial fraction of all eukaryotic genomes [37, 38]. The calculations presented here are based on the stiffness parameters recently computed for the 32 trinucleotide units from DNA data [32]. Our goal here is to understand how much the equilibrium configuration of a nonhomogeneous rod differs from that of the homogeneous case when the rod is subject to fixed mechanical conditions.

Repetitive DNA is formed by nucleotide sequences of varying lengths and compositions. Because tandemly repeated sequences form a significant percentage of the genome of several

organisms (reaching up to 100 megabasepairs of length [38]) and appear to have little or no functional role, they are commonly regarded as “selfish” or “junk” DNA [39]. We shall use a simple periodic formula for the (scaled) Young’s modulus that covers most of the parameter interval spanned by the trinucleotides given in ref. [32]:

$$E(s) = 1 + \alpha \cos \frac{9.52}{Per}s, \quad (51)$$

Per is the period of the oscillations of the Young’s modulus along the DNA in units of base pairs (bps) and α is a parameter (which depends on the specific sequence being repeated) which can not be greater than 0.66. We shall consider the scaled shear modulus $\mu(s) = E(s)$, which means that the Poison ratio $\Gamma = 2\mu/E$ will be kept constant. The conversion from scaled to SI units is given by $E_{SI}(s) = E_0E(s)$ and $\mu_{SI}(s) = \mu_0\mu(s)$, where $E_0 = 4.62 \times 10^8 Nm^{-2}$ [32] and $\Gamma_0 = 2\mu_0/E_0 = 2/3$ [33].

Eqs.(22)-(25) have to be slightly modified to include the non-constant Young’s and shear moduli. We obtain

$$H = \frac{P_\theta^2}{2E(s)} + \frac{P_\phi^2}{2\Gamma_0\mu(s)} + \frac{(P_\psi - P_\phi \cos \theta)^2}{2E(s) \sin^2 \theta} + F \cos \theta, \quad (52)$$

with

$$P_\theta = E(s)\theta', \quad (53)$$

$$P_\phi \equiv M_3 = \Gamma_0\mu(s)(\phi' + \psi' \cos \theta), \quad (54)$$

$$P_\psi \equiv M_Z = E(s)\psi' \sin^2 \theta + P_\phi \cos \theta. \quad (55)$$

Notice that these equations are not integrable if $\alpha \neq 0$. Although P_ψ and P_ϕ are still constants, the elastic energy per unit arclength is not. The configurations for non-homogeneous rods are obtained from the homogeneous solution using the same procedure described in section VI for rods with different forces. Here the trial solution is constructed integrating the Kirchhoff equations for $\alpha \neq 0$ using the initial conditions of the solution for $\alpha = 0$.

Figure 9(a) shows three configurations of short DNAs with the same end points but different values of α . The parameters are $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $F = 20pN$ and $L = 151bps$. The period of variation in Eq. (51) was chosen as $Per = 90bps$, which coincides with the length of one turn of the homogeneous helix, as calculated in the Sec. III. This choice is motivated by the fact that resonant periods enhance the effects of the non-homogeneities [40]. The full line shows the homogeneous case ($\alpha = 0$). This is the same as in Fig. 1 on the left. The other curves show the rod for $\alpha = 0.33$ (dotted line), and $\alpha = 0.66$ (full thick line).

Figure 9(b) shows configurations for longer DNAs, with $L = 757\text{bps}$. All other parameters are the same as in part (a). The thin line shows the homogeneous solution and the thick line shows the nonhomogeneous DNA for $\alpha = 0.48$.

VIII. CONCLUSIONS

In this work we presented a general method to solve the boundary value problem (BVP) for Kirchhoff filaments. The method consists in making small changes to a known *trial* filament which satisfies the Kirchhoff equations but not the boundary conditions. We use the linearized dynamics to push the end point of the trial solution to the desired position, step by step. By linearizing the Kirchhoff equations we obtain an explicit relation between a variation of the initial conditions (expressed in terms of Euler angles) and the consequent variation of the rod's end point.

The solutions of the BVP are limited by the physical constraints of the rod, such as the moments, tension and length. A sketch of the allowed end points can be constructed by integrating the Kirchhoff equations for a large number of initial conditions. The end points form complex tri-dimensional figures with cylindrical symmetry, reflecting the non-linear character of the equations.

We applied our method to compare the equilibrium configurations of rods with the same end points but with different mechanical parameters. In the case of the tension F we saw that there is a special equilibrium configuration, for each fixed end point, which minimizes the total elastic energy, corresponding to the stable configuration.

As a last example we applied our method to nonhomogeneous sequence-dependent DNAs by modeling pieces of repeated sequences by a sinusoidal oscillation of the Young's and shear moduli. We found that the three-dimensional structure of the DNA is indeed sensitive to the presence of such sequences.

Acknowledgments

This work was partially supported by the Brazilian agencies FAPESP, CNPq and FINEP.

