A. K. Vidybida, Periodic action-induced modification of the potential function of a mechanical system, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1987, Volume 292, Number 6, 1341–1345

УДК 517.91:531.13:531.36 МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

А.К. ВИДЫБИДА

ВЫЗВАННАЯ ПЕРИОДИЧЕСКИМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ МОДИФИКАЦИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ МЕХАНИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

(Представлено академиком Ю.А. Митропольским 27 I 1986)

Пусть механическая система состоит из отдельных частей, связанных между собой потенциальными силами. Относительное движение частей происходит в очень вязкой жидкости, так что собственные колебания в имеющихся потенциальных ямах передемпфированы. Такая модель используется в физико-химической биологии для описания механических свойств глобулярных белков [1]. При этом совокупность локальных минимумов потенциальной функции (называемых конформационными состояниями) и способность системы переходить из одного минимума в другой являются важнейшими характеристиками, определяющими функционирование глобулярного белка. Требуется выяснить, как могут измениться конформационные свойства (положение минимумов и их относительная глубина), если приложить к части системы периодическую силу малого периода, не имеющую постоянной составляющей. Задача такого рода возникает при теоретическом описании механизма воздействия периодических электрических полей на глобулярные белки и другие биополимеры.

В настоящей работе дается качественный ответ на поставленный вопрос. С этой целью рассмотрена простейшая ситуация, когда имеется только одна степень свободы. Уравнение движения совпадает тогда с уравнением для ангармонического осциллятора в потенциале с несколькими минимумами, помещенного в вязкую жидкость, которая не является ньютоновской (неньютоновость биологических жидкостей – известный в реологии факт), т.е. сила трения зависит от скорости нелинейным образом. Поведение траекторий указанной системы исследуется в работе. При этом установлено, что каждая траектория либо уходит на бесконечность, либо выходит на финальный режим движения, когда координата изменяется внутри фиксированной малой области пространства, положение которой может значительно отличаться от положения локального минимума исходной потенциальной функции. При рассмотрении движения в грубом масштабе (наличие иерархии масштабов и времен характерно для внутренних движений в глобулярных белках [1]), когда размер указанной области пренебрежимо мал, можно говорить о новом локальном минимуме потенциальной функции. Последовательное рассмотрение позволяет заключить, что внешнее периодическое воздействие приводит к модификации потенциальной функций, состоящей в прибавлении к ней линейного по координате слагаемого. Набор конформационных состояний может при этом как деформироваться (изменение положения и глубины минимумов), так и качественно перестроиться (отдельные минимумы могут исчезнуть и/или появиться новые минимумы).

1. В размерных переменных уравнение движения ангармонического осциллятора с нелинейным трением и периодической вынуждающей силой имеет вид

$$(1)\qquad m\frac{d}{d\tau}V(\tau)+\Lambda V(\tau)-Eg\left(\frac{V(\tau)}{V_0}\right)=F_0 f\left(\frac{\tau}{T}\right)-\Phi_0\varphi\left(\frac{X(\tau)}{X_0}\right),$$

$$\frac{d}{d\tau}X(\tau)=V(\tau),$$

где X, V, m — координата, скорость и масса осциллятора; Λ характеризует линейное трение; E, V_0 и безразмерная функция g — нелинейное трение; Φ_0, X_0 и безразмерная функция φ — силу со стороны ангармонического потенциала; F_0, T и безразмерная функция f — вынуждающую силу (периода T). Константы F_0, $\Phi_0 \geqslant 0$ выбраны так, что функции f, φ не превосходят по модулю единицы. Функция g из физических соображений должна быть нечетной. Предполагается, что g и φ удовлетворяют условию Липшица с постоянными g^* и φ^* соответственно. Предполагается также справедливость неравенств

(2) $\quad Eg^*/(\Lambda V_0) < 1/2,$

(3) $\quad \Lambda T/m \ll 1,$

(4) $\quad m\varphi^* \Phi_0/(\Lambda^2 X_0) \ll 1.$

Неравенство (2) означает малость нелинейной компоненты трения по сравнению с линейной, (4) — передемпфированность собственных колебаний. Неравенство (3) выполняется, если период вынуждающей силы достаточно мал. В безразмерных переменных $t = \tau/T$, $x = X/(V_0 T)$, $v = V/V_0$ уравнение (1) имеет вид

