第 55 卷 第 10 期 2006 年 10 月
1000-3290/2006/55(10)/5568-07
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.55,No.10,October,2006

球形拓扑中复杂形状生物膜泡的获得及其稳定性分析*

周晓华† 张劭光

(陕西师范大学物理与信息技术学院,西安 710062)

(2005 年 12 月 28 日收到;2006 年 2 月 16 日收到修改稿)

通过在 Surface Evolver 软件中建立一些与目标形状相似的初始形状,经长时间演化后,得到了实验上已经观察到的具有 D_{2h} 和 D_{3h} 对称性的海星形生物膜泡.通过跟踪不同形状膜泡的 Hessian 矩阵的本征值,确定了双凹圆盘与海星形及哑铃形之间的相变是不连续的,其间所经历的三角扁盘及椭圆扁盘形中间相在 SC 模型中通常是不稳定的.

关键词:SC 模型,生物膜泡,Surface Evolver

PACC:8720,8720E,0240

1. 引 言

由各向同性材料形成的肥皂泡之类的膜泡一般都是圆球形的.另一方面,静止的人类成熟红细胞却呈现双凹圆盘形.为了揭示这些形状的形成原因,Canham 提出了生物膜的曲率能模型[1].该模型中,膜泡单位面积上的能量正比于($2H^2$),其中 H 为曲面的平均曲率.考虑到膜两边环境的对称性因素对膜泡的影响,Helfrich 又在此基础上提出了自发曲率(SC)模型[2],在此模型中,平衡形状的膜泡由其自由能的最小值决定,其能量为

$$F = \frac{1}{2} k_c \int (C_1 + C_2 - C_0)^2 \mathrm{d}A + \Delta P \int \mathrm{d}V + \lambda \int \mathrm{d}A, \qquad (1)$$

此处的 $\mathrm{d}A$ 和 $\mathrm{d}V$ 分别为曲面的面积元和体积元,k_c 为弹性模量,C_1 和 C_2 为曲面的两个主曲率,C_0 是描述膜泡周围环境的不对称性所引起的自发曲率.拉格朗日乘子 ΔP 和 λ 分别对应于体积和面积约束.其中 ΔP 可理解为膜泡内外的渗透压,而 λ 可解释为曲面强度系数.

通过对方程(1)作变分,要求能量的一阶变分 $\delta^{(1)} F = 0$,欧阳和 Helfrich 得到了下面平衡形状的普适方程[3]

$$\Delta P - 2\lambda H + k_c(2H - C_0) \times (2H^2 - 2K - C_0 H) + 2k_c \nabla^2 H = 0, \qquad (2)$$

此处的 ∇^2 为曲面拉普拉斯算子,$H = (C_1 + C_2)/2$ 为 Helfrich 对曲面平均曲率的定义(注:欧阳在文献[3]中的取法为 $H = -(C_1 + C_2)/2$,这样会导致(2)式中的 C_0 与文献[3]中的 C_0 相差一个负号),$K = C_1 C_2$ 为曲面高斯曲率.此后,人们希望通过找到该方程的解而获得膜泡的形状.但是方程(2)是一个高阶非线性偏微分方程,要得到其通解非常困难,至今为止,只有张和欧阳对柱面型通解进行了讨论[4].其他的一些特解为欧阳等人给出,包括克利福德锚环解[5]、红血球解[6]以及改进的德朗尼曲面解[7].

为了标度不同形状膜泡的能量,我们使用约化量来进行计算.通常用膜泡面积 A 来定义约化半径 $R_0 = \sqrt{A/4\pi}$,此时,约化体积可表示为 $v = V/(4/3)\pi R_0^3$,其中的 V 为膜泡体积.同时可得到约化自发曲率 $c_0 = C_0 R_0$.由此,方程(2)的解将由 v 和 c_0 两个量决定.对于轴对称的情况,Seifert 等人利用打靶法数值求解了与方程(2)等价的拉格朗日方程组并给出了球形和环形拓扑的相图[8,9].虽然人们至今没能找到非轴对称的精确解,然而实验上却发现了

* 国家自然科学基金(批准号:10374063)和陕西省自然科学研究计划(批准号:2003A08)资助的课题.