- [1] J. Coyne, IEE Journal of Oceanic Engineering **15**, 72 (1990).
- [2] E. E. Zajac, Trans. ASME, **29**, 136 (1962).
- [3] Y. Sun and J. W. Leonard, Ocean Engineering **25**, 443 (1997).
- [4] M. A. Vaz and M. H. Patel, Appl. Ocean Res. **22**, 45 (2000).
- [5] M. D. Barkley and B. H. Zimm, J. Chem. Phys. **70**, 2991 (1979);
- [6] Y. Yang, I. Tobias and W. K. Olson, J. Chem. Phys. **98**, 1673 (1993);
- [7] Y. Shi and J. E. Hearst, J. Chem. Phys. **101**, 5186 (1994).
- [8] T. Schlick, Curr. Opin. Struct. Biol. **5**, 245 (1995). W. K. Olson, Curr. Opin. Struct. Biol. **6**, 242 (1996).
- [9] R. E. Goldstein and S. A. Langer, Phys. Rev. Lett. **75**, 1094 (1995);
- [10] C. W. Wolgemuth, T. R. Powers and R. E. Goldstein, Phys. Rev. Lett. **84**, 1623 (2000).
- [11] I. Klapper, J. Comput. Phys. **125**, 325 (1996).
- [12] A. Goriely and M. Tabor, Phys. Rev. Lett. **80**, 1564 (1998).
- [13] G. Kirchhoff, J. Reine Angew. Math. **56**, 285 (1859).
- [14] W. K. Olson and V. B. Zhurkin, Curr. Opin. Struct. Biol. **10**, 286 (2000).
- [15] E. H. Dill, Arch. Hist. Exact. Sci. **44**, 2 (1992); B. D. Coleman, E. H. Dill, M. Lembo, Z. Lu and I. Tobias, Arch Rational Mech. Anal. **121**, 339 (1993).
- [16] M. Nizette and A. Goriely, J. Math. Phys. **40**, 2830 (1999).
- [17] A. Goriely and M. Tabor, Physica D **105** 20 (1997); Physica D **105**, 45 (1997).
- [18] A. Goriely and M. Tabor, Nonl. Dyn. **21**, 101 (2000).
- [19] A. F. Fonseca and M. A. M. de Aguiar, Phys. Rev. E **63**, art. n. 016611 (2001).
- [20] I. Tobias, D. Swigon and B. D. Coleman, Phys. Rev. E **61**, 747 (2000); B. D. Coleman, D. Swigon and I. Tobias, Phys. Rev. E **61**, 759 (2000).
- [21] I. Tobias, B. D. Coleman and W. K. Olson, J. Chem. Phys. **101**, 10990 (1994).
- [22] A. Balaeff, L. Mahadevan and K. Schulten, Phys. Rev. Lett. **83**, 4900 (1999).
- [23] M. Baranger and K. T. R. Davis, Ann. Phys. (N.Y.) **177**, 330 (1987).

- [24] A.L. Xavier Jr. and M. A. M. de Aguiar, *Ann. Phys. (N.Y.)* **252**, 458 (1996).
- [25] G. Károlyi and G. Domokos, *Physica D* **134**, 316 (1999).
- [26] O. Gottlieb and N. C. Perkins, *ASME J. Appl. Mech.* **66**, 352 (1999).
- [27] C. Bustamante, S. B. Smith, J. Liphardt and D. Smith, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **10**, 279 (2000).
- [28] G. J. L. Wuite, R. J. Davenport, A Rappaport and C. Bustamante, *Biophys. J.* **79**, 1155 (2000).
- [29] J. C. Meiners and S. R. Quake, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5014 (2000).
- [30] R. Schleif, *Annu. Rev. Biochem.* **61**, 199 (1992).
- [31] T. Lipniacki, *Phys. Rev. E* **60**, 7253 (1999).
- [32] M. M. Gromiha, *J. Biol. Phys.* **26**, 43 (2000).
- [33] M. E. Hogan and H. Austin, *Nature* **329**, 263 (1987).
- [34] R. B. Macgregor Jr., *Biopolymers* **48**, 253 (1998); V. Norris, T. Onoda, H. Pollaert and G. Grehan, *BioSystems* **49**, 71 (1999).
- [35] J. F. Marko and E. D. Siggia *Phys. Rev. E* **52**, 2912 (1995).
- [36] J. F. Marko, *Europhys. Lett.* **38**, 183 (1997); C. Bustamante, S. B. Smith, J. Liphardt and D. Smith, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **10**, 279 (2000).
- [37] J. Hsieh and A. Fire, *Annu. Rev. Genet.* **34**, 187 (2000).
- [38] B. Charlesworth, P. Sniegowski and W. Stephan, *Nature* **371**, 215 (1994).
- [39] B. F. McAllister and J. H. Werren, *J. Mol. Evol.* **48**, 469 (1999).
- [40] A. F. da Fonseca and M. A. M. de Aguiar, *in preparation*.

