

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ “ВЫСШАЯ  
ШКОЛА ЭКОНОМИКИ”»

Факультет физики

Шишкин Максим Алексеевич

**НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ВЕЗИКУЛ**

Выпускная квалификационная работа  
по направлению подготовки 03.04.02 Физика  
образовательная программа «Физика»

Научный руководитель:  
к.ф. - м.н., доц.  
Пикина Елена Сергеевна

Москва  
2024

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Общие гидродинамические уравнения</b>	<b>9</b>
2.1	Исключение течения в объёме	11
2.2	Функция Грина для аксиально-симметричного случая	12
2.2.1	Самодействующая асимптотика	13
2.3	Параметризация аксиально-симметричной поверхности	14
2.3.1	Выражения для физических величин	14
<b>3</b>	<b>Численная реализация</b>	<b>16</b>
3.1	Задание формы и нахождение физических величин	16
3.1.1	Выражения на оси симметрии	17
3.1.2	Восстановление точности для аксиальной кривизны	18
3.1.3	Аналитическое продолжение на окружности	18
3.2	Численное интегрирование особенностей	20
3.2.1	Логарифмическая особенность	20
3.2.2	$\mathcal{P.V.} \frac{1}{x}$ особенность	21
3.3	Нахождение скорости через поверхностный интеграл	22
3.3.1	Масштабы поверхностного отклика	22
3.3.2	Регуляризованные квадратурные схемы	24
3.4	Нахождение поверхностной дивергенции скорости	26
3.4.1	Квадратурное приближение	28
3.5	Нахождение поверхностного натяжения	30
3.5.1	Квадратурное приближение	31
3.5.2	Квадратурное приближение оператора	31
3.6	Калибровочная свобода	32
3.6.1	Задание оптимальной калибровки	33
3.6.2	Смена калибровки на естественную	34
3.6.3	Произвольная перекалибровка	34
3.6.4	Динамика с сохранением калибровки	34
3.6.5	Динамика с сохранением естественной калибровки	35
3.7	Устойчивость динамики	37
<b>4</b>	<b>Релаксационная динамика</b>	<b>38</b>
4.1	Спектр нормальных возмущений	40

4.1.1	Локально-нормальная динамика . . . . .	41
4.1.2	Локальная квазидинамика . . . . .	42
4.2	Бифуркационная диаграмма сплюснутых везикул . . . . .	45
4.2.1	$\mathcal{V} = \mathcal{V}_{sto}$ Бифуркация седло-узел . . . . .	46
4.2.2	$\mathcal{V} = \mathcal{V}_c$ Фазовый переход первого рода . . . . .	47
4.2.3	$\mathcal{V} = \mathcal{V}_{ob}$ Суперкритическая бифуркация типа вилки . . . . .	48
4.3	Ветвь вытянутых везикул . . . . .	49
<b>5</b>	<b>Жемчужная неустойчивость вытянутых везикул . . . . .</b>	<b>53</b>
5.1	Внешнее натяжение везикулы . . . . .	53
5.2	Спектр нормальных возмущений . . . . .	54
5.3	Динамика в нелинейном режиме . . . . .	55
	<b>Заключение . . . . .</b>	<b>60</b>
	<b>Список использованных источников и литературы . . . . .</b>	<b>62</b>
	<b>Приложение 1 Тензор напряжений мембраны . . . . .</b>	<b>67</b>
	<b>Приложение 2 Функция Грина в цилиндрических координатах . . . . .</b>	<b>70</b>
	<b>Приложение 3 Функциональный базис . . . . .</b>	<b>73</b>
	<b>Приложение 4 Конечные элементы . . . . .</b>	<b>78</b>

# 1 Введение

Биологические мембраны являются одним из важнейших признаков жизни. Являясь границей, разделяющей клеточное содержимое и внешнюю среду, мембраны должны удовлетворять огромному количеству частично противоречивых требований. Мембрана должна выполнять одновременно функции защиты содержимого клетки от воздействия внешней среды и обеспечивать поток информации и питательных веществ в клетку и из нее. Физически она должна быть достаточно механически стабильной, чтобы противостоять агрессивной среде и в то же время податливой, чтобы обеспечивать рост клеток, их деление и динамические изменения формы.

Основным строительным материалом биологических мембран являются липиды, а также множество типов белков. Хотя существует огромное разнообразие различных липидов (в клетках было идентифицировано более 1000 различных типов), мембраны всех клеток содержат липиды, имеющие одинаковую базовую молекулярную архитектуру.[1]

В данной работе мы рассматриваем простейший случай, когда мембрана состоит только из липидного бислоя. Именно такие мембраны обычно используются в гидродинамических экспериментах с везикулами. Мы интересуемся процессами, происходящими на масштабах много большей толщины липидного бислоя, что позволяет рассматривать мембрану как двумерную пленку, помещенную в трёхмерную вязкую жидкость.

Следует упомянуть важные физические свойства мембраны: двухслойные мембраны являются текучими в смысле сопротивления сдвигу. Однако, двухслойная структура также является прочной в том смысле, что в ней не образуются отверстия, и, хотя сферическая форма значительно деформируется, двухслойные материалы не “разрезаются” и не “склеиваются”, образуя еще более сложные формы, которые, предположительно, могли бы быть еще более выгодными с энергетической точки зрения. Кроме того, на типичных масштабах времени проведения эксперимента можно считать, что мембрана непроницаема для окружающей жидкости. [2, 3]

Гидродинамическое описание мембраны должно начинаться с написания вклада в свободную энергию, ассоциированную с деформациями мембраны. Заметим, что липидный бислой имеет некоторую равновесную поверхностную концентрацию молекул при данной температуре, которая может быть достигнута изменением площади однородной мембраны. Это приводит к тому, что поверхностное натяжение липидных бислоев крайне мало, что, во-первых, объясняет мягкость такого объекта и его поверхностную несжимаемость, а во-вторых, указывает на необходимость учета из-

гибной энергии Хельфриха:

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \int_S \kappa \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^2,$$

где интеграл берется по поверхности мембраны,  $R_1, R_2$  - локальные радиусы кривизны,  $\kappa$  - изгибная жесткость (феноменологическая константа)<sup>1</sup>. В математической литературе такой функционал известен под названием энергия Уиллмора.

Статические свойства везикул могут быть изучены только в результате анализа указанной свободной энергии, так как равновесные формы минимизируют изгибную энергию при фиксированной площади поверхности  $S$  (в силу несжимаемости мембраны) и объеме  $V$  (в силу непроницаемости и несжимаемости жидкости). Энергия Хельфриха-Уиллмора является конформно-инвариантным функционалом от формы поверхности. В частности, энергия не чувствительна к изменению масштаба, поэтому равновесная форма везикулы определяется единственным параметром - приведенным объемом  $\mathcal{V} =$ , который меньше единицы и равен ей для случая сферической везикулы. Фазовая диаграмма делится на сплюснутые формы и вытянутые, при этом к ветви сплюснутых форм при умеренном приведенном объеме относится только эритроцитная форма, а при достаточно малом приведенном объеме абсолютному минимуму свободной энергии отвечает стоматоцитная форма. Также известны фазовые диаграммы для асимметричной мембраны, когда в энергию Хельфриха входит добавочный член, пропорциональный средней кривизне в первой степени.[4—11]

Наш интерес состоит в изучении эволюции форм везикул со временем в различных условиях. Эта задача гораздо сложнее статической, т.к. требует принятия во внимание гидродинамических свойств окружающей вязкой жидкости. Заметим, что благодаря изгибной жесткости и несжимаемости мембраны, динамика липидных везикул отличается от динамики обычных капель, где поверхность раздела жидкость—жидкость обладает поверхностным натяжением, но не сохраняет площадь поверхности.

Динамические уравнения были получены сперва в без-диссипативном для мембраны приближении, считая, что на мембране индуцирован тензор напряжений, возбуждающий течение в объеме, которое увлекает саму везикулу.[12—14] Позже было получено полное описание с добавлением как мембранной вязкости, так и теплового динамического шума.[15].

Хотя речь идет о течениях с малыми числами Рейнольдса, которые описываются линейным гидродинамическим уравнением (уравнением Стокса), форма везикулы

---

<sup>1</sup>Заметим, что  $\kappa$  логарифмически перенормируется при исключении мелкомасштабных флуктуаций в рамках ренорм-групповой процедуры.

со временем существенно изменяется. Это делает систему динамических уравнений сильно нелинейной и приводит к необходимости численного моделирования процесса. Моделирование динамики везикул представляет из себя не очень простую задачу, поскольку предполагает решение сильно нелокальных уравнений на поверхностях, не обладающих внутренней симметрией. Если традиционными для численного моделирования локальной динамики полей являются методы, использующие конечные элементы и быстрые алгоритмы работы с разреженными матрицами, то в такой системе все матрицы теряют разреженность, что сильно затрудняет существенное продвижение, т.к. требует разработки специальных алгоритмов. Однако теоретическое описание динамики сильно упрощается, если форма везикулы несильно отличается от модельной поверхности. Первые теоретические исследования динамики как раз проводились либо для везикул близких к сферическим, либо к цилиндрическим, для которых можно строить теорию возмущения по параметру отклонения от идеальной формы. Бислой является весьма «мягким» объектом (в силу малости поверхностного натяжения) и его форма может быть легко деформирована за счет внешних воздействий. Так внешняя сила может вывести из равновесия цилиндрическую везикулу через так называемую «жемчужную неустойчивость» (pearling instability), что представляет собой явление, при котором в центральной области самопроизвольно образуются шарики «жемчужины аналогично неустойчивости Рэлея–плато для капель [16]. После пионерской работы Бар-Зива и Мозеса [17] такая неустойчивость наблюдалась при различных способах индуцирования:

- оптическим пинцетом [18]
- электрическим полем [19]
- магнитным полем [20]
- осмотическим шоком [21, 22]
- адсорбцией наночастиц или полимеров [23]
- растягивающим потоком [24]

Эти изменения формы являются следствием воздействия внешней силы, вызывающей натяжение мембраны везикулы. Когда это натяжение превышает пороговое значение порядка изгибной жесткости, мембрана становится неустойчивой к длинноволновым возмущениям осесимметричной формы. Анализ устойчивости в рамках линейной теории устойчивости для бесконечной цилиндрической везикулы был проведен вскоре

после появления экспериментальной работы [25—27], однако аккуратные выражения для спектра нормальных возмущений с учетом тангенциального баланса сил были получены много позже [28].

С развитием вычислительных мощностей появилась возможность моделировать динамику везикул произвольных форм, далеких от сферы или цилиндра. Были разработаны программы численного моделирования аксиально-симметричной динамики [29], после чего появились работы, моделирующие нелинейную динамику вытянутых везикул конечного размера в растягивающем потоке: в работе [30] использован подход, схожий с использованным в этой работе, однако вычисления проводились в сферических координатах, что не позволило описывать динамику сильно вытянутых везикул. Позже появились работы по моделированию произвольной (не аксиально-симметричной) динамики [31]. Заметим, что качественное численное моделирование сильно вытянутых везикул в нелинейном режиме, судя по всему, всё ещё не проведено в силу крайне быстрого роста необходимого числа узлов решетки при увеличении длины везикулы, что вкупе с неразрезанностью возникающих операторов ведет к существенному увеличению требуемой памяти и машинного времени.

Отдельный цикл работ, важный для понимания общей реологии биологических жидкостей, был посвящен задаче о везикуле во внешнем сдвиговом потоке. Была получена фазовая диаграмма различных динамических режимов: экспериментально [32, 33], в рамках теории возмущения вблизи сферической формы [34—38] и прямым численным моделированием [39].

Везикулы являются природным инструментом для инкапсуляции важных биохимических соединений в процессах меж- и внутриклеточного транспорта. Практический интерес данной работы отчасти основан на сравнительно недавно разработанной методике искусственного производства везикул<sup>2</sup> методом ”выдувания” из планарной мембраны направленным потоком жидкости [40—44].<sup>3</sup> В частности, сформированы технологические карты (с видео-инструкцией) для таких процессов [45]. При этом в некоторых режимах выдувания сперва образуется вытянутая трубочка, из которой в последствии формируется образуются не одна, а несколько везикул - сателлитов.[46]. Такой процесс имеет много общего с упомянутой ”жемчужной неустойчивостью” вытянутых везикул конечной длины, теоретическому описанию которой посвящена последняя глава данной работы. Также, за последние несколько лет появились различные модификации процедуры, основанные на микрофлюидном способе генерации везикул, например, формирование везикулы, содержащей другую везикулу [47]

---

<sup>2</sup>Везикула выступает в качестве искусственной капсулы для хранения и высвобождения лекарств, биомолекул и других активных ингредиентов для биомедицинской, фармацевтической, пищевой и потребительской промышленности.

<sup>3</sup>в которой могут быть растворены вещества, которые должны быть помещены в везикулу-капсулу.

и использование акустической линзы вместо микропипетки в качестве источника направленного потока [48]. Более подробно ознакомиться со способами приготовления везикул можно в недавних обзорах [49—51] и книге [11]. Микрофлюидные методы обеспечивают беспрецедентную степень контроля над структурой везикул, и несмотря на богатую экспериментальную деятельность в этой области, работы по теоретическому моделированию таких процессов нам не известны, что и определило тематику данной работы.

*Цели* магистерской дипломной работы естественно разбить на два блока:

1. Более технический, связанный с реализацией общего алгоритма для моделирования нелинейной динамики везикул, в рамках которого были поставлены следующие задачи:

- Формулирование полной системы гидродинамических уравнений, описывающей эволюцию формы мембраны со временем
- Исключение динамики жидкости в объёме, получение уравнений в терминах поверхностных операторов и полей
- Разработка метода исключения быстрой динамики поверхностной плотности – корректный учет несжимаемости мембраны
- Разработка оптимальных методов параметризации замкнутой аксиально-симметричной поверхности, гладкого восполнения полей по конечному набору параметров.
- Реализация алгоритма на языке программирования python, проведение контроля точности численных методов, используемых в алгоритме

2. Более научный, направленный на получение первых результатов, с использованием полученного алгоритма. В этом блоке стояли следующие задачи:

- Моделирование релаксации везикулы к равновесной форме для различных начальных состояний. Проверка согласованности результатов с известной фазовой диаграммой стационарных состояний.
- Исследование устойчивости стационарных состояний — нахождение спектра нормальных возмущений, количественное описание окрестностей критических точек, где происходят бифуркации на ветви сплюснутых везикул.
- Получение асимптотической стационарной формы сильно вытянутых везикул



- Исследование ”жемчужной неустойчивости” в везикуле конечного размера в рамках линейной теории устойчивости
- Моделирование развития указанной неустойчивости в нелинейном режиме с образованием и динамикой ”жемчужин”.

## 2 Общие гидродинамические уравнения

В гидродинамическом пределе мы рассматриваем липидные бислои как бесконечно тонкие жидкие пленки различной формы, погруженные в вязкую жидкость. Такой подход предполагает характерные изменения формы на масштабе много большем толщины бислоя ( $h \sim 10^{-7}$  см), что справедливо для типичных экспериментов с везикулами ( $R \sim 10$  мкм). Мы изучаем динамику мембраны, то есть эволюцию её формы со временем.

Состояние мембраны задается её формой и поверхностной плотностью липидных молекул  $n$ . С формой мембраны ассоциирована изгибная энергия Хельфриха[52]:

$$\mathcal{F} = \int_S \frac{\kappa}{2} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)^2,$$

где интегрирование производится по поверхности мембраны с модулем Хельфриха  $\kappa \sim 20 k_B T^4$  и главными радиусами кривизны  $R_1, R_2$ .<sup>5</sup>

В главном порядке по отклонению поверхностной плотности  $n$  от равновесного значения  $n_0$  поверхностная плотность энергии, ассоциированной с растяжением мембраны, есть:

$$\varepsilon = \frac{K_n}{2} \left( \frac{n}{n_0} - 1 \right)^2,$$

где  $K_n \sim 60 \frac{k_B T}{\text{nm}^2}$  модуль растяжения мембраны. Тогда поверхностное натяжение есть

$$\sigma = \varepsilon - n \partial_n \varepsilon = -K_n \left( \frac{n}{n_0} - 1 \right).$$

Если мембрана не находится в равновесии, возникают сосредоточенные на ней напряжения, которые индуцируют вокруг неё движение жидкости, которое увлекает и

<sup>4</sup>Значение энергетических модулей приведены для удобства в величинах комнатных температур.

<sup>5</sup>Помимо приведенного выражение в главном гидродинамическом порядке можно написать ещё один инвариантный вклад в поверхностную плотность свободной энергии, пропорциональный гауссовой кривизне  $K \propto \frac{1}{R_1 R_2}$ , который мы опускаем, поскольку в силу теоремы Гаусса-Бонне такой вклад в энергию является топологическим инвариантом и не вносит вклада в тензор напряжений мембраны.

мембрану.

Липидный бислой довольно мягкий объект, поэтому движение жидкости вокруг неё обычно медленно и с малой скоростью, тогда скорость жидкости в объёме удовлетворяет уравнению Стокса (при отсутствии внешних воздействий на жидкость):

$$\rho \partial_t \mathbf{v} = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v},$$

где  $\mathbf{v}$  - скорость течения,  $\rho$  - плотность массы жидкости,  $p$  - давление, а  $\eta$  - коэффициент динамической вязкости. В силу предполагаемой медленности течения, его можно считать несжимаемым  $(\nabla \mathbf{v}) = 0$ , что определяет давление  $p$ .

Следующее упрощение связано опять же с медленностью течения, характерный масштаб времени релаксации везикулы можно оценить, приравняв темп убывания энергии Хельфриха  $\kappa$  к её диссипации за счёт вязкости на масштабе  $R$ :

$$\frac{\kappa}{T} \sim R^3 \eta \left( \frac{V}{R} \right)^2 \implies T = \frac{\kappa}{\eta} \frac{1}{R} \frac{1}{V^2} = \frac{\kappa}{\eta} \frac{1}{R} \frac{T^2}{R^2} \implies \underline{T = \frac{\eta}{\kappa} R^3, V = \frac{\kappa}{\eta} \frac{1}{R^2}},$$

тогда членом  $\rho \partial_t \mathbf{v}$  в уравнении Стокса можно пренебречь при условии, не являющимся обременительным:

$$\rho \ll \eta \frac{T}{R^2} \sim \eta \frac{\eta}{\kappa} R \Leftrightarrow R \gg \frac{\rho \kappa}{\eta^2} \sim 10^{-8} \text{ см}^6.$$

Таким образом движение жидкости вокруг мембраны можно считать квазистатическим:

$$\eta \Delta \mathbf{v} = \nabla p,$$

оно определяется текущим состоянием мембраны, а именно тензором напряжений (поверхностными силами), задающим граничные условия для уравнения Стокса.

Поверхностные силы естественным образом разделяются на силу Хельфриха и силу, связанную с поверхностным натяжением<sup>7</sup>:

$$\mathbf{f}_\kappa = \kappa \mathbf{l} \left( \frac{H^3}{2} - 2HK + \Delta^\perp H \right),$$

$$\mathbf{f}_\sigma = \nabla^\perp \sigma - \mathbf{l} \sigma H,$$

где  $H = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$  - средняя кривизна,  $K = \frac{1}{R_1 R_2}$  - гауссова кривизна,  $\mathbf{l}$  - вектор

<sup>6</sup>Оценка правой части приведена для воды.

<sup>7</sup>Подробный вывод тензора напряжения в без-диссипативном приближении приведен в приложении 5.3.

нормали к поверхности бислоя, а  $\nabla^\perp$  и  $\Delta^\perp$  - операторы градиента и Бельтрами-Лапласа на многообразии-поверхности мембраны.

Последнее уравнение описывает динамику поверхностной плотности  $n$ :

$$\partial_t n = -\mathbf{v}\nabla n - n\nabla^\perp\mathbf{v} \implies \partial_t \sigma = -\mathbf{v}\nabla\sigma - \sigma\nabla^\perp\mathbf{v} + K_n\nabla^\perp\mathbf{v},$$

которое в силу слабой сжимаемости упрощается до

$$\frac{d}{dt}\sigma = \partial_t\sigma + \mathbf{v}\nabla\sigma = K_n\nabla^\perp\mathbf{v},$$

описывающее релаксацию поверхностного натяжения  $\sigma$  за малое время  $\propto \frac{1}{K_n}$  к квазиравновесному значению, при котором поверхностная дивергенция скорости равна нулю:

$$\boxed{\nabla^\perp\mathbf{v} = 0}^8.$$

Таким образом мы пренебрегаем динамикой поверхностного натяжения по параметру  $\frac{\kappa R^2}{K_n} \ll 1$ . Поскольку скорость в силу уравнения Стокса линейна по граничным условиям и следовательно по поверхностному натяжению, условие бездивергентности скорости является линейным уравнением на  $\sigma$ .<sup>9</sup>

Таким образом мы приходим к замкнутому описанию динамики мембраны в терминах её формы – поверхностное натяжение и течение окружающей жидкости квазистатически определяются текущей формой поверхности. Изменение формы происходит вследствие условия прилипания и непроницаемости мембраны, буквально она переносится течением  $\mathbf{v}_{\text{mem}} = \mathbf{v}$ . Схематическое описание динамики приведено на рис. 1.

## 2.1 Исключение течения в объёме

Для простоты далее рассматривается ситуация, когда вязкости жидкости внутри и снаружи мембраны равны<sup>10</sup>, тогда скорость течения  $\mathbf{v}$  удовлетворяет единому уравнению, во всём пространстве

$$\partial_k p - \eta\Delta v_k = \hat{f}_k,$$

<sup>8</sup>Поверхностное натяжение аналогично давлению в обычной гидродинамике не является динамической переменной, обеспечивая поверхностную бездивергентность поля скорости.

<sup>9</sup>Поверхностное натяжение индуцирует вклад в тензор напряжения мембраны такой, что поверхностная дивергенция наводимой им скорости компенсирует поверхностную дивергенцию течения, созданного всеми остальными источниками.

<sup>10</sup>В ситуации различных вязкостей скорость на мембране может быть найдена без учета скорости в объёме жидкости из решения интегрального уравнению на поверхности[53].



Рис. 1: Схематическая запись уравнений, определяющих динамику мембраны.

с правой частью - источником, сосредоточенным на мембране. Это уравнение может быть решено явно с использованием функции Грина - Озеена:

$$v_i(\mathbf{r}) = \int dV_1 G_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \hat{f}_1^k,$$

$$G_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r} \left( \delta_{ik} + \frac{r_i r_k}{r^2} \right).$$

Полученное соотношение удобно переписать в терминах поверхностной плотности сил:

$$v_i(\mathbf{r}) = \int dS_1 G_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) f_1^k.$$

## 2.2 Функция Грина для аксиально-симметричного случая

Ниже мы моделируем процессы, при которых форма мембрана аксиально-симметрична, для упрощения вычислений необходимо явно произвести интегрирование по азимутальному углу, получив редуцированную функцию Грина в цилиндрических координатах:

$$v_\mu(\rho, z) = \int dV_1 G_{\mu\nu}(\rho, \rho_1, z - z_1) f_1^\nu, \text{ где } \mu, \nu \in [\rho, z]$$

Естественным образом функция Грина выражается через планарное расстояние  $\delta r$  и геометрический параметр  $\nu$ :<sup>11</sup>

$$\delta r^2 = z^2 + (\rho - \rho_1)^2, \nu = \frac{4\rho\rho_1}{\delta r^2}$$

$$\begin{aligned} G_{zz} &= \frac{4}{\delta r} \left( K(-\nu) + \frac{z^2}{z^2 + (\rho + \rho_1)^2} E(-\nu) \right) \\ G_{z\rho} &= \frac{2}{\delta r} \frac{z}{\rho_1} \left( -K(-\nu) + \frac{z^2 + \rho^2 - \rho_1^2}{z^2 + (\rho + \rho_1)^2} E(-\nu) \right) \\ G_{\rho z} &= -\frac{2}{\delta r} \frac{z}{\rho} \left( -K(-\nu) + \frac{z^2 + \rho_1^2 - \rho^2}{z^2 + (\rho + \rho_1)^2} E(-\nu) \right) \\ G_{\rho\rho} &= \frac{2}{\delta r} \frac{1}{\rho\rho_1} \left( [\rho^2 + \rho_1^2 + 2z^2] K(-\nu) - \frac{(\rho^2 - \rho_1^2)^2 + 3(\rho^2 + \rho_1^2)z^2 + 2z^4}{(\rho + \rho_1)^2 + z^2} E(-\nu) \right), \end{aligned}$$

где  $K, E$  суть эллиптические функции:

$$K(-\nu) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 + \nu \sin^2 \varphi}}, \quad E(-\nu) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \sqrt{1 + \nu \sin^2 \varphi}.$$

### 2.2.1 Самодействующая асимптотика

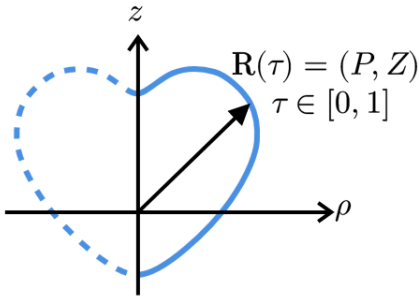
Редуцированная функция Грина имеет логарифмическую особенность при  $\delta r \rightarrow 0$  (вне оси  $\rho = 0$ ), которую можно выделить, используя асимптотику эллиптических функций на бесконечности:

$$K(-\nu) \sim \frac{\ln(4\sqrt{\nu})}{\sqrt{\nu}}, \quad E(-\nu) \sim \sqrt{\nu} + \frac{1}{2} \ln \nu / \sqrt{\nu},$$

$$G_{\mu\nu} \sim \delta_{\mu\nu} \frac{2}{\rho} \ln\left(4 \frac{2\rho}{\delta r}\right).$$

<sup>11</sup>Подробный вывод приведенных соотношений в приложении 5.3.

## 2.3 Параметризация аксиально-симметричной поверхности



Аксиально-симметричная поверхность описывается кривой на плоскости цилиндрических координат  $(\rho, z)$ :  $\mathbf{R}(\tau) = (P, Z)(\tau)$ . Имеется условие гладкости физических полей на оси:  $\partial_\rho^{2j+1}\Psi(\rho \rightarrow 0) = 0$ , что удобно автоматически учесть, выбрав такую параметризацию, для которой выполнено условие четности:

$$\partial_\tau^{2j+1}\Psi(\rho \rightarrow 0) = 0, \partial_\tau^{2j}P(\rho \rightarrow 0) = 0,$$

что по умолчанию предполагается в дальнейшем. Заметим, что остается калибровочная свобода, связанная с возможностью репараметризации поверхности  $\mathbf{R}'(\tau') = \mathbf{R}(\tau(\tau'))$ .

### 2.3.1 Выражения для физических величин

Выразим требующиеся нам различные физические величины в общей параметризации  $\mathbf{R}(\tau)$ .

