Компьютерное моделирование кривых и поверхностей

А. О. ИВАНОВ
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
e-mail: aoiva@mech.math.msu.su

А. А. ТУЖИЛИН
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
e-mail: tuz@mech.math.msu.su

А. Т. ФОМЕНКО
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
e-mail: fomenko@mech.math.msu.su

УДК 515.1

Ключевые слова: гладкое многообразие, функция Морса, граф Риба, атом, кривизна, конформация полимеров.

Аннотация

Первая часть работы посвящена изучению и моделированию слоений, порождаемых динамическими системами на фазовых и конфигурационных пространствах. Во второй части мы более подробно останавливаемся на случае кривых в трёхмерном пространстве и их геометрических характеристиках, которые могут оказаться полезными при моделировании конформации полимеров.

Abstract

A. O. Ivanov, A. A. Tuzhilin, A. T. Fomenko, Computer modeling of curves and surfaces, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 15 (2009), no. 5, pp. 63—94.

The first part of this work deals with the investigation and modeling of foliations generated by dynamic systems on their phase spaces and configuration spaces. In the second part, we speak in more details about curves and surfaces in three-dimensional space and their geometrical characteristics which can be useful for modeling of polymers conformation.

1. Топология слоений, порождаемых функциями Морса на двумерных поверхностях

1.1. Простые функции Морса

В современной качественной теории интегрируемых гамильтоновых дифференциальных уравнений большую роль играют понятия «атом» и «молекула»,

Фундаментальная и прикладная математика, 2009, том 15, № 5, с. 63—94.
© 2009 *Центр новых информационных технологий МГУ, Издательский дом «Открытые системы»*

введённые А. Т. Фоменко для топологической классификации названных выше динамических систем с двумя степенями свободы. Мы вкратце опишем эти понятия.

Рассмотрим пространство всех гладких функций на гладком многообразии. Как устроены типичные функции, функции общего положения? Чем они отличаются от экзотических функций? Ясно, что во многом свойства функции определяются характером её особенностей, т. е. тех точек, в которых её дифференциал равен нулю. Поэтому вопрос о типичности можно свести к вопросу, как устроены функции с типичными особенностями.

Рассмотрим гладкую функцию $f(x)$ на гладком многообразии X^n, и пусть $x_1, \ldots, x_n$ — гладкие регулярные координаты в окрестности точки x. Точка x называется *критической* для функции f, если дифференциал

$$df = \sum \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i$$

обращается в ноль в точке x. Это эквивалентно условию обращения в ноль всех частных производных функции в данной точке. Критическая точка называется *невырожденной*, если второй дифференциал

$$d^2 f = \sum \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} dx_i \, dx_j$$

невырожден в этой точке. Это эквивалентно условию, что матрица вторых частных производных имеет определитель, отличный от нуля.

Согласно известной лемме Морса в окрестности каждой невырожденной критической точки всегда можно выбрать такие локальные координаты, в которых функция запишется в виде квадратичной формы:

$$f(x) = -x_1^2 - x_2^2 - \ldots - x_\lambda^2 + x_{\lambda+1}^2 + \ldots + x_n^2.$$

Для каждой невырожденной критической точки число λ определено однозначно и называется её *индексом*. На рис. 1 показаны три возможных типа невырожденных критических точек для функции на двумерной поверхности: минимум, максимум, седло. Здесь же нарисованы линии уровня функции в окрестности каждой из этих особенностей.

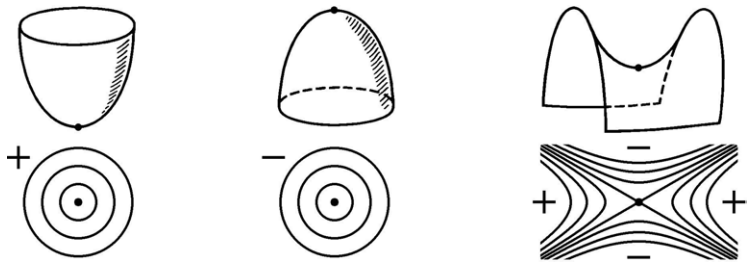


Рис. 1

Определение. Гладкая функция называется *функцией Морса*, если все её критические точки невырожденны.

Хорошо известно, что функции Морса всюду плотны в пространстве всех гладких функций на гладком многообразии. Другими словами, любую гладкую функцию сколь угодно малым шевелением можно превратить в функцию Морса. При этом сложные вырожденные критические точки рассыпаются в объединение некоторого числа морсовских, т. е. невырожденных, особенностей.

В дальнейшем через $f^{-1}(r)$ будем обозначать полный прообраз значения r функции f. Через a будем обозначать *регулярные значения* функции, т. е. такие значения, в прообразе которых нет ни одной критической точки. В этом случае $f^{-1}(a)$ всегда является гладким подмногообразием в X^n в силу известной теоремы о неявной функции. Через c будем обозначать *критические значения* функции, т. е. такие значения, в прообразе которых есть хотя бы одна критическая точка.

Сколь угодно малым шевелением функции Морса можно добиться, чтобы на каждом критическом уровне c (т. е. на множестве точек x, для которых $f(x) = c$) лежала ровно одна критическая точка. Другими словами, критические точки, попавшие на один уровень можно развести на близкие уровни (рис. 2). Функции Морса, имеющие ровно по одной критической точке на каждом критическом уровне, мы будем называть *простыми*.

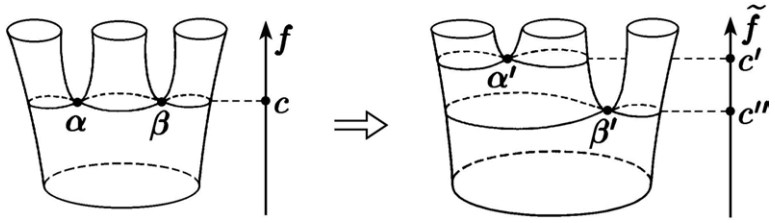


Рис. 2

1.2. Граф Риба функции Морса

Пусть f — функция Морса на компактном гладком многообразии X^n. Рассмотрим произвольную поверхность уровня $f^{-1}(a)$ и её компоненты связности, которые назовём *слоями*. В результате многообразие разбивается в объединение слоёв, получается слоение с особенностями. Подчеркнём, что каждый слой связен по определению. Объявляя каждый слой одной точкой и вводя естественную фактор-топологию в пространство слоёв Г, получаем некоторое фактор-пространство. Его можно рассматривать как базу этого слоения. Для функции Морса пространство Г является графом.

Определение. Граф Г называется *графом Риба* для функции Морса f на многообразии X^n. *Вершиной* графа Риба назовём точку, отвечающую особому

слою функции f, т. е. связной компоненте уровня, содержащей критическую точку функции. Вершину графа Риба назовём *концевой*, если она является концом ровно одного ребра графа. Все остальные вершины назовём *внутренними*.

Рассмотрим для примера двумерный тор в $\mathbb{R}^3$, вложенный так, как показано на рис. 3, и в качестве функции Морса возьмём естественную функцию высоты на торе. Тогда граф Риба имеет вид, показанный на рис. 3. На рис. 3 показан ещё один пример функции Морса на кренделе — функция высоты. Здесь граф Риба устроен сложнее.

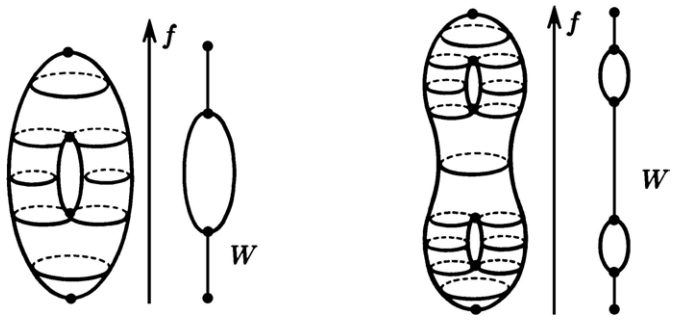


Рис. 3

Лемма. *Концевые вершины графа Риба взаимно-однозначно отвечают локальным минимумам и максимумам функции. Внутренние вершины графа Риба взаимно-однозначно отвечают особым слоям функции, содержащим седловые критические точки.*

Если заранее известно, что изучаемая поверхность является ориентируемой или неориентируемой, то граф Риба произвольной простой функции на ней позволяет восстановить топологию поверхности.

Теорема. *Граф Риба простой функции Морса на замкнутой двумерной ориентируемой* (*или неориентируемой*) *поверхности X^2 определяет эту поверхность однозначно с точностью до диффеоморфизма.*

1.3. Понятие атома

Пусть f — функция Морса на поверхности X^2. Пусть g — другая функция Морса на другой поверхности Y^2. Возникает естественный вопрос: когда эти функции на поверхностях можно считать эквивалентными? Рассмотрим пары (X^2, f) и (Y^2, g).

Определение. Функции Морса f и g на поверхностях X^2 и Y^2 будем называть *послойно эквивалентными*, если существует диффеоморфизм

$$\lambda\colon X^2 \to Y^2,$$

переводящий связные компоненты линий уровня функции f в связные компоненты линий уровня функции g. Иногда будем говорить, что пара (X^2, f) послойно эквивалентна паре (Y^2, g).

Замечание. При указанной послойной эквивалентности две связные компоненты какой-то одной линии уровня функции f могут отобразиться в связные компоненты, лежащие на разных линиях уровня функции g, т. е. компоненты связности, бывшие изначально на одном уровне одной функции, могут расползаться по разным уровням другой функции.

Дадим неформальное определение. *Атом* — это топологический тип особенности функции Морса. Другими словами, атом — это топологический тип связной компоненты окрестности особого слоя функции Морса на поверхности.