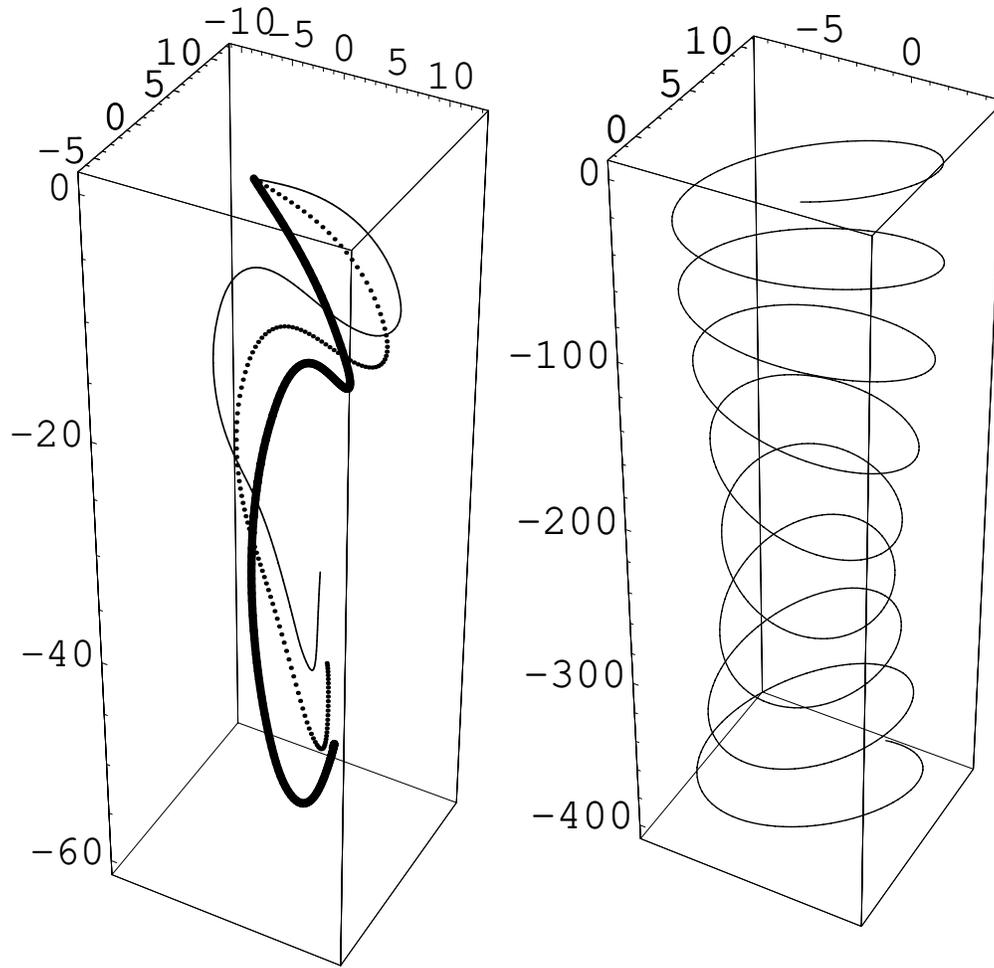


FIG. 1: Left: Trial (full line), intermediary (dotted line) and final (thick line) solutions for a *short* DNA of length $L = 151$ bps. The end point is fixed at $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$; Right: DNA of length $L = 757$ bps fixed at $\mathbf{r}_f = (0, 10, -400)$. The parameters for both cases are $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ and $F = 20pN$.

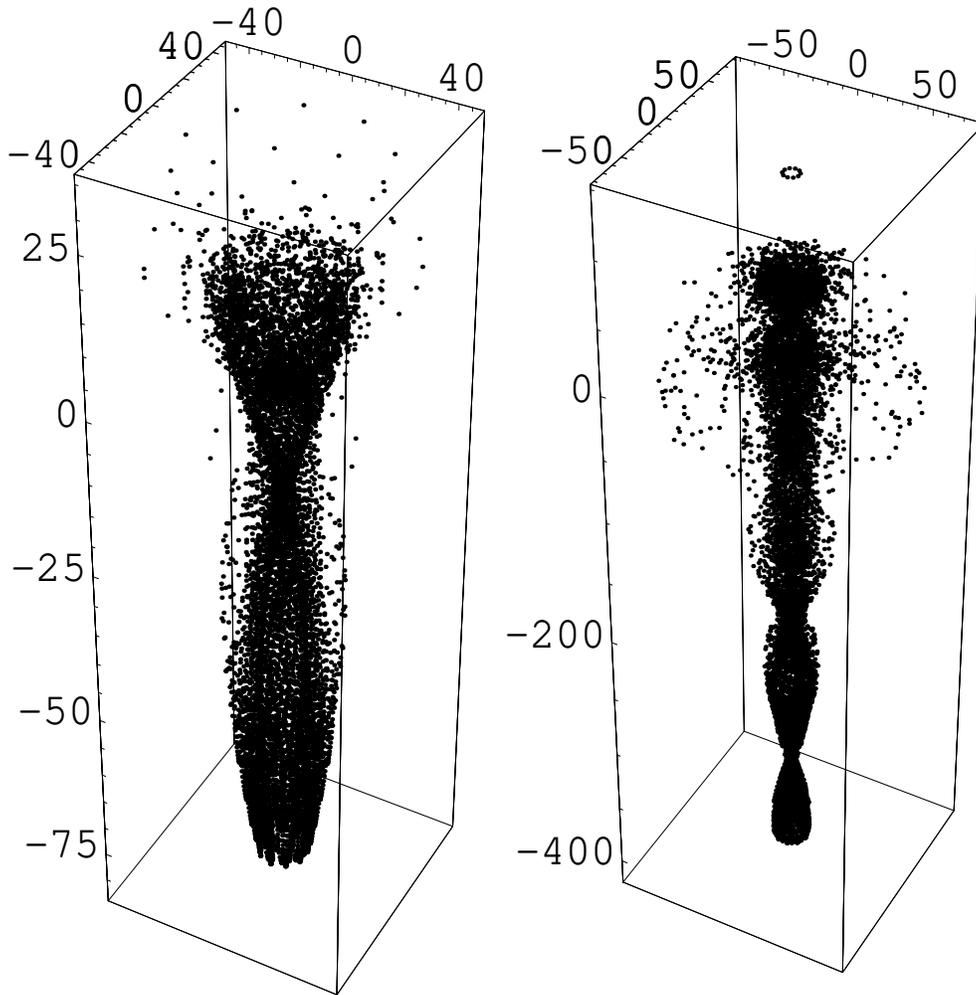


FIG. 2: Regions of the existence of final points for $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $F = 20pN$, $L = 151bps$ (left) and $L = 757bps$ (right). The plots are obtained by integrating the Kirchoff equations from initial conditions in the intervals $0 < \theta_0 < \pi$ (100 points), $-0.1 < P_{\theta_0} < 0.1$ (10 points) and $-\pi < \psi_0 < \pi$ (10 points).