Первая форма поверхности выражается через метрику в цилиндрических координатах  $(\rho, z, \varphi)$ :

$$ds^2 = dz^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2 = \underbrace{(Z_\tau^2 + P_\tau^2)}_{v^2} d\tau^2 + P^2 d\varphi^2,$$

где  $v = \frac{dl}{d\tau}$  - «скорость обхода» кривой. Откуда метрический тензор в компонентах  $(\tau, \varphi)$ :

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} v^2 & 0 \\ 0 & P^2 \end{pmatrix} \quad g^{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{v^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{P^2} \end{pmatrix}.$$

Соответственно элемент площади

$$dS = vP d\tau d\varphi.$$

В частности площадь поверхности и объём везикулы даются следующими выражениями:

$$S = 2\pi \int_0^1 vP d\tau, \quad V = \pi \int_0^1 P^2 Z_\tau d\tau.$$

Оператор поверхностного градиента есть:

$$\nabla^\perp = \tau \frac{1}{v} \partial_\tau + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{P} \partial_\varphi,$$

где касательные вектор  $\tau = \frac{1}{v} \begin{pmatrix} P_\tau & Z_\tau \end{pmatrix}$  в компонентах  $(\rho, z)$ . Приведем тут же определение нормального вектора:

$$\mathbf{l} = \frac{1}{v} \begin{pmatrix} -Z_\tau & P_\tau \end{pmatrix}.$$

Для получения радиусов кривизны необходимо вычислить вторую (внешнюю) форму[54]:

$$\begin{aligned} d\mathbf{r} &= (P_\tau \mathbf{e}_\rho + Z_\tau \mathbf{e}_z) d\tau + \mathbf{e}_\varphi P d\varphi \\ d^2\mathbf{r} &= (P_{\tau\tau} \mathbf{e}_\rho + Z_{\tau\tau} \mathbf{e}_z) d\tau^2 + 2P_\tau \mathbf{e}_\varphi d\varphi d\tau - \mathbf{e}_\rho P d\varphi^2 \\ Q_{\tau\tau} &= (\mathbf{l}, (P_{\tau\tau} \mathbf{e}_\rho + Z_{\tau\tau} \mathbf{e}_z)) = -\frac{Z_\tau}{v} P_{\tau\tau} + \frac{P_\tau}{v} Z_{\tau\tau} \\ Q_{\varphi\varphi} &= (\mathbf{l}, -\mathbf{e}_\rho P) = \frac{Z_\tau}{v}, Q_{\tau\varphi} = 0 \implies Q = \begin{pmatrix} \frac{P_\tau Z_{\tau\tau} - Z_\tau P_{\tau\tau}}{v} & \\ & \frac{P Z_\tau}{v} \end{pmatrix} \\ gQ &= \begin{pmatrix} \frac{P_\tau Z_{\tau\tau} - Z_\tau P_{\tau\tau}}{v^3} & \\ & \frac{Z_\tau}{Pv} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

откуда получаем среднюю и гауссову кривизну:

$$\begin{aligned} -H &= \text{Sp}(gQ) = \frac{P_\tau Z_{\tau\tau} - Z_\tau P_{\tau\tau}}{v^3} + \frac{Z_\tau}{Pv}, K = \det(gQ) = \frac{P_\tau Z_{\tau\tau} - Z_\tau P_{\tau\tau}}{v^3} \frac{Z_\tau}{Pv} \\ H_1 &= \frac{Z_\tau P_{\tau\tau} - P_\tau Z_{\tau\tau}}{v^3}, H_2 = -\frac{Z_\tau}{Pv}. \end{aligned}$$

При вычислениях часто используются следующие удобные соотношения:

$$\begin{aligned} \tau &= \tau_\rho \mathbf{e}_\rho + \tau_z \mathbf{e}_z; \\ \partial_\varphi \tau &= \tau_\rho \partial_\varphi \mathbf{e}_\rho = \tau_\rho \mathbf{e}_\varphi \\ \frac{1}{v} \partial_\tau \tau &= \frac{1}{v} \partial_\tau (\tau_\rho \mathbf{e}_\rho + \tau_z \mathbf{e}_z) = \frac{1}{v} (\mathbf{e}_\rho \partial_\tau \tau_\rho + \mathbf{e}_z \partial_\tau \tau_z) = -H_1 \mathbf{l} \\ \frac{1}{v} \partial_\tau \mathbf{l} &= H_1 \tau \\ \partial_\varphi \mathbf{l} &= l_\rho \mathbf{e}_\varphi \end{aligned}$$

Получим координатное выражение для оператора Бельтрами-Лапласа:

$$(\nabla^\perp, \nabla^\perp) = \left( \tau \frac{1}{v} \partial_\tau + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{P} \partial_\varphi, \tau \frac{1}{v} \partial_\tau + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{P} \partial_\varphi \right) = \frac{1}{vP} \left( \partial_\tau \frac{P}{v} \partial_\tau \right) + \frac{1}{P^2} \partial_\varphi^2 = \Delta_\tau^\perp + \Delta_\varphi^\perp$$

Полученные соотношения позволяют получить явный вид силы Хельфриха в произвольной параметризации через функции  $P(\tau)$ ,  $Z(\tau)$  и их производные вплоть до 4 порядка.

## 3 Численная реализация

### 3.1 Задание формы и нахождение физических величин

Далее мы рассматриваем динамику замкнутых мембран - везикул, обладающих аксиальной симметрией. Наиболее просто удовлетворить граничным условиям 2.3 можно выбрав подходящий функциональный базис, для этого мы можем мысленно отразить кривую от оси  $z$ , получив гладкую замкнутую, кривую, являющуюся диффеоморфизмом окружности, т.е. все гладкие физические поля являются гладкими периодическими полями на отрезке  $\tau \in [0, 2]$ :

$$\mathbf{R}(\tau) = \begin{cases} P(\tau) = \sum p_k \varphi_{pk} \\ Z(\tau) = \sum z_k \varphi_k \end{cases},$$

$$\varphi_{pk} = 2 \sin(\pi k \tau), k \geq 1$$

$$\varphi_{zk} = 2 \cos(\pi k \tau), k \geq 1; \varphi_{z0} = 1,$$

при этом в силу гладкости коэффициенты Фурье  $(p_k, z_k)$  экспоненциально спадают с номером гармоники  $k$ . Подробнее про данный функциональный базис написано в приложении 5.3. Калибровочная свобода всё еще сохранена: репараметризация поверхности  $\mathbf{R}'(\tau') = \mathbf{R}(\tau(\tau'))$  ведёт к изменению коэффициентов  $p_k, z_k$ .

Состояние задается  $N$  Фурье гармониками  $\mathbf{R}_N(\tau)$ . Для вычисления кривизны и силы Хельфриха необходимы производные  $\mathbf{R}_N$  до 4 порядка, что явно делается в фурье пространстве. Для получения полей в реальном пространстве используется быстрое преобразование фурье (БПФ).



### 3.1.1 Выражения на оси симметрии

На оси симметрии  $\rho = 0$  имеются неопределённости в физических полях, которые необходимо раскрывать по правилу Лопиталья, используя асимптотическое разложение  $\mathbf{R}(\tau)$ :

$$P = P_1\tau + \mathcal{O}(\tau^3), Z \approx Z_0 + Z_2\tau^2 + \mathcal{O}(\tau^4), v \approx P_1 + \mathcal{O}(\tau)$$

$$H_1 \approx \frac{-2Z_2}{P_1^2}, H_2 \approx -\frac{2Z_2}{P_1^2}$$

Различные дифференциальные тождества

$$\Delta^\perp = \frac{1}{vP} \left( \partial_\tau \frac{P}{v} \partial_\tau \right) = \frac{P_\tau}{v^2} \frac{\partial_\tau []}{P} + \frac{1}{v} \partial_\tau \frac{1}{v} \partial_\tau$$

$$\frac{1}{v} \partial_\tau \frac{1}{v} \partial_\tau = \frac{1}{v} \left( \partial_\tau \frac{1}{v} \right) \partial_\tau + \frac{1}{v^2} \partial_\tau^2$$

$$\frac{1}{v} \left( \partial_\tau \frac{1}{v} \right) = \frac{1}{v} \partial_\tau \frac{1}{v^k} = \frac{1}{v} (-k) \frac{1}{v^{k+1}} \partial_\tau [v^2]^{1/2} = \frac{1}{v^4} \frac{-1}{2} \partial_\tau [v^2] = -\frac{P_2 P_1 + Z_2 Z_1}{v^4}$$

Теперь можем выразить наблюдаемые на оси:

$$H_1 = -\frac{2z_2}{p_1|p_1|} + \frac{12(-p_1^2 z_4 + 2p_1 p_3 z_2 + z_2^3)}{|p_1|^3 p_1} \tau^2 + \mathcal{O}(\tau^3)$$

$$H_2 \approx -\frac{2z_2}{p_1|p_1|} + \frac{4(-p_1^2 z_4 + 2p_1 p_3 z_2 + z_2^3)}{p_1|p_1|^3} \tau^2 + \mathcal{O}(\tau^3)$$

$$\Delta^\perp H_2 = \frac{16z_2^3}{p_1^5 \sqrt{p_1^2}} + \frac{32p_3 z_2}{p_1^4 \sqrt{p_1^2}} - \frac{16z_4}{p_1^3 \sqrt{p_1^2}} + \mathcal{O}(\tau)$$

$$\Delta^\perp H_1 = \frac{48z_2^3}{p_1^5 \sqrt{p_1^2}} + \frac{96p_3 z_2}{p_1^4 \sqrt{p_1^2}} - \frac{48z_4}{p_1^3 \sqrt{p_1^2}} + \mathcal{O}(\tau)$$

$$H(0) = -4 \frac{z_2}{p_1|p_1|},$$

$$\Delta^\perp H(0) = 4 \cdot 16 \cdot \left[ \frac{z_2^3}{p_1^5 |p_1|} + \frac{2p_3 z_2}{|p_1|^5} - \frac{z_4}{p_1^3 |p_1|} \right]$$

$$K(0) = H(0)^2/4$$

$$f(0) = \Delta^\perp H(0)$$

### 3.1.2 Восстановление точности для аксиальной кривизны

Поскольку аксиальная кривизна содержит неопределённость  $\propto \frac{Z'}{P}$ , оператор Бельтрами-Лапласа от неё содержит компоненты, вычисление которых в окрестности оси симметрии приводит к потере точности. Сама величина определена с машинной относительной точностью (если  $Z'$  и  $P$  так же):

$$\frac{Z'}{P}(\varepsilon) \approx \frac{Z_2\varepsilon(1 + \epsilon_{arh})}{P_1\varepsilon} = \frac{Z_2}{P_1}(1 + \epsilon_{arh}),$$

при этом производная от неё

$$\begin{aligned} \frac{Z''P - P'Z'}{P^2} &\approx \frac{\left(Z_2 + \frac{Z_4\varepsilon^2}{2}\right)\left(P_1\varepsilon + \frac{P_3\varepsilon^3}{3!}\right)(1 + \epsilon_{arh}) - \left(Z_2\varepsilon + \frac{Z_4\varepsilon^3}{3!}\right)\left(P_1 + \frac{P_3\varepsilon^2}{2}\right)(1 + \tilde{\epsilon}_{arh})}{P_1^2\varepsilon^2} \approx \\ &\frac{Z_2P_1\varepsilon\epsilon_{arh} + \varepsilon^3\frac{1}{3}(P_1Z_4 - Z_2P_3)}{P_1^2\varepsilon^2} \approx \varepsilon \left[ \frac{\frac{1}{3}(P_1Z_4 - Z_2P_3)}{P_1^2} + \frac{Z_2P_1}{P_1^2} \frac{\epsilon_{arh}}{\varepsilon} \right] \end{aligned}$$

уже имеет относительную точность в  $\varepsilon$  раз хуже.

Обойти эту неприятность можно взяв дискретное преобразование Фурье аксиальной кривизны (с машинной точностью), произведя дифференцирование в Фурье пространстве и взяв обратное преобразование Фурье.

### 3.1.3 Аналитическое продолжение на окружности

Поскольку получаемая интегрированием скорость течения представлена в конечном наборе точек  $\tau_i$ , необходимо сформулировать процедуру аналитического продолжения на весь отрезок. Во-первых, в силу выбранной параметризации можно продлить скорости на всю окружность  $\tau \in [0, 1]$ , используя симметрию скорости. Тогда мы имеем дискретизацию гладкой функции на окружности.

На окружности в такой ситуации наиболее удобно использовать равномерную сетку и дискретное преобразование Фурье. Использование  $n_{int}$  узлов позволяет точно восстановить функцию, частоты которой ограничены величиной  $n_{int}/2$ . В ситуации же общего положения (когда есть ненулевые коэффициенты Фурье больше  $n_{int}/2$ ) возникает алиасинг - неединственность аналитического продолжения, при этом полученные  $n_{int}/2$  коэффициентов дискретного преобразования Фурье содержат кроме истинных коэффициентов Фурье функции добавочный вклад от дискретизации высших гармоник. Поэтому для корректного определения первых  $N/2$  гармоник функции необходимо использовать количество точек дискретизации, большее чем  $N$ . Заметим, однако, что в силу гладкости функции, коэффициенты Фурье затухают экспоненциально с номером гармоники, так же затухает и относительная ошибка определения коэффи-

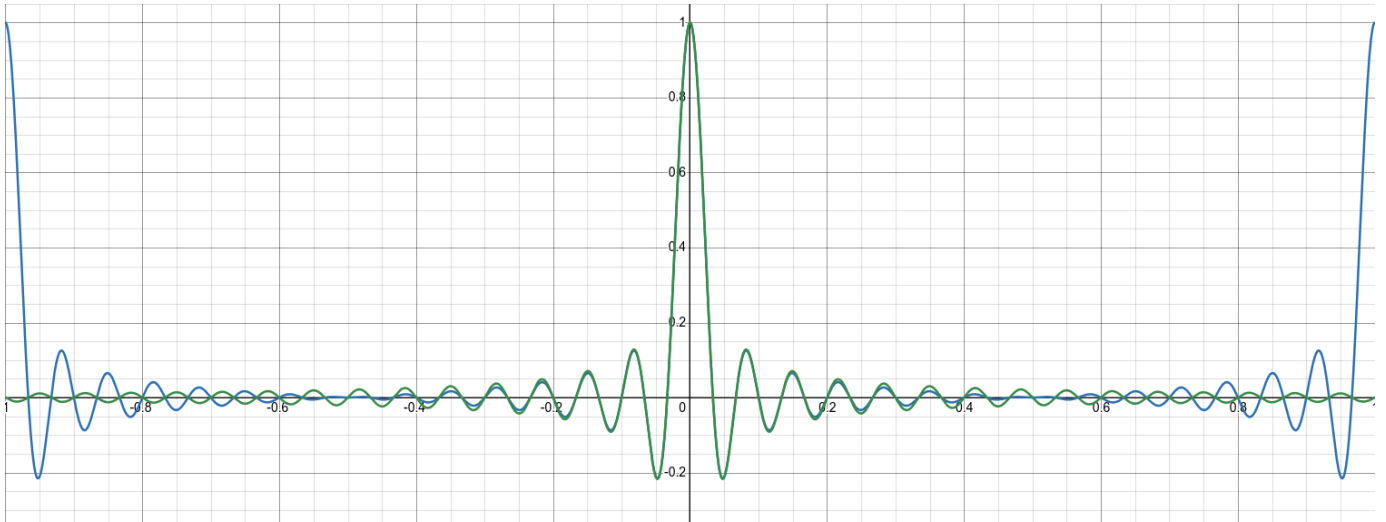


Рис. 2: Сравнение функций отклика на прямой  $\text{sinc}(\pi x n_{int})$  (зелёным) и на окружности (голубым) при  $n_{int} = 30$ .

циента Фурье с помощью дискретного преобразования Фурье вместо непрерывного. Другими словами, если бы мы искали коэффициенты Фурье разложения полученной функции используя скалярное  $L_2$  произведение, квадратурное правило на однородной сетке на окружности является Гауссовой квадратурой.

Полезно так же переговорить этот метод в терминах прямого пространства. В силу однородности узлов и периодических граничных условий аналитическое продолжение функции с  $n_{int}$  точек на окружности длины 1  $\left(\tau_i = \frac{1}{n_{int}}\right)$  имеет вид свёртки с функцией отклика:

$$f_{cont}(\tau) = \sum_i f_i R_{n_{int}}(\tau - \tau_i),$$

$$R_{n_{int}}(x) = \frac{\sin(\pi x n_{int})}{\pi x n_{int}} (\pi x \cdot \cot(\pi x)) = \text{sinc}(\pi x n_{int}) \frac{\cos(\pi x)}{\text{sinc}(\pi x)}.$$

Функция отклика соответственно периодическая и равна нулю в узлах, не конгруэнтных нулю. Эта формула может быть получена прямым пересуммированием формулы Котельникова для периодической функции. На фигуре ниже приведено сравнение функции отклика на окружности с откликом на прямой. Заметим, что в обоих случаях ядро степенным образом спадает с номером точки, что связано с бесконечной гладкостью восполнения.

Полученные соотношения используются для задания состояния везикулы вручную (см. интерактивный график в [Desmos](#)), закрепив небольшое количество узлов на плоскости, получаем гладкую кривую  $\mathbf{R}(\tau)$ .<sup>12</sup>

<sup>12</sup>Задача провести гладкую кривую по заданному набору точек решается в векторной графике обычно с использованием кусочно гладких сплайнов, что неприменимо для задания начального состояния гладкой поверхности везикулы. Описанная

## 3.2 Численное интегрирование особенностей

Использование метода функции Грина предполагает взятие интегралов с особенностями, которые необходимо учитывать для достижения умеренной погрешности при разумном числе квадратурных точек.

### 3.2.1 Логарифмическая особенность

Рассмотрим методы интегрирования выражений, содержащих логарифмическую самодействующую асимптотику:

$$\int_0^1 d\tau_1 f(\tau, \tau_1), f \sim C_{\ln}(\tau) \ln |\tau - \tau_1| + C_0(\tau) + \mathcal{O}(\tau - \tau_1)$$

Самый простой способ - вычитание ведущей особенности, которая интегрируется аналитически:

$$\begin{aligned} \int_0^1 d\tau_1 f(\tau, \tau_1) &= \int_0^1 d\tau_1 \tilde{f}(\tau, \tau_1) + C_{\ln}(\tau) I_{\ln}(\tau), \\ \tilde{f}(\tau, \tau_1) &= f(\tau, \tau_1) - C_{\ln}(\tau) \ln |\tau - \tau_1|, \tilde{f}(\tau, \tau) = C_0(\tau) \\ I_{\ln}(\tau) &= \int_0^1 d\tau_1 \ln |\tau - \tau_1| = (1 - \tau) \ln(1 - \tau) + \tau \log(\tau) - 1. \end{aligned}$$

Заметим, что при этом  $\tilde{f}$  непрерывна, однако вблизи  $\tau_1 \approx \tau$  всё ещё имеется особенность вида  $(\tau - \tau_1) \ln |\tau - \tau_1|$ . Простейший дальнейший путь состоит в том, чтобы интегрировать  $\tilde{f}$  обычными методами, рассмотрим для примера метод трапеций, при котором по заданным точкам производится кусочно-линейное восполнение с последующим интегрированием.

Заметим, что наивная оценка погрешности такой процедуры с шагом  $\epsilon$

$$Res \sim \tilde{f}''(\xi) \epsilon^2, \xi \in [0, 1]$$

сильно завышена, если считать, что ошибка набегает вблизи особенности

$\tilde{f}'' \sim \frac{1}{\tau - \tau_1} \sim \frac{1}{\epsilon}$ , так что  $Res \sim \epsilon$ . Дело в том, что интеграл от ведущей особенности по её окрестности равен нулю в силу симметрии, что метод трапеций так же воспроизводит при использовании равномерно расставленных квадратурных узлах, так что необходимо рассмотреть следующий неаналитичный член разложения  $(\tau - \tau_1)^2 \ln |\tau - \tau_1|$ . Интегрирование его методом трапеции приводит к погрешности  $\sim \epsilon^2$  (оценка через

---

выше процедура позволяет строить бесконечно гладкое восполнение замкнутых кривых, что может быть так же удобнее в приложениях.

характерную производную дает завышенную погрешность, так как на результат сказывается её интеграл, а логарифм особенность интегрируемая). Полученный результат позволяет улучшить асимптотику как минимум до  $\epsilon^3 \ln \epsilon$ , перейдя к формуле Симпсона (что является одним шагом по правилу Рунге).

Более оптимальным подходом является следующий: исходя из оценки погрешности понятно, что можно предложить более гладкое ( $C_1$ ) восполнение подынтегральной функции, мы используем полученные ранее конечные элементы 5.3, который приводит к следующему квадратурному правилу:

$$\int_0^1 \tilde{f} \rightarrow \frac{9}{24}f_0 + \frac{28}{24}f_1 + \frac{23}{24}f_2 + f_3 + \dots + f_{-4} + \frac{23}{24}f_{-3} + \frac{28}{24}f_{-2} + \frac{9}{24}f_{-1} = \sum_{j=0}^{j=N_{int}} w_j \tilde{f}_j$$

Представим полную форму метода:

$$\begin{aligned} \int_0^1 d\tau_1 f(\tau, \tau_1) &= w_j \tilde{f}_j(\tau) + C_{\ln}(\tau) I_{\ln}(\tau) = \\ w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} f_j(\tau) - C_{\ln}(\tau) w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} \ln |\tau - \tau_j| + w_{j: \tau_j = \tau} C_0(\tau) + C_{\ln}(\tau) I_{\ln}(\tau) &= \\ w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} f_j(\tau) + w_{j: \tau_j = \tau} C_0(\tau) + C_{\ln}(\tau) [I_{\ln}(\tau) - I_{\ln|quad}(\tau)], & \\ I_{\ln|quad} = w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} \ln |\tau - \tau_j|, I_{\ln|\delta}(\tau) = I_{\ln}(\tau) - I_{\ln|quad}(\tau) & \end{aligned}$$

$$\int_0^1 d\tau_1 f(\tau, \tau_1) = w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} f_j(\tau) + w_{j: \tau_j = \tau} C_0[f](\tau) + C_{\ln}[f](\tau) I_{\ln|\delta}(\tau)$$

### 3.2.2 $\mathcal{P.V.} \frac{1}{x}$ особенность

Для нахождения поверхностной дивергенции скорости, наведенной градиентом поверхностного натяжения, необходимо вычислять интеграл с особенностью  $\frac{1}{\tau_1 - \tau}$ :

$$\mathcal{P.V.} \int_0^1 d\tau_1 f(\tau, \tau_1), f \sim C_{1/x}(\tau) \frac{1}{\tau_1 - \tau} + \mathcal{O}(\ln |\tau - \tau_1|)$$

Действовать будем аналогично предыдущему случаю:

$$\begin{aligned} \mathcal{P.V.} \int_0^1 d\tau_1 f(\tau, \tau_1) &= \int_0^1 d\tau_1 \tilde{f}(\tau, \tau_1) + C_{1/x}(\tau) I_{1/x}(\tau), \\ \tilde{f}(\tau, \tau_1) &= f(\tau, \tau_1) - C_{1/x}(\tau) \frac{1}{\tau_1 - \tau}, \\ I_{1/x}(\tau) &= \mathcal{P.V.} \int_0^1 d\tau_1 \frac{1}{\tau_1 - \tau} = \ln \left( \frac{1 - \tau}{\tau} \right). \end{aligned}$$

У  $\tilde{f}$  осталась лишь логарифмическая особенность, которая учитываются описанным выше способом:

$$\int_0^1 d\tau_1 f(\tau, \tau_1) = w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} f_j(\tau) + C_0[f](\tau) w_{j: \tau_j = \tau} + C_{\ln}[f](\tau) I_{\ln|\delta}(\tau) + C_{1/x}[f](\tau) I_{1/x|\delta}(\tau),$$

$$I_{1/x|\delta}(\tau) = I_{1/x}(\tau) - I_{1/x|\text{quad}}(\tau), I_{1/x|\text{quad}}(\tau) = w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} \frac{1}{\tau_j - \tau}$$

### 3.3 Нахождение скорости через поверхностный интеграл

Скорость жидкости, индуцированная поверхностными силами, находится с помощью полученной функции Грина уравнения Стокса в цилиндрических координатах. При этом удобно разбить тензор напряжений на поверхности на нормальную  $f_n$  и касательную  $f_\tau$  составляющие, и соответственно индуцированную скорость:

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{r})[f_n] = \int [\hat{G}(\rho, P(\tau_1), z - Z(\tau_1)) \mathbf{l}(\tau_1)] v P(\tau_1) f_n(\tau_1) d\tau_1,$$

$$\mathbf{v}_\tau(\mathbf{r})[f_\tau] = \int [\hat{G}(\rho, P(\tau_1), z - Z(\tau_1)) \boldsymbol{\tau}(\tau_1)] v P(\tau_1) f_\tau(\tau_1) d\tau_1.$$

Поскольку при интегрировании по поверхности всегда есть вклад от меры  $P(\tau_1)$ , удобно внести его в функцию Грина  $\hat{\tilde{G}} = \hat{G} \rho_1$ .

Если мы интересуемся скоростью на поверхности, необходимо подставить  $(\rho, z) = \mathbf{R}(\tau)$ , тогда в компонентах скорости  $\mu = \{\rho, z\}$ :

$$\mathbf{v}_{n|\mu}(\tau)[f_n] = \int K_{n|\mu}(\tau, \tau_1) f_n(\tau_1) d\tau_1,$$

$$K_{n|\mu} = [G_{\mu\nu}(P(\tau), P(\tau_1), Z(\tau) - Z(\tau_1)) \mathbf{l}_\nu(\tau_1)] v(\tau_1) P(\tau_1)$$

$$\mathbf{v}_{\tau|\mu}(\tau)[f_\tau] = \int K_{\tau|\mu}(\tau, \tau_1) f_\tau(\tau_1) d\tau_1.$$

$$K_{\tau|\mu} = [G_{\mu\nu}(P(\tau), P(\tau_1), Z(\tau) - Z(\tau_1)) \boldsymbol{\tau}_\nu(\tau_1)] v(\tau_1) P(\tau_1)$$

#### 3.3.1 Масштабы поверхностного отклика

Сам вид функциональной зависимости указывает на наличие 3 характерных масштабов:

1. Ближняя область.

В этой области источник очень близко к изучаемой точке и имеется логарифми-

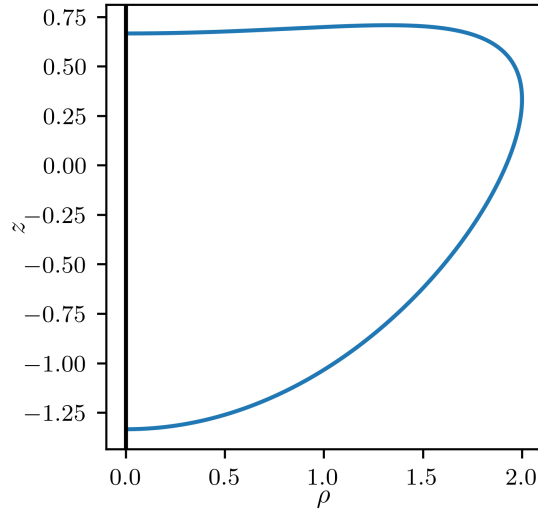


Рис. 3: Поверхность везикула, используемая для демонстрации масштабов функции Грина.

ческая особенность:

$$\nu = \frac{4\rho\rho_1}{\delta r^2} \gg 1, \underline{\delta r} \ll \rho \implies \tilde{G} \approx 2 \ln \left[ \frac{\rho}{\delta r} \right]$$

## 2. Средняя область.

В этой области проявляется всё богатство эллиптических функций

$$\nu \sim 1 \implies \underline{\delta r} \sim \rho, G \sim 1$$

## 3. Дальняя область.

Здесь геометрический параметр мал:

$$\nu = \frac{4\rho\rho_1}{\delta r^2} \ll 1, \underline{\delta r} \gg \rho, \implies K(-\nu), E(-\nu) \approx \frac{\pi}{2},$$

$$\tilde{G}_{zz} \approx 2\pi \frac{\rho_1}{\delta r} \left( 1 + \frac{z^2}{z^2 + (\rho + \rho_1)^2} \right) \sim 1,$$

Важно: дробление на области зависит от той точки  $\rho$ , в которой мы ищем отклик.

