

Оптимальная динамика сферического сквирмера в Эйлеровом описании

В. П. Рубан¹⁾

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черногоровка, Россия

Поступила в редакцию 8 февраля 2019 г.

После переработки 8 февраля 2019 г.

Принята к публикации 21 февраля 2019 г.

Проблема оптимизации цикла касательных деформаций поверхности сферического объекта (микро-сквирмера), самопередвигающегося в вязкой жидкости при малых числах Рейнольдса, представлена в неканонической гамильтоновой форме. Получена эволюционная система уравнений для коэффициентов разложения поверхностной скорости по присоединенным полиномам Лежандра $P_n^1(\cos \theta)$. Система имеет квадратичную нелинейность, но в случае трех-модовой аппроксимации оказывается интегрируемой. Это позволяет теоретически интерпретировать численные результаты, полученные ранее для такой задачи.

DOI: 10.1134/S0370274X19080058

Введение. Гидродинамика плавающих микроорганизмов в настоящее время выделилась в отдельную ветвь науки на стыке биологии и механики (см. обзор [1] и многочисленные ссылки там). Кроме того, интерес к данной области имеется и со стороны создания медицинских нанороботов. Задачей гидродинамики в этой связи является количественное описание движения жидкости и погруженных в нее активных объектов. Микроорганизмы используют для своего перемещения разнообразные приспособления и приемы — жгутики, реснички, деформации поверхности и др. Решающее упрощение теории обусловлено тем фактом, что течения жидкости происходят при очень малых числах Рейнольдса [2], когда эффекты инерции в высокой степени несущественны по сравнению с вязкостью (режим Стокса). Поэтому поле скорости практически мгновенно и однозначно реагирует на любое изменение формы тела, сдвигая его при этом в пространстве. Важно, что если объект изменяет свое состояние периодически по времени, то его смещение за цикл может быть отличным от нуля только при условии наличия “петли” в пространстве параметров, характеризующих форму тела. Отсюда следует, что таких меняющихся во времени параметров — внутренних степеней свободы — должно быть не меньше двух. Был предложен ряд упрощенных моделей, которые позволили исследовать механику вязкого плавания во всех подробностях. Например, хорошо известны “три бусинки” с двумя перемычками переменной длины [3–6]. Изучались и другие, в том числе значительно более сложные модели (см.,

например, [2, 7–10] и ссылки там). Несколько иной тип плавания осуществляется за счет касательных деформаций поверхности тела без изменения его геометрической формы [11–15]. Такого типа модельный микроорганизм называется сквирмером (*squirmers*). Простейший сквирмер имеет сферическую форму и допускает простое и точное решение задачи в терминах присоединенных полиномов Лежандра [11, 12]. А именно, если в системе координат, связанной со сферой, касательное поле скорости раскладывается в ряд

$$u_\theta(\theta, t) = \sin \theta \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n(t) P_n^1(\cos \theta)}{n(n+1)}, \quad (1)$$

то скорость самого сквирмера вдоль оси его симметрии по отношению к покоящейся на бесконечности жидкости есть просто $U_{sq}(t) = a_1(t)/3$. Поскольку поверхностная скорость $u_\theta(\theta, t)$ обусловлена движением некоторых лагранжевых маркеров θ_0 , то фактически

$$u_\theta(\theta, t) = \left. \frac{\partial \theta(\theta_0, t)}{\partial t} \right|_{\theta_0 = \theta_0(\theta, t)}. \quad (2)$$

Периодическое по времени (взаимно однозначное) отображение $\theta(\theta_0, t)$ и определяет ту “петлю” в пространстве конфигураций сквирмера, которая приводит к его перемещению.

Здесь сразу же встает вопрос об оценке эффективности любого заданного цикла с точки зрения энергозатрат. Если учитывать только диссипацию механической энергии в окружающей жидкости и

¹⁾e-mail: ruban@itp.ac.ru

не касаться внутренних энергозатрат, то мгновенный темп диссипации дается выражением вида

$$Q \propto \sum_n \frac{D_n}{2n+1} a_n^2, \quad (3)$$

где $D_1 = 1$, а остальные коэффициенты определяются формулой [11, 12]

$$D_n = \frac{2n+1}{n(n+1)}, \quad n \geq 2. \quad (4)$$

Мы далее рассматриваем общий случай произвольных $D_n > 0$, за исключением численных примеров.