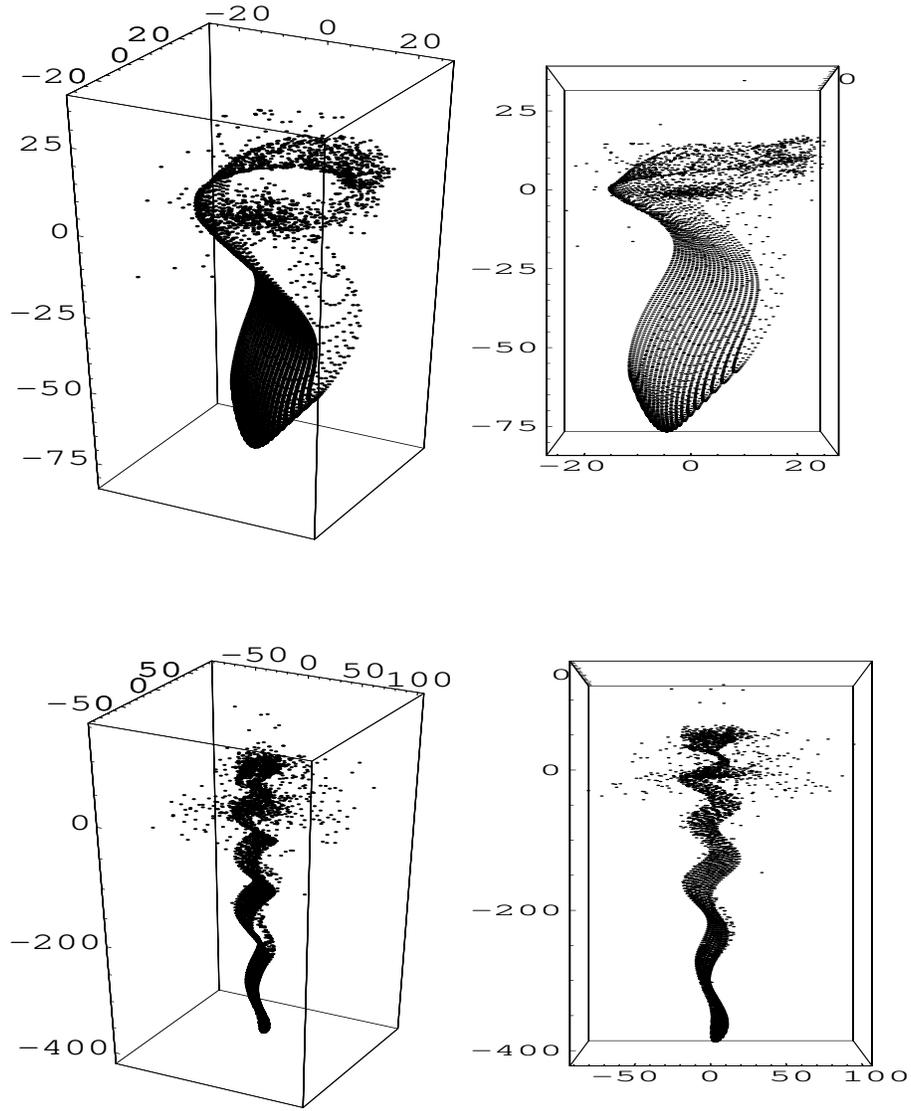


FIG. 3: Partial plots (first and second lines), from two points of view (left and right of each line), showing the region of the existence of final points for $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $F = 20pN$. The initial conditions used to generate the plots are: $0 < \theta_0 < \pi$ (250 points), $-0.1 < P_{\theta_0} < 0.1$ (20 points) and $\psi = 0$. First line: $L = 151$ bps; Second line: $L = 757$ bps.

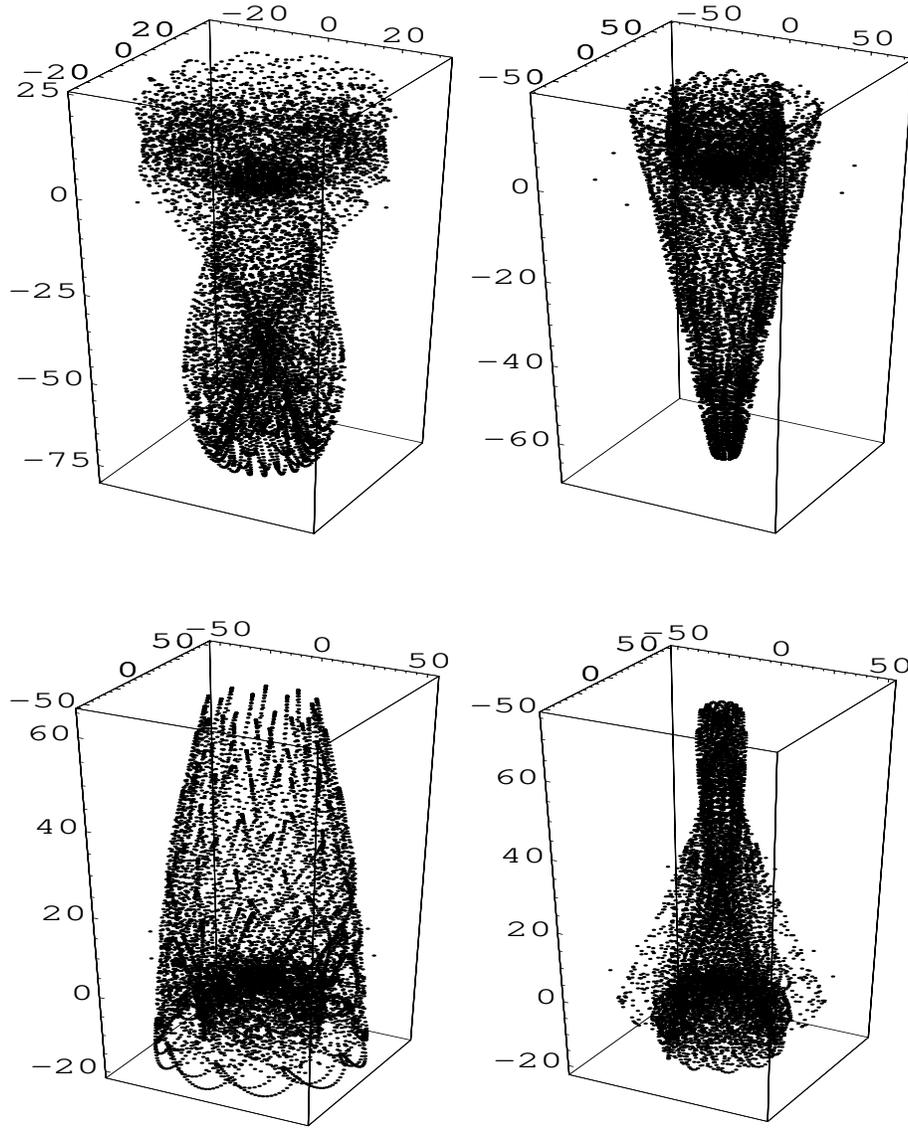


FIG. 4: Regions of existence for $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$ and $L = 151bps$. From top left to bottom right: $F = 15pN$, $F = 7pN$, $F = -5pN$ and $F = -10pN$. The initial conditions are $0 < \theta_0 < \pi$ (100 points), $-0.1 < P_{\theta_0} < 0.1$ (10 points) and $-\pi < \psi_0 < \pi$ (10 points).