Каждая функция Морса определяет слоение с особенностями на поверхности. Его слоями по определению считаются компоненты связности уровня функции. В окрестности каждого регулярного слоя это слоение тривиально: прямое произведение окружности на отрезок. В окрестности критического слоя слоение может быть устроено довольно сложно.

Определение. *Атомом* назовём окрестность P^2 критического слоя, задаваемую неравенством $c - \varepsilon \leqslant f \leqslant c + \varepsilon$ для достаточно малого ε, расслоённую на линии уровня функции f и рассматриваемую с точностью до послойной эквивалентности. Другими словами, атом — это росток слоения на особом слое. Если критическое значение c — локальный минимум или локальный максимум, то атом будет называться *атомом A*. Если критическое значение c седловое, то соответствующий атом будем называть *седловым*. Атом будет называть *простым*, если функция Морса f в паре (P^2, f) простая. Остальные атомы будут называться *сложными*. Атом будет называться *ориентируемым* (*ориентированным*) или *неориентируемым* в зависимости от того, является ли поверхность P^2 ориентируемой (ориентированной) или неориентируемой.

Для дальнейшего полезно ввести важное понятие f-атома, или оснащённого атома, учитывающее направление роста функции f.

Пусть c — критическое значение функции f на X^2 и c' — критическое значение функции g на Y^2. Рассмотрим их особые слои $f^{-1}(c)$ и $g^{-1}(c')$ и предположим, что эти слои связны.

Определение. Функции Морса f и g называются *послойно оснащённо эквивалентными* в окрестности своих особых слоёв $f^{-1}(c)$ и $g^{-1}(c')$, если существуют два положительных числа ε и ε' и диффеоморфизм

$$\lambda\colon f^{-1}(c - \varepsilon, c + \varepsilon) \to g^{-1}(c' - \varepsilon', c' + \varepsilon'),$$

переводящий линии уровня функции f в линии уровня функции g и сохраняющий направление роста функций, т. е. λ отображает область $f > c$ в область $g > c'$.

Обозначим поверхность с краем $f^{-1}(c - \varepsilon, c + \varepsilon)$ через P^2_c. Индекс c будем часто опускать.

Определение. Рассмотрим пару (P^2, f), где P^2 — связная компактная поверхность с непустым краем ∂P^2, а f — функция Морса на ней, имеющая ровно одно критическое значение c, причём $f^{-1}(c-\varepsilon) \cup f^{-1}(c+\varepsilon) = \partial P^2$. Класс оснащённой послойной эквивалентности этой пары (P^2, f) будем называть *f-атомом* или *оснащённым атомом*.

1.4. Простые атомы

Как устроены линии уровня простой функции Морса, заданной на двумерной поверхности X^2?

Если a — регулярное значение функции, то соответствующая линия уровня состоит из нескольких непересекающихся гладких окружностей (рис. 4). Эти окружности как-то перестраиваются при переходе через особый уровень функции. Опишем эти перестройки. Рассмотрим сначала ориентируемую поверхность.

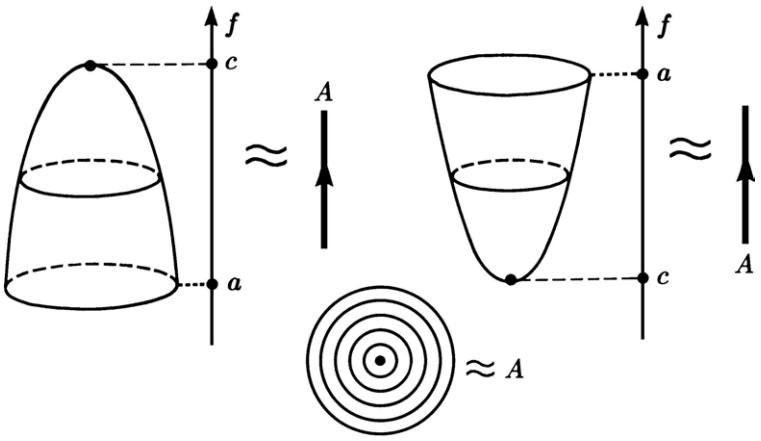


Рис. 4

Случай минимума и максимума. Атом A

Рассмотрим неособую линию уровня, близкую к точке минимума или максимума функции. Эта линия гомеоморфна окружности. Когда регулярное значение стремится к локальному минимуму или максимуму, окружность стягивается в точку (рис. 4). При этом двумерный диск расслаивается на концентрические окружности с общим центром, отвечающим точке локального минимума или максимума. Изобразим эту эволюцию линий уровня и перестройку следующим условным, но весьма наглядным образом. Каждую неособую линию уровня, окружность, изобразим как точку, расположенную на уровне a (рис. 4). При изменении a эта точка будет меняться и заметать отрезок. Когда значение функции

станет критическим, равным c, окружность сожмётся в точку. Изобразим это событие буквой A с выходящим из неё отрезком.

Совершенно аналогично поступим в случае минимума (рис. 4). Здесь отрезок спускается сверху и кончается внизу буквой A.

Будем также считать, что буква A обозначает диск с точкой в центре, расслоённый на концентрические окружности. Мы получили пример простого атома A.

Атому A отвечают два f-атома. Один из них соответствует максимуму функции f, другой — минимуму функции f. Условно будем различать их, ставя на ребре стрелку, показывающую направление роста функции (рис. 4). Эти f-атомы различны.

Случай ориентируемого седла. Атом B

Если c — критическое седловое значение, то линия уровня является восьмёркой. Когда a стремится к c, две окружности сближаются и сливаются в одной точке. Возникает перестройка линии уровня. Этот процесс показан на рис. 5.

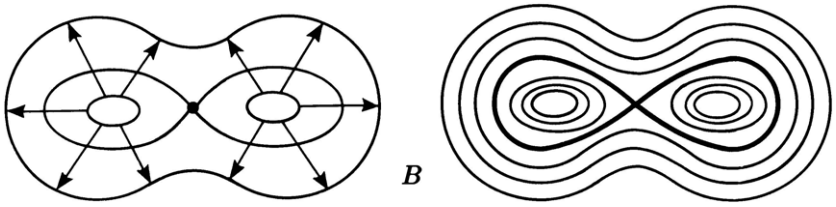


Рис. 5

Меняя направление движения, можно говорить, наоборот, о распаде одной окружности на две. Исходная окружность перетягивается, возникает перемычка, затем две точки окружности слипаются, после чего получившаяся восьмёрка распадается на две окружности. Поступая как и в предыдущем случае, т. е. изображая каждую регулярную окружность точкой и прослеживая их эволюцию при изменении уровня, получаем граф, показанный на рис. 6. Этот атом мы обозначим через B.

Ему также отвечают два f-атома. Они получаются, когда мы поставим стрелки на трёх рёбрах, инцидентных B, на рис. 6. Соответствующий граф с ориентированными рёбрами описывает либо распад одной окружности на две, либо, напротив, слияние двух окружностей в одну.

Атом B можно изобразить несколько по-другому (см. рис. 5), в виде плоского диска с двумя дырками, расслоённого на линии уровня функции Морса.

Случай неориентируемого седла. Атом $\tilde{B}$

Теперь откажемся от гипотезы ориентируемости X^2. Перестройки типа A устроены одинаково как в ориентируемом, так и в неориентируемом случае.

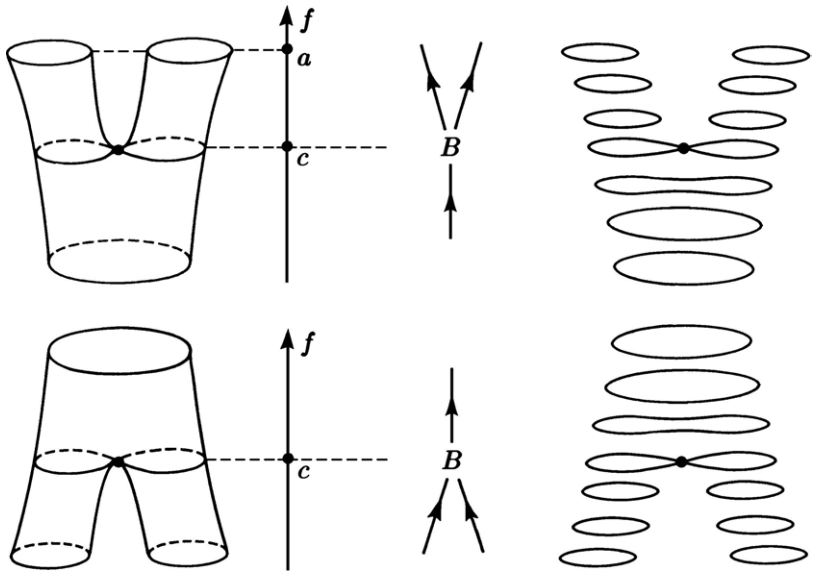


Рис. 6

Отличие возникает в случае седла. Сначала вспомним, как реально происходит седловая перестройка в ориентируемом случае. Она показана на рис. 7. К окружности, являющейся одной из компонент края многообразия $\{f(x) \leqslant c - \varepsilon\}$, где ε — малая величина, приклеивается узкая полоска, прямоугольник, причём приклейка происходит таким образом, что получающаяся поверхность остаётся ориентируемой. После перестройки граница оказывается гомеоморфной объединению двух окружностей. При замене функции f на функцию $-f$ направление перестройки меняется: две граничные окружности превращаются в одну.