Далее проиллюстрируем наличие разных масштабов у функции Грина на примере  $\tilde{G}_{zz}$  для такой поверхности:

$\tau \sim 1$  В этой ситуации дальней области нет, все функции имеют масштаб по  $\tau$  порядка 1 (см. рис. 4):

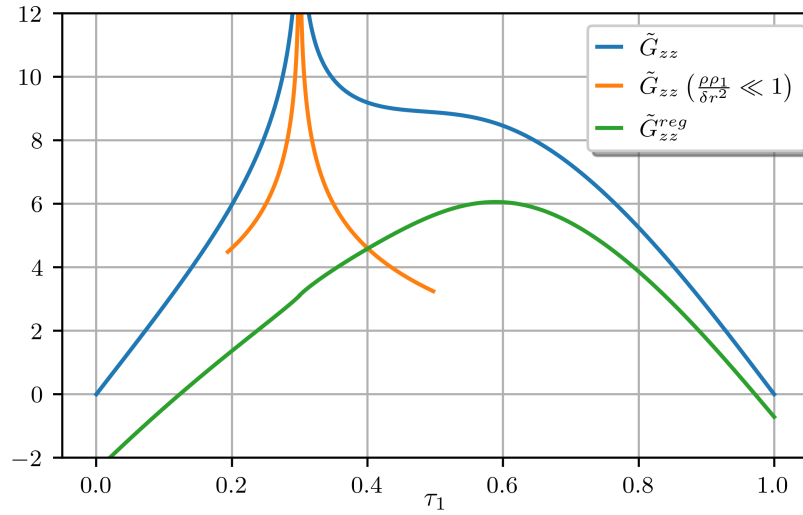


Рис. 4:  $G_{zz}(\tau = 0.3, \tau_1)$ , её сингулярная часть  $-2 \ln |\tau - \tau_j|$  и их разность.

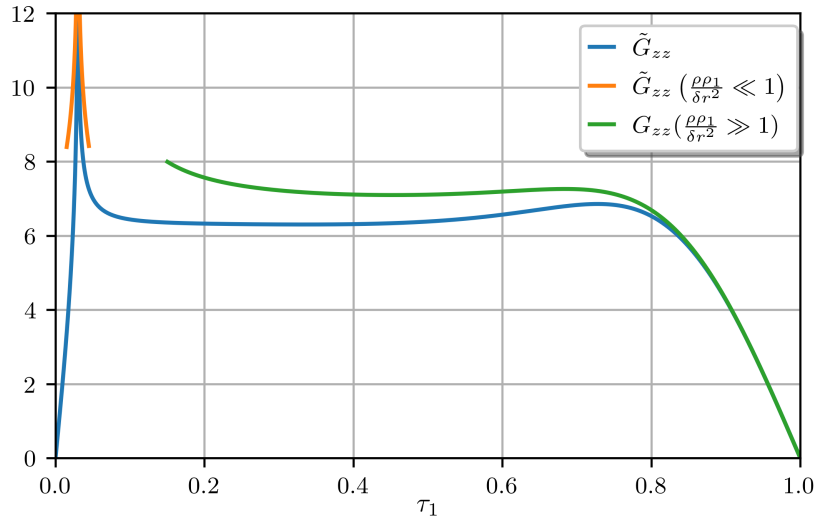


Рис. 5: Поверхностная функция Грина для  $\tau = 0.03$ .

$\tau \ll 1$  Когда же мы интересуемся откликом вблизи оси, например в самой первой точке, ситуация другая (см. рис. 5 и 6): при  $\tau_1 \lesssim 2\tau$  масштабом функции является  $\tau$  (даже вне сингулярной области!). Такое свойство указывает на то, что сколь точно мы не учтём сингулярность, все равно понадобится существенное количество точек  $N_{int}$  для аккуратного интегрирования для отклика на  $n_{int}$  точках.

### 3.3.2 Регуляризованные квадратурные схемы

$K_\tau$  касательная сила

Ядро касательного направления имеет следующую самодействующую асимптоти-



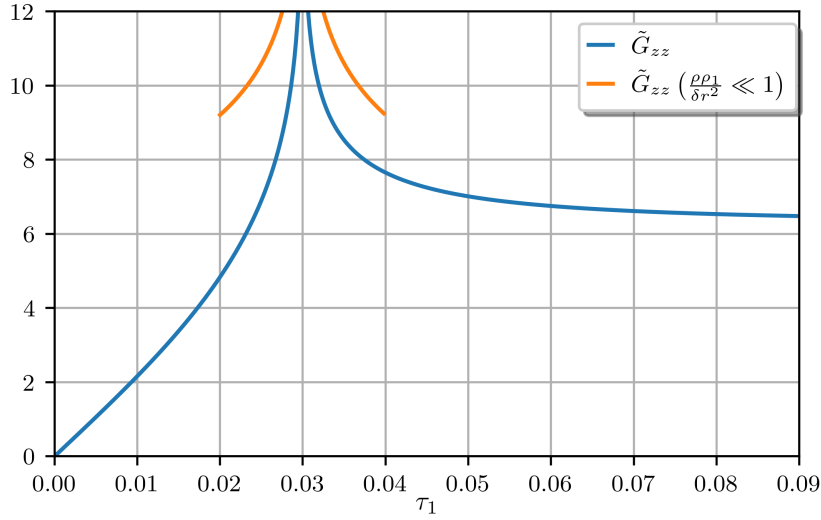


Рис. 6: Вблизи нуля графика 5. Видно, что даже за вычетом сингулярности функция имеет масштаб порядка  $\tau$ .

ку:

$$K_{\tau|\rho} = \left[ Z'(\tau_1)\tilde{G}_{\rho z} + P'(\tau_1)\tilde{G}_{\rho\rho} \right] = 2P' \ln \left( \frac{8P}{V} \frac{1}{|\tau - \tau_1|} \right) - 4P' + \mathcal{O}(\tau - \tau_1)$$

$$K_{\tau|z} = \left[ Z'(\tau_1)\tilde{G}_{zz} + P'(\tau_1)\tilde{G}_{z\rho} \right] = 2Z' \ln \left( \frac{8P}{V} \frac{1}{|\tau - \tau_1|} \right) + 2Z' + \mathcal{O}(\tau - \tau_1)$$

В рамках описанной в [ссылка] схемы интегрирования необходимо из итоговой подынтегральной функции

$$f(\tau, \tau_1) = D_\tau(\tau, \tau_1) f_\tau(\tau_1)$$

Выделить регуляризующие коэффициенты:

$$C_{\ln|\rho}[f_\tau](\tau) = -2P'(\tau) f_\tau(\tau) = C_{\ln|\rho|0}(\tau) f_\tau(\tau),$$

$$C_{\ln|z}[f_\tau](\tau) = -2Z'(\tau) f_\tau(\tau) = C_{\ln|\rho|0}(\tau) f_\tau(\tau)$$

$$C_{0|\rho}[f_\tau](\tau) = \left[ 2P' \ln \left( \frac{8P}{V} \right) - 4P' \right] f_\tau(\tau) = C_{0|\rho}(\tau) f_\tau(\tau)$$

$$C_{0|z}[f_\tau](\tau) = \left[ 2Z' \ln \left( \frac{8P}{V} \right) + 2Z' \right] f_\tau(\tau) = C_{0|z}(\tau) f_\tau(\tau)$$

Объединением результат в квадратурную формулу:

$$\mathbf{v}_{\tau|\mu}[f_\tau] = \int_0^1 d\tau_1 K_{\tau|\mu}(\tau, \tau_1) f_\tau(\tau_1) \rightarrow$$

$$w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} K_{\tau|\mu}(\tau)_j f_{\tau_j}(\tau) + C_{0|\mu} f_\tau(\tau) w_{j:\tau_j=\tau} + C_{\ln|\mu|0} f_\tau(\tau) I_{\ln|\delta}(\tau)$$

Если интегрирование проводится по квадратурной формуле с конечно-элементным восполнением, то формулу можно упростить, т.к. в глубине отрезка  $w_j = 1/N_{int}$ :

$$\mathbf{v}_{\tau|\mu}[f_\tau] \rightarrow w_j \|\widetilde{K_{\tau|\mu}(\tau)}\|_j \|f_\tau\|_j + C_{0|0|\mu} f_\tau(\tau) w_{j:\tau_j=\tau} + C_{\ln|\mu|0} f_\tau(\tau) I_{\ln|\delta}(\tau)$$

$$\|\widetilde{K_{\tau|\mu}(\tau)}\|_j = \begin{cases} K_{\tau|\mu}(\tau, \tau_j), & \tau \neq \tau_j \text{ or } \tau = P(\tau) = 0 \\ 0, & \text{else.} \end{cases}$$

$K_n$  нормальная сила

Ядро для нормальной силы:

$$K_{n|\rho} = \left[ P'(\tau_1) \tilde{G}_{\rho z} - Z'(\tau_1) \tilde{G}_{\rho\rho} \right], K_{n|z} = \left[ P'(\tau_1) \tilde{G}_{zz} - Z'(\tau_1) \tilde{G}_{z\rho} \right]$$

Поскольку постоянная по величине нормальная сила полностью компенсируется давлением и не индуцирует поле скорости, можно упростить вычисление отклика:

$$\mathbf{v}_{n|\mu}[f_n] = \int_0^1 d\tau_1 K_{n|\mu}(\tau, \tau_1) f_n(\tau_1) = \int_0^1 d\tau_1 K_{n|\mu}(\tau, \tau_1) [f_n(\tau_1) - f_n(\tau)]$$

$$\mathbf{v}_{n|\mu}[f_n] = w_j \|\widetilde{K_{n|\mu}(\tau)}\|_j \|f_n\|_j - w_j \|\widetilde{K_{n|\mu}(\tau)}\|_j f_n(\tau)$$

**Отклик на оси симметрии**

Отдельно необходимо описать вычисление скорости на оси симметрии при  $\rho = 0$ .

На оси только  $v_z$  отлична от нуля

$$\tilde{G}_{zz}(\rho = 0) = \frac{4}{\delta r} \frac{\pi}{2} \rho_1 \left( 1 + \frac{z^2}{z^2 + \rho_1^2} \right), \tilde{G}_{z\rho}(\rho = 0) = \frac{2}{\delta r} z \left( -1 + \frac{z^2 - \rho_1^2}{z^2 + \rho_1^2} \right) \frac{\pi}{2}$$

Асимптотика при подходе источника к оси:

$$\tilde{G}_{zz}(\rho = 0, \tau_1 \rightarrow 0) = 2\pi, \tilde{G}_{z\rho}(\rho = 0, \tau_1 \rightarrow 0) = 0$$

### 3.4 Нахождение поверхностной дивергенции скорости

Поверхностная дивергенция скорости  $\nabla^\perp \mathbf{v}$  находится по известному полю скорости следующим образом:

$$(\nabla^\perp \mathbf{v})(\tau) = \left[ \tau \frac{1}{v} \partial_\tau + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{P} \partial_\varphi \right] [v_\rho \mathbf{e}_\rho + v_z \mathbf{e}_z] = \frac{P'}{v^2} \partial_\tau v_\rho + \frac{Z'}{v^2} \partial_\tau v_z + \frac{v_\rho}{P},$$

где производные  $\partial_\tau$  удобнее выразить через  $\partial_\mu$  :  $\partial_\tau = R'_\mu \partial_\mu$ :

$$(\nabla^\perp \mathbf{v})(\tau) = \frac{P'}{v^2} [P' \partial_\rho + Z' \partial_z] v_\rho + \frac{Z'}{v^2} [P' \partial_\rho + Z' \partial_z] v_z + \frac{v_\rho}{P}.$$

Поверхностная дивергенция скорости от сил, сосредоточенных на поверхности, таким образом так же выражается через поверхностный интеграл с некоторым векторным ядром  $\mathbf{D}$ :

$$\begin{aligned} (\nabla^\perp \mathbf{v})(\tau) &= \int_{S_1} \mathbf{D}(\tau, \tau_1) \cdot \mathbf{f}(\tau_1) \\ D_\rho &= \frac{P_\tau^2}{v^2} \partial_\rho G_{\rho\rho} + \frac{Z_\tau^2}{v^2} \partial_z G_{z\rho} + \frac{1}{v^2} P_\tau Z_\tau (\partial_z G_{\rho\rho} + \partial_\rho G_{z\rho}) + \frac{G_{\rho\rho}}{P} \\ D_z &= \frac{P_\tau^2}{v^2} \partial_\rho G_{\rho z} + \frac{Z_\tau^2}{v^2} \partial_z G_{zz} + \frac{1}{v^2} P_\tau Z_\tau (\partial_z G_{\rho z} + \partial_\rho G_{zz}) + \frac{G_{\rho z}}{P} \end{aligned}$$

Удобно переписать отклик в терминах нормальной и тангенциальной поверхностной силы:

$$\begin{aligned} \nabla^\perp \mathbf{v}_n[f_n] &= \int (\mathbf{D}(\tau, \tau_1), \mathbf{l}(\tau_1)) f_n(\tau_1) v(\tau_1) P(\tau_1) d\tau_1 = \int D_n(\tau, \tau_1) f_n(\tau_1) d\tau_1 \\ D_n &= (\mathbf{D}, P\mathbf{v}\mathbf{l}) = -Z'(\tau_1) D_\rho + P'(\tau_1) D_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla^\perp \mathbf{v}_\tau[f_\tau] &= \int (\mathbf{D}(\tau, \tau_1), \boldsymbol{\tau}(\tau_1)) f_\tau(\tau_1) v(\tau_1) P(\tau_1) d\tau_1 = \int D_\tau(\tau, \tau_1) f_\tau(\tau_1) d\tau_1 \\ D_\tau &= [\mathbf{D}, P\mathbf{v}\boldsymbol{\tau}] = P'(\tau_1) D_\rho + Z'(\tau_1) D_z \end{aligned}$$

### Самодействующая асимптотика

Как и для функции Грина скорости, ядро оператора поверхностной дивергенции содержит особенность при  $\tau \rightarrow \tau_1$ :

$$\begin{aligned} \tilde{D}_z(\tau, \tau_1) &\approx \frac{2Z'}{v^2} \frac{1}{\tau_1 - \tau} + \left( \frac{Z_2 (P_1^2 - Z_1^2) - 2P_1 P_2 Z_1}{v^4} + \frac{P_1 Z_1}{\rho v^2} \right) \\ \tilde{D}_\rho(\tau, \tau_1) &\approx \frac{2P'}{v^2} \frac{1}{\tau_1 - \tau} + \frac{1}{\rho} \left( \log \left( \frac{8\rho}{v} \frac{1}{|\tau_1 - \tau|} \right) \right) + \left( \frac{-2P_1 Z_1 Z_2 + P_2 Z_1^2 - P_2 P_1^2}{v^4} - \frac{4Z_1^2}{\rho v^2} \right) \end{aligned}$$

Используя

$$P'(\tau_1) \approx P'(\tau) + (\tau_1 - \tau) P''(\tau), \quad Z'(\tau_1) \approx Z'(\tau) + (\tau_1 - \tau) Z''(\tau),$$

получаем асимптотику ядра для нормальной и тангенциальной компоненты:

$$D_n \approx -\frac{Z_1}{\rho} \log \left( \frac{8\rho}{v} \frac{1}{|\tau_1 - \tau|} \right) + \left( \frac{Z_1 (P_1^2 + 4Z_1^2)}{\rho v^2} + \frac{P_2 Z_1 - P_1 Z_2}{v^2} \right),$$

$$D_\tau \approx 2 \frac{1}{\tau_1 - \tau} + \frac{P_1}{\rho} \log \left( \frac{8\rho}{v} \frac{1}{|\tau_1 - \tau|} \right) + \left( -\frac{3P_1 Z_1^2}{\rho v^2} + \frac{P_1 P_2 + Z_1 Z_2}{v^2} \right).$$

### 3.4.1 Квадратурное приближение

Как и для самой скорости, необходимо получить квадратурные правила для каждой компоненты ядра.

$D_\tau$  касательная сила

Ядро касательного направления имеет следующую самодействующую асимптотику:

$$D_\tau \sim 2 \frac{1}{\tau_1 - \tau} + \frac{P_1}{\rho} \ln \left( \frac{8\rho}{v} \frac{1}{|\tau_1 - \tau|} \right) + \left( -\frac{3P_1 Z_1^2}{\rho v^2} + \frac{P_1 P_2 + Z_1 Z_2}{v^2} \right) + \mathcal{O}(\tau - \tau_1)$$

В рамках описанной ранее схемы интегрирования необходимо из итоговой подынтегральной функции

$$f(\tau, \tau_1) = D_\tau(\tau, \tau_1) f_\tau(\tau_1)$$

Выделить регуляризующие коэффициенты:

$$C_{1/x}[f_\tau](\tau) = 2f_\tau(\tau),$$

$$C_{\ln}[f_\tau](\tau) = -\frac{P_1}{P}(\tau) f_\tau(\tau) = C_{\ln|0} f_\tau(\tau),$$

$$C_0[f_\tau](\tau) = \left[ \frac{P_1}{P} \ln \left( \frac{8P}{V} \right) + \left( -\frac{3P_1 Z_1^2}{P v^2} + \frac{P_1 P_2 + Z_1 Z_2}{v^2} \right) \right] f_\tau(\tau) + 2 \lim_{\tau_1 \rightarrow \tau} \frac{1}{\tau_1 - \tau} f_\tau(\tau_1)$$

$$C_0[f_\tau](\tau) = C_{0|0}(\tau) f_\tau(\tau) + 2f'_\tau(\tau),$$

$$C_{0|0}(\tau) = \left[ \frac{P_1}{P} \ln \left( \frac{8P}{V} \right) + \left( -\frac{3P_1 Z_1^2}{P v^2} + \frac{P_1 P_2 + Z_1 Z_2}{v^2} \right) \right]$$

Объединим результат в квадратурную формулу:

$$(\nabla^\perp \mathbf{v}) [f_\tau] = \int_0^1 d\tau_1 D_\tau(\tau, \tau_1) f_\tau(\tau_1) \rightarrow$$

$$w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} D_\tau(\tau)_j f_{\tau_j}(\tau) + C_0[f_\tau](\tau) w_{j:\tau_j=\tau} + C_{\ln}[f_\tau](\tau) I_{\ln|\delta}(\tau) + C_{1/x}[f_\tau](\tau) I_{1/x|\delta}(\tau) =$$

$$w_j \delta_{\tau_j \neq \tau} D_\tau(\tau)_j \|f_\tau\|_j + C_{0|0}(\tau) f_\tau(\tau) w_{j:\tau_j=\tau} + C_{\ln|0} f_\tau(\tau) I_{\ln|\delta}(\tau) + 2f_\tau(\tau) I_{1/x|\delta}(\tau)$$

$$+ 2f'_\tau(\tau) w_{j:\tau_j=\tau}$$

Если интегрирование проводится по квадратурной формуле с конечно-элементным восполнением, то формулу можно упростить, т.к. в глубине отрезка  $w_j = 1/N_{int}$ :

$$\boxed{(\nabla^\perp \mathbf{v})_\tau [f_\tau] = w_j \|\widetilde{D_\tau(\tau)}\|_j \|f_\tau\|_j + \left[ \frac{1}{N_{int}} C_{0|0}(\tau) + C_{\ln|0}(\tau) I_{\ln|\delta}(\tau) + 2I_{1/x|\delta}(\tau) \right] f_\tau(\tau) + 2 \frac{1}{N_{int}} f'_\tau(\tau)}$$

$$\|\widetilde{D_\tau(\tau)}\|_j = \begin{cases} D_\tau(\tau, \tau_j), & \tau \neq \tau_j \\ 0, & \text{else.} \end{cases}$$

### $D_n$ нормальная сила

Поскольку постоянная по величине нормальная сила полностью компенсируется давлением и не индуцирует поле скорости, можно упростить вычисление отклика:

$$\begin{aligned} (\nabla^\perp \mathbf{v})_n &= \int_0^1 d\tau_1 D_n(\tau, \tau_1) f_n(\tau_1) = \int_0^1 d\tau_1 D_n(\tau, \tau_1) (f_n(\tau_1) - f_n(\tau)) \implies \\ f(\tau, \tau_1) &= D_n(\tau, \tau_1) [f_n(\tau_1) - f_n(\tau)] \end{aligned}$$

$$\boxed{(\nabla^\perp \mathbf{v})_n [f_n] = w_j \|\widetilde{D_n(\tau)}\|_j \|f_n\|_j - w_j \|\widetilde{D_n(\tau)}\|_j f_n(\tau)}$$

### Отклик на оси симметрии

Отдельно необходимо описать вычисление скорости на оси симметрии при  $\rho = 0$ .

$$D_z(\rho \rightarrow 0) = -\frac{2\pi\rho_1 z (\rho_1^2 - 2z^2)}{(\rho_1^2 + z^2)^{5/2}}, D_\rho(\rho \rightarrow 0) = \frac{2\pi\rho_1^2 (\rho_1^2 - 2z^2)}{(\rho_1^2 + z^2)^{5/2}}$$

Асимптотика при подходе источника к оси:

$$\begin{aligned} D_z(\tau_1 \rightarrow \tau = 0) &= \pi \frac{Z_2}{P_1^2}, D_\rho(\tau_1 \rightarrow \tau = 0) = 2\pi \frac{1}{\rho_1(\tau_1)} \\ D_n(\tau \rightarrow 0) &= -2\pi \frac{Z_2}{P_1}, D_\tau(\tau = 0, \tau_1 \rightarrow 0) \sim 2\pi \frac{1}{\tau_1} \end{aligned}$$

Учитывая тот факт, что  $f_\tau$  стремится к нулю вблизи оси, интегрировать нужно функцию без особенностей, нужно только раскрыть неопределённость в нуле:

$$\begin{aligned} f(\tau = 0, \tau_1) &= D_\tau(\tau = 0, \tau_1) f_\tau(\tau_1) \\ f(0, 0) &= \lim_{\tau_1 \rightarrow \tau} 2\pi \frac{1}{\tau_1} f_\tau(\tau_1) = 2\pi f'_\tau(0) \end{aligned}$$

Тогда итоговое выражение для отклика на оси:

$$\begin{aligned} (\nabla^\perp \mathbf{v})_\tau [f_\tau](\tau = 0) &= w_j \| \widetilde{D_\tau(\tau = 0)} \|_j \| f_\tau \|_j + w_{j=0} 2\pi f'_\tau(0) \\ (\nabla^\perp \mathbf{v})_\tau [f_\tau] &= w_j \| \widetilde{D_\tau(\tau)} \|_j \| f_\tau \|_j + [C_{0|0}(\tau) + C_{\ln|0}(\tau) I_{\ln|\delta}(\tau) + 2I_{1/x|\delta}(\tau)] f_\tau(\tau) + 2f'_\tau(\tau) \end{aligned}$$

### 3.5 Нахождение поверхностного натяжения

Поскольку зависимость скорости от поверхностного натяжения может быть выражена через функцию Грина, получаем уравнение:

$$(\nabla^\perp \mathbf{v}) = \underbrace{\int_{S_1} (\nabla^\perp \hat{G}) [\nabla_1^\perp - \mathbf{n}_1 H_1] \sigma_1}_{(\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma)[\sigma]} + (\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma} = 0,$$

где под  $(\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma}$  обозначена поверхностная дивергенция, индуцированная без учета поверхностного натяжения, а  $(\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma)$  линейный оператор с ядром  $(\nabla^\perp \hat{G}) [\nabla_1^\perp - \mathbf{n}_1 H_1]$ .

У этого линейного оператора все собственные значения неположительные, что отвечает именно релаксации поверхностного натяжения к равновесному.

В случае отсутствия нулевых мод  $\sigma$  однозначно определяется из этого уравнения

$$\begin{aligned} \int_{S_1} (\nabla^\perp \hat{G}) [\nabla_1^\perp - \mathbf{n}_1 H_1] \sigma_1 + (\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma} &= 0 \\ \boxed{(\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma)[\sigma] = -(\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma}} \end{aligned}$$

Находить  $\sigma$  будем приближенно, используя конечный отрезок ряда Фурье

$$\sigma = \sum_{n=0}^{n=N_\sigma} \sigma_n \varphi_n,$$

минимизируя  $L_2$  норму невязки уравнения по его коэффициентам:

$$\int \left( (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma)[\sigma] + (\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma} \right)^2 d\mu \rightarrow \min$$

Выбор меры  $\mu$  задача творческая, естественными кандидатами являются  $dS, dl, d\tau$ .

$$\forall k : \int \left( \sum_n \sigma_n (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma \varphi_n) + (\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma} \right) (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma \varphi_k) d\mu = 0$$

$$\sum_n \int (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma [\varphi_n]) (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma [\varphi_k]) d\mu \sigma_n = - \int (\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma} (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma \varphi_k) d\mu$$

$$\mathcal{O}_\sigma \sigma = -\mathbf{s}_\sigma,$$

$$\|\mathcal{O}_\sigma\|_{kn} = \int (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma [\varphi_n]) (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma [\varphi_k]) d\mu, \|\mathbf{s}_\sigma\|_k = \int (\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma} (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma \varphi_k) d\mu$$

*Замечание.* Поскольку мы решаем физическую задачу, количество  $N_\sigma$  должно быть выбрано в том числе из тех соображений, что при смене меры  $\mu$  само поле  $\sigma$  должно меняться уже мало.

### 3.5.1 Квадратурное приближение

Рассмотрим например меру  $d\mu = d\tau$ , тогда в силу гладкости оптимальной (гауссовой) квадратурной формулой интегрирования симметричных полей является  $\int f d\tau \approx \frac{\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \dots + \frac{1}{2}f_n}{n} = c_j f_j$ .

Рассмотрим матрицу с первым индексом в реальном пространстве  $M_{jk} = (\nabla^\perp \mathbf{v}_\sigma [\varphi_k])_j$ , перенормируем её с учетом меры  $d\mu$   $\tilde{M}_{jk} = \sqrt{c_j} M_{jk}$ . Вектор  $\mathbf{rhs}_j = \left\| -(\nabla^\perp \mathbf{v})_{-\sigma} \right\|_j$  так же перенормируем  $\tilde{\mathbf{rhs}}_j = \mathbf{rhs}_j \sqrt{c_j}$ , тогда уравнение (5) имеет следующий вид:

$$\tilde{M}^T \tilde{M} \sigma = \tilde{M}^T \tilde{\mathbf{rhs}},$$

т.ч. решение является также решением задачи линейной регрессии с прямоугольной матрицей  $\tilde{M}$ .

(Это позволяет не домножать на матрицу  $\tilde{M}^T$ , используя устойчивые методы LLS.)

### 3.5.2 Квадратурное приближение оператора

В рамках численного решения используем разложение поверхностного натяжения по гармоникам:

$$\sigma = \sum_{n=0}^{n=N_\sigma} \sigma_n \varphi_n$$

Для разрешения условия поверхностной несжимаемости необходимо найти наводимую поверхностную дивергенцию скорости поверхностным натяжением, равным  $\varphi_n$ .

Разделим вклады в тензор напряжений на нормальный  $f_{\sigma|n} = -\sigma H$  и касательный  $f_{\sigma|\tau} = \frac{1}{v} \partial_\tau \sigma$ ,

и поверхностные дивергенции наводимых ими скоростей:  $(\nabla^\perp \mathbf{v})_{\sigma|n}$  и  $(\nabla^\perp \mathbf{v})_{\sigma|\tau}$ .