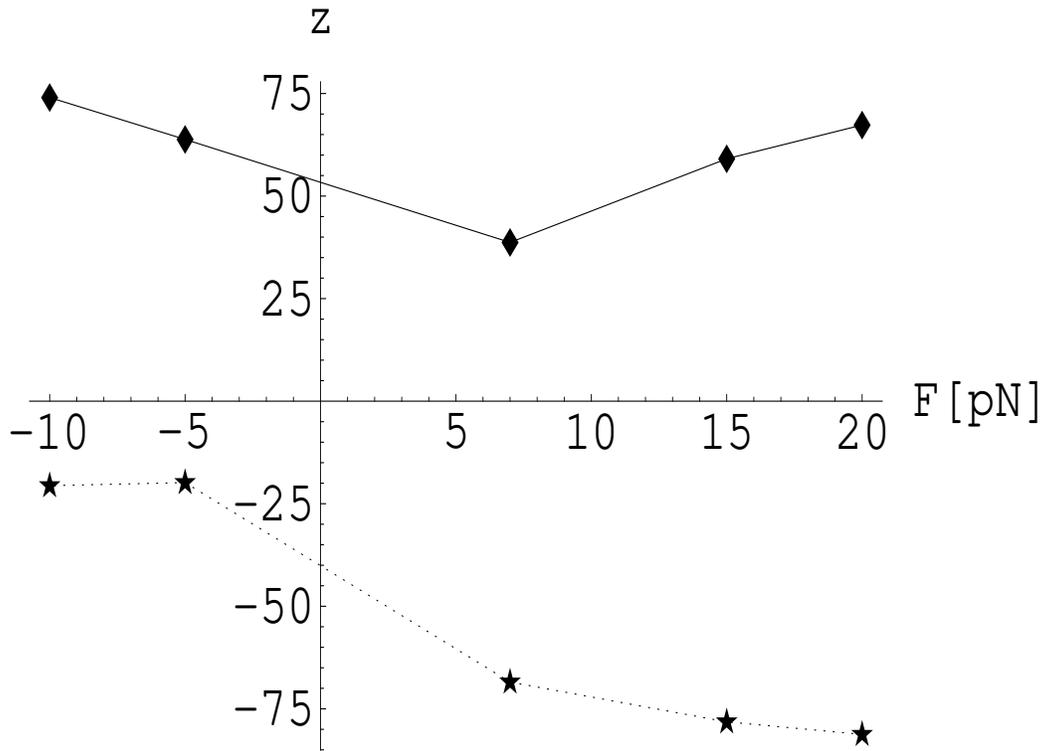


FIG. 5: Maximum and minimum z_f for the same parameters used in Fig. 2, part (a) and Fig. 4 as function of F . The region between the two curves are possible values of z_f .