Теперь перейдём к случаю, когда перестройка происходит внутри неориентируемой поверхности. Некоторые перестройки индекса 1, т. е. седловые, могут быть устроены здесь так же, как и в ориентируемом случае. Однако заведомо

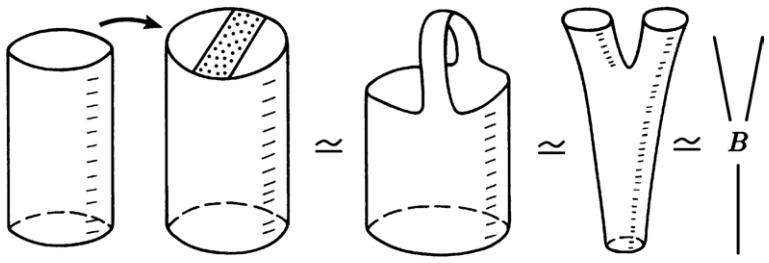


Рис. 7

есть по крайней мере одна перестройка, устроенная принципиально иначе. Она показана на рис. 8. Здесь перекрученный на 180° прямоугольник приклеивается к одной и той же граничной окружности поверхности с краем. В результате внутри поверхности $\{f \leqslant c+\varepsilon\}$ появляется новый лист Мёбиуса. Ясно, что после перестройки прежняя граничная окружность превращается снова в одну граничную окружность. Таким образом, при переходе через критический уровень c одна окружность преобразуется снова в одну окружность. Используя введённую выше символику, т. е. изображая каждую неособую линию уровня точкой, мы должны нарисовать описанную только что эволюцию так, как показано на рис. 8: ребро графа, в середине которого поставлена буква $\tilde{B}$. Эта буква условно обозначает неориентируемую перестройку.

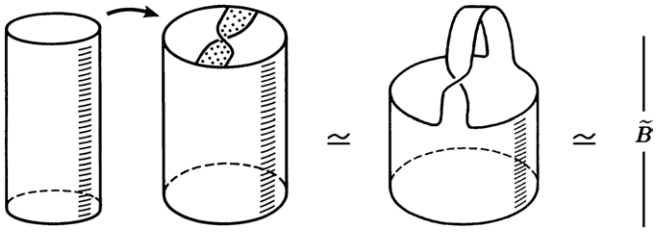


Рис. 8

На рис. 9 изображена поверхность $P^2 = f^{-1}(c-\varepsilon, c+\varepsilon)$ для неориентируемого атома $\tilde{B}$. Она получается склейкой двух листов Мёбиуса.

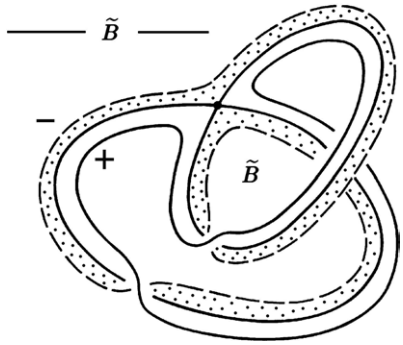


Рис. 9

Классификация простых атомов

Теорема. *Любой простой атом совпадает либо с атомом A, либо с атомом B, либо с атомом $\tilde{B}$. Этим трём атомам отвечают пять f-атомов: два — атому A, два — атому B и один — атому $\tilde{B}$.*

Доказательство. Рассмотрим малую окрестность критической седловой точки функции Морса, гомеоморфную диску, выделим в этой окрестности область $\{c - \varepsilon \leqslant f \leqslant c + \varepsilon\}$. Отметим в ней области положительности и отрицательности функции Морса. Получим объект, который иногда в дальнейшем будем называть крестом (рис. 10). Концами креста будем называть четыре ориентированных отрезка α, β, γ, δ (см. рис. 10). Ориентация каждого из них указывает направление роста функции, т. е. её градиента.

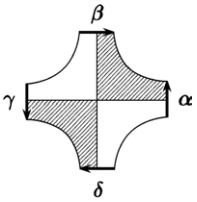


Рис. 10

Вся поверхность $P^2 = \{c - \varepsilon \leqslant f \leqslant c + \varepsilon\}$ получается из этого креста простой процедурой. Нужно попарно склеить концы креста с учётом их ориентации. Ясно, что число различных способов склейки равно трём. Склейки показаны на рис. 11. В результате мы получаем два различных ориентируемых f-атома, отвечающих атому B, и один неориентируемый f-атом, отвечающий атому $\tilde{B}$. Таким образом, в случае седлового атома никаких других возможностей нет. Теорема доказана. □

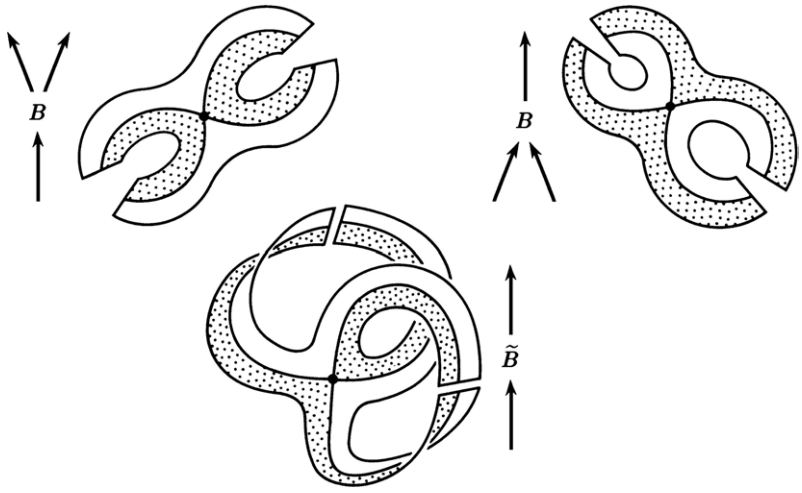


Рис. 11

1.5. Классификация атомов

Склейка атомов из крестов

Атомы бывают двух сортов: атомы типа A и седловые атомы. Атомы первого типа изоморфны между собой. Если мы сразу рассматриваем атом как класс эквивалентности, то лучше сказать, что атом A только один. Поэтому проблема классификации атомов актуальна, в действительности, для седловых атомов.

Как мы сейчас покажем, атомы допускают довольно красивую классификацию. Мы предъявим алгоритм, выписывающий полный список всех атомов. Затем мы укажем алгоритм, позволяющий сравнивать любые два атома и отвечать на вопрос, эквивалентны они или нет. Отметим, что классификация атомов — задача не вполне тривиальная. В самом деле, атом — это пара: поверхность с вложенным в неё графом. Рассмотрим сначала более общую задачу, когда на граф L, вложенный в поверхность, никаких ограничений не наложено. Пусть даны две такие пары: (P^2, L) и (P'^2, L'). Как выяснить, существует ли гомеоморфизм, переводящий P в P' и L в L'? Эта более общая задача алгоритмически разрешима. Хотя выяснение того, существует искомый гомеоморфизм или нет, для каждой конкретной пары поверхностей с графами может быть весьма громоздкой процедурой. В нашем же случае есть облегчающее обстоятельство, состоящее в том, что граф K, вложенный в поверхность P, обладает дополнительными свойствами. В частности, нам известно, что дополнение к графу L в поверхности P состоит из колец. Это позволит нам не только указать абстрактный алгоритм перечисления и распознавания, но даже реализовать этот алгоритм на компьютере. Другими словами, мы предъявим эффективную процедуру распознавания.

Алгоритм построения полного списка всех атомов

Ясно, что при построении алгоритма достаточно ограничиться атомами фиксированной сложности. Итак, рассмотрим множество всех атомов с одним и тем же числом вершин m.

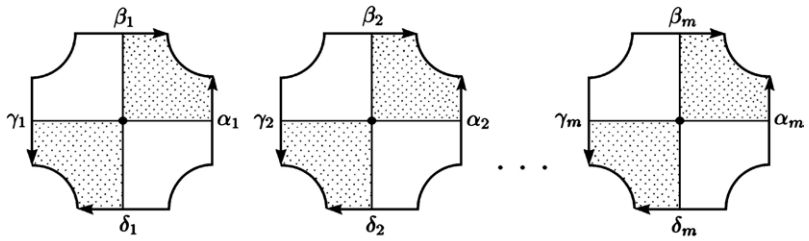
Возьмём множество, состоящее из m раскрашенных крестов. Раскрашенный крест показан на рис. 10. Стрелки на его концах направлены из белого цвета в чёрный. Пометим концы крестов буквами так, чтобы каждая буква встречалась в получившемся наборе ровно два раза. Другими словами, разобьём множество концов на пары и каждую пару пометим одной и той же буквой. Затем склеим концы, помеченные одинаковыми буквами, с учётом их ориентации, т. е. согласуя стрелки. Каждая такая склейка легко записывается, кодируется дискретной таблицей. Легко убедиться, что в результате склейки получится некоторый атом. Чёрные области крестов дадут положительные кольца атома, а белые области — отрицательные кольца. Перебирая все варианты склеек, строим некоторое множество поверхностей. Отберём из них только связные. В результате очевидно получим множество всех атомов данной сложности, хотя, возможно, с повторами, т. е. список избыточен: две разные таблицы, задающие склейки, могут породить одну и ту же поверхность с графом. Тем не менее мы алгоритмически получили полный список всех атомов.

Алгоритм распознавания одинаковых атомов

Осталось решить задачу алгоритмического распознавания в этом конечном (при фиксированном m) списке одинаковых (эквивалентных) атомов.

Пусть даны два атома, получившиеся в результате склейки крестов. Удобно сформулировать задачу выяснения их эквивалентности или неэквивалентности

следующим образом. Рассмотрим один набор крестов (крест 1), (крест 2),. . . , (крест m) и две таблицы, два кода, диктующие склейки их концов (рис. 12). Требуется выяснить, будут ли гомеоморфны получившиеся атомы, т. е. поверхности с графом.