Задачу оптимизации цикла удобно переформулировать в других переменных [16]. Пусть $x = \cos \theta$, а лагранжево отображение поверхности есть $x(x_0, t)$. Тогда соответствующее поле скорости будет

$$v(x, t) = -\sin \theta u_\theta = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \left(\frac{d}{dx}\right)^{-1} P_n(x), \quad (5)$$

где

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^{-1} P_n(x) = -\frac{(1-x^2)P'_n(x)}{n(n+1)}. \quad (6)$$

При этом

$$a_n(t) = -\frac{(2n+1)}{2} \int P'_n(x) v(x, t) dx, \quad (7)$$

$$U_{\text{sq}}(t) = \frac{a_1(t)}{3} = -\frac{1}{2} \int v(x, t) dx. \quad (8)$$

Оптимальный цикл должен обеспечить максимальное смещение сферы за период при ограничении энергозатрат. Такой цикл был найден численно в работе [16] в терминах отображения $x(x_0, t)$ путем градиентной максимизации отношения $\langle a_1 \rangle^2 / \langle Q \rangle$, где угловые скобки означают усреднение по периоду. Однако временные зависимости для коэффициентов $a_n(t)$ были получены лишь опосредованно, уже после решения уравнения движения на $x(x_0, t)$. Интерпретировать поведение старших мод оказалось довольно затруднительно. В целом, аналитическая сторона вопроса осталась не до конца исследованной.

Целью данной работы является дополняющий по отношению к [16] теоретический анализ проблемы оптимизации сферического сквирмера с учетом имеющейся симметрии переобозначений лагранжевых маркеров $x_0 = x_0(\xi_0)$. Как будет показано далее, задача допускает получение системы уравнений движения непосредственно в терминах $a_n(t)$. К тому же, эти уравнения имеют всего лишь первый порядок по времени и разрешены относительно временной производной. Более того, трех-модовая аппроксимация

оказывается интегрируемой, что полностью выявляет структуру соответствующего решения.

Гамильтонова механика оптимизации. Нам будет удобно использовать стандартный язык консервативной динамики. Ввиду соотношения (8), наиболее эффективный цикл сквирмера должен доставлять минимум функционалу “действия” $A = \int L dt$ с лагранжианом

$$L[v] = \int_{-1}^1 \left(\frac{1}{2} v \hat{D} v + \lambda v\right) dx, \quad v = -\frac{\partial x_0 / \partial t}{\partial x_0 / \partial x}, \quad (9)$$

где λ представляет собой неопределенный множитель Лагранжа, а оператор \hat{D} дается формулой

$$\hat{D} v = -\sum_{k=1}^{\infty} D_k a_k(t) P'_k(x). \quad (10)$$

Варьированием действия по $\delta x_0(x, t)$ легко составить соответствующее динамическое уравнение Эйлера–Лагранжа и после простых преобразований получить из него следующее уравнение:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(vp) - p \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (11)$$

где введен канонический импульс $p(x, t) = \delta L[v] / \delta v$. В нашем случае

$$p = \hat{D} v + \lambda. \quad (12)$$

Обратим внимание, что лагранжево отображение само по себе здесь не фигурирует, и что порядок уравнения (11) по временной производной не второй, а всего лишь первый. Так проявляется упомянутая ранее симметрия переобозначений при переходе от лагранжева к эйлерову описанию.

Стоит отметить, что уравнение (11) обладает неканонической гамильтоновой структурой. Если определить функционал Гамильтона $H[p]$ стандартным образом как преобразование Лежандра от лагранжиана $L[v]$, то тогда $v = \delta H / \delta p$ и уравнение (11) переписется как

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{\delta H}{\delta p} \right) - p \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta H}{\delta p}. \quad (13)$$

Вариационный принцип $\delta \int \mathcal{L} dt = 0$ для таких динамических систем имеет несколько необычный вид:

$$\mathcal{L} = -\int \sqrt{p} \partial_x^{-1} \partial_t \sqrt{p} dx - H[p]. \quad (14)$$

Независимо от вида гамильтониана, имеется закон сохранения

$$\int \sqrt{p} dx = S = \text{const}. \quad (15)$$

Остается под вопросом случай, когда $p(x, t)$ – знакопеременная функция.