Каждый вклад находится с использованием соответствующих функций Грина:

$$\begin{aligned} (\nabla^\perp \mathbf{v})_{\sigma|n} &= \int_0^1 d\tau_1 D_n(\tau, \tau_1) f_{\sigma|n}, \\ (\nabla^\perp \mathbf{v})_{\sigma|\tau} &= \int_0^1 d\tau_1 D_\tau(\tau, \tau_1) f_{\sigma|\tau}. \end{aligned}$$

### $D_\tau$ касательная сила

Поскольку теперь задействована производная касательной силы, приведем для неё аналитическое выражение:

$$f_{\sigma|\tau} = \frac{1}{v} \partial_\tau \sigma \implies f'_{\sigma|\tau} = \partial_\tau \left[ \frac{1}{v} \partial_\tau \sigma \right] = \left[ -\frac{P'P'' - Z'Z''}{v^2} \right] \frac{1}{v} \partial_\tau \sigma + \left[ \frac{1}{v} \right] \partial_\tau^2 \sigma$$

### $D_n$ нормальная сила

Поскольку постоянная по величине нормальная сила полностью компенсируется давлением и не индуцирует поле скорости, можно упростить вычисление отклика:

$$\begin{aligned} (\nabla^\perp \mathbf{v})_{\sigma|n} &= \int_0^1 d\tau_1 D_n(\tau, \tau_1) f_{\sigma|n}(\tau_1) = \int_0^1 d\tau_1 D_n(\tau, \tau_1) (f_{\sigma|n}(\tau_1) - f_{\sigma|n}(\tau)) \implies \\ f(\tau, \tau_1) &= D_n(\tau, \tau_1) [f_{\sigma|n}(\tau_1) - f_{\sigma|n}(\tau)] \end{aligned}$$

$$\boxed{(\nabla^\perp \mathbf{v})_{\sigma|n} [f_{\sigma|n}] = w_j \|\widetilde{D_n(\tau)}\|_j \|f_{\sigma|n}\|_j - w_j \|\widetilde{D_n(\tau)}\|_j f_{\sigma|n}(\tau)}$$

## 3.6 Калибровочная свобода

При описании формы поверхности в терминах кривой  $\mathbf{R}(\tau)$  на плоскости  $(\rho, z)$  есть большая неоднозначность, связанная с возможностью репараметризации кривой  $\mathbf{R}'(\tau') = \mathbf{R}(\tau(\tau'))$ . Иными словами мы можем локально менять двумерную скорость движения вдоль этой кривой  $v(\tau) = \frac{dl}{d\tau} = |\partial_\tau \mathbf{R}|$ . Таким образом калибровка однозначно задаётся этой скоростью  $v(\tau)$ . На теоретическом уровне совершенно не важно, какая калибровка задана, однако на практике мы имеем лишь конечномерное представление полей, для которого крайне нежелательно сильное сгущение точек на поверхности (это повышает численную жесткость динамической задачи), а так же сильное разрежение (которое ведет к потере точности в этой области). Применительно к нашему случаю,



для любой калибровки коэффициенты Фурье разложения  $\mathbf{R}(\tau)$  затухают экспоненциально с номером гармоники, однако калибровка влияет на коэффициент в экспоненте, что очень существенно для столь аккуратного счета.

Дополнительную сложность представляет то, что типично поверхность имеет более и менее гладкие участки, так что идеальной калибровкой была бы такая, которая обеспечивает большую плотность точек в "узких, интересных" местах и меньшую в гладкой области.

Заметим так же, что из физического мира есть только требование на нормальную скорость мембраны, т.к. смещение вдоль касательного направления не приводит к физическому изменению формы мембраны. Если же, например, использовать в качестве скорости поверхности только нормальную компоненту скорости течения, т.е.  $\partial_t \mathbf{R} = \mathbf{v}_n = \mathbf{I}(\mathbf{I}, \mathbf{v})$ , нет никакой гарантии, что изначально удачная калибровка не перейдет в плохую, имеющую разрежения в "узких" областях. Поэтому отдельно необходимо уделить внимание правильному определению тангенциальной составляющей скорости  $\partial_t \mathbf{R} = \mathbf{v}_n + \tau v_{\tau|gauge}[v_n]$ .

### 3.6.1 Задание оптимальной калибровки

Выбрать калибровку для заданной формы поверхности задача во многом творческая, поскольку предполагает обрамление слов про "узкие" места в численный эквивалент.<sup>13</sup>

Простейшая стратегия "не навреди" заключается в выборе естественной параметризации, т.е. такой, при которой плотность точек постоянна вдоль кривой  $V(\tau) = C$ .

Более интеллектуальные методы основаны более менее на таком соображении: определим некоторым образом локальный масштаб на кривой  $a_{loc}(\tau)$ , выраженный например через её кривизну, расстояние до оси и прочие физические величины, тогда естественным кажется использовать такую калибровку, в которой плотность точек обратно пропорциональна локальному масштабу, т.е. скорость движения по кривой прямо пропорциональна ему:

$$V(\tau) = C a_{loc}(\tau).$$

Одним из естественных кандидатов на роль локального масштаба выступает следующее выражение:

$$a_{loc} \equiv \left( H_1^4 + \left( \frac{dH_1}{dl} \right)^2 \right)^{-1/4}$$

<sup>13</sup>Тот факт, что работу сеточных алгоритмов можно существенно ускорить, изменив плотность точек в узких областях, давно известен, алгоритмы автоматического выбора сетки являются проприетарной собственностью компаний, продающих программы для моделирования различных процессов.

Для работы с разными параметризациями необходимо уметь переходить от одной к другой.

### 3.6.2 Смена калибровки на естественную

Пусть у нас имеется кривая  $\mathbf{R}(\tau)$ , а мы для примера хотим представить её в естественной калибровке  $\mathbf{R}'(\tau')$ , т.е. такой, чтобы скорость движения по кривой была постоянна:

$$C = V' = V \frac{d\tau}{d\tau'} \implies \boxed{\frac{d\tau'}{d\tau} = \frac{V(\tau)}{C}} \implies \tau' = \frac{1}{C} \int_0^\tau V(\tau_1) d\tau_1,$$

где  $C$  - константа, определяемая из условия нормировки  $\int_0^1 V' d\tau' = \int_0^1 V d\tau$ .

Полученное уравнение удобно решать в Фурье пространстве:

$$\tau' = \tau + \sum_k c_k \varphi_{\rho k}(\tau)$$

$$\frac{d\tau'}{d\tau} = 1 + \sum_{k=1} c_k (\pi k) \varphi_{zk} = \frac{1}{C} \left( \sum_{k=0} V_k \varphi_{zk} \right) = \frac{V_0}{C} + \sum_{k=1} \frac{V_k}{C} \varphi_{zk} \implies \begin{cases} C = V_0 \\ c_k = \frac{1}{\pi k} \frac{V_k}{V_0}, \quad k \geq 1 \end{cases}$$

Тогда искомое выражение есть:

$$\mathbf{R}'(\tau') = \mathbf{R}(\tau(\tau'))$$

### 3.6.3 Произвольная перекалибровка

Произвольная перекалибровка может быть задана скоростью  $V'(\tau') = C F'(\tau')$ , где  $C$  - константа, определяемая из условия нормировки  $\int V' d\tau' = \int V d\tau$ .

Если  $F$  скалярное поле, т.е.  $F' = F$ :

$$V' = V \frac{d\tau}{d\tau'} \implies \boxed{\frac{d\tau'}{d\tau} = \frac{V(\tau)}{C F'(\tau')} = \frac{1}{C} \frac{V(\tau)}{F(\tau)}}$$

дальнейшие вычисления те же, что в параграфе для естественной калибровки.

### 3.6.4 Динамика с сохранением калибровки

Поскольку мы занимаемся изучением динамики везикулы, т.е. изменением её формы со временем, мало один раз выбрать удачную калибровку (это можно было бы сде-

лать и вручную), необходимо следить за тем, чтобы в динамике она сильно не портилась.

Для этого есть два пути:

1. Использовать наиболее простую динамику, например повторяющую течение жидкости, при этом в некоторые моменты (пока калибровка не стала плохой) останавливаться и делать перекалибровку. Этот подход имеет право на существование, однако не обладает универсальностью и кроме того приводит к разрывности динамики в терминах внутренних переменных  $\mathbf{R}(\tau)$ .
2. Более аккуратным является такой подбор тангенциальной скорости, которая сохраняет оптимальность калибровки.

### 3.6.5 Динамика с сохранением естественной калибровки

#### Тангенциальная релаксация

Один из способов почти сохранять естественную калибровку в динамике - придумать такую тангенциальную динамику (напомним, что тангенциальные смещения не сказываются на форме мембраны), чтобы устойчивой стационарной точкой была естественная.

Для этого можно придумать калибровочный функционал типа энергии, минимум которого достигается при однородной скорости движения вдоль кривой, а тангенциальная скорость направлена вдоль направления наискорейшего спуска для этого функционала.

Наиболее удобный пример:

$$G = \frac{1}{2} \int (V - V_{eq})^2 d\tau \rightarrow \min, \text{ где } V_{eq} = \int V d\tau$$

Рассмотрим тангенциальное смещение  $\delta T(\tau)$ , скорость при таком смещении преобразуется следующим образом:

$$\delta V = \partial_\tau \delta T,$$

а значит калибровочная энергия:

$$\delta G = \int (V - V_{eq}) \delta T' d\tau = - \int V' \delta T d\tau,$$

откуда направление наискорейшего спуска:

$$\delta T \propto V'.$$

Для практического использования необходимо кроме того выбрать амплитуду калибровочной тангенциальной скорости  $1/T_g$ :

$$\boxed{\mathbf{v}_g = \frac{1}{T_g} \tau V' },$$

где  $T_g$  - время, меньшее характерного времени нарушения калибровки (характерного времени в задаче).

### Тангенциальная компенсация

Формально можно добиться полного сохранения естественной калибровки, устремив  $T_g \rightarrow 0$  предыдущем параграфе, однако это делает задачу очень жесткой и не очень удобной для численного интегрирования. Поэтому проще построить такой функционал  $\mathbf{v}_g[\mathbf{v}_n]$ , который компенсирует нарушение калибровки в касательном расслоении.

Пусть имеется инфинитезимальное изменение:

$$\delta \mathbf{R} = \begin{pmatrix} \delta P \\ \delta Z \end{pmatrix} = \mathbf{1} \delta R_l + \mathbf{e}_\tau \delta R_\tau,$$

Тогда поле скорости  $\frac{dl}{d\tau} = v$  преобразуется следующим образом:

$$\delta v = \mathbf{e}_\tau \partial_\tau \delta \psi = (H_1 v) \cdot \delta R_n + \partial_\tau \delta R_\tau$$

Если мы хотим удерживать однородную скорость, необходимо  $\delta R_\tau$  находить из того, чтоб вариации скорости была равна константе<sup>14</sup>:

$$\begin{aligned} \delta v = C &\implies \\ \partial_\tau R_\tau &= -(H_1 v) \cdot \delta R_n + C, \end{aligned}$$

откуда  $R_\tau$  может быть явно найдено через Фурье компоненты:

$$\delta R_{\tau|k} = -\frac{\|(H_1 v) \cdot \delta R_n\|_k}{\partial_{\tau|k}}, \quad k > 0$$

Итоговое выражение:

$$\delta \mathbf{R}_{corr} = \mathbf{1} \delta R_n + \mathbf{e}_\tau \left\| \left\| -\frac{\|(H_1 v) \cdot \delta \psi_n\|_k}{\partial_{\tau|k}} \right\| \right\|_\tau.$$

<sup>14</sup>Общая длина кривой в динамике разумеется не сохраняется, в отличии от площади.

Похожим образом могут быть получены выражения для сохранения произвольной калибровки.

### 3.7 Устойчивость динамики

Как известно, для моделирования динамики систем недостаточно аппроксимации, необходима устойчивость для сходимости той или иной схемы. Поясним это, рассматривая общую задачу моделирования полевой динамики. Пусть имеется некоторое поле  $\Psi(t)$ , описываемое динамическим уравнением  $\partial_t \Psi = F[\Psi]$ , мы же хотим приближенно описывать эту эволюцию, используя конечномерную аппроксимацию  $\psi(a[t])$ . Наша задача (творческая и инженерная) найти такой функционал  $f[a]$ , управляющий динамикой параметров  $\partial_t a = f[a]$ , обеспечивающий наилучшее приближение бесконечномерной задачи:

$$r_\Psi = \|\psi(a(t)) - \Psi(t)\|_\Psi^{15} \rightarrow \min$$

Естественным кажется аппроксимировать скорость с какой-то нормой в касательном расслоении:

$$\begin{aligned} \partial_t \psi &= \partial_a \psi \partial_t a \approx F[\psi[a]] \\ r_F &= \|\partial_a \psi \partial_t a - F[\psi]\|_F \rightarrow \min \\ \partial_t a &= f[a; \|\cdot\|_F], \end{aligned}$$

Тогда вся творческая деятельность сводится к выбору нормы, даже если на истинном решении в каждый момент времени две нормы более-менее эквивалентны, это не гарантирует эквивалентность динамик. Заметим, что малость ошибки представления скорости  $r_F$  не гарантирует малость отклонения траектории  $r_\Psi$ , т.к. грубая оценка сверху на расхождение траекторий  $r_\psi(t) \lesssim \max_l \{e^{lt} r_{F|l}(0)\}$  с набором констант  $l$  для конечномерной схемы это более менее собственные числа якобиана  $\{l_i\} = \text{eigenvals}[\partial_a f]$ . (Предполагая, что изначальная задача устойчива и плавна на всей интересующей фазовой области.)

Заметим, что если у изначальной полевой задачи есть жесткие (обычно пространственно высоко-частотные) моды, которые устойчивы (сужение якобиана  $[\partial_\Psi F]$  на эти моды отрицательно), есть большая опасность при неправильном выборе меры получить такие же большие, но уже положительные собственные числа якобиана  $[\partial_a f]$ , что приведёт к высокочастотной неустойчивости (вместо быстрой релаксации). Именно такое мы наблюдали при попытках моделирования динамики коллокационными ме-

<sup>15</sup>Какая-то норма на траекториях

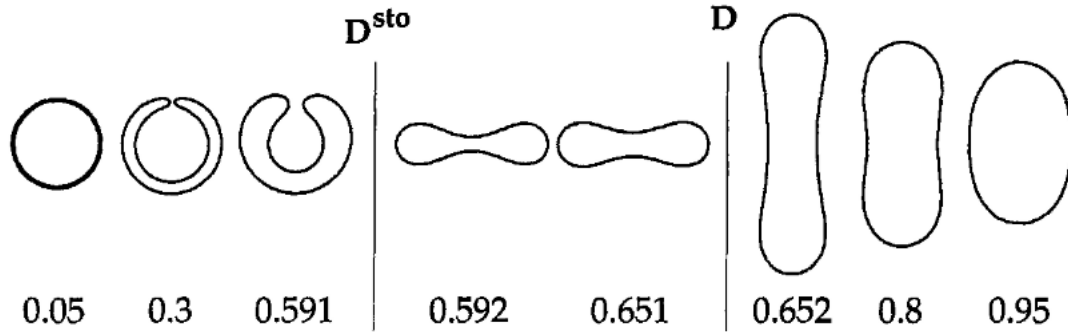


Рис. 7: Симметричные классы замкнутых везикул, имеющих минимальную энергию Хельфриха при заданном приведённом объёме, указанном снизу  $\mathcal{V}$ . [6]

тодами. Поэтому для обеспечения надёжности в сложных нелинейных задачах приходится пользоваться большим количеством точек на сетке, чем число параметров.

Если высокочастотная устойчивость обеспечена, для моделирования динамики можно использовать неявные схемы, отлично работающие для жёстких диссипативных систем. В нашей работе мы используем методы BDF и RADAU в зависимости от требуемой точности.

## 4 Релаксационная динамика

В качестве апробации полученного алгоритма и программы мы моделируем собственную (без внешних сил) динамику замкнутой везикулы к равновесным состояниям. Фазовая диаграмма давно известна и получена из условия минимизации энергии Хельфриха при фиксированных площади и объёме. Поскольку энергия Хельфриха масштабно-инвариантна, равновесная форма определяется одним параметром - безразмерным приведённым объёмом

$$\mathcal{V} = \frac{V/(4\pi/3)}{(S/4\pi)^{3/2}} \leq 1,$$

который меньше единицы и равен ей для сферической везикулы.

В стационарном состоянии выполнен баланс нормальных сил при постоянных  $\Delta P_{eq}, \sigma_{eq}$ :

$$\Delta P_{eq} = -\sigma_{eq}H + \kappa (H^3/2 - 2HK + \Delta^\perp H)$$

Как видно из рис. 7, стационарные формы разделяются глобально на две ветви: сплюснутых форм и вытянутых, среди сплюснутых форм имеются эритроциты и стоматоциты. На рисунках 8 представлены кадры релаксации начального состояния различных везикул, при этом стационарные состояния совпадают с известными в литера-

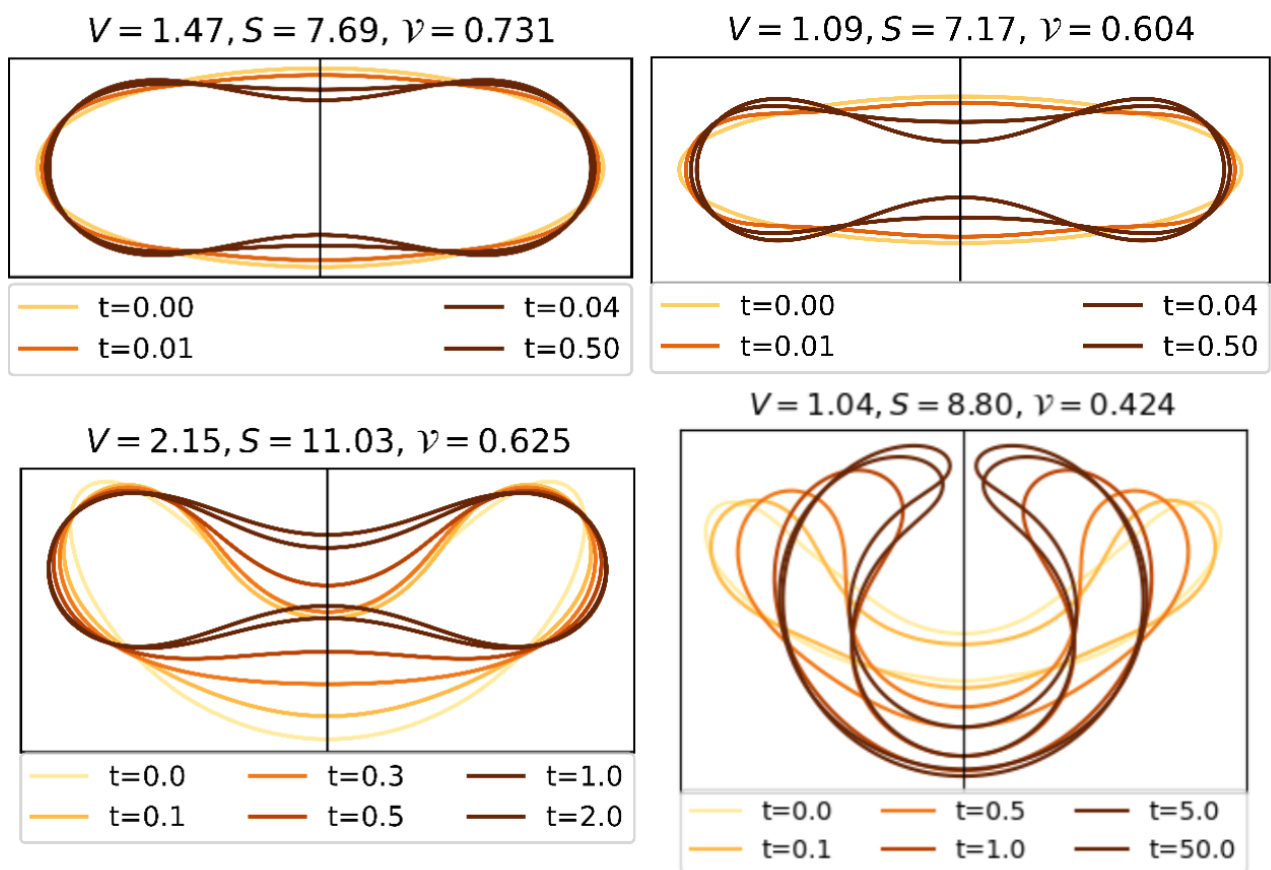


Рис. 8: Релаксационная динамика сплюснутых форм из различных начальных состояний. Различными цветами указаны состояния везикулы в промежуточные моменты времени.

туре результатами.

Однако, несмотря на то, что сама структура фазовой диаграммы определяется только энергией Хельфриха, динамические характеристики равновесных состояний требуют именно знания полной системы динамических уравнений.

## 4.1 Спектр нормальных возмущений

Поскольку многообразие начальных форм непознаваемо (можно нарисовать любую непересекающуюся кривую), необходимо некоторым универсальным образом характеризовать равновесные формы. Хорошая наблюдаемая величина - спектр нормальных возмущений равновесной формы: при малом изменении формы поверхности  $R = R_{\text{eq}} + \delta R(t)$  функционал скорости  $\dot{R} = F[R]$  можно разложить до линейного порядка:

$$\partial_t R = F[R] \implies \partial_t \delta R = \frac{\delta F}{\delta R} \delta R = \hat{\Lambda} \delta R,$$

диагонализуя линейный динамический оператор  $\hat{\Lambda}$  находим нормальные моды:

$$\hat{\Lambda} N_k = \lambda_k N_k,$$

по которым можно разложить начальное возмущение  $\delta R(0) = \sum \delta R_k N_k$ , тогда в линейном приближении возмущение зависит от времени простым образом:

$$\delta R(t) = \sum \delta R_k N_k e^{\lambda_k t}.$$

Тогда на основе спектральных значений мы можем сделать следующие выводы о локальных свойствах фазового портрета:

- Равновесие устойчиво (локально), если все возмущения не растут со временем, то есть  
 $\forall k : \mathbb{R} \lambda_k \leq 0$
- Релаксация на самых больших временах к данному равновесному состоянию происходит экспоненциально с декрементом  $\lambda_{\text{max}}$

Отметим, что в такой постановке всегда имеются 3 нулевые моды, связанные с законами сохранения объёма, площади и трансляционной симметрии вдоль оси  $z$ . На языке фазовой диаграммы можно сказать, что есть во первых направление движения в касательном расслоении вдоль равновесных конфигураций (с изменением  $\mathcal{V}$ ), мода



связанная с однородным растяжением (перемасштабировкой) и однородным сдвигом вдоль оси симметрии.

Кроме того имеется бесконечный набор нулевых калибровочных мод, связанных с возможностью произвольной перепараметризацией поверхности, чтобы избавиться от которых мы формулируем ниже локально-нормальную динамику. Для достаточно точного описания поведения спектра вблизи точек бифуркации на ветви сплюснутых везикул необходимо как можно точнее найти ветви стационарных форм. Эта задача более простая, чем настоящая нелокальная динамика, поэтому мы разработали локальный квазидинамический подход для нахождения стационарных состояний на выбранной ветви.

#### 4.1.1 Локально-нормальная динамика

Для удобства анализа спектра нормальных возмущений необходимо отделить моды, связанные с тангенциальными смещениями. То есть будем рассматривать устойчивость относительно нормальных возмущений:

$$\delta R = \mathbf{I}_0 \delta N.$$

Напомним, что физическая эволюция задана не однозначно, динамические уравнения

$$\mathbf{v} = \mathbf{I}v_n + \tau v_\tau$$

с различными  $v_\tau$  приводят к одной и той же физической динамике.

Поэтому мы воспользуемся этой калибровочной свободой, так, чтобы скорость была всегда по нормали выбранного стационарного состояния  $\mathbf{v} = \mathbf{I}_0 \tilde{v}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{I}_0 \tilde{v} = \mathbf{I}v_n + \tau v_\tau \\ \tilde{v} &= \frac{1}{(\mathbf{I}, \mathbf{I}_0)} v_n \end{aligned}$$

Соответственно динамика  $\delta N$ :

$$\delta \dot{N} = \frac{1}{(\mathbf{I}, \mathbf{I}_0)} v_n = \frac{1}{(\mathbf{I}[R_0 + \mathbf{I}_0 \delta N], \mathbf{I}_0)} v_n [R_0 + \mathbf{I}_0 \delta N],$$

что в линейном порядке по  $\delta N$  приводит к простому:

$$\delta \dot{N} = \left( \frac{\delta v_l}{\delta R}, \mathbf{I}_0 \delta N \right)$$

### 4.1.2 Локальная квазидинамика

В дифференциально геометрии исследуются так называемые геометрические течения, которые строятся следующим образом:[55]<sup>16</sup>

1. Есть функционал типа интеграла от плотности энергии на некотором многообразии:

$$F[\mathcal{K}] = |\mathcal{K}|^2 = \int_{\mathcal{M}} \mathcal{K}^2,$$

2. Течение устроено так, что минимизирует эту энергию, двигаясь вдоль вариации энергии:

$$\delta F = - \int_{\mathcal{M}} f \delta \mathbf{R} \implies \partial_t \mathbf{R} = f$$

Рассмотрим несколько иной взгляд на геометрическое течение:

Конформная инвариантность во времени  $\rightarrow$  поиск *направления* наискорейшего спуска - работа в касательном расслоении. Иначе говоря выбор такого смещения  $\delta \mathbf{R}$  в каждой точке многообразия, чтобы убыль энергии была максимальна при единичной норме такой вариации  $|\delta \mathbf{R}| = 1$ . Продемонстрируем, что такая постановка воспроизводит уравнение геометрического течения при некотором выборе нормы в касательном расслоении:

$$\delta F = - \int_{\mathcal{M}} \mathbf{f} \delta \mathbf{R} \xrightarrow{\|\delta \mathbf{R}\|=1} \min$$

Действуем с помощью функции Лагранжа, считая что норма смещения индуцирована евклидовой:

$$L = - \int_{\mathcal{M}} \mathbf{f} \delta \mathbf{R} + \lambda/2 \left( \int_{\mathcal{M}} (\delta \mathbf{R})^2 - 1 \right)$$

$$\delta L = - \int_{\mathcal{M}} \mathbf{f} \delta[\delta \mathbf{R}] + \lambda \int_{\mathcal{M}} (\delta \mathbf{R}, \delta \delta \mathbf{R}) \implies \lambda \delta \mathbf{R} = \mathbf{f} \implies \underline{\delta \mathbf{R} \propto \mathbf{f}}.$$

### Геометрическое течение со связями

Описанные выше взгляд позволяет обобщить построение на случай наличия огра-

<sup>16</sup>Красивые видео, относящиеся в течению Уиллмора можно посмотреть тут: <http://www.cs.cmu.edu/~kmc Crane/Projects/ConformalV>

ничений, например в нашем случае сохраняющегося объёма и площади:

$$\begin{aligned}
 L &= - \int_{\mathcal{M}} \mathbf{f} \delta \mathbf{R} + \lambda/2 \left( \int_{\mathcal{M}} (\delta \mathbf{R})^2 - 1 \right) + P \int_{\mathcal{M}} \frac{\delta V}{\delta \mathbf{R}} \delta \mathbf{R} + \Sigma \int_{\mathcal{M}} \frac{\delta S}{\delta \mathbf{R}} \delta \mathbf{R} \\
 L &= - \int_{\mathcal{M}} \mathbf{f} \delta \mathbf{R} + \lambda/2 \left( \int_{\mathcal{M}} (\delta \mathbf{R})^2 - 1 \right) + P \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R} + \Sigma \int_{\mathcal{M}} H \mathbf{1} \delta \mathbf{R} \\
 &\quad - \mathbf{f} + \lambda \delta \mathbf{R} + P \mathbf{1} + \Sigma H \mathbf{1} = 0 \\
 &\quad \underline{\delta \mathbf{R} = \mathbf{f} - P \mathbf{1} - \Sigma H \mathbf{1} = \delta \mathbf{R}_f + P \delta \mathbf{R}_P + \Sigma \delta \mathbf{R}_\Sigma}
 \end{aligned}$$

Множители Лагранжа находятся из условия соблюдения ограничений:

$$\begin{aligned}
 \begin{cases} \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R} = 0 \\ \int_{\mathcal{M}} H \mathbf{1} \delta \mathbf{R} = 0 \end{cases} &\implies \begin{pmatrix} \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R}_P & \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R}_\Sigma \\ \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R}_P H & \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R}_\Sigma H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ \Sigma \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R}_f \\ \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} \delta \mathbf{R}_f H \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} & \int_{\mathcal{M}} H \\ \int_{\mathcal{M}} H & \int_{\mathcal{M}} H^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ \Sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_{\mathcal{M}} f \\ \int_{\mathcal{M}} f H \end{pmatrix} &\implies \begin{pmatrix} \int_{\mathcal{M}} \mathbf{1} & \int_{\mathcal{M}} H \\ \int_{\mathcal{M}} H & \int_{\mathcal{M}} H^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ \Sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_{\mathcal{M}} f \\ \int_{\mathcal{M}} f H \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Введем удобную нотацию средних по многообразию:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{\int_{\mathcal{M}} \mathcal{O}}{S}, \quad S = \int_{\mathcal{M}} 1 \\
 \begin{pmatrix} 1 & \langle H \rangle \\ \langle H \rangle & \langle H^2 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ \Sigma \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle f \rangle \\ \langle f H \rangle \end{pmatrix} \implies \\
 \begin{pmatrix} 1 & \langle H \rangle \\ \langle H \rangle & \langle H^2 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ \Sigma \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle f \rangle \\ \langle f H \rangle \end{pmatrix} \implies \\
 \begin{pmatrix} P \\ \Sigma \end{pmatrix} &= \frac{1}{\mathbb{D}H} \begin{pmatrix} \langle H^2 \rangle & - \langle H \rangle \\ - \langle H \rangle & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle f \rangle \\ \langle f H \rangle \end{pmatrix}, \\
 \mathbb{D}H &= \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 \\
 \begin{cases} \Sigma = \frac{\langle f H \rangle - \langle f \rangle \langle H \rangle}{\mathbb{D}H} \\ P = \langle f \rangle - \langle H \rangle \Sigma \end{cases} \\
 &\implies \boxed{\delta \mathbf{R} = \mathbf{1}(f - P - \Sigma H)}
 \end{aligned}$$

$$\partial_t \mathbf{R} = l \left( f - \langle f \rangle + \left[ \frac{\langle H \rangle - H}{\mathbb{D}H} \right] (\langle f H \rangle - \langle f \rangle \langle H \rangle) \right)$$

Таким образом мы сформулировали явно локальные динамические уравнения, имеющие ту же локальную топологическую структуру фазового портрета вблизи равновес-

ных положений

### **Получение стационарной ветви**

Для быстрого и не трудоемкого получения стационарной ветви используется следующая последовательность действий:

1. Из настоящей динамики получаем состояние близкое к равновесию<sup>17</sup>.
2. Запускается квазидинамика, получаем стационарное состояние с отличной точностью.
3. Находим спектр нормальных квазидинамических возмущений, делаем небольшой шаг в направлении нулевой моды, соответствующей другой точке на фазовой диаграмме (с другим приведенным объёмом  $\mathcal{V}$ )
4. Повторяем шаги 2-4 нужное количество раз.