α_1	β_1	γ_1	δ_1	α_2	β_2	γ_2	δ_2	. . .	α_m	β_m	γ_m	δ_m
$\sigma(\alpha_1)$	$\sigma(\beta_1)$	$\sigma(\gamma_1)$	$\sigma(\delta_1)$	$\sigma(\alpha_2)$	$\sigma(\beta_2)$	$\sigma(\gamma_2)$	$\sigma(\delta_2)$	. . .	$\sigma(\alpha_m)$	$\sigma(\beta_m)$	$\sigma(\gamma_m)$	$\sigma(\delta_m)$

$$\sigma(*) \neq * \qquad \sigma^2(*) = *$$

Рис. 12

Задание той или иной склейки крестов очевидно эквивалентно заданию некоторого элемента σ конечной группы перестановок S_{4m}. Напомним, что каждый крест имеет по четыре конца, и для задания склейки всех крестов нужно сказать, какой конец с каким склеивается. Это и даёт перестановку из $4m$ элементов. Впрочем, не любая перестановка σ задаёт склейку. Нужно выполнение некоторых простых условий:

1) поскольку концы крестов склеиваются попарно, то перестановка σ должна быть инволюцией;
2) так как каждый конец x сам с собой не склеивается, то $\sigma(x) \neq x$, т. е. каждый конец склеивается обязательно с каким-то другим концом.

Другими словами, необходимым условием является, что σ — это инволюция без неподвижных точек.

Верно и обратное. Любая такая инволюция реализуется в виде некоторой склейки набора крестов. В результате получается некоторый атом.

Обозначим описанное выше подмножество в группе перестановок через G_m.

Возвратимся к вопросу, какие же склейки одного и того же набора крестов дают один и тот же атом?

Предположим, что две склейки дали один и тот же результат. Это означает, что существует гомеоморфизм одного атома на другой. Но каждый атом состоит из крестов с указанными склейками их концов. Возникший гомеоморфизм атомов задаёт, следовательно, некоторый гомеоморфизм множества ещё не

склеенных крестов на себя. Этот гомеоморфизм является композицией двух преобразований. Первое преобразование — некоторая перестановка крестов. Чтобы получить второе преобразование, для каждого креста нужно указать некоторую его симметрию на себя, учитывающую его раскраску, т. е. переводящую белое в белое и чёрное в чёрное. Таких симметрий ровно четыре, они отвечают элементам группы $\mathbb{Z}_2 + \mathbb{Z}_2$.

Таким образом, на множестве G_m действует некоторая подгруппа H группы перестановок. Эта подгруппа была только что описана.

Для выяснения эквивалентности двух склеек теперь достаточно проверить, лежат две отвечающие им перестановки в одной и той же орбите действия этой группы H или принадлежат разным орбитам. Так как действующая группа H конечна и множество G_m тоже конечно, то ответ на этот вопрос даётся, например, простым перебором.

Поскольку мы с самого начала фиксировали раскраску крестов на чёрные и белые области, то в действительности описанный выше алгоритм распознает эквивалентные f-атомы, а не просто атомы. Нужно только добавить к описанной выше группе H ещё один класс преобразований — перестановку белого и чёрного цветов на всех крестах одновременно, т. е. на всём атоме. Получаем расширение группы H при помощи группы $\mathbb{Z}_2$. Образующая этой дополнительной группы $\mathbb{Z}_2$ действует следующим образом: на всех крестах одновременно выполняется симметрия относительно вертикальной прямой, проходящей через центр креста (рис. 12).

На рис. 13—18 показаны некоторые примеры атомов, в том числе и с большой группой симметрий.

Описанный алгоритм, конечно, достаточно прост и естественен, однако недостаточно эффективен из-за большого перебора. Причина этого ясна: мы опирались здесь на задание атома в виде склейки крестов. Этот способ хотя и нагляден, но, как было только что показано, ведёт к большому перебору при решении задач распознавания. Поэтому остаётся актуальной задача построения более эффективного алгоритма. Это можно сделать (см. подробности в [1]).