Уравнения для коэффициентов. Подставим теперь в уравнение (11) разложения (5) и (10), затем умножим на $(d/dx)^{-1}P_m(x)$ и проинтегрируем по x . В результате получим бесконечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{2D_m}{2m+1}\dot{a}_m = 2\lambda \sum_n \Omega_{mn}a_n + \sum_{n,k} W_{mnk}a_n D_k a_k, \quad (16)$$

где элементы антисимметричной матрицы Ω даются выражениями

$$\Omega_{mn} = -\Omega_{nm} = -\int_{-1}^1 P_n(x) \left(\frac{d}{dx}\right)^{-1} P_m(x) dx. \quad (17)$$

Используя свойства полиномов Лежандра, нетрудно понять, что отличны от нуля только элементы между соседними модами, причем

$$\Omega_{m,m-1} = \frac{2}{(2m+1)(2m-1)}. \quad (18)$$

Тензор квадратичной нелинейности W также антисимметричен по своим первым двум индексам. После интегрирования по частям он приводится к виду

$$W_{mnk} = \left[\frac{1}{m(m+1)} - \frac{1}{n(n+1)} \right] J_{mnk}, \quad (19)$$

$$J_{mnk} = \int_{-1}^1 (1-x^2) P'_m(x) P'_n(x) P_k(x) dx. \quad (20)$$

Очевидно, что здесь отличны от нуля только такие элементы, для которых сумма трех индексов является четным числом: $m+n+k=2s$. Кроме того, должно выполняться условие $(m+n) \geq k$. Несколько первых элементов W равны: $W_{1,2,1} = 4/15$, $W_{1,2,3} = -4/35$, $W_{1,3,2} = 2/7$, $W_{2,3,1} = 4/35$, $W_{2,3,3} = 2/105$.

По причине антисимметрии Ω и W темп диссипации на оптимальном цикле оказывается интегралом движения, то есть константой во времени,

$$\sum_m \frac{D_m}{2m+1} a_m^2 = E = \text{const}. \quad (21)$$

Таким образом, движение происходит на эллипсоиде в многомерном фазовом пространстве.

Конечно-модовые аппроксимации. Численные результаты работы [16] свидетельствуют о том, что на оптимальном решении амплитуды a_n убывают экспоненциально с ростом номера n . Если оборвать цепочку уравнений (16), положив $a_n = 0$ при $n > N$, то полученная таким образом конечномерная динамическая система перестанет быть гамильтоновой.

“Испортится” также интеграл движения (15). Однако польза от таких приближений все же будет, если только удастся найти такие их решения, на которых последние моды содержат лишь малую часть от полной “энергии”. В этой связи необходимо отметить случаи $N = 3$ и $N = 5$. При $N = 3$ уравнения выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{2D_1}{3}\dot{a}_1 &= -\frac{4\lambda}{15}a_2 + \frac{4}{15}a_2 D_1 a_1 - \\ &\quad - \frac{4}{35}a_2 D_3 a_3 + \frac{2}{7}a_3 D_2 a_2, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \frac{2D_2}{5}\dot{a}_2 &= \frac{4\lambda}{15}a_1 - \frac{4\lambda}{35}a_3 - \frac{4}{15}a_1 D_1 a_1 + \\ &\quad + \frac{4}{35}a_1 D_3 a_3 + \frac{4}{35}a_3 D_1 a_1 + \frac{2}{105}a_3 D_3 a_3, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \frac{2D_3}{7}\dot{a}_3 &= \frac{4\lambda}{35}a_2 - \frac{2}{7}a_1 D_2 a_2 - \\ &\quad - \frac{4}{35}a_2 D_1 a_1 - \frac{2}{105}a_2 D_3 a_3. \end{aligned} \quad (24)$$

У этой системы имеется еще один интеграл движения вида $F(a_1, a_3) = C$, поскольку в правых частях первого и третьего уравнений множитель a_2 выносится за скобки. Их отношение не содержит переменной a_2 и соответствует автономной линейной неоднородной системе с особой точкой в виде фокуса. Фазовая траектория оказывается пересечением эллипсоида (21) и поверхности из семейства $F(a_1, a_3) = C$ (предполагается, что фокус находится за пределами эллипсоида). Пример динамики трех мод показан на рис. 1а. В случае же $N = 5$ удается без особого труда подобрать такие начальные условия, что фазовая траектория оказывается близкой к периодической и проходит через относительно малые a_4 и a_5 , как это показано на рис. 1б. В качественном отношении эта картинка очень похожа на рис. 6 из работы [16]. Но количественно рис. 1б представляет другой оптимальный цикл, поскольку локальных минимумов функционала действия на самом деле много, как было отмечено авторами работы [16].

Что касается систем с $N > 5$, то для них алгоритм численного поиска подходящих периодических решений автором пока не разработан. Метод же проб и ошибок ничего не дал.