† E-mail:zxhua@stu.snnu.edu.cn

许多非旋转对称的稳定膜泡[10-12]．为了进一步解释这些复杂的膜泡形状，人们又提出了一些其他的模型，包括面积差弹性（ADE）模型[13]和与 SC 模型有相同形状方程的双层耦合（BC）模型[14]．近年来，欧阳小组利用功能强大的曲面模拟软件 Surface Evolver[15]，得到了一些非轴对称的膜泡[16-18]，此外，杜强等人的数值计算也获得了很丰富的图形[19]．但是以上这些数值求解的文章存在以下缺点：1）打靶法给出的只是轴对称形式的解及其基态相图，对于非轴对称形式却无能为力；2）所有的数值解都是只满足 $\delta^{(1)}F=0$，然而稳定性还要求膜泡能量的二阶变分 $\delta^{(2)}F>0$；3）没能表明不同形状之间相变的途径及其所经历的中间相．我们的计算在一定程度上克服了前文的缺点，首次对 Surface Evolver 获得的形状进行了稳定性分析，并确定了两种不连续的相变及其对应的两种不稳定的中间相．

2．软件的介绍及模型的建立

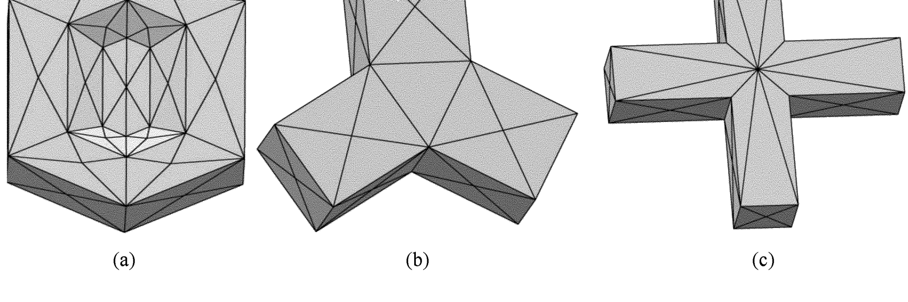
Surface Evolver 是美国 University of Minnesota 国家科学和几何结构计算与可视化研究中心 Brakke 教授开发的一个有限元模拟软件．它通过对初始模型进行三角剖分来获得曲面的参数，如：面积、体积、平均曲率 H 等．用于计算在曲面曲率能，液体表面能等能量作用下曲面或液体表面的平衡形态．在 Surface Evolver 中，曲面的能量包括了表面张力能、重力势能、曲率能等．与 SC 模型中的能量函数相比较，我们得到在该软件中膜泡的能量函数可表示为

$$F=m_1\int(H-H_0)^2\mathrm{d}A+\lambda\int\mathrm{d}A-P\int\mathrm{d}V,\quad(3)$$

其中 m_1 为曲率能的权重，平均曲率 $H=(C_1+C_1)/2$．为了与 SC 模型一致，此处 $m_1=2k_c$，$P=-\Delta P$，$H_0=C_0/2$．在我们的计算中，取 $k_c=1$．

该软件的一个特点是它能计算膜泡能量的 Hessian 矩阵，该矩阵是膜泡能量的二阶导数[20]．并且，Hessian 矩阵的每一个本征值代表膜泡在构型空间中的一种变形模式，可以通过给定某个本征值一定的步长改变来观察这种变形模式．显然，只有 Hessian 矩阵正定的膜泡才可能是稳定的．计算表明，Hessian 矩阵有时会出现接近于零的、对应着旋转或平移的本征值，这样的变形模式不会引起膜泡能量的改变，我们称之为平庸本征值．如果出现非平庸的而且接近于零的本征值，那么这就可能是个不稳定点，在这种情况下，我们给定这些接近于零的本征值一定的步长改变，这相当于给膜泡加上了一个扰动，接着让膜泡长时间演化，如果它能变回原来的形状，那么该点就应该是个稳定点，反之则是个不稳定点．实践表明，Hessian 矩阵是分析膜泡稳定性的有效方法．另外，要判定某种形状是否稳定，也可以直接使用该软件中的 Hessian_seek 命令[20]，但是该命令引入的扰动较大，从而不能获得一些有趣的中间相，因此我们一般不使用．