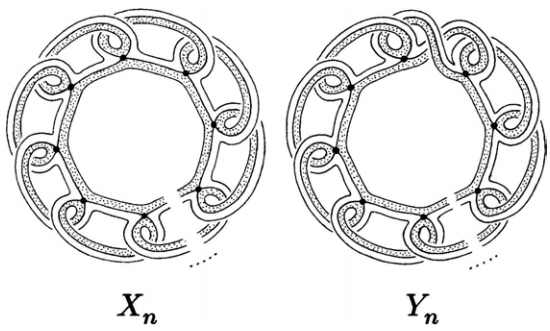


Рис. 13

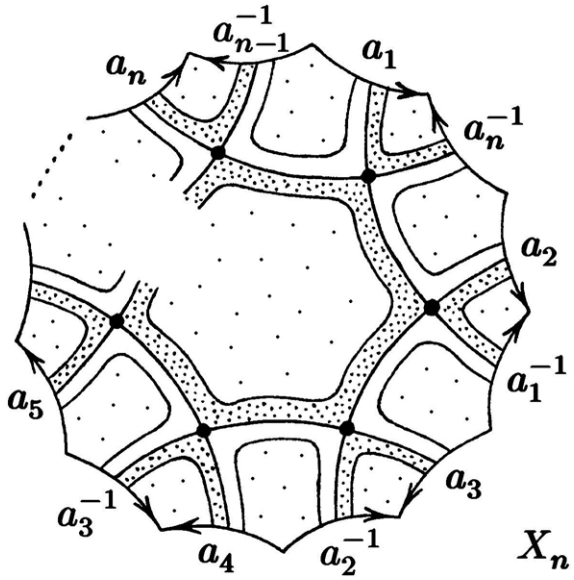

a_{n-1}^{-1}
a_n
a_1
a_n^{-1}
a_2
a_1^{-1}
a_5
a_3
a_3^{-1}
a_4
a_2^{-1}
X_n

Рис. 14

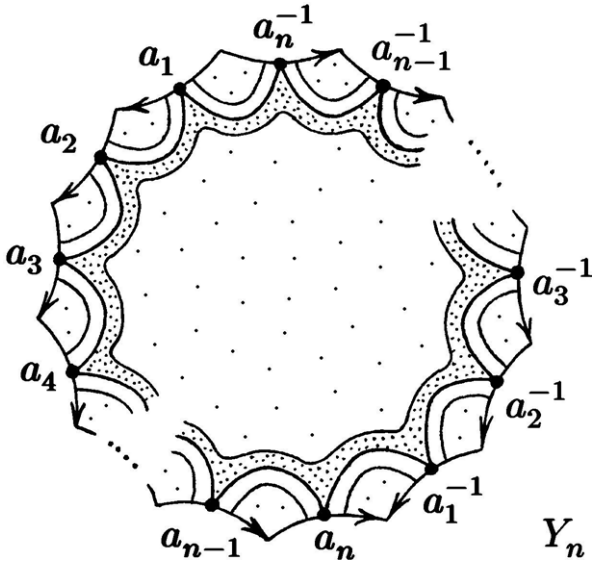

a_n^{-1}
a_1
a_{n-1}^{-1}
a_2
a_3
a_3^{-1}
a_4
a_2^{-1}
a_1^{-1}
a_{n-1}
a_n
Y_n

Рис. 15

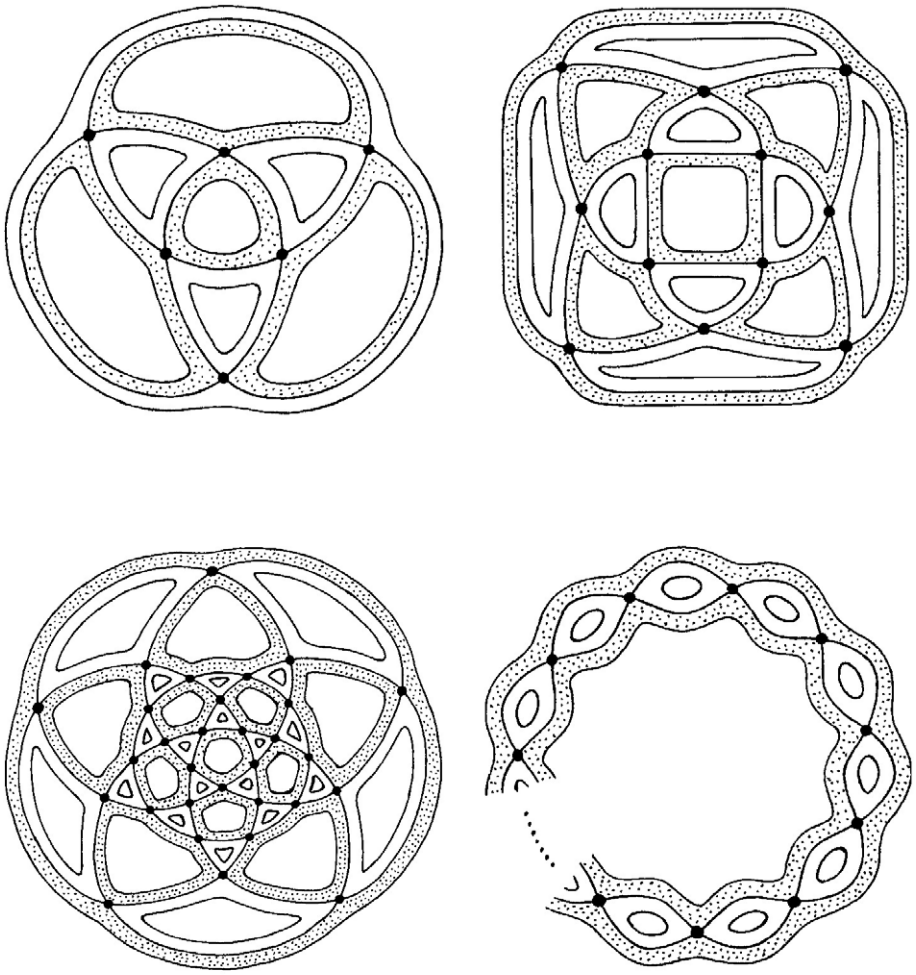


Рис. 16

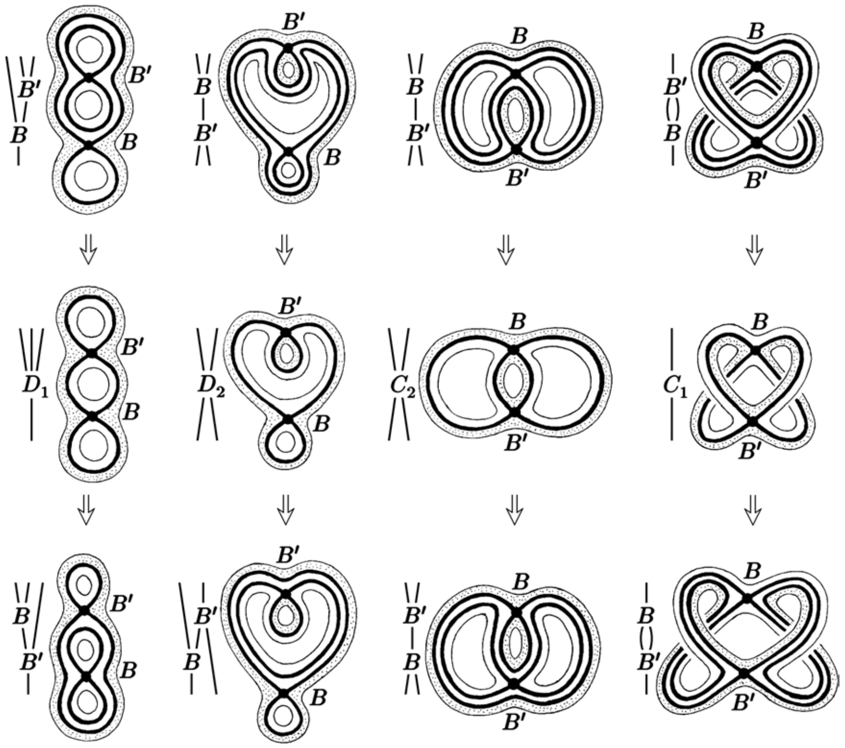


Рис. 17

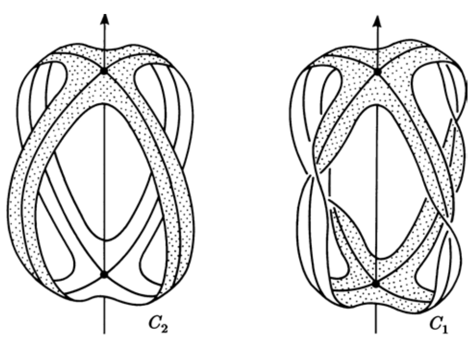


Рис. 18

2. Геометрия кривых и её приложение к исследованию конформации полимеров

Основная цель этого раздела — показать, как можно использовать геометрические характеристики ломаных для изучения конформации полимеров. Предлагаемые нами геометрические характеристики являются дискретными аналогами кривизны и кручения пространственных кривых, хорошо известных в классической дифференциальной геометрии. Основная теорема теории кривых утверждает, что по заданным кривизне и кручению кривая восстанавливается однозначно, с точностью до движения пространства. Оказывается, что у сложно устроенных кривых могут быть достаточно простые кривизна и кручение. Последнее позволяет надеяться, что можно получить более простое представление сложных форм полимеров, которое позволило бы существенно продвинуться в исследовании конформации.

Начнём с напоминания классических определений из дифференциальной геометрии.

Пусть

$$\gamma(s) = \big(x(s), y(s)\big) -$$

натурально параметризованная гладкая плоская кривая, т. е. функции $x(s)$, $y(s)$ непрерывно дифференцируемы нужное число раз, абсолютная величина скорости

$$\gamma'(s) = \big(x'(s), y'(s)\big)$$

движения по кривой равна 1.

Положим

- $v(s) = \gamma'(s)$ — *скорость* (её величина равна 1);
- $k(s) = |\gamma''(s)|$ — *кривизна*;
- $n(s) = \gamma''(s)/|\gamma''(s)|$ — *главная нормаль* (мы предполагаем, что кривизна отлична от нуля);
- (v, n) — *репер Френе*;
- $\{v' = kn;\ n' = -kv\}$ — *формулы Френе*.

Теорема. *Для каждой положительной гладкой функции $f(s)$ существует плоская натурально параметризованная кривая с кривизной $k(s)$, равной $f(s)$. Все такие кривые отличаются друг от друга на движение плоскости.*

Приведём примеры плоских кривых с заданными функциями кривизны.

Если $k(s) = 0$, то $\gamma(s)$ — прямая линия.

Если $k(s) = \text{const} \neq 0$, то $\gamma(s)$ — окружность.

Отметим, что простым функциям кривизны часто соответствуют сложно устроенные кривые. Для иллюстрации на рис. 20—28 приведём серию плоских кривых с кривизной вида

$$k(s) = a\cos^2(s) + 1.$$

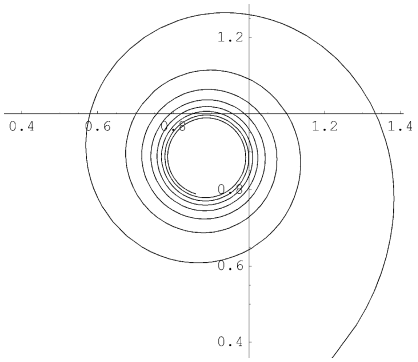


Рис. 19. Спираль. $k(s) = s$

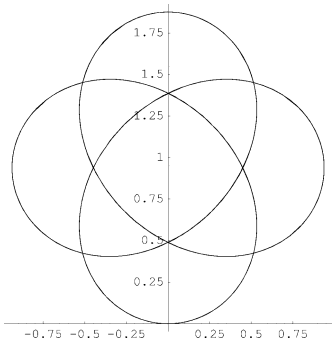


Рис. 20. $k(s) = \cos^2(s) + 1$

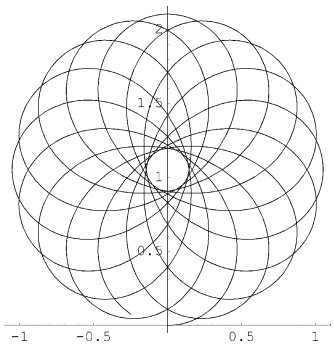


Рис. 21. $k(s) = \frac{5\cos^2(s)}{4} + 1$

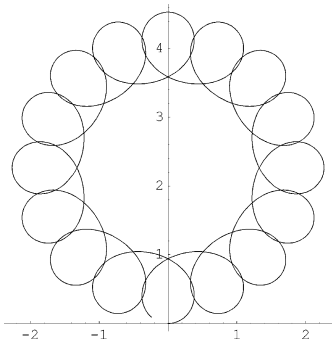


Рис. 22. $k(s) = \frac{7\cos^2(s)}{4} + 1$

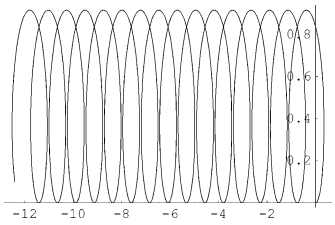


Рис. 23. $k(s) = 2\cos^2(s) + 1$

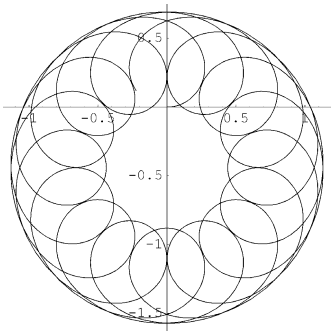


Рис. 24. $k(s) = \frac{11\cos^2(s)}{4} + 1$

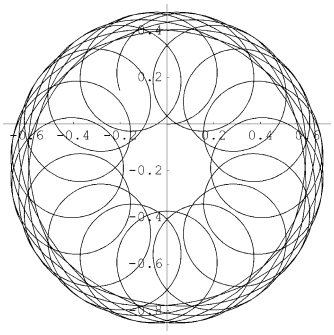


Рис. 25. $k(s) = \frac{15\cos^2(s)}{4} + 1$

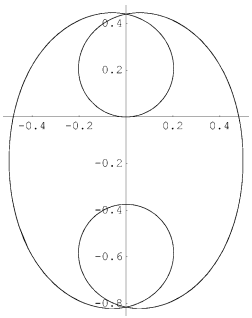


Рис. 26. $k(s) = 4\cos^2(s) + 1$

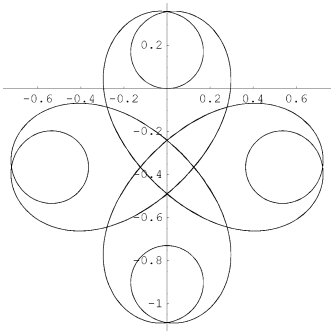


Рис. 27. $k(s) = 5\cos^2(s) + 1$

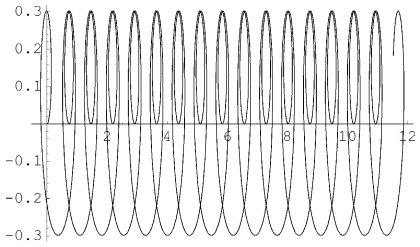


Рис. 28. $k(s) = 6\cos^2(s) + 1$

На рис. 29 можно видеть пример кривой с несколько более сложно устроенной кривизной.

Рассмотрим теперь случай пространственных кривых.

Пусть $\gamma(s) = \big(x(s), y(s), z(s)\big)$ — натурально параметризованная гладкая пространственная кривая, т. е. функции $x(s)$, $y(s)$, $z(s)$ непрерывно дифференцируе-

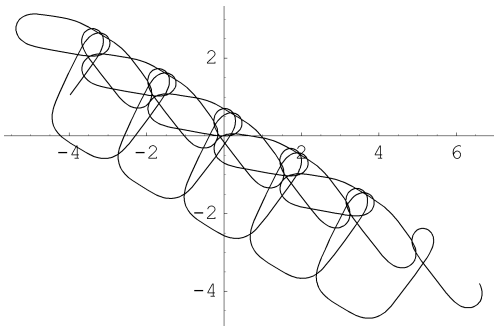


Рис. 29. $k(s) = \left(\cos(\frac{s}{3}) + \sin(2s)\right)^2$.