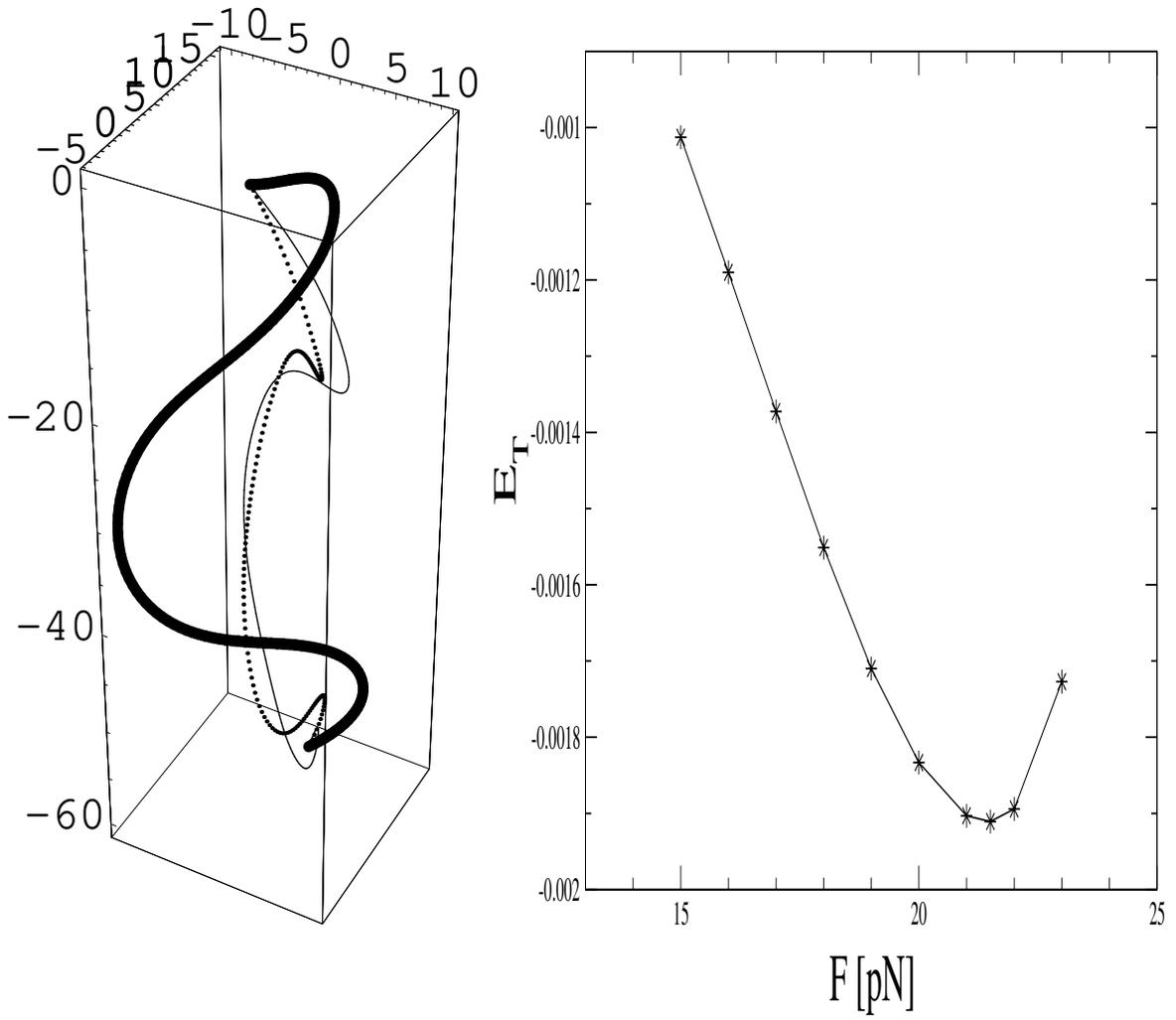


FIG. 6: Left: Three DNA configurations with $L = 151\text{bps}$, $F = 21.5\text{pN}$ (full line), $F = 23\text{pN}$ (dotted line) and $F = 15\text{pN}$ (thick line). Right: Total elastic energy E_T , as function of F . In all cases $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$, $P_\psi = 0$ and $P_\phi = 0.043$.

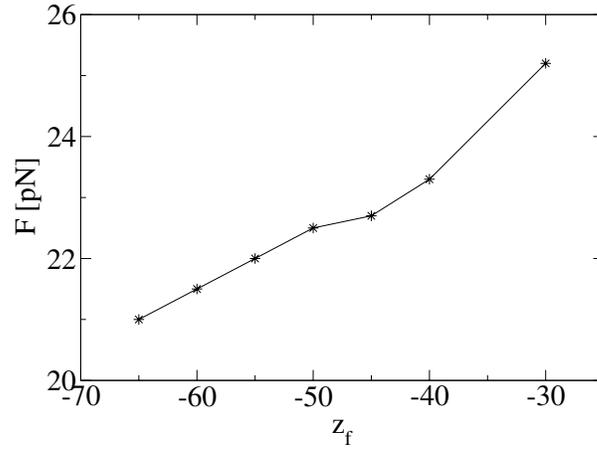
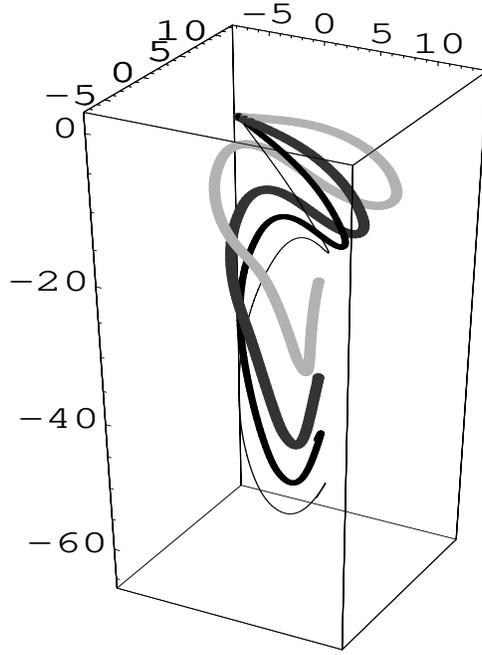


FIG. 7: (a) Equilibrium solutions for rods with $z_f = -65$ (full line), $z_f = -55$ (thick line), $z_f = -45$ (dark gray) and $z_f = -30$ (light gray). (b) Force F versus z_f for the stable equilibrium solutions. The mechanical parameters are $P_\psi = 0$ and $P_\phi = 0.043$.