---

<sup>17</sup>Заметим, что квазидинамика хороша только в некоторой области вблизи равновесия, на [рисунке](#) представлена квазидинамика из состояния далекого от равновесия, приводящая к самопересечению поверхности.

## 4.2 Бифуркационная диаграмма сплюснутых везикул

Ветвь сплюснутых форм на фазовой диаграмме устроена следующим образом:

- При умеренном приведённом объёме  $\mathcal{V} > \mathcal{V}_{sto}$  существует единственная симметричная стационарная конфигурация, похожая на эритроцит
- По мере уменьшения объёма при  $\mathcal{V} < \mathcal{V}_{sto}$  бифуркационным образом возникает стоматоцитная ветвь, содержащая локально устойчивые и неустойчивые состояния
- При дальнейшем уменьшении объёма в какой-то момент  $\mathcal{V} < \mathcal{V}$  энергия Хельфриха устойчивой стоматоцитной формы оказывается равна энергии эритроцитной формы, что соответствует фазовому переходу 1 рода
- При ещё меньшем объёме происходит бифуркация  $\mathcal{V} < \mathcal{V}_{ob}$ , при которой симметричная эритроцитная форма становится локально неустойчивой, а при дальнейшем уменьшении объёма эритроцитная форма самопересекается.

Рисунок 9 дает хорошее наглядное представление о бифуркационной диаграмме, на нём схематично показана относительная свободная энергия от степени нарушения симметрии - выгнутой везикулы. В бесконечномерном пространстве конфигураций путешествие вдоль  $x$  на графике как бы соответствует движению вдоль мягчайшего направления системы.

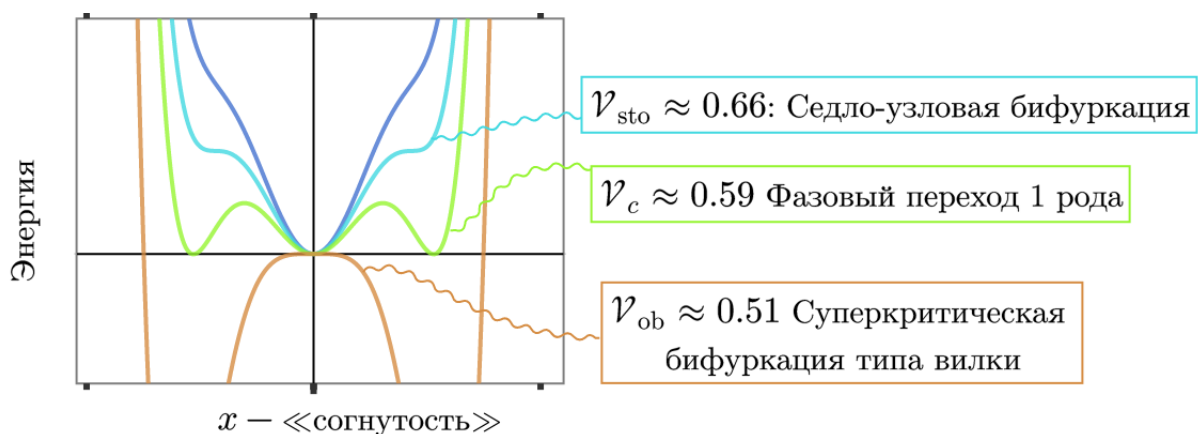
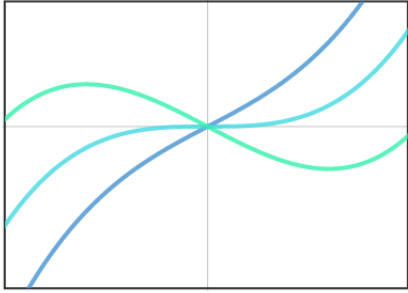


Рис. 9: Схематическое изображение бифуркационной диаграммы сплюснутых везикул. Показана энергия от меры согнутости везикулы (нарушения симметрии).

### 4.2.1 $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{sto}$ Бифуркация седло-узел



$$v = \frac{d(\delta x)}{dt} \approx \delta x^2 + \beta$$

$$\delta x_{eq} = \pm \sqrt{-\beta}$$

$$\partial_x v = 2\delta x \rightarrow \pm 2\sqrt{-\beta}$$

Исследование окрестности критических точек так же удобно производить с помощью спектра нормальных возмущений. Так для одномерной седло-узловой бифуркации ожидается корневое поведение декремента мягчайшей моды в зависимости от отстройки от точки бифуркации. (См. схему слева.) Именно такое поведение наблюдается на графиках 10. На рисунке 11 представлена возникшая стоматоцитная форма и мягчайшее её возбуждение.

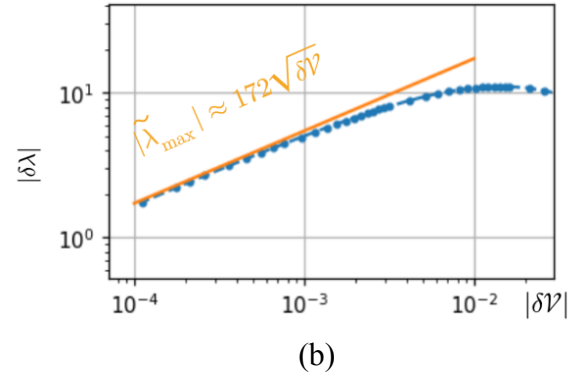
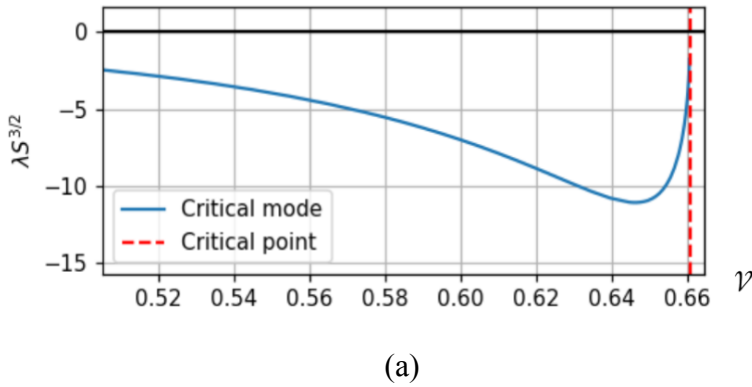


Рис. 10: (а) Зависимость декремента затухания мягчайшего возмущения  $\lambda_{\max}$  на стоматоцитной ветви локально устойчивых форм в зависимости от приведенного объёма. (b) Выделенная корневая асимптотика. Декремент для удобства нормирован на площадь поверхности.

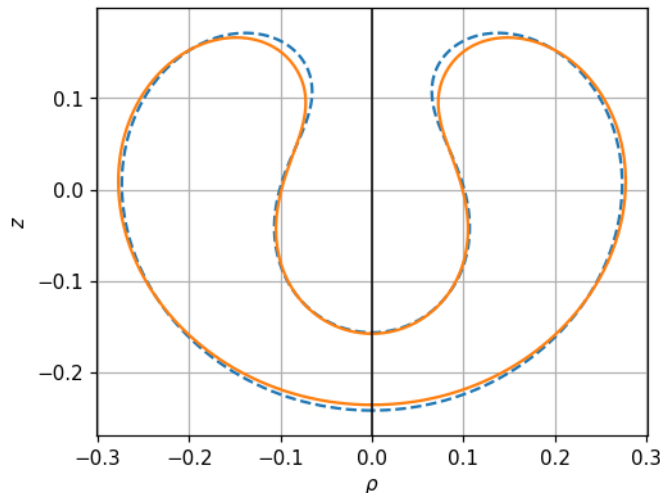


Рис. 11: Локально-устойчивая стоматоцитная форма вблизи точки бифуркации (пунктиром) и профиль мягчайшего возбуждения (сплошной).

#### 4.2.2 $\mathcal{V} = \mathcal{V}_c$ Фазовый переход первого рода

При указанном значении приведенного объема свободные энергии стоматоцита и эритроцита сравниваются, формы этих ветвей в этот момент представлены на рис. 13 и 12.

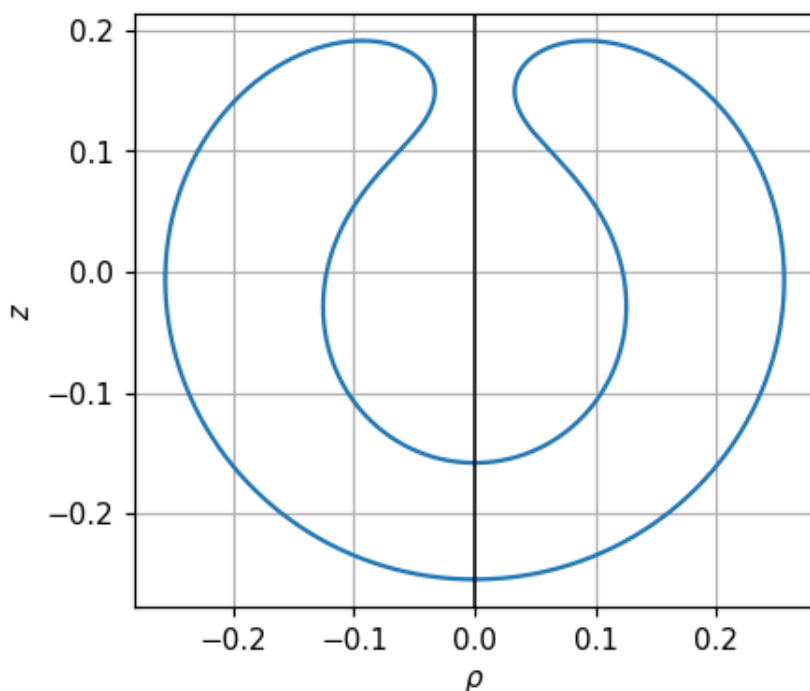


Рис. 12: Стоматоцитная стационарная форма в момент фазового перехода.

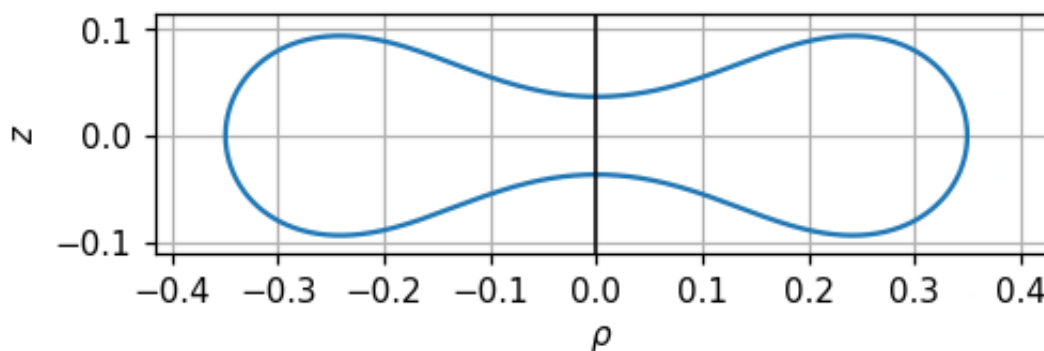
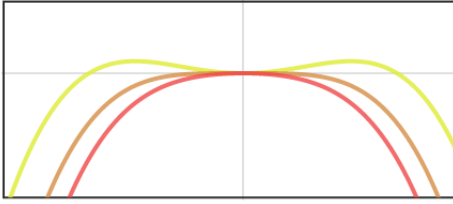


Рис. 13: Эритроцитная стационарная форма в момент фазового перехода.

### 4.2.3 $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{ob}$ Суперкритическая бифуркация типа вилки



$$\frac{dx}{dt} = v(x) = -\alpha x - x^3$$

$$\partial_x v = -\alpha$$

В окрестности потери устойчивости эритроцитной ветви происходит бифуркация типа вилки, при которой пропадают два стационарных неустойчивых равновесия, при этом симметричная эритроцитная форма становится неустойчивой. Для одномерной задачи при такой бифуркации  $\lambda_{\max}$  пересекает ноль по линейному закону (см. схему слева). Ровно такое поведение мы наблюдаем на графике 14. На рисунке 15 представлено эритроцитное состояние в точке бифуркации и неустойчивая мода, нарушающая симметрию.

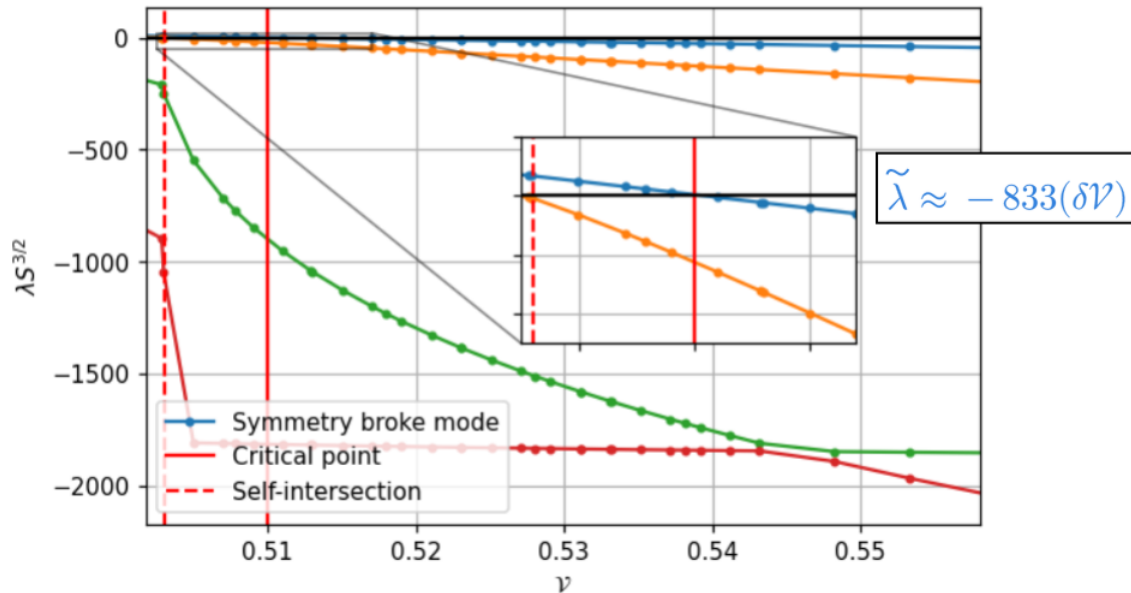


Рис. 14: Спектр нормальных возмущений эритроцитного стационарного состояния. Мода, отвечающая за нарушение зеркальной симметрии по оси  $z$  в критической точке пересекает ноль (показано на вставке), соответственно состояние становится неустойчивым по отношению к спонтанному нарушению симметрии.

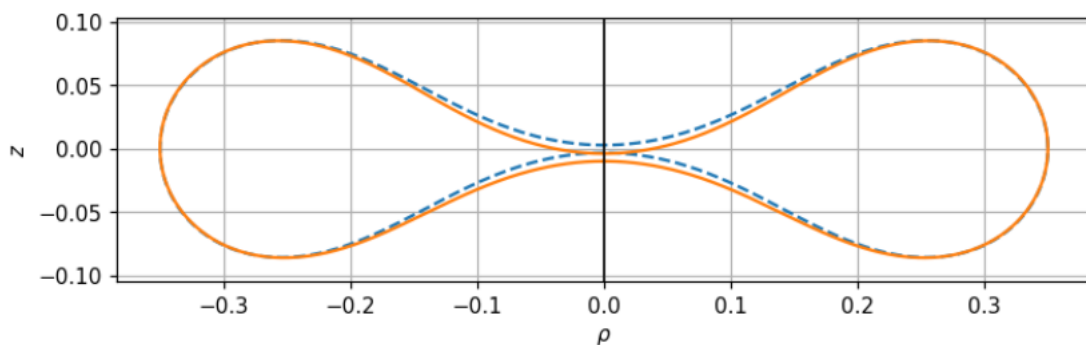


Рис. 15: Эритроцитная форма в точке бифуркации (пунктиром) и профиль неустойчивой моды, нарушающей зеркальную симметрию (сплошной).



### 4.3 Ветвь вытянутых везикул

Рис. 16: Равновесная форма сильно вытянутой везикулы.

При умеренном значении приведенного объёма вытянутая форма представляет собой гантель (см. рис. 7). Однако при уменьшении этого параметра ожидать некоторую асимптотическую универсальность одного из двух типов:

- Некоторая асимптотическая форма, вариация радиуса  $\rho = P(\tau)$  происходит на большом масштабе порядка длины везикулы (тип эллипсоид).
- Асимптотическая форма, представляющая собой длинный цилиндр с концами, при этом вариация  $P$ , связанная с концами происходит на масштабе порядка радиуса цилиндра и не ощущается в объёме.

Оказывается, что асимптотическая форма вытянутых везикул соответствует именно второму варианту. (см. рис. 16). При этом асимптотическая форма края может быть получена следующим образом. Будем использовать калибровку-параметризацию:

$$Z = -\tau, v = \sqrt{1 + P'^2}$$

$$H_1 = \frac{Z_\tau P_{\tau\tau} - P_\tau Z_{\tau\tau}}{v^3} = -\frac{P''}{v^3} = -\partial_z \left( \frac{P'}{v} \right), H_2 = \frac{1}{Pv}$$

Оператор Бельтрами-Лапласса:

$$\Delta^\perp = \frac{1}{vP} \left( \partial_z \frac{P}{v} \partial_z \right)$$

Условие равновесия:

$$\Delta P_{eq} = -\sigma_{eq} H + \kappa (H^3/2 - 2HK + \Delta^\perp H)$$

Из масштабной инвариантности мы можем растянуть всю картинку, везикула при этом останется равновесной (при этом поверхностное натяжение  $\sigma_{eq}$  и давление  $\Delta P_{eq}$  также отмасштабируются):

$$R \rightarrow R/\lambda \implies \mathcal{F}_\kappa = \frac{\kappa}{2} \int H^2 dS \rightarrow \mathcal{F}_\kappa$$

$$H \rightarrow \lambda H, \sigma \rightarrow \lambda^2 \sigma, \Delta P \rightarrow \lambda^3 \Delta P$$

С другой стороны, равновесная форма минимизирует энергию Хельфриха при заданной площади и объёме:

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{F} + \sigma\delta S + \Delta P\delta V &= 0 \\ \sigma S(1 - 2\epsilon) - \Delta PV(1 - 3\epsilon) &= 0 \\ \boxed{2\sigma S + 3\Delta PV = 0},\end{aligned}$$

откуда можем найти следующее соотношения для асимптотически длинного цилиндра единичного радиуса:

$$\begin{aligned}S &= 2\pi L, V = \pi L \\ 4\sigma + 3\Delta P &= 0 \\ \Delta P &= -\frac{4}{3}\sigma\end{aligned}$$

Подставляя в условие равновесия бесконечного цилиндра ( $H = 1$ ):

$$\begin{aligned}\Delta P &= -\sigma + \kappa/2, \\ \kappa/2 &= -\frac{4}{3}\sigma + \sigma = \sigma \left(-\frac{1}{3}\right) \implies \boxed{\sigma_{eq} = -\frac{3}{2}\kappa, \Delta P_{eq} = 2\kappa}.\end{aligned}$$

Поэтому необходимо просто решить вполне заданное нелинейное дифференциальное уравнение 4 порядка:

$$\boxed{2 = \frac{3}{2}H + (H^3/2 - 2HK + \Delta^\perp H)}$$

Мы можем аналитически найти асимптотику решения этого уравнения вдали от края.

Представим  $P = 1 + \delta P$  и разложимся по  $\delta P$  в основной части везикулы:

$$\begin{aligned}v &= (1 + \delta P'^2)^{1/2} \approx 1 \\ H_1 &= -\partial_z \left(\frac{P'}{v}\right) \approx -\delta P'', H_2 = \frac{1}{Pv} \approx 1 - \delta P \\ H &= 1 - \delta P'' - \delta P, K = -\delta P'' \\ \Delta^\perp H &= \frac{1}{vP} \left(\partial_z \frac{P}{v} \partial_z\right) H \approx -\partial_z^2 [\delta P'' + \delta P]\end{aligned}$$

Подставляя полученные приближения в уравнение баланса:

$$-3[\delta P'' + \delta P] + 2\delta P'' - \partial_z^2[\delta P'' + \delta P] = 0,$$

это линейное уравнение с постоянными коэффициентами, и все его базисные решения имеют вид:

$$\delta P \propto e^{\lambda z},$$

при этом четыре  $\lambda$  находятся из алгебраического уравнения:

$$-3[\lambda^2 + 1] + 2\lambda^2 - \lambda^2[\lambda^2 + 1] = 0$$

$$\lambda^2 = -1 \pm i\sqrt{2}$$

$$\lambda = \pm \varkappa \pm ik$$

$$\boxed{\varkappa = \sqrt{\frac{\sqrt{3}-1}{2}}, k = \sqrt{\frac{\sqrt{3}+1}{2}}}$$

$$\varkappa \approx 0.6, k \approx 1.2,$$

Соответственно отклонение радиуса от 1 экспоненциально затухает при удалении от края:

$$\delta P \propto Ae^{-\varkappa z} \cos(kz + \phi_0).$$

Если же мы вернёмся к рассмотрению везикулы конечного размера, то думать про неё можно как про два края, между которыми есть слабая связь (гладкая сшивка в центре везикулы), тогда естественно ожидать, что равновесные параметры, такие как давление и поверхностное натяжение с увеличением длины везикулы будут экспоненциально приближаться к найденным асимптотическим значениям, что видно на графиках **18** и **19**. Форма везикулы в окрестности края для везикул различных длин представлена на рисунке **17**, период колебаний и экспоненциальная огибающая согласуются с проведёнными выше вычислениями.

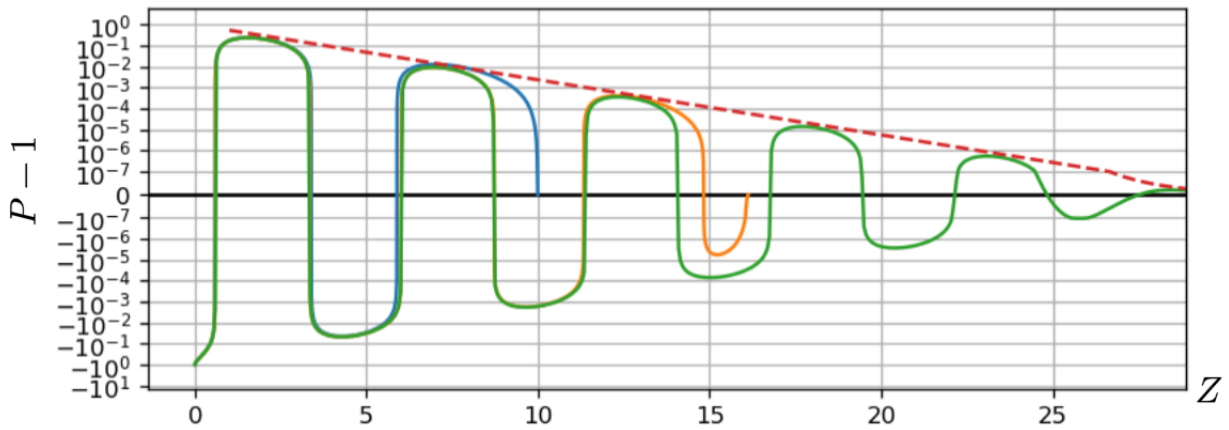


Рис. 17: Отклонение радиуса от единицы в зависимости от расстояния от края везикулы для разных везикул (разные цвета), построение выполнено до середины везикулы, все расстояния измеряются в радиусах везикулы в центре. Пунктиром построена теоретически полученная огибающая  $\propto e^{-\kappa Z}$

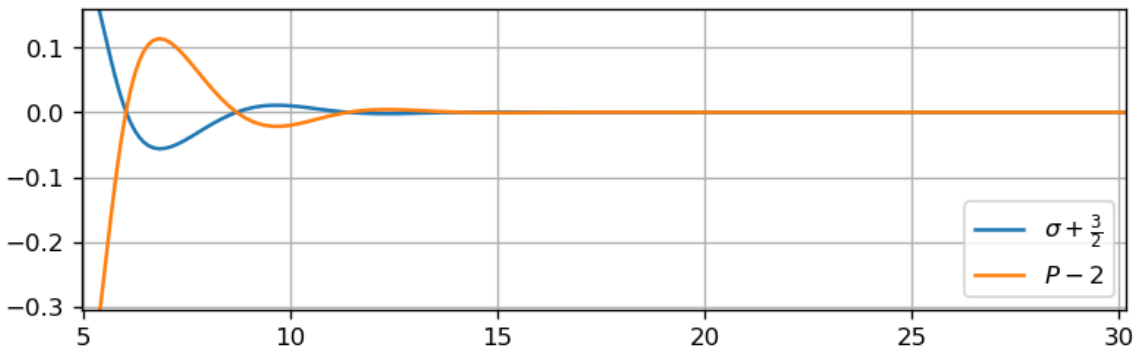


Рис. 18: Сходимость равновесных давления и поверхностного натяжения вытянутых везикул к асимптотическим по мере увеличения длины везикулы (по горизонтали).