Необходимо подчеркнуть, что задача оптимизации не заканчивается на решении динамической системы (16). Еще необходимо отобрать те решения, на которых перемещение действительно максимально. Однако вполне может оказаться, что при учете дополнительных ограничений на свойства лагранжевых отображений некоторые не вполне оптимальные решения могут оказаться предпочтительнее. Например, если наиболее оптимальное решение дикту-

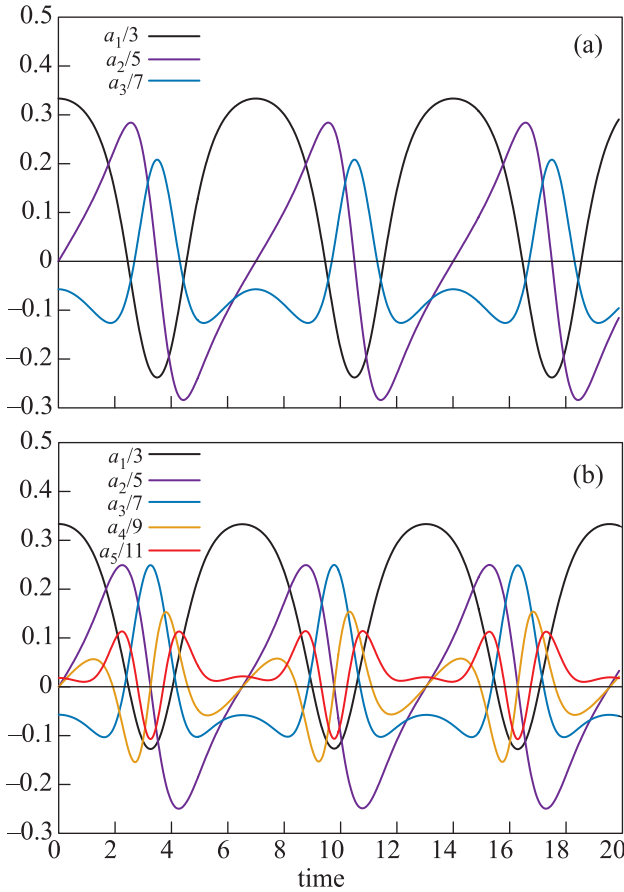


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Трех-модовая аппроксимация. (б) – Пяти-модовая аппроксимация

ет слишком большие смещения лагранжевых маркеров по углу θ , которые невозможны по внутреннему устройству реального сквирмера, то пригодятся решения с меньшей амплитудой.

Заключение. Таким образом, переход к эйлерову описанию оптимальной динамики сферического сквирмера выявил ее неканоническую гамильтонову структуру и позволил вывести удобные для численного решения уравнения движения непосредственно в терминах коэффициентов разложения поля скоро-

сти на поверхности. Найденные приближенные решения и их расположение в фазовом пространстве позволяют лучше понять поведение нескольких наиболее важных первых мод.

Аналогичный подход может быть использован и для других осесимметричных сквирмеров. Только разложение поля скорости $v(x, t)$ нужно будет вести по подходящим наборам функций, в зависимости от геометрической формы объекта.

Работа выполнена в рамках госзадания # 0033-2019-0003.

1. E. Lauga and T. R. Powers, Rep. Prog. Phys. **72**, 096601 (2009).
2. E. M. Purcell, Am. J. Phys. **45**, 3 (1977).
3. A. Najafi and R. Golestanian, Phys. Rev. E **69**, 062901 (2004).
4. R. Golestanian and A. Ajdari, Phys. Rev. E **77**, 036308 (2008).
5. F. Alouges, A. DeSimone, and A. Lefebvre, Eur. Phys. J. E **28**, 279 (2009).
6. R. Zargar, A. Najafi, and M. Miri, Phys. Rev. E **80**, 026308 (2009).
7. J. E. Avron, O. Gat, and O. Kenneth, Phys. Rev. Lett. **93**, 186001 (2004).
8. E. Gauger and H. Stark, Phys. Rev. E **74**, 021907 (2006).
9. D. Tam and A. E. Hosoi, Phys. Rev. Lett. **98**, 068105 (2007).
10. D. Takagi, Phys. Rev. E **92**, 023020 (2015).
11. M. J. Lighthill, Commun. Pure Appl. Math. **5**, 109 (1952).
12. J. R. Blake, J. Fluid Mech. **46**, 199 (1971).
13. O. S. Pak and E. Lauga, J. Eng. Math. **88**, 1 (2014).
14. M. Theers, E. Westphal, G. Gompper, and R. G. Winkler, Soft Matter **12**, 7372 (2016).
15. D. Papavassiliou and G. P. Alexander, J. Fluid Mech. **813**, 618 (2017).
16. S. Michelin and E. Lauga, Physics of Fluids **22**, 111901 (2010).