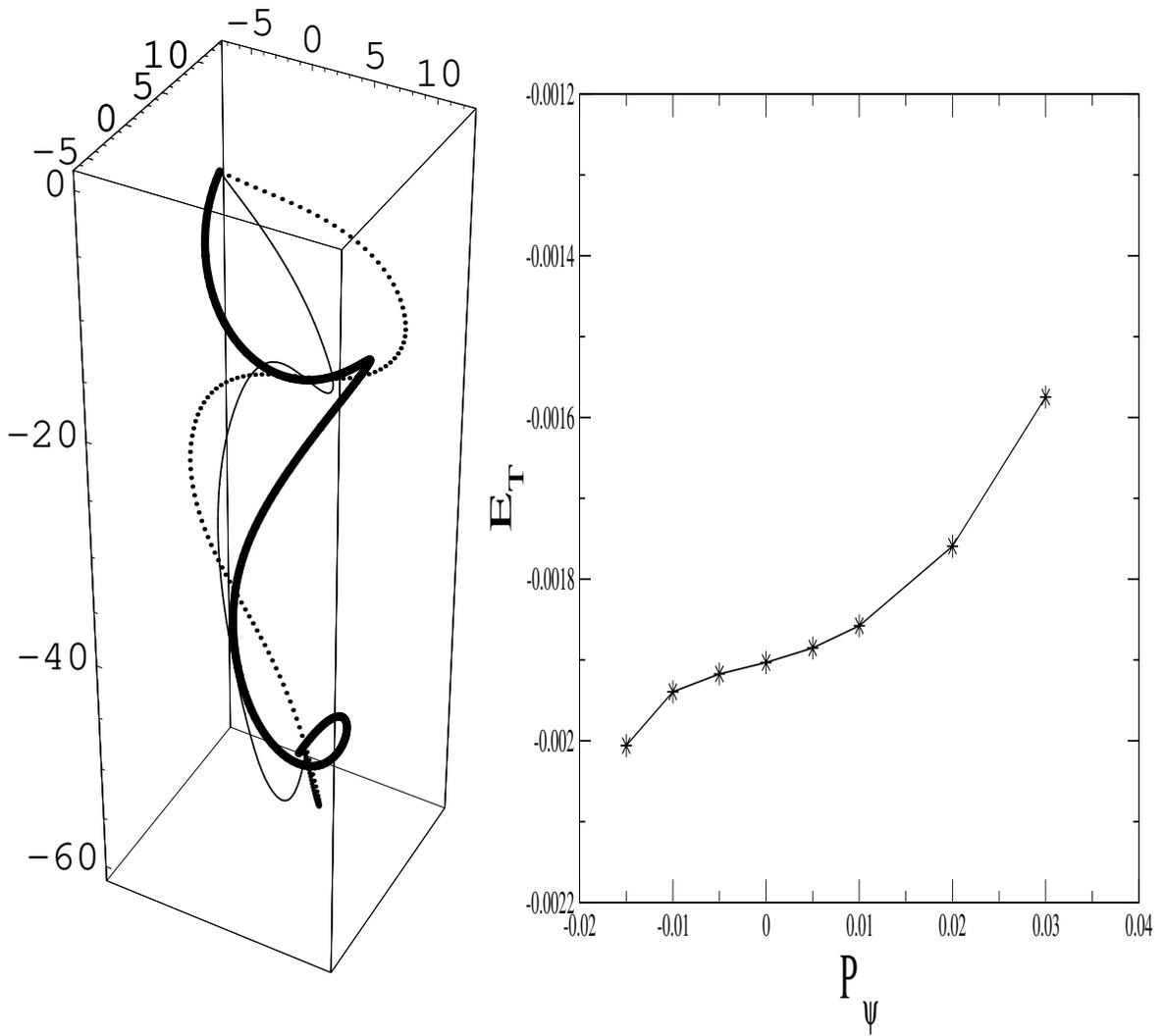


FIG. 8: Left: Three DNA configurations with $L = 151bps$, $P_\psi = 0$ (full line), $P_\psi = -0.015$ (dotted line) and $P_\psi = 0.03$ (thick line). Right: Total elastic energy E_T as function of P_ψ . In all cases $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$, $F = 21pN$ and $P_\phi = 0.043$.

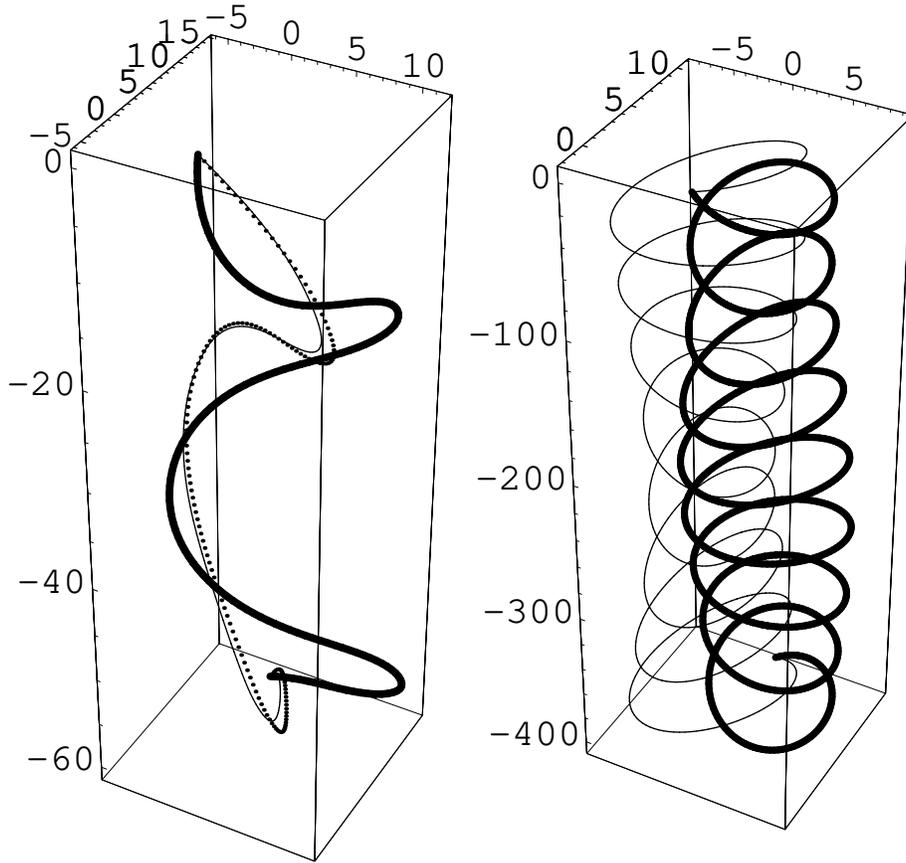


FIG. 9: Left: Three DNA configurations with $L = 151\text{bps}$, $\mathbf{r}_f = (0, 12, -60)$ and $\alpha = 0$ (full line), $\alpha = 0.33$ (dotted line) and $\alpha = 0.66$ (thick line); Right: Two DNA with $L = 757\text{bps}$, $\mathbf{r}_f = (0, 10, -400)$ and $\alpha = 0$ (full line) and $\alpha = 0.48$ (thick line). The parameters are $P_\psi = 0$, $P_\phi = 0.043$, $F = 20\text{pN}$ and $Per = 90\text{bps}$.

Referências Bibliográficas

- [1] Michio Kaku, *Hiperespaço*, Editora Rocco LTDA, 2000.
- [2] Yanner Bar-Yam, *Dynamics of Complex Systems*, Perseus Books, 1997.
- [3] S. J. Webb, Phys. Rep. **60**, 201 (1980).
- [4] <http://www.fapesp.br>
- [5] A. J. G. Simpson *et al.*, Nature (London) **403**, 151 (2000).
- [6] H. Fröhlich, The Biological Effects of Microwaves and Related Questions.
In: *Advances in Electronics and Electron Physics*. New York, Academic
v.53, p.85-162, 1980.
- [7] G. Nicolis e I. Prigogine, *Selforganization in nonequilibrium systems*.
New York, Wiley-Interscience, 1971.
- [8] A. F. Fonseca, M. V. Mesquita, A. R. Vasconcellos e R. Luzzi, J. Chem.
Phys. **112**, 3967 (2000).
- [9] A. F. da Fonseca, *Tese de Mestrado*, UNICAMP, (1998).