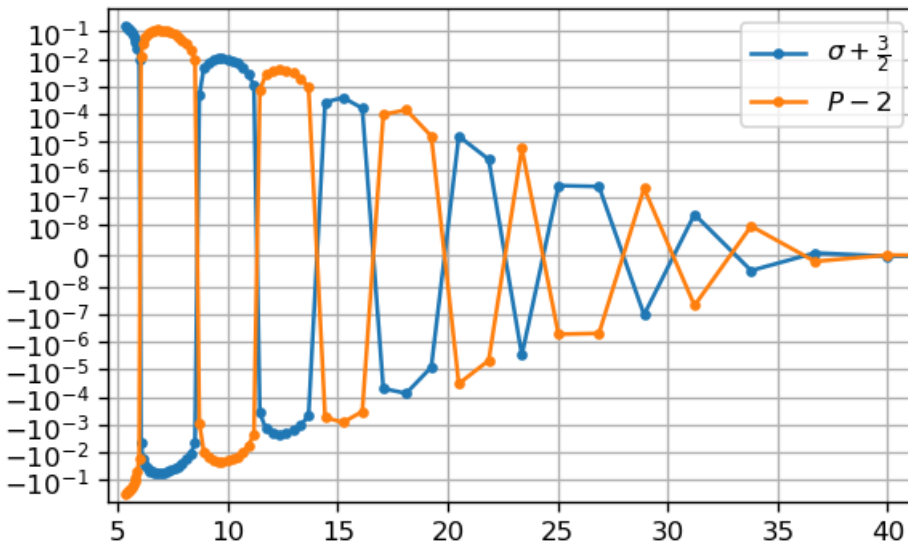


Рис. 19: То же, что и на 18, но в логарифмическом масштабе для наглядности.

## 5 Жемчужная неустойчивость вытянутых везикул

Эта глава посвящена исследованию хорошо известной жемчужной неустойчивости ("pearling instability"), возникающей при натяжении цилиндрической везикулы таким образом, что поверхностное натяжение оказывается больше критического  $\sigma > \sigma_c = \frac{3}{2}$ <sup>18</sup>. Мы исследуем неустойчивость такого плана в везикулах достаточно вытянутых, но конечного размера.

Конечность размера везикулы существенно влияет на развитие неустойчивости за рамками линейного режима в силу дальнедействующего гидродинамического взаимодействия, поэтому численное моделирование важно для корректного сравнения с экспериментальными работами

### 5.1 Внешнее натяжение везикулы

Динамическая неустойчивость связана именно с превышением натяжения над критическим, при этом методы создания такого натяжения могут быть различные:

- Оптический пинцет
- Растягивающее течение
- Электрическое или магнитное поле

Разумеется аккуратное описание конкретного эксперимента должно включать в динамику явный вид прикладываемой сил. Однако для вытянутых везикул можно рассчитывать на некоторую универсальность, если растягивающая сила приложена к торцам, то для динамики в объёме (а именно там развивается неустойчивость) не очень существенен конкретный вид внешней силы, поэтому для теоретического анализа можно брать наиболее удобный для расчётов. В общем случае, если к равновесной вытянутой везикуле приложить растягивающую силу, стационарная форма несколько изменится (в основном на краях), поэтому влияние от произвольного профиля растягивающей силы сводится не только к увеличению равновесного поверхностного натяжения, но и к изменению самой равновесной формы. Для анализа неустойчивости хотелось бы избежать необходимости нахождения ветви стационарных форм в зависимости от амплитуда приложенной растягивающей силы.

К счастью, это можно сделать, прикладывая модельную нормальную силу конкретного профиля:

$$f_\gamma = \gamma(H - H_0),$$

---

<sup>18</sup>В единицах  $\kappa/R_0^2$ .

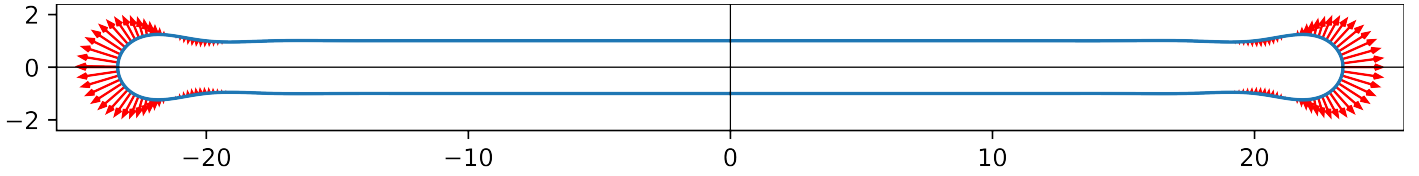


Рис. 20: Равновесная форма вытянутой везикулы. Стрелочками показано направление и величина модельной растягивающей силы.

где  $\gamma$  - амплитуда приложенной силы,  $H$  - величина локальной кривизны, а  $H_0$  - кривизна в центре мембраны. Такая сила сосредоточена на краях (см. рис 20)(поскольку вариация кривизны экспоненциально затухает в центральной части мембраны), и не приводит к изменению стационарной формы, т.к. коль скоро условие баланса сил свободной вытянутой везикулы выполнено:

$$\Delta P_{eq} = -\sigma_{eq}H + \kappa \left( H^3/2 - 2HK + \Delta^\perp H \right),$$

то оно же будет выполнено и при добавление модельной силы в правую часть и компенсации добавкой в поверхностное натяжение и давление:

$$\begin{aligned} \Delta P'_{eq} &= -\sigma'_{eq}H + \kappa \left( H^3/2 - 2HK + \Delta^\perp H \right) + \gamma(H - H_0), \\ \sigma'_{eq} &= \sigma_{eq} + \gamma, \quad \Delta P'_{eq} = \Delta P_{eq} - \gamma H_0. \end{aligned}$$

В этом смысле если мы хотим у везикулы данной формы увеличить поверхностное натяжение, нормальная сила такого профиля - единственная возможность.

## 5.2 Спектр нормальных возмущений

Мы как и раньше исследуем локальное равновесие с помощью линейной теории устойчивости. Интерес представляет спектр нормальных возмущений. В силу линейности уравнения Стокса, оператор динамики нормальных возмущений линейным образом зависит от приложенной внешней силы:

$$\Lambda = \Lambda_{eq} + \gamma \Lambda_\gamma,$$

что существенно облегчает его нахождение, т.к. необходимо для данной везикулы единожды найти  $\Lambda_\gamma$ .

Как и для случая с бесконечным цилиндром естественно ожидать, что при малых  $\gamma$  равновесие устойчиво, т.е. все  $\lambda_k < 0$ , а при достижении критического значения  $\gamma_c$  есть нейтральные (не растущие и не затухающие в рамках линейной теории) возму-

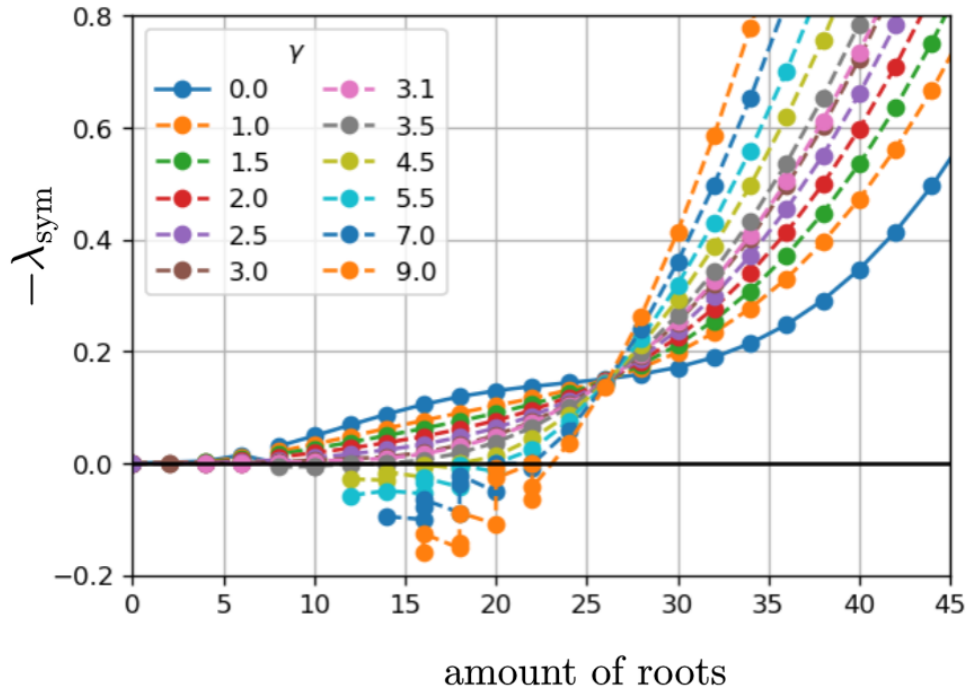


Рис. 21: Спектры нормальных симметричных возмущений для различных амплитуд растягивающей силы.

щения, а при большем  $\gamma$  есть некоторое количество мод, экспоненциально растущих со временем.

Есть вопрос классификации состояний в спектре. Во первых можно их упорядочить по их собственным числам, однако более удобный подход заключается в построении классификации, аналогичной случаю бесконечного цилиндра, в котором все возмущения характеризуются волновым вектором  $k$ . Это полезно проделать для более наглядного сравнения с результатами, известными для случая бесконечного цилиндра. Хорошим аналогом волнового вектора  $k$  для вытянутой везикулы выступает число нулей у нормального возмущения. Спектры представлены на рисунках 21 и 22. Заметим, что на графике 22 мы наблюдаем, что потеря устойчивости происходит при  $\gamma_c \approx 3$ , что соответствует критическому поверхностному натяжению  $\sigma_c = \sigma_{eq} + \gamma_c \approx \frac{3}{2}$ , т.к. равновесное поверхностное натяжение свободной вытянутой везикулы примерно равно  $\frac{3}{2}$ .

### 5.3 Динамика в нелинейном режиме

Представим, что мы приготовили вытянутую везикулу, подождали, пока она расслабится к равновесной форме, натянули с силой выше критической, что будет дальше? Разумеется, на практике есть тепловой шум, так что состояние в момент приложения

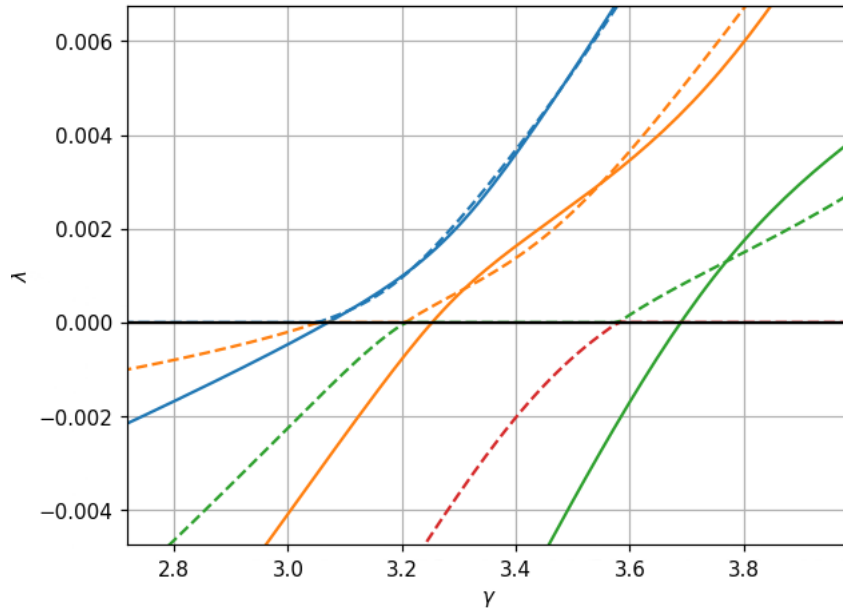


Рис. 22: Зависимость жесткости нескольких симметричных (сплошные линии) и асимметричных (пунктирные линии) нормальных возмущений с наибольшими собственными значениями.

силы имеет небольшое отклонение от равновесного

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_{eq} + \delta \mathbf{R},$$

эту начальную добавку можно разложить по нормальным возмущениям  $\delta N = \sum_k \delta R_k N_k$ , тогда среднеполюнная эволюция приведет к росту коэффициентов перед нормальными возмущениями с положительными собственными значениями  $\lambda$  и затуханию с отрицательными:  $\delta N(t) = \sum e^{\lambda_k t} \delta R_k N_k$ . В общем случае роль скоро природа  $\delta R_k$  случайна, то динамика везикул с различными начальными возмущениями так же случайна. Однако упрощение ситуации происходит, когда есть существенный зазор между максимальным  $\lambda_{\max} = \lambda_0$  и вторым по величине  $\lambda_1$ , тогда за время  $t$  отношение амплитуд между этими модами изменится экспоненциально:

$$\frac{c_0}{c_1} = \frac{\delta R_0}{\delta R_1} e^{(\lambda_0 - \lambda_1)t},$$

тогда при выходе из линейной области (если время выхода из линейной области не мало) стоит ожидать, что профиль возмущения примерно повторяет профиль самой быстрорастущей моды  $N_0$ . Так или иначе на начальном этапе необходимо проследить, как в нелинейном режиме эволюционирует везикула с начальным возмущением, про-



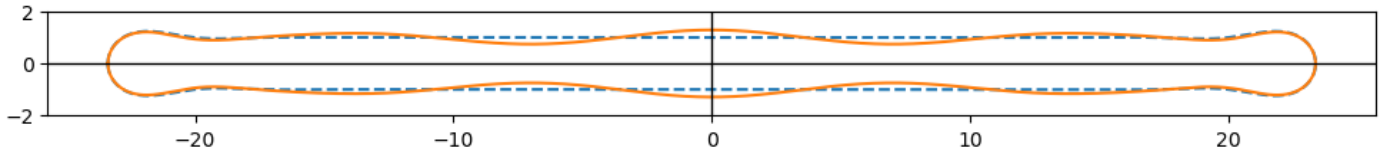


Рис. 23: Стационарное состояние везикулы (пунктиром) и оно же с самым быстрорастущего возмущением.

порциональным самой быстрорастущей моде.<sup>19</sup>

Заметим, что рассмотрение нелинейной динамики для бесконечного цилиндра непросто, поскольку возмущение с фиксированным  $k$  фиксирует число будущих везикул на единицу площади, т.к. граница между двумя везикулами в силу зеркальной и трансляционной симметрии не может двигаться вдоль везикулы. Поэтому есть множество стационарных форм. В везикуле же конечного размера есть далекодействующее гидродинамическое влияния концов. На рисунках 24 и 26 представлена эволюция развития одного и того же (симметричного возмущения) разных знаков.

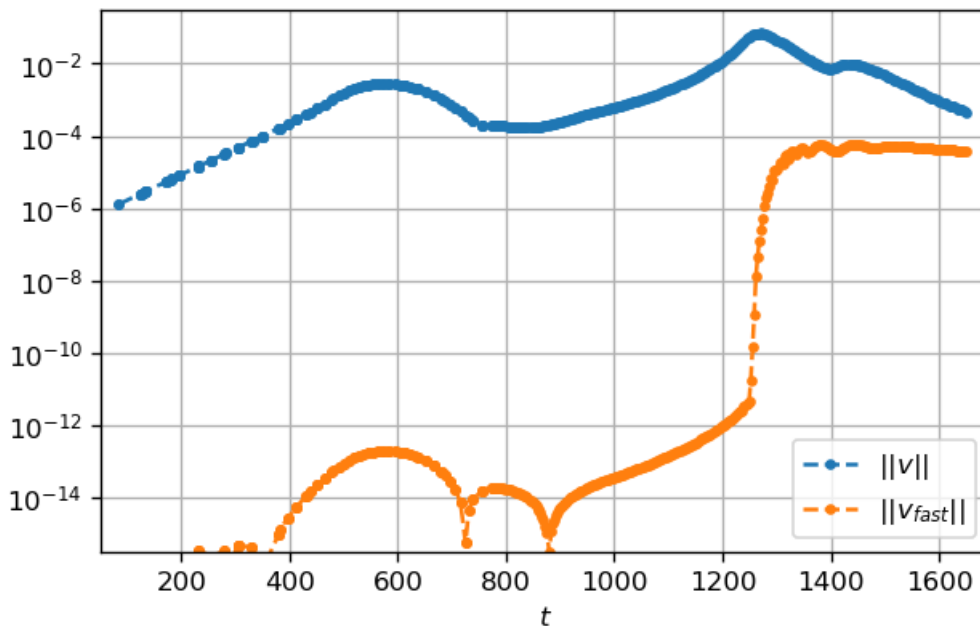


Рис. 27: Зависимость полной среднеквадратичной скорости на поверхности от времени (голубым) и высокочастотной части скорости (оранжевым), последняя может быть ассоциирована с ошибкой численного моделирования, т.к. отражает ту часть скорости, которая не проецируется на конечный базис из  $N = 200$  Фурье гармоник. Данный график представлен для динамики 24. Мы можем видеть, что точность моделирования существенно снижается по мере того, как форма мембраны становится сложнее.

<sup>19</sup>Содержательная физика возникает в ситуации, когда устойчивых стационарных состояний несколько, тогда по амплитудам начальных возмущений возникает фазовая диаграмма, указывающая в какой локальный стационар перейдет система, если запустить динамику с того или иного начального состояния.

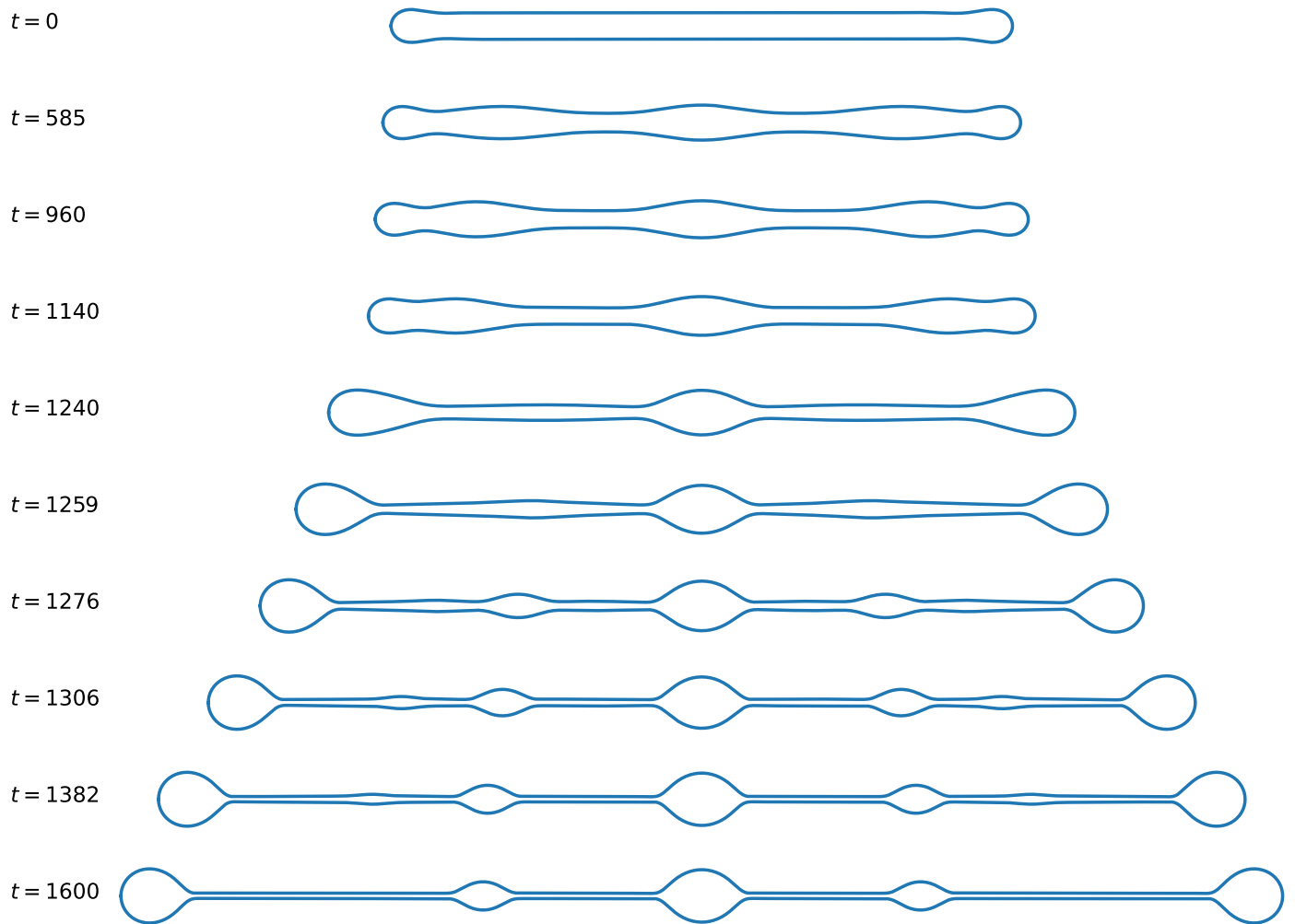


Рис. 24: Эволюция приготовленного состояния **23** со временем

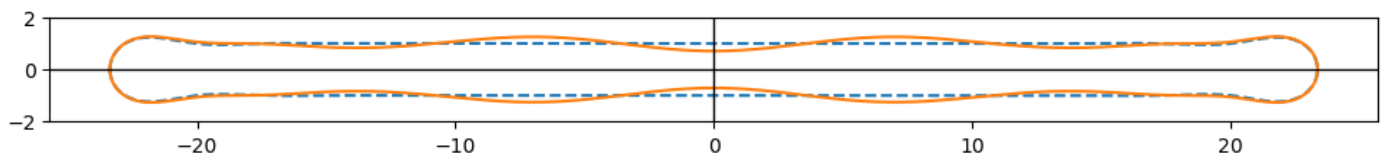


Рис. 25: Стационарное состояние везикулы (пунктиром) и оно же с самым быстрорастущего возмущением.

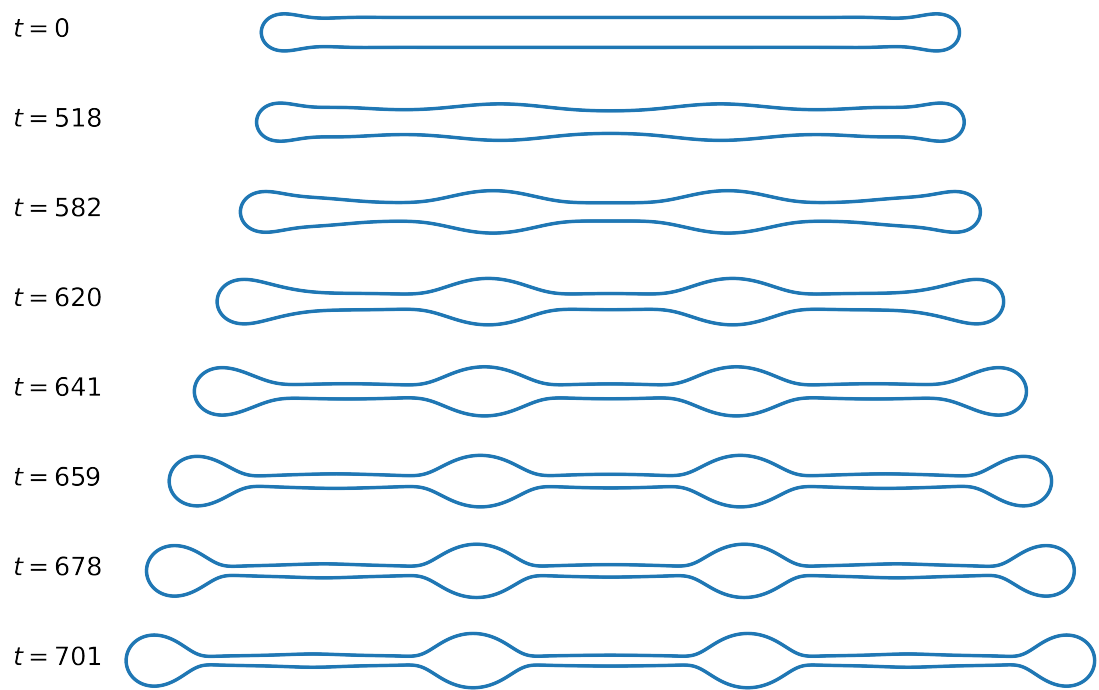


Рис. 26: Эволюция приготовленного состояния **25** со временем.

## Заключение

В магистерской работе решена задача моделирования нелинейной динамики везикул с топологией сферы как в свободном релаксационном режиме, так и под действием растягивающей внешней силы.

Основные результаты ВКР, относящиеся к реализации общего алгоритма моделирования нелинейной динамики везикул состоят в следующем:

1. Выписана замкнутая система уравнений динамики везикулы с окружающей жидкостью.
2. Получена редуцированная для аксиальной симметрии функция Грина уравнения Стокса.
3. Сформулирован метод исключения из динамики жесткой переменной - поверхностного натяжения, которое находится из решения линейного уравнения с нелокальным оператором в левой части, явный вид которого получен для аксиально-симметричной геометрии.
4. Предложен функциональный базис с экспоненциальной асимптотикой точности представления гладкой поверхности.
5. Разработаны методы динамического управления калибровочной степенью свободы, что соответствует адаптивному разбиению в сеточных методах.
6. Выполнена регуляризация интегральных ядер для возможности численного интегрирования, построены квадратурные схемы повышенной устойчивости.
7. Построен набор конечных элементов, обладающих требуемой степенью гладкости.
8. Реализован программный код на языке Python для моделирования релаксационной динамики замкнутых везикул, наиболее время-затратные части реализованы в виде модулей на языке C++.[56]

С использованием указанного алгоритма были получены следующие научные результаты:

1. Промоделирована релаксация ко всем 3 ветвям стационарных форм замкнутых везикул с топологией сферы.

2. Сформулированы локальные динамические чисто-релаксационные уравнения на форму поверхности, используемые для аккуратного нахождения стационарных состояний.
3. Построены спектры нормальных возмущений вблизи состояний равновесия. Исследовано критическое поведение вблизи точек бифуркаций для ветви сплюснутых везикул.
4. Исследована асимптотическая форма сильно вытянутых везикул, получены асимптотические значения поверхностного натяжения и давления.
5. В рамках линейной теории исследована «жемчужная неустойчивость» вытянутых везикул, возникающая под действием растягивающих сил, приложенных к краям.
6. Промоделировано развитие указанной неустойчивости из наиболее быстрорастущих возмущений в нелинейной области с образованием «жемчужин».