Surface Evolver 中常用对顶点取平均和使三角形等角化来获得光滑的曲面[20]，例如命令｛V；u；g5｝，其中｛V｝表示对顶点取平均，｛u｝表示使三角形等角化，｛g5｝表示向着能量低的方向积分 5 次．我们的计算中，每使用一次｛V；u；g5｝命令称之为一步．显然，反复使用｛V；u；g5｝命令就可能获得较为稳定的曲面．为了迅速得到目标形状，我们建立如图 1 中的初始形状．这些初始形状的参数是可以调整的，（a）是一个双凹盘形，（b）类似于三爪海星形[10]，（c）类似于四爪海星形[10]．



(a)　　(b)　　(c)

图 1　初始形状，依次分别具有 D_{2h}，D_{3h} 和 D_{4h} 对称性

3. 海星形膜泡

利用图 1(b)和(c)中的初始形状,逐次细分并长时间演化,很容易到具有 D_{3h} 和 D_{2h} 对称性的三爪海星形和四爪海星形膜泡. 在固定面积和约化体积的条件下,通过逐步调整约化曲率 c_0,找到了与文献[5]中约化平均曲率积分 $m = \oint H\mathrm{d}A/R_0$ 相对应的值 c_0,如图 2 所示,其中每个形状都达到 1—2 万

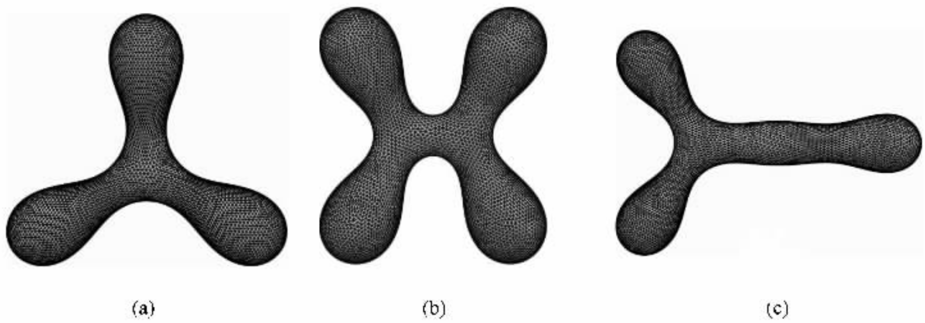


图 2 (a)具有 D_{3h} 对称性的三爪海星形,能量为 13.65,$R_0=4.26$,$c_0=2.03$,$v=0.5$,$m=1.67\times4\pi$,$\lambda=0.218$,$P=-0.274$;(b)具有 D_{2h} 对称性的四爪海星形,能量为 23.12,$R_0=3.48$,$c_0=1.96$,$v=0.5$,$m=1.83\times4\pi$,$\lambda=0.376$,$P=-0.656$. 这两种膜泡已被用一种改进的 ADE 模型讨论过[10];(c) Y 字形,能量为 19.35,$R_0=4.25$,$c_0=2.03$,$v=0.45$,$m=1.81\times4\pi$,$\lambda=0.32$,$P=-0.42$. 这种类型的膜泡已被实验上观察到[12]

个面,演化次数不低于 10 万步.

我们利用 Hessian 矩阵分析了这三种膜泡的稳定性,发现它们都是稳定的. 在固定 $c_0=2.03$ 的条件下,通过逐步改变图 2(a)的约化体积 v 发现,当 $v\geqslant0.54$时,D_{3h} 对称性的海星形将出现负的本征值,长时间演化后会不连续地变成能量较低的哑铃形[8] 而当 $v\leqslant0.45$ 时,也会出现负的本征值,长时间演化后它会不连续地变成能量较低的 Y 字形. 同样,我们改用图 2(c),当 v 逐渐增大到 0.48 时,Y 字形会逐渐变成 D_{3h} 对称性的海星形. 在 $0.45\leqslant v\leqslant0.48$ 时,同一个点上的 Y 字形的能量低于 D_{3h} 对称性的海星形的能量,要判断前者是否是从后者中分叉出来的需要较大的计算量,我们现在正在讨论.