(5) $$\dot v(t) + \lambda v(t) - \epsilon g(v(t)) = f_0 f(t) - \varphi_0 \varphi(k_0 x(t)), \qquad \dot x(t) = v(t).$$

2. Рассмотрим вспомогательное уравнение

(6) $$\dot v + \lambda v - \epsilon g(v) = h(t),$$

где $\| h \| \equiv \sup_{t \geqslant 0} |h(t)| < \infty$. Влияние возмущений правой части на единственное (см. [2, 3]) решение уравнения (6) оценивается

(7) $$\| \delta v \| \leqslant (\lambda - \epsilon g^*)^{-1} \| \delta h \|.$$

Рассмотрим уравнение

(8) $$\dot v + \lambda v - \epsilon g(v) = f_0 f(t) + d,$$

где $f_0 f(t)$ — 1-периодическая функция, не имеющая постоянной составляющей: $\langle f \rangle \equiv \int_0^1 f(t)\,dt = 0$. Уравнение (8) имеет единственное периодическое решение $v_d^*(t)$. Решение $v_d^*(t)$ асимптотически устойчиво, причем все решения стремятся к $v_d^*(t)$ при $t \to \infty$. Скорость выхода на установившийся режим движения (на периодическое решение) может быть оценена

(9) $$| v_d^*(t + \delta t) - V(t + \delta t) | \leqslant \exp((\epsilon g^* - \lambda)\, \delta t)\, | v_d^*(t) - v(t) |,$$

где $v(t)$ — произвольное решение уравнения (8).

Определение. Останавливающей силой для не имеющей постоянной составляющей вынуждающей силы $f_0 f(t)$ называется постоянная d_0, удовлетворяющая соотношению $\langle v_{d0}^* \rangle = 0$.

Теорема. *Останавливающая сила существует, единственна и удовлетворяет оценке*

(10) $\quad |d_0| \leqslant f_0.$

Доказательство производится переходом к интегральному уравнению для $v_d^*(t)$. Невозможность улучшить оценку (10) следует из рассмотрения конкретных ситуаций, например когда имеется только сухое трение.

Из определения и теоремы следует, что если в (8) $d = d_0 + b$, $b \neq 0$, то скорость в установившемся режиме движения будет иметь постоянную составляющую, удовлетворяющую соотношению

(11) $\langle v^*_{d0+b} \rangle = b(1+w(b))/\lambda$,

(12) $|w(b)| \leqslant \epsilon g^*/(\lambda - \epsilon g^*)$,

Рассмотрим уравнение

(13) $\dot v + \lambda v - \epsilon g(v) = f_0 f(t) + b(t)$,

где $f_0 f(t)$ – периодическая функция, а $b(t)$ – непериодическая, причем

(14) $\sup\limits_{t \geqslant 0} |(d/dt)\, b(t)| \leqslant b^*$.

Уравнение (13) обладает единственным решением $v(t)$ для произвольного начального условия. Будем говорить, что движение со скоростью $v(t)$ испытывает дрейф вправо (влево) на интервале $[t_0;\ t_1]$ $(t_1 - t_0 \leqslant 1)$, если для всех $n \in [t_0;\ t_1]$ $\int\limits_0^1 v(t+n)\,dt > 0 (< 0)$. По функции $b(t)$ определим кусочно-постоянную функцию $b^{\sim}(t)$ следующим образом: $t \in [n;\ n+1[\ \Rightarrow b^{\sim}(t) = b(n)$. Рассмотрим уравнение

(15) $\dot v^{\sim} + \lambda v^{\sim} - \epsilon g(v^{\sim}) = f_0 f(t) + b^{\sim}(t)$.

Из (7), (14) следует оценка

(16) $\| v - v^{\sim} \| \leqslant b^*/(\lambda - \epsilon g^*)$,

где v, $v^{\sim}$ – решения уравнений (13), (15) соответственно с равными начальными условиями.