мы нужное число раз, абсолютная величина скорости $\gamma'(s) = \big(x'(s), y'(s), z'(s)\big)$ движения по кривой равна 1.

Положим

- $v(s) = \gamma'(s)$ — *скорость* (её величина равна 1);
- $k(s) = |\gamma''(s)|$ — *кривизна*;
- $n(s) = \frac{\gamma''(s)}{|\gamma''(s)|}$ — *главная нормаль* (мы предполагаем, что кривизна отлична от нуля, т. е. кривая *бирегулярна*);
- $b(s) = [v(s), n(s)]$ — *бинормаль* (здесь $[\,,\,]$ обозначает векторное произведение);
- (v, n, b) — *репер Френе*;
- $\{v' = kn;\ n' = -kv + \chi b;\ b' = -\chi n\}$ — *формулы Френе*;
- $\chi(s) = \langle b'(s), n(s)\rangle$ — *кручение*.

Теорема. *Для каждой положительной гладкой функции $f(s)$ и произвольной гладкой функции $g(s)$ существует пространственная натурально параметризованная кривая с кривизной $k(s)$, равной $f(s)$, и кручением $\chi(s)$, равным $g(s)$. Все такие кривые отличаются друг от друга на движение пространства.*

Приведём примеры пространственных кривых с заданными функциями кривизны и кручения.

Если $k(s) = 0$, то $\gamma(s)$ — прямая линия и кручение $\chi(s)$ не определено.

Если $\chi(s) = 0$, то $\gamma(s)$ — плоская кривая.

Если $k(s) = \text{const} \neq 0$ и $\chi(s) = 0$, то $\gamma(s)$ — окружность.

Если $k(s) = \text{const} \neq 0$ и $\chi(s) = \text{const} \neq 0$, то $\gamma(s)$ — винтовая линия (рис. 30).

Ниже приведена последовательность рисунков, демонстрирующая деформацию пространственной кривой при изменении кривизны и кручения. Справа на графике серым цветом показана кривизна, а чёрным — кручение кривой, изображённой слева.

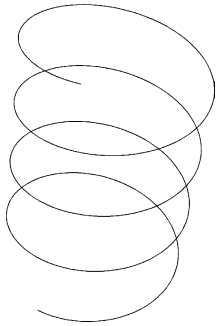
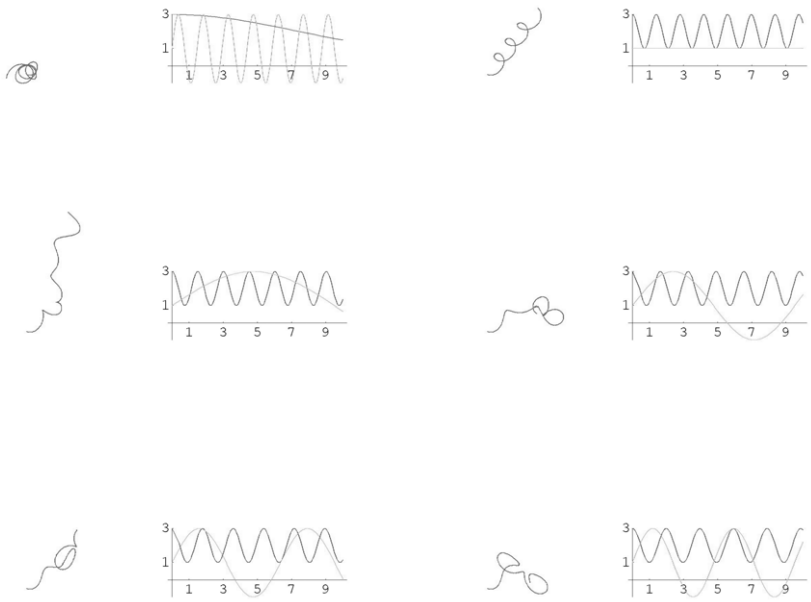
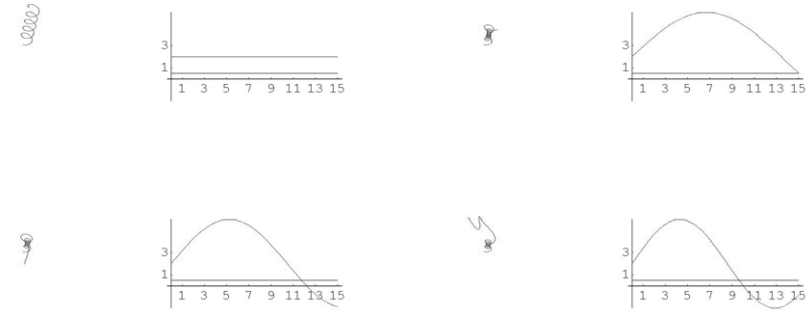
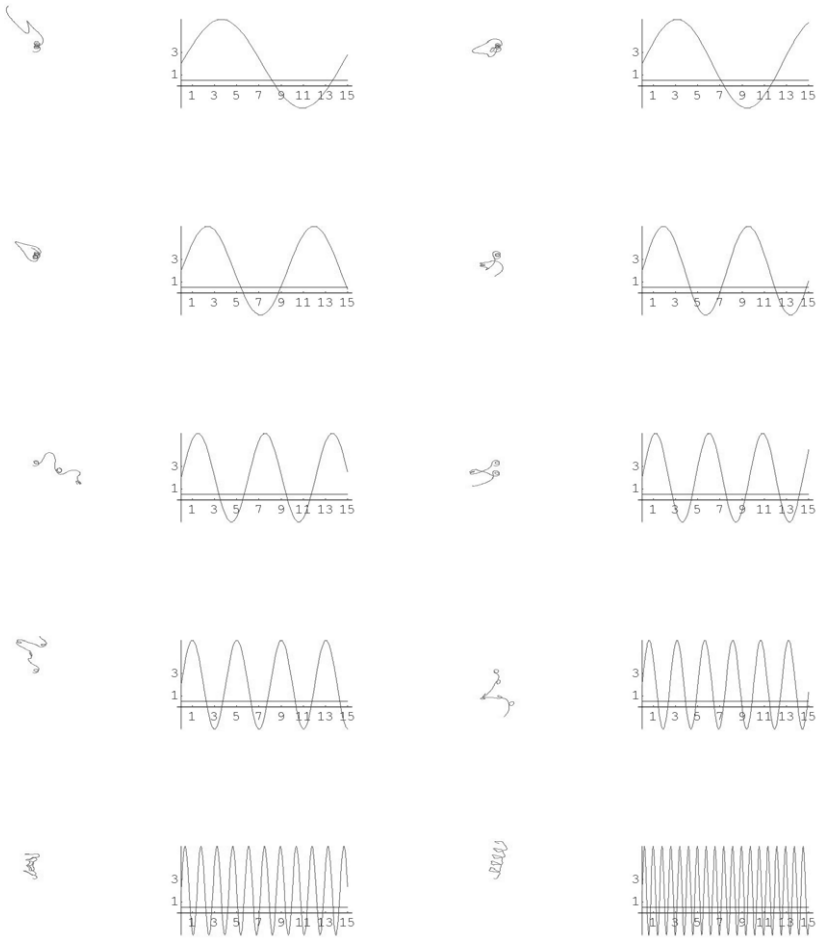


Рис. 30. $k(s) = 8$, $x(s) = 1$.



Ещё один пример. Справа на графике показаны кривизна и кручение кривой, изображённой слева (кручение не меняется).





Биологические полимеры обычно устроены достаточно сложно. На рис. 30 приведён пример, демонстрирующий это.

Покажем, как работают наши идеи на примере моделирования конформации белков. Форму белка будем описывать ломаной, соединяющей последовательные альфа-углероды (к которым крепятся радикалы).

Для описания геометрии ломаных мы будем использовать следующие их локальные геометрические характеристики:

- углы в вершинах (их естественно использовать для определения кривизны);

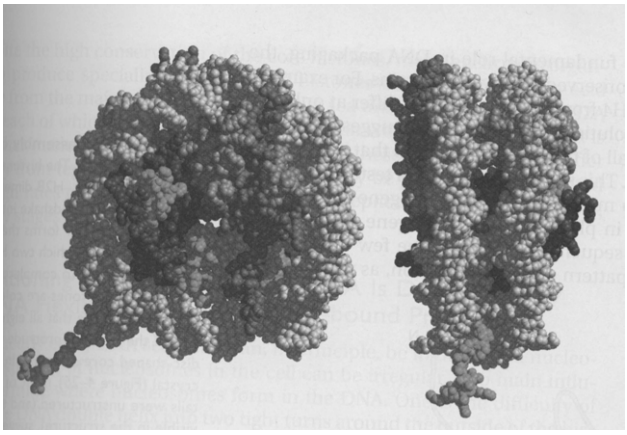


Рис. 31. Нуклеосома (светло-серым цветом окрашен фрагмент ДНК)

- угол между плоскостями, первая из которых натянута на $(i-1)$-е и i-е рёбра, а вторая — на i-е и $(i+1)$-е рёбра (их естественно использовать для определения кручения);
- длины рёбер (аналог выбора параметризации).

По этим данным ломаная восстанавливается однозначно с точностью до движения.