В рамках магистерской работы тематика нелинейной динамики везикул не исчерпывает себя полностью, следующие задачи будут рассмотрены в кандидатской диссертации:

- Исследование пространства стационарных форм растягиваемой вытянутой везикулы при малом превышении амплитуды растягивающей силы над критическим значением.
- Нахождение универсальной асимптотической формы «жемчужин» и построение описания стационарного состояния сильно вытянутой везикулы в терминах распределения таких жемчужин вдоль везикулы.
- Исследование устойчивости относительно не аксиально-симметричных возмущений.
- Учет температурных флуктуаций и мембранной вязкости для описания динамики вблизи критической точки.
- Моделирование процессов, происходящих с отрывом дочерней везикулы от мембраны под действием направленной струи, исследование критических параметров в таких процессах.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ И ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] R. Phillips и J. Theriot, «Physical Biology of the Cell What and Where : Construction Plans for Cells and Organisms», Construction.
- [2] H. Coster, «The Physics of Cell Membranes», [Journal of Biological Physics 29, 363 \(2003\)](#).
- [3] R. Lipowsky, в [Festkörperprobleme 32](#) (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007), с. 19—44.
- [4] H. J. Deuling и W. Helfrich, «Red blood cell shapes as explained on the basis of curvature elasticity», [Biophysical Journal 16, 861 \(1976\)](#).
- [5] H. Deuling и W. Helfrich, «The curvature elasticity of fluid membranes : A catalogue of vesicle shapes», [Journal de Physique 37, 1335 \(1976\)](#).
- [6] U. Seifert, K. Berndl и R. Lipowsky, «Shape transformations of vesicles: Phase diagram for spontaneous- curvature and bilayer-coupling models», [Physical Review A 44, 1182 \(1991\)](#).
- [7] U. Seifert, «Curvature-induced lateral phase segregation in two-component vesicles», [Physical Review Letters 70, 1335 \(1993\)](#).
- [8] S. Svetina и B. Žekš, «Membrane bending energy and shape determination of phospholipid vesicles and red blood cells», [European Biophysics Journal 17, 101 \(1989\)](#).
- [9] R. Lipowsky, «(CUL-ID:1486149) The conformation of membranes», *Nature* **349**, 475 (1991).
- [10] U. Seifert, «Configurations of fluid membranes and vesicles», [Advances in Physics 46, 13 \(1997\)](#).
- [11] R. M. Abarca, *Giant Vesicle Book* (2021), с. 2013—2015.
- [12] E. I. Kats и V. V. Lebedev, «Dynamics of Langmuir films», *Langmuir* **149**, 940 (1988).
- [13] V. Lebedev и A. Muratov, «Dynamics of micelles and vesicles», *Sov. Phys. JETP* **68**, 1011 (1989).
- [14] E. I. Kats и V. V. Lebedev, *Fluctuational Effects in the Dynamics of Liquid Crystals, Partially Ordered Systems* (Springer New York, New York, NY, 1994).
- [15] W. Cai и T. C. Lubensky, «Hydrodynamics and dynamic fluctuations of fluid membranes», [Physical Review E 52, 4251 \(1995\)](#).

- [16] S. Tomotika, «On the instability of a cylindrical thread of a viscous liquid surrounded by another viscous fluid», [Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences](#) **150**, 322 (1935).
- [17] R. Bar-Ziv и E. Moses, «Instability and "Pearling" States Produced in Tubular Membranes by Competition of Curvature and Tension», [Physical Review Letters](#) **73**, 1392 (1994).
- [18] R. Bar-Ziv, E. Moses и P. Nelson, «Dynamic Excitations in Membranes Induced by Optical Tweezers», [Biophysical Journal](#) **75**, 294 (1998).
- [19] K. P. Sinha, S. Gadkari и R. M. Thaokar, «Electric field induced pearling instability in cylindrical vesicles», [Soft Matter](#) **9**, 7274 (2013).
- [20] C. Ménager, M. Meyer, V. Cabuil, A. Cebers, J.-C. Bacri и R. Perzynski, «Magnetic phospholipid tubes connected to magnetoliposomes: Pearling instability induced by a magnetic field», [The European Physical Journal E](#) **7**, 325 (2002).
- [21] M. Yanagisawa, M. Imai и T. Taniguchi, «Shape Deformation of Ternary Vesicles Coupled with Phase Separation», [Physical Review Letters](#) **100**, 148102 (2008).
- [22] J. Sanborn, K. Oglıcka, R. S. Kraut и A. N. Parikh, «Transient pearling and vesiculation of membrane tubes under osmotic gradients», [Faraday Discussions](#) **161**, 167 (2012).
- [23] I. Tsafrir, D. Sagi, T. Arzi, M.-A. Guedeau-Boudeville, V. Frette, D. Kandel и J. Stavans, «Pearling Instabilities of Membrane Tubes with Anchored Polymers», [Physical Review Letters](#) **86**, 1138 (2001).
- [24] V. Kantsler, E. Segre и V. Steinberg, «Critical dynamics of vesicle stretching transition in elongational flow», [Physical Review Letters](#) **101**, 1 (2008).
- [25] P. Nelson, T. Powers и U. Seifert, «Dynamical Theory of the Pearling Instability in Cylindrical Vesicles», [Physical Review Letters](#) **74**, 3384 (1995).
- [26] K. L. Gurin, V. V. Lebedev и A. R. Muratov, «Dynamic instability of a membrane tube», [Zhurnal Eksperimental'noj i Teoreticheskoy Fiziki](#) **110**, 600 (1996).
- [27] R. E. Goldstein, P. Nelson, T. Powers и U. Seifert, «Front Propagation in the Pearling Instability of Tubular Vesicles», [Journal de Physique II](#) **6**, 767 (1996).
- [28] G. Boedec, M. Jaeger и M. Leonetti, «Pearling instability of a cylindrical vesicle», [Journal of Fluid Mechanics](#) **743**, 262 (2014).

- [29] S. K. Veerapaneni, D. Gueyffier, G. Biros и D. Zorin, «A numerical method for simulating the dynamics of 3D axisymmetric vesicles suspended in viscous flows», [Journal of Computational Physics](#) **228**, 7233 (2009).
- [30] H. Zhao и E. S. Shaqfeh, «The shape stability of a lipid vesicle in a uniaxial extensional flow», [Journal of Fluid Mechanics](#) **719**, 345 (2013).
- [31] V. Narsimhan, A. P. Spann и E. S. Shaqfeh, «Pearling, wrinkling, and buckling of vesicles in elongational flows», [Journal of Fluid Mechanics](#) **777**, 1 (2015).
- [32] V. Kantsler и V. Steinberg, «Orientation and dynamics of a vesicle in tank-treading motion in shear flow», [Physical Review Letters](#) **95**, 4 (2005).
- [33] V. Kantsler, E. Segre и V. Steinberg, «Vesicle dynamics in time-dependent elongation flow: Wrinkling instability», [Physical Review Letters](#) **99**, 1 (2007).
- [34] C. Misbah, «Vacillating breathing and tumbling of vesicles under shear flow», [Physical Review Letters](#) **96**, 2 (2006).
- [35] V. V. Lebedev, K. S. Turitsyn и S. S. Vergeles, «Dynamics of nearly spherical vesicles in an external flow», [Physical Review Letters](#) **99**, 1 (2007).
- [36] K. S. Turitsyn и S. S. Vergeles, «Wrinkling of vesicles during transient dynamics in elongational flow», [Physical Review Letters](#) **100**, 1 (2008).
- [37] V. V. Lebedev, K. S. Turitsyn и S. S. Vergeles, «Nearly spherical vesicles in an external flow», [New Journal of Physics](#) **10**, 10.1088/1367-2630/10/4/043044 (2008).
- [38] K. S. Turitsyn и S. S. Vergeles, «Wrinkling of vesicles during transient dynamics in elongational flow», [Physical Review Letters](#) **100**, 1 (2008).
- [39] T. Biben, A. Farutin и C. Misbah, «Three-dimensional vesicles under shear flow: Numerical study of dynamics and phase diagram», [Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics](#) **83**, 1 (2011).
- [40] K. Funakoshi, H. Suzuki и S. Takeuchi, «Formation of Giant Lipid Vesicle-like Compartments from a Planar Lipid Membrane by a Pulsed Jet Flow», [Journal of the American Chemical Society](#) **129**, 12608 (2007).
- [41] J. C. Stachowiak, D. L. Richmond, T. H. Li, A. P. Liu, S. H. Parekh и D. A. Fletcher, «Unilamellar vesicle formation and encapsulation by microfluidic jetting», [Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America](#) **105**, 4697 (2008).



- [42] D. L. Richmond, E. M. Schmid, S. Martens, J. C. Stachowiak, N. Liska и D. A. Fletcher, «Forming giant vesicles with controlled membrane composition, asymmetry, and contents», [Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America](#) **108**, 9431 (2011).
- [43] D. Van Swaay и A. Demello, «Microfluidic methods for forming liposomes», [Lab on a Chip](#) **13**, 752 (2013).
- [44] L. Wang, *Advances in Transport Phenomena 2011*, под ред. L. Wang, т. 3, *Advances in Transport Phenomena* (Springer International Publishing, Cham, 2014).
- [45] C. W. Coyne, K. Patel, J. Heureaux, J. Stachowiak, D. A. Fletcher и A. P. Liu, «Lipid Bilayer Vesicle Generation Using Microfluidic Jetting», [Journal of Visualized Experiments](#), 1 (2014).
- [46] K. Kamiya, R. Kawano, T. Osaki, K. Akiyoshi и S. Takeuchi, «Cell-sized asymmetric lipid vesicles facilitate the investigation of asymmetric membranes», [Nature Chemistry](#) **8**, 881 (2016).
- [47] K. Kamiya, T. Osaki и S. Takeuchi, «Formation of vesicles-in-a-vesicle with asymmetric lipid components using a pulsed-jet flow method», [RSC Advances](#) **9**, 30071 (2019).
- [48] M. Armstrong, M. D. Vahey, T. P. Hunt и D. A. Fletcher, «Forming and loading giant unilamellar vesicles with acoustic jetting», [Biomicrofluidics](#) **14**, 10.1063/5.0021742 (2020).
- [49] K. Kamiya, «Development of artificial cell models using microfluidic technology and synthetic biology», [Micromachines](#) **11**, 1 (2020).
- [50] S. Penič, L. Mesarec, M. Fošnarič, L. Mrówczyńska, H. Hägerstrand, V. Kralj-Iglič и A. Iglič, «Budding and Fission of Membrane Vesicles: A Mini Review», [Frontiers in Physics](#) **8**, 10.3389/fphy.2020.00342 (2020).
- [51] C. Has и S. Pan, «Vesicle formation mechanisms: an overview», [Journal of Liposome Research](#) **31**, 90 (2021).
- [52] W. Helfrich, «Elastic Properties of Lipid Bilayers: Theory and Possible Experiments», [Zeitschrift für Naturforschung C](#) **28**, 693 (1973).
- [53] C. Pozrikidis, *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow* (1992).
- [54] L. Komzsik, *Differential geometry* (2020), с. 101—114.

- [55] I. Bakas, «The algebraic structure of geometric flows in two dimensions», [Journal of High Energy Physics](#) **2005**, 038 (2005).
- [56] M. Shishkin, *Nonlinear Vesicles Dynamics*, [https://github.com/maxkway/vesicle\\_dynamic](https://github.com/maxkway/vesicle_dynamic), 2024.

## Тензор напряжений мембраны

Поверхность мембраны описывается линией уровня некой сколь угодно гладкой функцией  $\Phi(\mathbf{x}) = 0$ . Тогда удобно писать обычную гидродинамику, считая позже, что все плотности сосредоточены на мембране, например плотность массы есть

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_\Sigma(\mathbf{x})\delta(\Phi(\mathbf{x}))|\nabla\Phi|, \quad \rho_\Sigma = \frac{\partial M}{\partial S} = n_\Sigma m_0.$$

Начинаем как обычно с бездиссипативной термодинамики<sup>20</sup>:

$$E = E[\rho, s, \mathbf{j}, \Phi] = \underbrace{\int \delta(\Phi)|\nabla\Phi|\varepsilon_\Sigma(\rho_\Sigma, s_\Sigma)}_{E_0[\rho, s, \Phi]} + \int \frac{\mathbf{j}^2}{2\rho} + E_c[\Phi].$$

Поскольку сохраняющиеся величины суть

$$\int \rho \text{ — число частиц, } \int s \text{ — энтропия, } \int \mathbf{j} \text{ — импульс, } \int \rho\Phi \text{ — перенос поверхности,} \quad (.1)$$

то мы можем выписать соответствующие гидродинамические скобки Пуассона:

$$\begin{aligned} \{j_1^k, j_2^i\} &= p_1^i \partial_{k1} \delta(1-2) - p_2^k \partial_{i2} \delta(1-2), \\ \{j_1^k, \phi_2\} &= -\partial_{2k} [\phi_2 \delta(1-2)] = \phi_1 \partial_{1k} \delta(1-2), \\ \{\phi_1, \tilde{\phi}_2\} &= 0, \end{aligned} \quad (.2a)$$

где  $\phi$  — любая скалярная плотность из (.1). Выразим необходимою нам скобку:

$$\begin{aligned} \{j_1^k, \rho_2 \Phi_2\} &= \underbrace{\{j_1^k, \rho_2\}}_{-\partial_{2k}[\rho_2 \delta(1-2)]} \Phi_2 + \{j_1^k, \Phi_2\} \rho_2 = -\partial_{2k} [\rho_2 \Phi_2 \delta(1-2)] \implies \\ &\quad \{j_1^k, \Phi_2\} = -[\partial_{2k} \Phi_2] \delta(1-2). \end{aligned}$$

Теперь мы можем воспроизвести известный вклад в поверхностную силу от поверхностного натяжения.

$$f_\sigma^k = \{E_0, j^k\} = \int dV_2 \left[ \frac{\mathcal{D}E_0}{\mathcal{D}\rho_2} \{\rho_2, j^k\} + \frac{\mathcal{D}E_0}{\mathcal{D}s_2} \{s_2, j^k\} + \frac{\mathcal{D}E_0}{\mathcal{D}\Phi_2} \{\Phi_2, j^k\} \right] \quad (.3)$$

<sup>20</sup>Неаддитивными вкладами в поверхностную энергию от кривизны мы пренебрегаем.

Для вычисления вариационных производных достаточно выразить аргументы  $\varepsilon_\Sigma$  в формальном виде:

$$\rho_\Sigma = \frac{\rho}{\delta(\Phi(\mathbf{x}))|\nabla\Phi|}, \quad s_\Sigma = \frac{s}{\delta(\Phi(\mathbf{x}))|\nabla\Phi|}.$$

$$\frac{\mathcal{D}E_0}{\mathcal{D}\star_2} = \partial_{\star_\Sigma}\varepsilon_{\Sigma 2}, \quad \star = s, \rho$$

Вариация по  $\Phi$  чуть сложнее<sup>21</sup>:

$$\mathcal{D}E_0[\mathcal{D}\Phi] = \int \underbrace{\frac{\partial\varepsilon}{\partial\delta(\Phi)|\nabla\Phi|}}_{\varepsilon_\Sigma - \star_\Sigma \partial_{\star_\Sigma}\varepsilon_\Sigma = \sigma} \mathcal{D}[\delta(\Phi)|\nabla\Phi|] = \int -\delta(\Phi)\partial_m(\sigma l_m)\mathcal{D}\Phi \quad (.4)$$

Подставляя полученные выражения в (.3) с использованием (.2a), получаем ответ:

$$f_\sigma^k = \underbrace{-\star\partial_k(\partial_{\star_\Sigma}\varepsilon_\Sigma)}_{\partial_k\sigma\delta(\Phi)|\nabla\Phi|} - \delta(\Phi)|\nabla\Phi|\partial_m(\sigma l_m)l_k = \delta(\Phi)|\nabla\Phi| \left[ \underbrace{(\delta_{km} - l_m l_k)\partial_m\sigma}_{\partial_k^\perp} - \underbrace{\sigma(\partial_m l_m)l_k}_H \right].$$

Полученная сила может быть записана в виде полной производной:

$$f_\sigma^k = \partial_m(\delta(\Phi)|\nabla\Phi|\delta_{km}^\perp\sigma) = \delta(\Phi)|\nabla\Phi|\partial_k^\perp\sigma + \sigma\delta(\Phi)\partial_m(|\nabla\Phi|\delta_{km}^\perp) =$$

$$= \delta(\Phi)|\nabla\Phi| \left[ \partial_k^\perp\sigma - \sigma H l_k \right] + \delta(\Phi) \underbrace{(\delta_{km}^\perp\partial_m|\nabla\Phi| - |\nabla\Phi|l_m\partial_m l_k)}_{\partial_k|\nabla\Phi| - l_m\partial_m\partial_k\Phi=0}.$$

Вычислим теперь изгибную силу, для этого необходимо найти вариацию<sup>22</sup>:

$$\mathcal{D}E_c = \frac{\kappa}{2} \int \mathcal{D}[\delta(\Phi)|\nabla\Phi|(\partial_m l_m)^2] = \frac{\kappa}{2} \int H^2 \mathcal{D}[\delta(\Phi)|\nabla\Phi|] + \kappa \int \delta(\Phi)|\nabla\Phi| H \partial_m \mathcal{D}l_m$$

С первым слагаемым мы разобрались ранее (.4), т.ч. производная просто  $-\kappa/2 \delta(\Phi)\partial_m(H^2 l_m)$ . Для вычисления второго выпишем вариацию:

$$\mathcal{D}l_m = \frac{\partial_m^\perp \mathcal{D}\Phi}{|\nabla\Phi|}.$$

Производная от второго слагаемого:

$$\kappa\delta(\Phi)\partial_n \left( \frac{\partial_n^\perp [|\nabla\Phi|H]}{|\nabla\Phi|} \right) = \kappa\delta(\Phi)\partial_n (\partial_n^\perp H + H\delta_{nm}^\perp l_k \partial_k l_m).$$

<sup>21</sup>  $\sigma = \left( \frac{\partial E_\Sigma}{\partial S} \right)_{S_\Sigma, M_\Sigma}$

<sup>22</sup>  $\kappa$  — термодинамическая величина, которая может быть выражена через  $\rho_\Sigma, s_\Sigma$  и кривизну, однако поскольку в равновесии она конечна, мы можем пренебречь этой зависимостью.

Тогда сила

$$f_{\kappa}^k = \kappa l_k \delta(\Phi) |\nabla \Phi| \left( -\frac{1}{2} \partial_m (H^2 l_m) + \partial_n (\partial_n^{\perp} H + H \delta_{nm}^{\perp} l_k \partial_k l_m) \right).$$

Несмотря на то, что полученное выражение пригодно для дальнейших вычислений, после громоздких вычислений его можно привести к известному виду:

$$f_{\kappa}^k = \kappa l_k \delta(\Phi) |\nabla \Phi| \left( \frac{H^3}{2} - 2HK + \underbrace{\Delta^{\perp}}_{\partial_n^{\perp} \partial_n^{\perp}} H \right),$$

где Гауссова кривизна может быть записана в виде<sup>23</sup>:

$$K = \frac{1}{2} \nabla \cdot (\mathbf{1} (\nabla \cdot \mathbf{1}) + \mathbf{1} \times \nabla \times \mathbf{1}).$$

<sup>23</sup>В силу теоремы Гаусса-Боне вариационная производная от энергии, связанной с Гауссовой кривизной равна нулю.

## Функция Грина в цилиндрических координатах

Поле скорости будем искать с помощью функции Грина:

$$G_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r} \left( \delta_{ik} + \frac{r_i r_k}{r^2} \right)$$

$$v_i(\mathbf{r}) = \int dV_1 G_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) f_1^k$$

учтём аксиальную симметрию — сила  $f_1$  имеет только радиальную и вертикальную составляющую  $\mathbf{f}_1 = f_\rho^1 \mathbf{e}_\rho(\phi_1) + f_z^1 \mathbf{e}_z$ , как и сама скорость. Тогда необходимо найти функцию Грина в цилиндрических координатах, при этом интересуют только указанные выше компоненты.

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{e}_\rho(\phi_1) \rho_1, \mathbf{r} = z \mathbf{e}_z + \mathbf{e}_\rho(0) \rho$$

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1| = (z^2 + (\rho - \rho_1 \cos \phi_1)^2 + \rho_1^2 \sin^2 \phi_1)^{1/2} = \delta r \sqrt{1 + \nu \underbrace{(1 - \cos \phi_1)/2}_{\sin^2[\phi_1/2]}}$$

где  $\delta r^2 = z^2 + (\rho - \rho_1)^2$  “безугловое” расстояние, а  $\nu = 4\rho\rho_1/\delta r^2$ .

Распишем в векторном виде второе слагаемое в функции Грина, явно выделив векторную структуру:

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \otimes (\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) &\rightarrow z^2 \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z + z(\rho \cos \phi_1 - \rho_1) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\rho(\phi_1) + \\ & z(\rho - \rho_1 \cos \phi_1) \mathbf{e}_\rho(0) \otimes \mathbf{e}_z + ((\rho^2 + \rho_1^2) \cos \phi_1 - \rho\rho_1(1 + \cos^2 \phi_1)) \mathbf{e}_\rho(0) \otimes \mathbf{e}_\rho(\phi_1) \end{aligned}$$

Кronecker же из первого слагаемого переходит в

$$\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z + \cos \phi_1 \mathbf{e}_\rho(0) \otimes \mathbf{e}_\rho(\phi_1)$$

В сумме перед  $\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z$  имеем:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_1 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \left( 1 + \frac{z^2}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)^2} \right) = I_{1/2} + z^2 I_{3/2}$$

**Attention!** У вольфрама странное определение функции  $K$ , по факту это Quarter period, связанный с полным эллиптическим интегралом первого рода в виде  $\text{Elliptic integral}(k) = K(k^2)$

Определения:

$$K(-\nu) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 + \nu \sin^2 \varphi}}, \quad E(-\nu) = \int_0^{\pi/2} d\varphi \sqrt{1 + \nu \sin^2 \varphi}$$

Асимптотическое выражение при больших аргументах

$$K(-\nu) \sim \frac{\ln(4\sqrt{\nu})}{\sqrt{\nu}}, \quad E(-\nu) = \sqrt{\nu} + \frac{1}{4} \ln \nu / \sqrt{\nu} + \mathcal{O}(1/\sqrt{\nu})$$

Эллиптические свойства:

$$K(-\nu) = \frac{K(\frac{\nu}{1+\nu})}{\sqrt{1+\nu}}, \quad E(-\nu) = \sqrt{\nu+1} E(\frac{\nu}{1+\nu})$$

Выразим требуемые интегралы:

$$I_{1/2} = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} = \frac{2}{\delta r} \int_0^{\pi} d\phi_1 \frac{1}{\sqrt{1 + \nu(1 - \cos \phi_1)/2}} = \frac{4}{\delta r} \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 + \nu \sin^2 \varphi}} = \frac{4}{\delta r} K(-\nu)$$

$$I_{3/2} = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3} = \frac{2}{\delta r^3} \int_0^{\pi} d\phi_1 \frac{1}{\sqrt{1 + \nu(1 - \cos \phi_1)/2}^3} = \frac{4}{\delta r^3} \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 + \nu \sin^2 \varphi}^3} = \frac{4}{\delta r^3} \frac{E(-\nu)}{1 + \nu}$$

$$G_{zz} = \frac{4}{\delta r} \left( K(-\nu) + \frac{z^2}{z^2 + (\rho + \rho_1)^2} E(-\nu) \right)$$

В сумме перед  $\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\rho(\phi_1)$  имеем:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_1 \frac{z(\rho \cos \phi_1 - \rho_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3} = z\rho I_{\cos} - z\rho_1 I_{3/2}$$

$$I_{\cos} = \frac{4}{\delta r^3} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos 2\varphi d\varphi}{(1 + \nu \sin^2 \varphi)^{3/2}} = I_{3/2} - \frac{8}{\delta r^3} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2 \varphi d\varphi}{(1 + \nu \sin^2 \varphi)^{3/2}} =$$

$$I_{3/2} + \frac{8}{\delta r^3} \left[ \frac{E(-\nu)}{\nu(1 + \nu)} - \frac{K(-\nu)}{\nu} \right] = \frac{4}{\delta r^3} \frac{E(-\nu)}{1 + \nu} (1 + 2/\nu) - \frac{8}{\delta r^3} \frac{K(-\nu)}{\nu}$$

$$G_{z\rho} = \frac{2}{\delta r} \frac{z}{\rho_1} \left( -K(-\nu) + \frac{z^2 + \rho^2 - \rho_1^2}{z^2 + (\rho + \rho_1)^2} E(-\nu) \right)$$

В сумме перед  $\mathbf{e}_\rho(0) \otimes \mathbf{e}_z$  имеем:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_1 \frac{z(\rho - \rho_1 \cos \phi_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3} = z\rho I_{3/2} - z\rho_1 I_{\cos}$$

$$G_{\rho z} = -\frac{2}{\delta r} \frac{z}{\rho} \left( -K(-\nu) + \frac{z^2 + \rho_1^2 - \rho^2}{z^2 + (\rho + \rho_1)^2} E(-\nu) \right)$$

И наконец в сумме перед  $\mathbf{e}_\rho(0) \otimes \mathbf{e}_\rho(\phi_1)$  имеем:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_1 \frac{[2(\rho^2 + \rho_1^2) + z^2] \cos \phi_1 - \rho\rho_1 - 3\rho\rho_1 \cos^2 \phi_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3} = (2(\rho^2 + \rho_1^2) + z^2) I_{\cos} - \rho\rho_1 I_{3/2} - 3\rho\rho_1 I_{\cos 2}$$

$$\frac{4}{\delta r} \frac{E(-\nu)}{1 + \nu} \left[ \nu^2/2 - 4 - 6/\nu - z^2/\delta r^2 \frac{\nu + 2}{2} \right] + \frac{4}{\delta r} \frac{K(-\nu)}{\nu} \left[ 2 + \nu + 2 \frac{z^2}{\delta r^2} \right]$$

$$I_{\cos 2} = \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2 \phi_1 d\phi_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3} = \frac{4}{\delta r^3} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2(2\varphi) d\varphi}{(1 + \nu \sin^2 \varphi)^{3/2}} = \frac{4}{\delta r^3} \left( \frac{8 + \nu(8 + \nu)}{\nu^2} \frac{E(-\nu)}{1 + \nu} - 4 \frac{2 + \nu}{\nu^2} K(-\nu) \right)$$

$$G_{\rho\rho} = \frac{2}{\delta r} \frac{1}{\rho\rho_1} \left( [\rho^2 + \rho_1^2 + 2z^2] K(-\nu) - \frac{(\rho^2 - \rho_1^2)^2 + 3(\rho^2 + \rho_1^2)z^2 + 2z^4}{(\rho + \rho_1)^2 + z^2} E(-\nu) \right)$$

Заметим, что с использованием эллиптических свойств полученные выражения соответствуют формулам, представленным в [53].