- [10] R. A. P. Nagem, Z. Dauter e I. Polikarpov, *Acta Cryst. D* **57**, 996 (2001).
- [11] L. Diambra, J. C. B. Figueiredo e C. P. Malta, *Physica A* **273**, 475 (1999).
- [12] C. R. Calladine e H. R. Drew, *Understanding DNA* (Academic Press, New York, 1992).
- [13] T. Schlick, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **5**, 245 (1995); W. K. Olson, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **6**, 242 (1996).
- [14] R. E. Goldstein e S. A. Langer, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1094 (1995).
- [15] W. Helfrich, *Langmuir* **7**, 567 (1991).
- [16] I. Tobias, D. Swigon e B. D. Coleman, *Phys. Rev. E* **61**, 747 (2000); B. D. Coleman, D. Swigon e I. Tobias, *Phys. Rev. E* **61**, 759 (2000).
- [17] I. Tobias, B. D. Coleman e W. K. Olson, *J. Chem. Phys.* **101**, 10990 (1994).
- [18] Y. Yang, I. Tobias e W. K. Olson, *J. Chem. Phys.* **98**, 1673 (1993).
- [19] N. H. Mendelson, *Sci. Prog.* **74**, 425 (1990); J. J. Thwaites e N. H. Mendelson, *Adv. Microbial. Physiol.* **32**, 174 (1991).
- [20] J. Coyne, *IEEE J. Ocean. Eng.* **15**, 72 (1990).
- [21] E. E. Zajac, *J. Appl. Mec.* **29**, 136 (1962).

- [22] Y. Sun e J. W. Leonard, *Ocean. Eng.* **25**, 443 (1997); M. A. Vaz e M. H. Patel, *Appl. Ocean. Res.* **22**, 45 (2000).
- [23] W. K. Olson e V. B. Zhurkin, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **10**, 286 (2000).
- [24] A. Sommerfeld, *Mechanics of Deformable Bodies*. 5.ed.- Academic Press, Inc. (London), 1971.
- [25] E. H. Dill, *Arch. Hist. Exact. Sci.* **44**, 2 (1992).
- [26] W. Han, S. M. Lindsay, M. Dlakic e R. E. Harrington, *Nature (London)* **386**, 563 (1997); W. Han, M. Dlakic, Y. -J. Zhu, S. M. Lindsay e R. E. Harrington, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **94**, 10565 (1997).
- [27] M. E. Hogan e H. Austin, *Nature (London)* **329**, 263 (1987).
- [28] K. R. Symon, *Mecânica*. 2.ed.- Editora Campus, 1986.
- [29] A. Goriely e M. Tabor, *Physica D* **105**, 20 (1997); *Physica D* **105**, 45 (1997); *Nonlinear Dyn.* **21**, 101.
- [30] M. Nizette e A. Goriely, *J. Math. Physics* **40**, 2830 (1999).
- [31] A. F. Fonseca e M. A. M. de Aguiar, *Phys. Rev. E* **63**, art. n. 016611 (2001).
- [32] L. Landau e E. Lifchitz, *Mécanique des Fluides* (Editions Mir, Moscow, 1971).

- [33] R. Kh. Zeytounian , *Les Modèles Asymptotiques de la Mécanique des Fluides II*, Lecture Notes in Physics Vol. **276** (Springer-Verlag, Berlin, 1987).
- [34] E. M. Purcell, *Am. J. Phys.* **45**, 3 (1977).
- [35] Z. Haijun e O. -Y. Zhong-can, *J. Chem. Phys.* **110**, 1247 (1999).
- [36] T. Lipniacki, *Phys. Rev. E* **60**, 7253 (1999).
- [37] M. M. Gromiha, M. G. Munteanu, I. Simon e S. Pongor, *Biophys. Chem.* **69**, 153 (1997).
- [38] J. F. Marko e E. D. Siggia, *Phys. Rev. E* **52**, 2912 (1995).
- [39] A. Mielke e P. Holmes, *Arch. Rat. Mech.* **101**, 319 (1988).
- [40] M. A. Davies e F. C. Moon, *Chaos* **3**, 93 (1993).
- [41] M. M. Gromiha, *J. Biol. Phys.* **26**, 43 (2000).
- [42] R. S. Manning, J. H. Maddocks e J. D. Kahn, *J. Chem. Phys.* **105**, 5626 (1996).
- [43] J. Hsieh e A. Fire, *Annu. Rev. Genet.* **34**, 187 (2000).
- [44] B. Charlesworth, P. Sniegowski e W. Stephan, *Nature* **371**, 215 (1994).
- [45] B. F. McAllister e J. H. Werren, *J. Mol. Evol.* **48**, 469 (1999).

- [46] R. B. Macgregor Jr., *Biopolymers* **48**, 253 (1998); V. Norris, T. Onoda, H. Pollaert e G. Grehan, *BioSystems* **49**, 71 (1999).
- [47] J. F. Marko, *Europhys. Lett.* **38**, 183 (1997).
- [48] C. Bustamante, S. B. Smith, J. Liphardt e D. Smith, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **10**, 279 (2000).
- [49] M. M. Gromiha, M. G. Munteanu, A. Gabrielian e S. Pongor, *J. Biol. Phys.* **22**, 227 (1996).
- [50] O. Gottlieb e N. C. Perkins, *ASME J. Appl. Mech.* **66**, 352 (1999).
- [51] A. Balaeff, L. Mahadevan e K. Schulten, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4900 (1999).
- [52] M. Baranger e K. T. R. Davis, *Ann. Phys. (N.Y.)* **177**, 330 (1987).
- [53] A. L. Xavier Jr. e M. A. M. de Aguiar, *Ann. Phys. (N.Y.)* **252**, 458 (1996).
- [54] G. Kirchhoff, *J. Reine Angew. Math.* **56**, 285 (1859).
- [55] J. H. Maddocks e D. J. Dichmann, *J. Elasticity* **34**, 83 (1994).
- [56] A. F. da Fonseca e M. A. M. de Aguiar, poster apresentado na conferência “Sixth SIAM conference on applications of dynamical systems” em Snowbird, Utah, EUA, de 20 a 24 de maio de 2001.
- [57] A. F. da Fonseca e M. A. M. de Aguiar, submetido ao *Phys. Rev. E*.

[58] Comunicação particular.