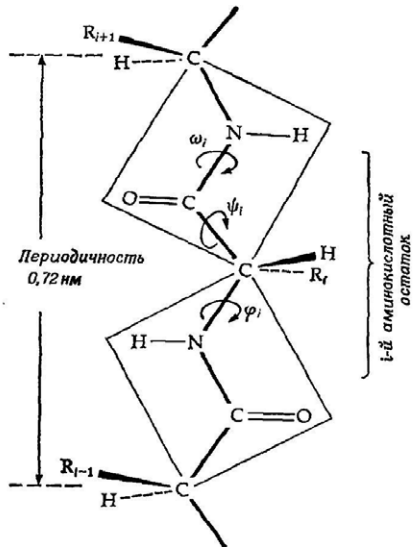


Рис. 32

Имеется много способов определения кривизны и кручения ломаной. Чтобы получить геометрически осмысленные характеристики, естественно требовать, чтобы при измельчении ломаной, вписанной в бирегулярную кривую, аналоги кривизны и кручения ломаной стремились бы к кривизне и кручению предельной кривой. Впрочем, оказывается, для полипептидов бывают полезны и характеристики, не обладающие этим свойством (в нашей модели полипептидам соответствуют ломаные частного вида, а именно те, у которых звенья имеют почти одну и ту же длину).

Приведём некоторые, на наш взгляд наиболее естественные, способы определения кривизны и кручения для ломаной:

- кривизна $= \alpha$, кручение $= \psi$ (так определённые кривизна и кручение при измельчении ломаной, вписанной в бирегулярную кривую, не стремятся к кривизне и кручению этой кривой);

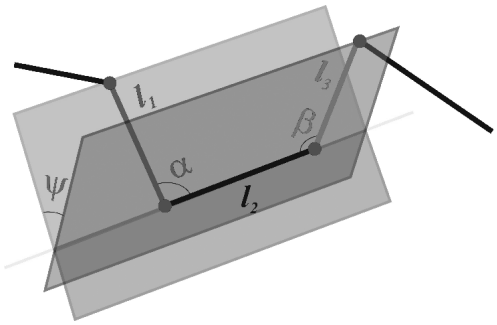


Рис. 33

- кривизна $= \frac{\alpha}{l_1+l_2}$, кручение $= \frac{\psi}{l_1+l_2+l_3}$;
- кривизна равна радиусу R окружности, описанной вокруг трёх последовательных вершин, что равно учетверённой площади соответствующего треугольника, делённой на произведение длин его сторон;

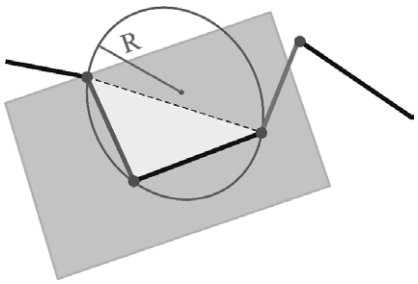


Рис. 34

кручение пропорционально объёму параллелепипеда, натянутого на три последовательных звена, делённому на произведение площадей двух последовательных треугольников.

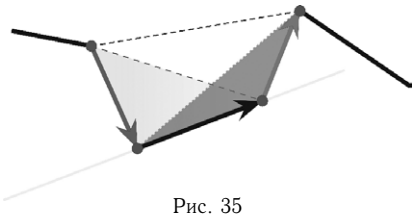


Рис. 35

Ниже приводятся результаты численного эксперимента, демонстрирующего вид определённых выше аналогов кривизны и кручения для фрагментов реальных белков.

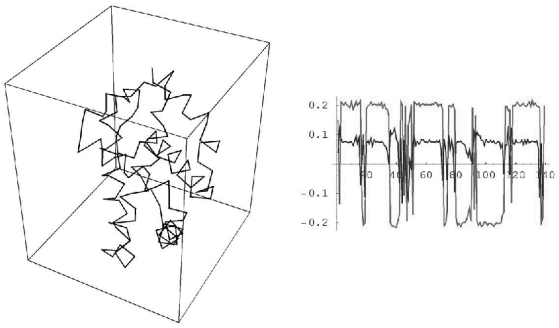


Рис. 36. Аномальный гемоглобин (первый метод)

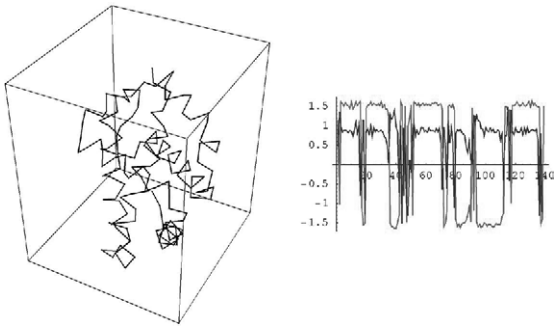


Рис. 37. Аномальный гемоглобин (второй метод)

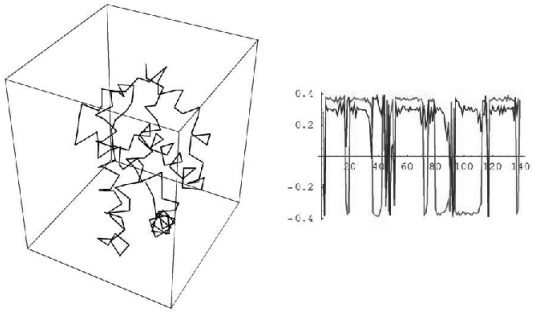


Рис. 38. Аномальный гемоглобин (третий метод)

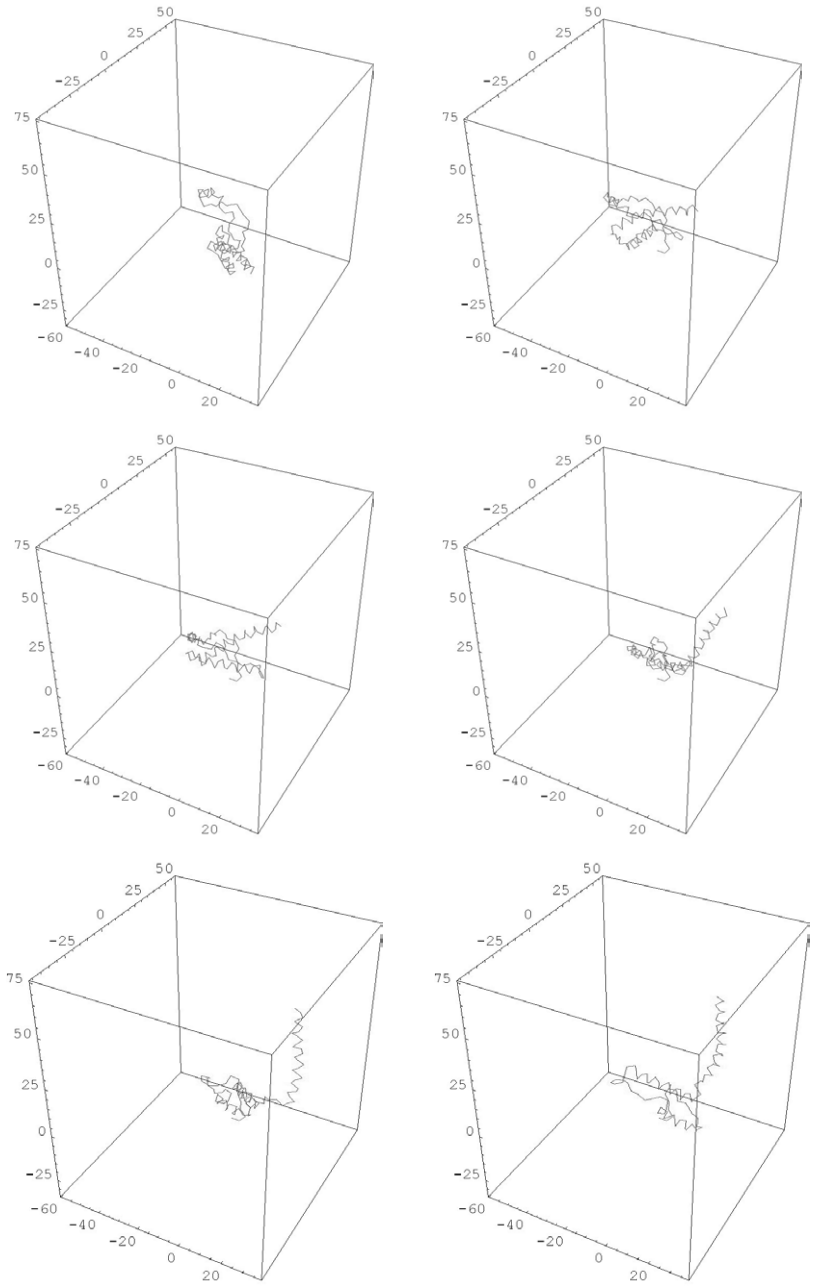
Заметим, что с точностью до скалярного множителя полученные графики похожи друг на друга. Этот эффект объясняется тем, что моделирующие белки ломаные имеют звенья почти одинаковой длины.