Для произвольной функции $d(t)$ определим функцию $v^*_{d(t)}(t)$ как значение в момент t периодического решения уравнения (8) с $d = d(t)$, t – "заморожено".

На каждом интервале $t \in [n;\ n+1[$ (15) совпадает по форме с (8). Поэтому из оценок (3), (7), (9), (16) следует оценка

(17) $|v(t) - v^*_{b^{\sim}(t)}(t)| \leqslant b^*/(\lambda - \epsilon g^*)^2$,

где $v(t)$ – решение уравнения (13), справедливая на временах, когда произошло "забывание" начальной скорости (когда влиянием начальной скорости можно пренебречь). Переход к размерным величинам позволяет заключить, что охарактеризованная неравенством (17) точность аппроксимации решения уравнения (13) семейством периодических решений уравнений (8) тем выше, чем больше коэффициент трения Λ.

3. Уравнения (1), (5) обладают единственным решением для всех $t \geqslant 0$ (см. [2]). Наличие большого трения Λ в (1) позволяет заключить из энергетических соображений, что большие начальные скорости будут быстро затухать и начиная с некоторого момента t_0 влиянием начальной скорости можно пренебречь. Движение на этом этапе будем называть установившимся. Для установившегося движения из (7) имеем оценку

(18) $\sup\limits_{t \geqslant t_0} |v(t)| \leqslant (f_0 + \varphi_0)/(\lambda - \epsilon g^*)$,

где $v(t)$ – решение уравнения (5). Рассмотрев (5) как уравнение вида (13) с $b(t) = -\varphi_0 \varphi(k_0 x(t))$, имеем из (17), (18) оценку

(19) $|v(t) - v^*_{b^{\sim}(t)}(t)| \leqslant (f_0 + \varphi_0)\, \varphi_0 \varphi^* k_0/(\lambda - \epsilon g^*)^3$,

где $v(t)$ – решение уравнения (5), справедливую в установившемся режиме движения. Записав размерный вариант (19), можно видеть, что точность аппроксимации (19) обеспечивается большим трением Λ и "мягкостью" потенциальной функции (малыми значениями ее первых двух производных).

4. Наличие большого трения в (1) позволяет предположить, что начиная с некоторого момента времени влиянием начальной координаты можно пренебречь ("в малом"). Движение на этом этапе будем называть финальным (решением). Запишем уравнение (5) в виде

$$\dot{v} + \lambda v - \epsilon g(v) = f_0 f(t) + d_0 - (\varphi_0 \varphi(k_0(x(t)) + d_0 - d), \qquad \dot{x} = v, \tag{20}$$

где d_0 — останавливающая сила для $f_0 f(t)$, а d — некоторая постоянная. Если бы периодическая сила отсутствовала ($f_0 = d_0 = 0$), то финальное решение характеризовалось бы нулевой скоростью и координатой x, удовлетворяющей уравнению $\varphi_0 \varphi(k_0 x) - d = 0$. Для решения $v(t)$ уравнения (20) в установившемся режиме справедлива оценка (19) с

$$b(t) = -(\varphi_0 \varphi(k_0 x(t)) + d_0 - d): \tag{21}$$

$$| v(t) - v^*_{b\sim(t)}(t) | \leqslant (\varphi_0 + |d_0 - d|)\, \varphi^* k_0 (f_0 + d_0 + \varphi_0 + |d_0 - d|)/(\lambda - \epsilon g^*)^3 . \tag{22}$$

Из пп. 2, 3 и из (22) следует, что если заданная формулой (21) функция $b(t)$ в достаточной мере отлична от нуля в течение времени, достаточного для выхода на установившийся режим движения, то движение со скоростью $v(t)$, удовлетворяющей (20), будет испытывать дрейф. Действительно, согласно (11), (12), (22) для наличия постоянной составляющей у скорости $v(t)$ достаточно выполнения неравенства

$$| \varphi_0 \varphi(k_0 x(t)) - d + d_0 | > \delta,$$
$$\delta = (\varphi_0 + | d_0 - d |)(f_0 + \varphi_0 + d_0 + |d_0 - d|)\, \varphi^* k_0 /(1 - 2\epsilon g^* /\lambda)/(\lambda - \epsilon g^*)^2 .$$