Отметим здесь так же полученное нами полное выделение логарифмической особой части в эллиптических функциях, что полезно для регуляризации интегралов при использовании численных методов:

$$K(-\nu) = \sqrt{\nu} K_{\text{Reg}}(\nu) + \sqrt{\nu} \ln(16\nu) \frac{K(-1/\nu)}{\pi\nu},$$

$$E(-\nu) = \sqrt{\nu} E_{\text{Reg}}(\nu) + \sqrt{\nu} \ln(16\nu) \frac{{}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2, -\frac{1}{\nu}\right)}{4\nu}$$



## Функциональный базис

### Определения и свойства

В зависимости от симметрии физического поля, оно может быть разложено по одному из полных наборов:

$$\begin{aligned}\varphi_{\rho k} &= 2 \sin(\pi k \tau), k \geq 1 \\ \varphi_{zk} &= 2 \cos(\pi k \tau), k \geq 1; \varphi_{z0} = 1\end{aligned}$$

Произведение базисных функций простым образом раскладывается:

$$k \geq 1 : \varphi_{\rho m} \varphi_{zk} = \varphi_{\rho|m-k} + \varphi_{\rho|m+k}$$

Есть замечательное свойство, помогающее при регуляризации выражений на оси:

$$\frac{\varphi_{\rho k}}{\varphi_{\rho 1}} = \frac{\varphi_{\rho k}}{2 \sin(\pi \tau)} = \sum_{0 \leq n \leq k-1, n+k \bmod 2=1} \varphi_{zn}$$

### Скалярные произведения

#### Расширенные

$$\int_0^2 \varphi_{\nu k} \varphi_{\mu m} d\tau = 4\delta_{\mu\nu} \delta_{k=m>0} + 2\delta_{k=m=0} \delta_{\nu=\mu=z}$$

На отрезке  $[0,1]$  :

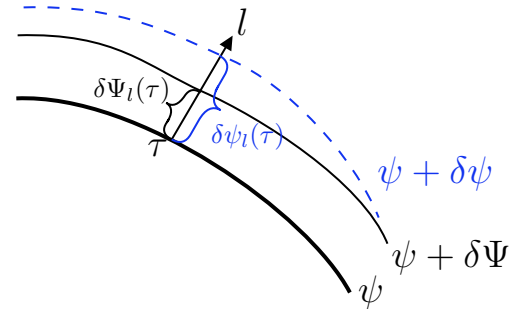
$$\begin{aligned}\int_0^1 \varphi_{\nu k} \varphi_{\mu m} d\tau &= 2\delta_{\mu\nu} \delta_{k=m>0} + \delta_{k=m=0} \delta_{\nu=\mu=z} \\ &+ \delta_{\nu=z, \mu=\rho} \left[ \delta_{k>0} \delta_{(k+m) \bmod 2=1} \frac{8m}{\pi(m^2 - k^2)} + \delta_{k=0} \delta_{m \bmod 2=1} \frac{4}{\pi m} \right] + (z \Leftrightarrow \rho, k \Leftrightarrow m)\end{aligned}$$

Отдельно:

$$\int_0^1 \varphi_{\rho m} d\tau = \delta_{m \bmod 2=1} \frac{4}{\pi m}$$

$$\boxed{\Phi_{km}^{z\rho} = \int_0^1 \varphi_{zk} \varphi_{\rho m} d\tau = \frac{4}{\pi} \left[ \delta_{k>0} \delta_{(k+m) \bmod 2=1} \frac{2m}{(m^2 - k^2)} + \delta_{k=0} \delta_{m \bmod 2=1} \frac{1}{m} \right]}$$

$$\frac{4}{\pi} \begin{pmatrix} & m=1 & m=2 & m=3 & m=4 & m=5 \\ k=0 & \frac{1}{1} & 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{5} \\ k=1 & 0 & 2\frac{2}{2^2-1^2} & 0 & 2\frac{4}{4^2-1^2} & 0 \\ k=2 & 2\frac{1}{1^2-2^2} & 0 & 2\frac{3}{3^2-2^2} & 0 & 2\frac{5}{5^2-2^2} \end{pmatrix}$$



**Физическая(калибровочно-инвариантная) мера**

Исходя из картинке можем ввести локальное физическое расстояние между везикулами:

$$\int (\delta\Psi_l - \delta\psi_l)^2 \mu(d\tau),$$

где мера  $\mu$  может быть выбрана из физических соображений, например  $dl, dS, d\tau$ .

Такая  $L_2(\mu)$  норма индуцирует скалярное произведение:

$$\int \delta\Psi_l \delta\psi_l \mu(d\tau) = \int \delta\Psi_\mu l_\mu l_\nu \delta\psi_\nu \mu(d\tau)$$

$$A_{km}^{\nu\mu} = \int l_\mu l_\nu \varphi_{\nu k} \varphi_{\mu m} \mu(d\tau)$$

$$A = \begin{pmatrix} A_{\rho\rho} & A_{\rho z} \\ A_{z\rho} & A_{zz} \end{pmatrix}$$

$$d\mu = d\tau$$

$$A_{km}^{\nu\mu} = 2\pi \int l_\mu l_\nu \varphi_{\nu k} \varphi_{\mu m} d\tau$$

$$A^{\rho\rho}$$

$$A_{km}^{\rho\rho} = 2\pi \int \varphi_{\rho k} \varphi_{\rho m} l_\rho^2 d\tau$$

$$l_\rho^2 = \sum_{n=0} \|\|l_\rho^2\|\|_n \varphi_{zn} \implies$$

$$A_{km}^{\rho\rho} = 2\pi \sum_{n=0} \|\|l_\rho^2\|\|_n \int \varphi_{\rho k} \varphi_{\rho m} \varphi_{zn} d\tau = 2\pi \sum_{n=0} \|\|l_\rho^2\|\|_n \Phi_{km|n}^{\rho\rho z}$$

$$\Phi_{km|n}^{\rho\rho|z} = \int \varphi_{\rho k} \varphi_{\rho m} \varphi_{zn} d\tau$$

$$k > m > 0 : \varphi_{\rho k} \varphi_{\rho m} = \varphi_{z|k-m} - \varphi_{z|k+m}$$

$$\Phi_{km}^{z\rho} = \int_0^1 \varphi_{zk} \varphi_{\rho m} d\tau$$

$$\Phi_{k>m|n}^{\mathcal{P}} = \int \varphi_{z|k-m} \varphi_{\rho n} d\tau - \int \varphi_{z|k+m} \varphi_{\rho n} d\tau = \Phi_{k-m|n}^{z\rho} - \Phi_{k+m|n}^{z\rho}$$

$$\frac{4}{\pi} \delta_{(k-m+n) \bmod 2=1} 2n \left[ \frac{1}{(n-(k-m))(n+(k-m))} - \frac{1}{(n-(k+m))(n+(k+m))} \right] =$$

$$\frac{8}{\pi} \delta_{(k+m+n) \bmod 2=1} \frac{4knm}{(-k+m+n)(k+m-n)(k-m+n)(k+m+n)}$$

$$k = m > 0 : \varphi_{\rho k} \varphi_{\rho m} = 2\varphi_{z|0} - \varphi_{z|2k}$$

Общий результат:

$$\Phi_{kmn}^{\mathcal{P}} = \frac{8}{\pi} \delta_{(k+m+n) \bmod 2=1} \frac{4knm}{(k+m+n)(-k+m+n)(k-m+n)(k+m-n)}$$

$$n = 1 : k, m \gg 1 : \delta_{(k+m) \bmod 2=0} \frac{1}{(m-k+1)^2}$$

$$n > k \sim m : \frac{4km}{n^3}$$

$$\frac{n}{(n^2 - (m-k)^2)}$$

$A^{zz}$

$$A_{km}^{zz} = 2\pi \int l_z^2 \varphi_{zk} \varphi_{zm} vP d\tau$$

$$l_z^2 vP = \sum_{n=1} \left\| l_z^2 vP \right\|_n \varphi_{\rho n} \implies$$

$$A_{km}^{zz} = 2\pi \sum_n \left\| l_z^2 vP \right\|_n \int \varphi_{zk} \varphi_{zm} \varphi_{\rho n} d\tau = 2\pi \sum_{n=1} \left\| l_z^2 vP \right\|_n \Phi_{km|n}^{zz|\rho}$$

$$\begin{aligned}\Phi_{km|n}^{zz|\rho} &= \int \varphi_{zk} \varphi_{zm} \varphi_{\rho n} d\tau \\ m = 0 : \int \varphi_{zk} \varphi_{\rho n} d\tau &= \Phi_{kn}^{z\rho} \\ k > m > 0 : \varphi_{zk} \varphi_{zm} &= \varphi_{z|k-m} + \varphi_{z|k+m} \\ \int \varphi_{z|k-m} \varphi_{\rho n} d\tau + \int \varphi_{z|k+m} \varphi_{\rho n} d\tau &= \Phi_{k-m|n}^{z\rho} + \Phi_{k+m|n}^{z\rho}\end{aligned}$$

$$\Phi_{km|n}^{zz|\rho} = \int \varphi_{zk} \varphi_{zm} \varphi_{\rho n} d\tau$$

$$\Phi_{km>0|n}^{zz|\rho} = \frac{8}{\pi} \delta_{(k+m+n) \bmod 2=1} \left[ \frac{2(k^2 + m^2 - n^2)n}{(k+m+n)(-k+m+n)(k-m+n)(k+m-n)} \right]$$

$$\Phi_{k|m=0|n}^{zz|\rho} = \Phi_{kn}^{z\rho}$$

$A^{z\rho}$

$$\begin{aligned}A_{km}^{z\rho} &= 2\pi \int l_z l_\rho \varphi_{zk} \varphi_{\rho m} v P d\tau \\ l_z l_\rho v P &= \sum_{n=0} \|l_z l_\rho v P\|_n \varphi_{zn} \implies \\ A_{km}^{z\rho} &= 2\pi \sum_n \|l_z l_\rho v P\|_n \int \varphi_{zk} \varphi_{zn} \varphi_{\rho m} d\tau = 2\pi \sum_{n=0} \|l_z l_\rho v P\|_n \Phi_{kn|m}^{zz|\rho}\end{aligned}$$

### Сингулярное ядро

$$\begin{aligned}\Phi_{\sin|k,m} &= \int d\tau \varphi_{\rho|k} \frac{1}{\sin(\pi\tau)} \varphi_{\rho|m} = 2 \sum_{0 \leq n \leq k-1, n+k \bmod 2=1} \int d\tau \varphi_{zn} \varphi_{\rho m} = \\ &= 2 \sum_{0 \leq n \leq k-1, n+k \bmod 2=1} \Phi_{nm}^{z\rho} \\ &= \frac{4}{\pi} \left[ \delta_{n>0} \delta_{(n+m) \bmod 2=1} \frac{2m}{(m^2 - n^2)} + \delta_{n=0} \delta_{m \bmod 2=1} \frac{1}{m} \right] \\ \Phi_{\sin|k,m} &= \frac{4}{\pi} \delta_{(k+m) \bmod 2=0} \left[ \psi \left( \frac{1}{2} + \frac{k+m}{2} \right) - \psi \left( \frac{1}{2} + \frac{k-m}{2} \right) \right], \\ &\psi - \text{digamma function}\end{aligned}$$

Теперь осложненное - тройное:

$$\int d\tau \varphi_{\rho k} \varphi_{\rho m} \frac{1}{\sin(\pi\tau)} \varphi_{zn} =$$

$$n \geq 1 : \varphi_{\rho m} \varphi_{zn} = [\varphi_{\rho|m-n} + \varphi_{\rho|m+n}]$$

$$= \int d\tau \varphi_{\rho k} \frac{1}{\sin(\pi\tau)} [\varphi_{\rho|m-n} + \varphi_{\rho|m+n}] = \Phi_{\sin|k,m-n} + \Phi_{\sin|k,m+n}$$

$$\int d\tau \varphi_{\rho k} \varphi_{\rho m} \frac{1}{\sin(\pi\tau)} \varphi_{zn} = \Phi_{\sin|k,m+n} + \begin{cases} \Phi_{\sin|k,m-n} & m > n > 0 \\ -\Phi_{\sin|k,n-m} & 0 < m < n \\ 0 & n = 0 \end{cases}$$

## Конечные элементы

Во многих практических приложениях появляется задача восполнения функции с дискретного набора точек до непрерывной функции:

$$\text{Sm}[f](x) = \sum_j f(x_j)S(x, x_j)$$

Простейшая реализация метода конечных элементов использует линейную интерполяцию, при этом функция отклика  $S$  представляет шляпку. Получаемая функция  $C_0$  и аппроксимирует функцию с точностью  $O(h^2)$ , а производную с  $O(h)$ .

Обычная конструкция сплайна позволяет построить кусочно полиномиальное восполнение с формально произвольной точностью аппроксимации, однако функция отклика хоть и спадает экспоненциально, тем не менее простирается на всю область определения функции, более того функция отклика зависит от количества использованных точек и получается обращением довольно крупной матрицы.

Наша цель упростить процедуру восполнения без потери точности аппроксимации и гладкости  $C_n$ , но, возможно, увеличивая степень локального полинома с той целью, чтобы носитель функции отклика был ограничен  $\sim n$ .

### $C_1$

Как легко можно понять  $C_1$  восполнение может быть построено только с функцией отклика, затрагивающей 2 сегмента с каждой стороны контрольной точки, понятно, что для этих целей полинома второй степени не достаточно, попробуем 3:

$$S(x) = \{j < |x| < j + 1 : c_{j0} + c_{j1}|x| + c_{j2}x^2 + c_{j3}|x|^3\}, j \in [0,1] \quad \mathbf{8 \text{ unknowns}}$$

$$S(0) = 1, S(1 \pm 0) = 0, S(2) = 0 \quad \mathbf{4}$$

$$S'(0) = 0, S'(2) = 0 \quad \mathbf{2}$$

$$S'(1 - 0) = S'(1 + 0) \quad \mathbf{1}$$

**7 equation**

Важное замечание: не любое  $C_n$  восполнение обеспечивает аппроксимацию ожидаемого порядка  $O(h^{n+2})$  для самой функции,  $O(h^{n+1})$  для производной ...  $O(h)$  для  $n+1$  производной.<sup>24</sup>

Для наших кусочных сплайнов необходимо таким образом проверить точно воспроизведение  $f_k(x) = x^k, k \in [0, n+1]$ .

<sup>24</sup>Встречаются  $C_1$  восполнение без такой степени аппроксимации, что на мой взгляд вряд ли полезно

На отрезке  $x \in [0,1]$ :

$$Sp[f](x) = f_{-1}S(x+1) + f_0S(x) + f_1S(x-1) + f_2S(x-2) =$$

$$f_{-1}(c_{k1}(x+1)^k) + f_0(c_{k0}x^k) + f_1(c_{k0}(1-x)^k) + f_2(c_{k1}(2-x)^k) =$$

$c_1$

$$\begin{pmatrix} 1 & x & x^2 & x^3 \end{pmatrix} \hat{M} \begin{pmatrix} f_{-1} \\ f_0 \\ f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\hat{M} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{M} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{M} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$c_{00} \rightarrow 1, c_{01} \rightarrow 0, c_{03} \rightarrow \frac{3}{2}, c_{10} \rightarrow 2, c_{11} \rightarrow -4, c_{13} \rightarrow -\frac{1}{2}, c_{12} \rightarrow \frac{5}{2}, c_{02} \rightarrow -\frac{5}{2}$$

$$Sp[f](x) = f_{-1}S(x+1) + f_0S(x) + f_1S(x-1) + f_2S(x-2) =$$

$$f_{-1}(c_{k1}(x+1)^k) + f_0(c_{k0}x^k) + f_1(c_{k0}(1-x)^k) + f_2(c_{k1}(2-x)^k) =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & x & x^2 & x^3 \end{pmatrix} \hat{M} \begin{pmatrix} f_{-1} \\ f_0 \\ f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\hat{M} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{M} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{M} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$c_{00} \rightarrow 1, c_{01} \rightarrow 0, c_{03} \rightarrow \frac{3}{2}, c_{10} \rightarrow 2, c_{11} \rightarrow -4, c_{13} \rightarrow -\frac{1}{2}, c_{12} \rightarrow \frac{5}{2}, c_{02} \rightarrow -\frac{5}{2}$$

$$S(x) = \begin{cases} \frac{3|x|^3}{2} - \frac{5|x|^2}{2} + 1 & |x| < 1 \\ -\frac{|x|^3}{2} + \frac{5|x|^2}{2} - 4|x| + 2 & 1 < |x| < 2 \\ 0 & |x| > 2 \end{cases}$$

У границы интервала для сохранения тоже порядка точности можно формально дополнить минус первой точкой:

$$f_{-1} = 3f(0) - 3f(1) + f(2)$$

Тогда для квадратурная формула для функции, выполненной такими конечными элементами:

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x)dx &= -\frac{1}{24}f_{-1} + \frac{1}{2}f_0 + \frac{25}{24}f_1 + f_2 + f_3 + \dots = \\ &= -\frac{1}{24}(3f_0 - 3f_1 + f_2) + \frac{1}{2}f_0 + \frac{25}{24}f_1 + f_2 + f_3 + \dots = \\ &= \left(\frac{9}{24}\right) f_0 + \frac{28}{24}f_1 + \frac{23}{24}f_2 + f_3 + \dots \end{aligned}$$

### Более гладкое выполнение

Приведем общую процедуру построения таких конечных элементов на примере  $C_2$  выполнения.

$$S(x) = \{j < |x| < j + 1 : c_{j0} + c_{j1}|x| + c_{j2}x^2 + c_{j3}|x|^3 + c_{j4}|x|^4\}, j \in [0,1,2] \text{ 15 unknowns}$$

$$S(0) = 1, S(1 \pm 0) = 0, S(2 \pm 0) = 0, S(3) = 0 \text{ 6}$$

$$S'(0) = 0, S'(3) = 0, S''(3) = 0 \text{ 3}$$

$$S'(1 - 0) = S'(1 + 0), S''(1 - 0) = S''(1 + 0) \text{ 2}$$

$$S'(2 - 0) = S'(2 + 0), S''(2 - 0) = S''(2 + 0) \text{ 2}$$

13 equation

$$\|\mathbf{P}_{x+j}\|_i = \|\mathbf{P}_x \hat{T}_j\|_i :$$

$$\|\mathbf{P}_{x+j}\|_i = (x+j)^i = \sum_{k=0}^{k=i} x^k C_i^k j^{i-k} = \sum_k x^k \|T_j\|_{ki}, \|T_j\|_{ki} = \begin{cases} C_i^k j^{i-k} & k \leq i \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

$$\|\mathbf{P}_{-x}\|_i = \|\mathbf{P}_x \hat{R}\|_i : R = (-1)^i \delta_{ij}$$



$$\hat{M} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{M} \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{M} \begin{pmatrix} 2^2 \\ 1^2 \\ 0 \\ 1^2 \\ 2^2 \\ 3^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{M} \begin{pmatrix} -2^3 \\ -1^3 \\ 0 \\ 1^3 \\ 2^3 \\ 3^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\{c_{00} \rightarrow 1, c_{01} \rightarrow 0, c_{02} \rightarrow -\frac{5}{2}, c_{03} \rightarrow \frac{5}{3}, c_{04} \rightarrow -\frac{1}{6},$$

$$c_{10} \rightarrow \frac{7}{2}, c_{11} \rightarrow -\frac{95}{12}, c_{12} \rightarrow \frac{25}{4}, c_{13} \rightarrow -\frac{25}{12}, c_{14} \rightarrow \frac{1}{4},$$

$$c_{20} \rightarrow -\frac{9}{2}, c_{21} \rightarrow \frac{27}{4}, c_{22} \rightarrow -\frac{15}{4}, c_{23} \rightarrow \frac{11}{12}, c_{24} \rightarrow -\frac{1}{12}\}$$

$$S(x) = \begin{cases} S_0(|x|) = -\frac{|x|^4}{6} + \frac{5|x|^3}{3} - \frac{5|x|^2}{2} + 1 & |x| < 1 \\ S_1(|x|) = \frac{|x|^4}{4} - \frac{25|x|^3}{12} + \frac{25|x|^2}{4} - \frac{95|x|}{12} + \frac{7}{2} & 1 < |x| < 2 \\ S_2(|x|) = -\frac{|x|^4}{12} + \frac{11|x|^3}{12} - \frac{15|x|^2}{4} + \frac{27|x|}{4} - \frac{9}{2} & 2 < |x| < 3 \end{cases}$$

### C<sub>3</sub>

$$S(x) = \{j < |x| < j + 1 : c_{j0} + c_{j1}|x| + c_{j2}x^2 + c_{j3}|x|^3 + c_{j4}|x|^4 + c_{j5}|x|^5\}, j \in [0, 1, 2, 3] \text{ 24 unknowns}$$

$$S(0) = 1, S(1 \pm 0) = 0, S(2 \pm 0) = 0, S(3 \pm 0) = 0, S(4) = 0 \text{ 8}$$

$$S'(0) = 0, S'''(0) = 0, S'(4) = 0, S''(4) = 0, S'''(4) = 0 \text{ 5}$$

$$S'(1 - 0) = S'(1 + 0), S'''(1 - 0) = S'''(1 + 0), S''(1 - 0) = S''(1 + 0) \text{ 3}$$

$$S'(2 - 0) = S'(2 + 0), S'''(2 - 0) = S'''(2 + 0), S''(2 - 0) = S''(2 + 0) \text{ 3}$$

$$S'(3 - 0) = S'(3 + 0), S'''(3 - 0) = S'''(3 + 0), S''(3 - 0) = S''(3 + 0) \text{ 3}$$

22 equation

На отрезке  $x \in [0, 1]$ :

$$Sp[f](x) = f_{-3}S(x + 3) + f_{-2}S(x + 2) + f_{-1}S(x + 1) + f_0S(x) +$$

$$f_1S(x - 1) + f_2S(x - 2) + f_3S(x - 3) + f_4S(x - 4)$$

$$S(x) = \begin{cases} S_0(|x|) = -\frac{515|x|^5}{768} + \frac{1267|x|^4}{768} - \frac{95|x|^2}{48} + 1 & |x| < 1 \\ S_1(|x|) = \frac{233|x|^5}{768} - \frac{567|x|^4}{256} + \frac{183|x|^3}{32} - \frac{91|x|^2}{16} + \frac{163|x|}{192} + \frac{33}{32} & 1 < |x| < 2 \\ S_2(|x|) = -\frac{9|x|^5}{256} + \frac{301|x|^4}{768} - \frac{51|x|^3}{32} + \frac{65|x|^2}{24} - \frac{253|x|}{192} - \frac{19}{32} & 2 < |x| < 3 \\ S_3(|x|) = -\frac{7|x|^5}{768} + \frac{133|x|^4}{768} - \frac{21|x|^3}{16} + \frac{119|x|^2}{24} - \frac{28|x|}{3} + 7 & 3 < |x| < 4 \end{cases}$$

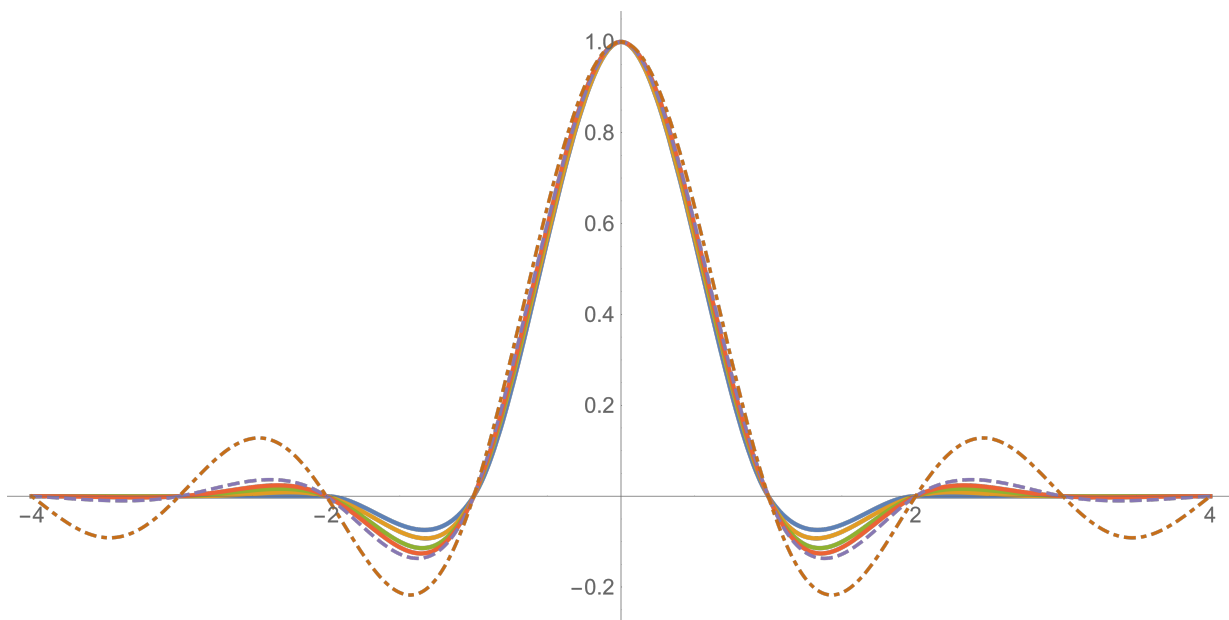


Рис. 28: Функции отклика  $C^{-1,2,3,4}$  гладких финитных восполнений в сравнении с функцией отклика кубического сплайна, затухающей экспоненциально (пунктиром) и бесконечно-гладкой функцией отклика Котельникова  $\frac{\sin(\pi x)}{\pi x}$ . (штрих-пунктиром).

**C<sub>4</sub>**

$$S(x) = \{j < |x| < j + 1 : c_{j0} + c_{j1}|x| + c_{j2}|x|^2 + c_{j3}|x|^3 + c_{j4}|x|^4 + c_{j5}|x|^5 + c_{j6}|x|^6\}, j \in [0,1,2,3,4] \text{ 35 unknowns}$$

$$S(0) = 1, S(1 \pm 0) = 0, S(2 \pm 0) = 0, S(3 \pm 0) = 0, S(\pm 4) = 0, S(5) = 0 \text{ 10}$$

$$S'(0) = 0, S'''(0) = 0, S'(5) = 0, S'''(5) = 0, S''''(5) = 0, S''''(5) = 0 \text{ 6}$$

$$S'(1-0) = S'(1+0), S''(1-0) = S''(1+0), S'''(1-0) = S'''(1+0), S''''(1-0) = S''''(1+0) \text{ 4}$$

$$S'(2-0) = S'(2+0), S''(2-0) = S''(2+0), S'''(2-0) = S'''(2+0), S''''(2-0) = S''''(2+0) \text{ 4}$$

$$S'(3-0) = S'(3+0), S''(3-0) = S''(3+0), S'''(3-0) = S'''(3+0), S''''(3-0) = S''''(3+0) \text{ 4}$$

$$S'(4-0) = S'(4+0), S''(4-0) = S''(4+0), S'''(4-0) = S'''(4+0), S''''(4-0) = S''''(4+0) \text{ 4}$$

32 equation

$$S(x) = \begin{cases} S_0(|x|) = \frac{251|x|^6}{3360} - \frac{5377|x|^5}{6720} + \frac{1123|x|^4}{672} - \frac{2615|x|^2}{1344} + 1 & |x| < 1 \\ S_1(|x|) = -\frac{297|x|^6}{2240} + \frac{1021|x|^5}{672} - \frac{1527|x|^4}{224} + \frac{10015|x|^3}{672} - \frac{253|x|^2}{16} + \frac{44503|x|}{6720} - \frac{317}{1120} & 1 < |x| < 2 \\ S_2(|x|) = \frac{95|x|^6}{1344} - \frac{1291|x|^5}{1120} + \frac{5179|x|^4}{672} - \frac{18097|x|^3}{672} + \frac{17335|x|^2}{336} - \frac{342889|x|}{6720} + \frac{4519}{224} & 2 < |x| < 3 \\ S_3(|x|) = -\frac{163|x|^6}{13440} + \frac{703|x|^5}{2688} - \frac{3127|x|^4}{1344} + \frac{2095|x|^3}{192} - \frac{10903|x|^2}{384} + \frac{521041|x|}{13440} - \frac{24223}{1120} & 3 < |x| < 4 \\ S_4(|x|) = -\frac{3|x|^6}{4480} + \frac{87|x|^5}{4480} - \frac{15|x|^4}{64} + \frac{675|x|^3}{448} - \frac{4875|x|^2}{896} + \frac{9375|x|}{896} - \frac{1875}{224} & 4 < |x| < 5 \end{cases}$$