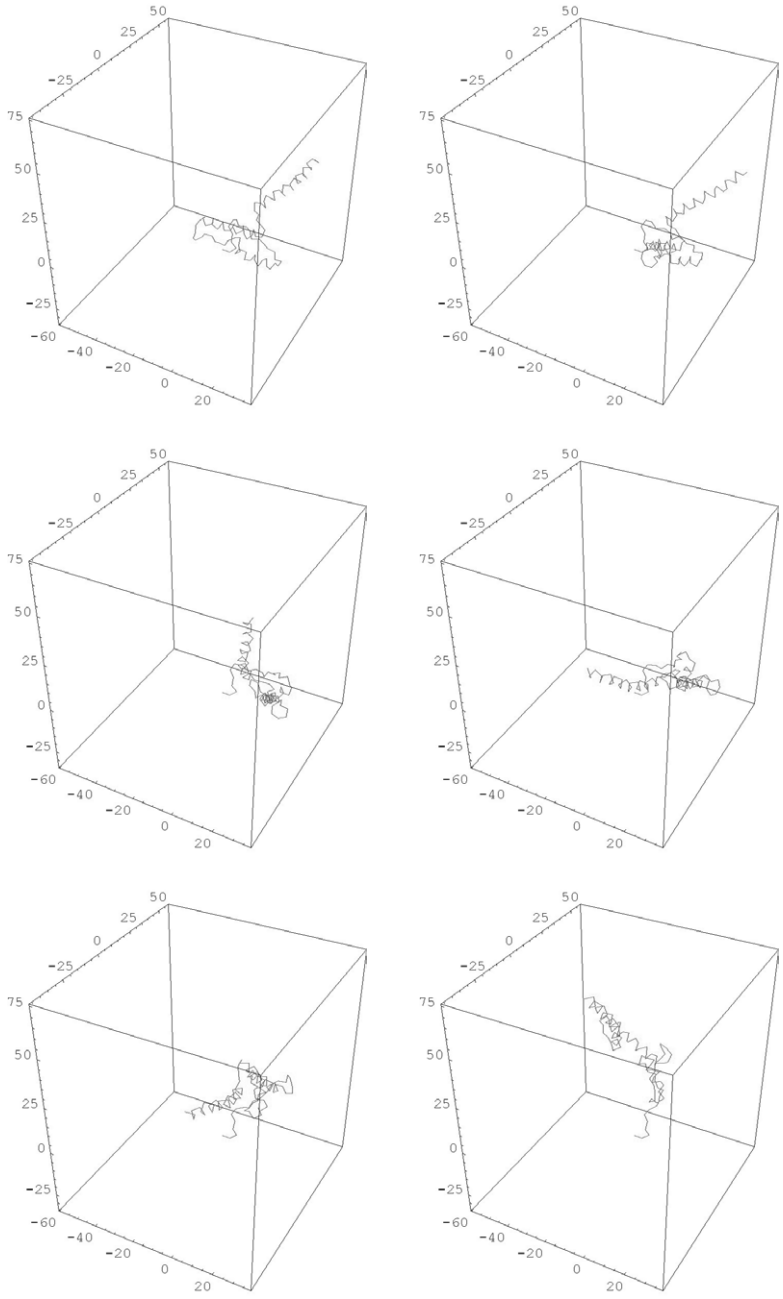
Напомним, что постоянство кривизны и кручения регулярных кривых является характеристическим свойством винтовых линий. У белков эти винтовые линии возникают как α-спирали. На полученных графиках участки, соответствующие α-спиралям, отчетливо видны, им соответствуют почти горизонтальные фрагменты. Кроме того, плоские фрагменты кривых характеризуются обнулением кручения. В белках такие фрагменты называются β-слоями. На приведённых графиках β-слои выделяются фрагментами, на которых кручение (серая кривая) осциллирует в окрестности нуля. Тем самым одно из возможных приложений построенных характеристик — автоматическое выделение α-спиралей и β-слоёв.

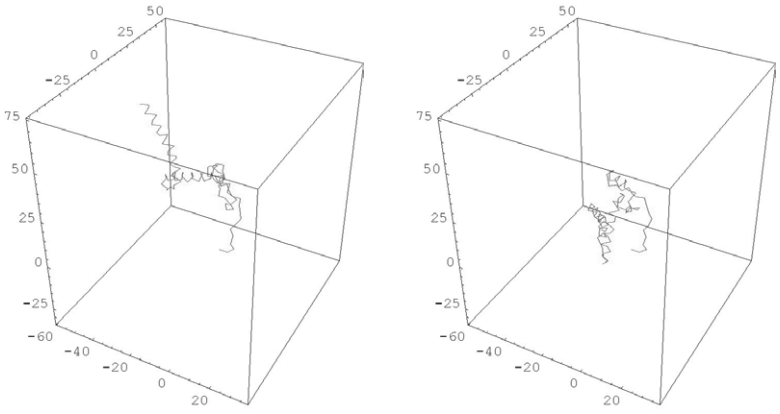
Ещё одно возможное приложение — статистическое исследование связи кривизн и кручений ломаной, описывающей белковую молекулу, с конкретными последовательностями аминокислот этой молекулы. Однако здесь требуется более сложная модель, разработкой которой занимается наша группа в настоящее время.

Также можно использовать построенные характеристики для моделирования изменения конформации белков. Идея состоит в том, чтобы устроить непрерывную деформацию кривизны и кручения начальной ломаной в кривизну и кручение конечной ломаной в подходящем классе функций и для каждого набора промежуточных значений кривизны и кручения построить соответствующую ломаную. Ниже приводятся возможные реализации.

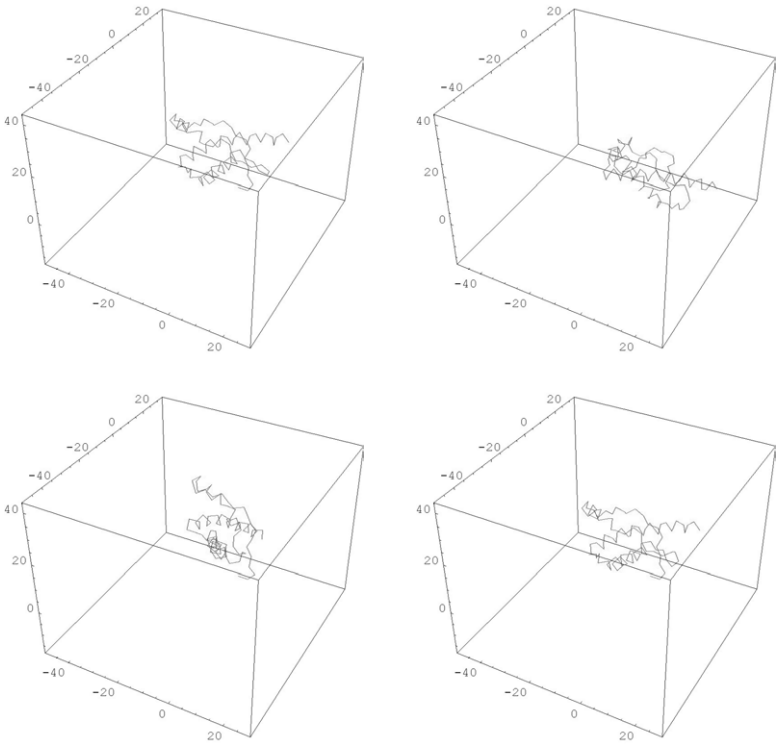
Человеческий прионный белок
(деформация, меняющие одновременно все кривизны и кручения)

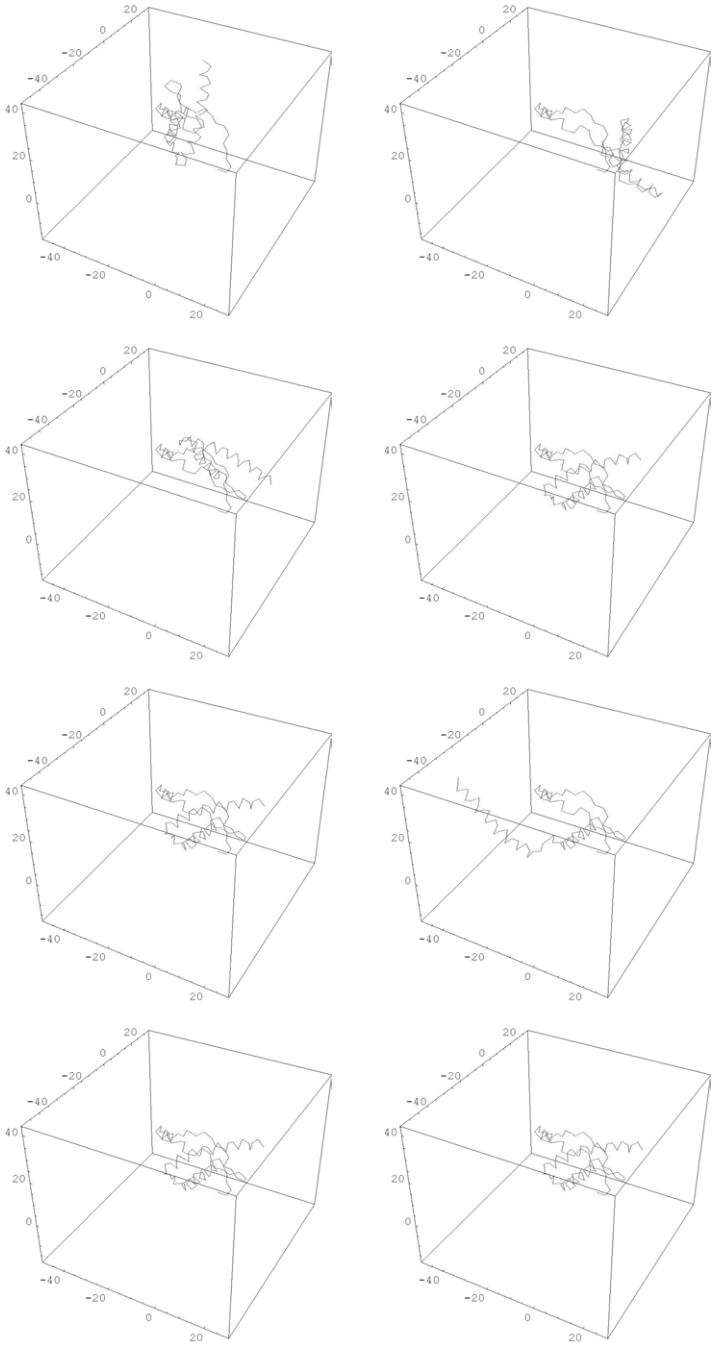



50
25
0
-25
75
50
25
0
-25
-60
-40
-20
0
20



Человеческий прионный белок
(деформация, меняющие кривизны и кручения внутри бегущей рамки)




20
0
−20
−40
40
20
0
−40
−20
0
20

Литература

[1] Болсинов А. В., Фоменко А. Т. Интегрируемые гамильтоновы системы. Геометрия. Топология. Классификация. — Ижевск: Удмуртский ун-т, 1999.