Определим точку (точки) x^* следующим образом:

$$\varphi_0 \varphi(k_0 x^*) + d_0 - d = 0, \qquad \varphi'(k_0 x^*) > 0. \tag{23}$$

На основании вышесказанного можно утверждать, что в финальном режиме движения удовлетворяющая (20) траектория $x(t)$ будет сосредоточена в окрестности одной из точек x^*, определяемой неравенством

$$| \varphi_0 \varphi(k_0 x) + d_0 - d | \leqslant \delta. \tag{24}$$

5. Физически интересный случай характеризуется неравенствами $f_0 < \varphi_0$, $| d - d_0 | < \varphi_0$. Записав в этом случае размерный вариант (24), можно установить, что δ имеет порядок Λ^{-2} и малость δ обеспечена (4). В то же время d_0 имеет нулевой порядок по Λ. Поэтому естественной является ситуация, когда $\delta \ll d_0$. В этом случае из (24) следует, что если к ангармоническому осциллятору, подверженному действию периодической силы малого периода, приложена постоянная сила d, то траектория финального движения будет сосредоточена в области, удаленной от положений равновесия x_0, которые определяются соотношениями

$$\varphi_0 \varphi(k_0 x_0) - d = 0, \qquad \varphi'(k_0 x_0) > 0. \tag{25}$$

При наблюдении за движением в масштабе, когда размер области (24) пренебрежимо мал, эволюция в финальном режиме движения можно считать равновесием в положении x^*, определенном (23). Сравнивая (23) и (25), можно утверждать, что с точки зрения крупномасштабного наблюдения осциллятор, подверженный действию периодической силы, ведет себя так (в смысле устойчивых положений равновесия), как будто силовое поле $\Phi_0 \varphi(X/X_0)$ заменено на новое силовое поле $\Phi_0 \varphi(X/X_0)$ +

$+ D_0$ (где $D_0 = d_0 m V_0 / T$). Исходная потенциальная функция $\Phi_0 \Phi (X/X_0)$ при этом переходит в модифицированную потенциальную функцию $\psi (X)$:

$$\psi (X) = \Phi_0 \Phi (X/X_0) - D_0 X. \tag{26}$$

6. Для того чтобы описание эффекта действия периодической силы в терминах модифицированной потенциальной функции было адекватным, необходимо согласно (4), чтобы связь была мягкой, а вязкость большой. Необходима также физически обоснованная возможность пренебречь мелкомасштабными движениями на фоне крупномасштабных. Все эти требования выполняются для внутренних движений в глобулярных белках [1].

Величина модифицирующего эффекта определяется согласно (26) величиной останавливающей силы D_0, которая в рассмотренной модели может быть отличной от нуля, если закон трения нелинеен. (Аргументы в пользу нелинейности закона трения в глобулярных белках имеются в [4]). При этом абсолютное значение D_0 может быть близким к амплитуде вынуждающей силы F_0. В общем ситуации величина D_0 сложным образом зависит от формы сигнала $F_0 f(\tau/T)$. Форма сигнала, в свою очередь, определяется соотношением амплитуд и фаз отдельных его гармоник, т.е. информационным составом. Таким образом, здесь имеет место характерная для нелинейных систем чувствительность к информационному составу воздействия.

Автор благодарит В.Г. Самойленко, сделавшего ряд ценных замечаний.

Институт теоретической физики
Академии наук УССР
Киев

Поступило
5 II 1986

ЛИТЕРАТУРА

1. *Демченко А.П.* – Укр. биохим. журн., 1981, т. 53, № 4, с. 114–128; *Морозов В.Н. Морозова Т.Я.* – Мол. биол., 1983, т. 17, вып. 3, с. 505–517. 2. *Хартман Ф.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Мир, 1970. 720 с. 3. *Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А.* Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Физматгиз, 1958. 503 с. 4. *Видыбида А.К.* Периодическое электрическое поле как переключатель конформаций биополимеров. Препринт АН УССР, ИТФ–85–112Р. Киев, 1985. 36 с.