图 2 中的三种海星形,可以确定它们是普适形状方程(2)的三支不同的稳定解. 但是通过选取大量的点计算表明,其能量始终高于同一个点上轴对称形状的能量,因此它们始终是以亚稳态形式存在的. 图 3 和 4 分别给出了 $v=0.53$ 时,三种不同形状的 m 值和能量与 c_0 的变化曲线,此时已不存在稳定的 Y 字形和四爪海星形,并且 D_{3h} 对称性的海星形在 $c_0\leqslant-0.1$ 时会不连续的变为双凹圆盘形,而双凹圆盘形在 $c_0\geqslant1.4$ 时会不连续的变为 D_{3h} 对称性的海星形(见后文). 从图 3 看出,SC 模型中存在一个 m 的取值区间,此区间内没有任何稳定的形状存在. 显然这些形状之间的相变是不可能连续的. 从图 4 看出,D_{3h} 对称性的海星的能量始终高于同一个点上轴对称形状的能量.

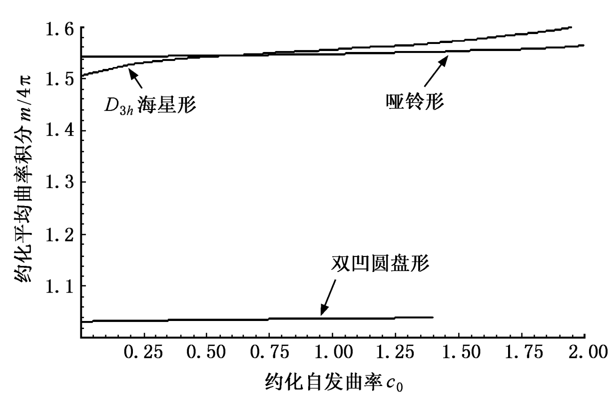


图 3 $v=0.53$ 时,三种不同形状 $m/4\pi$ 的值与 c_0 的变化曲线

4. 三角扁盘及椭圆扁盘的不稳定性

利用图 1(a)作为初始形状,逐次细分并演化,很容易得到图 5(a)中的双凹圆盘形. 固定该所得形状的体积和面积,逐步增大 c_0 并长时间演化,当

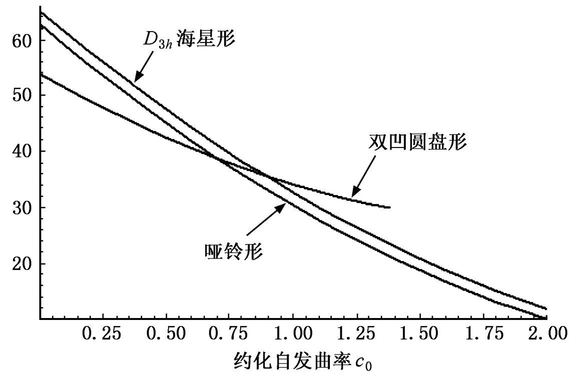


图 4　$v=0.53$ 时，三种不同形状的能量与 c_0 的变化曲线

$c_0\geqslant 1.4$时，其 hessian 矩阵会出现负的本征值. 表 1 给出了图 5(b) 的 hessian 矩阵的前 9 个较小的本征值的大小及其对应的变形模式，其中两个负的本征值都对应着向三角扁盘变形的模式. 另外，还包括三个平移和两个旋转的本征值，像这样的 5 个平庸本征值会总是出现双凹圆盘形的本征值中. 从表 1 看出，双凹圆盘存在三角扁盘和椭圆扁盘两种非平庸的变形模式，该模式很可能是双凹圆盘在一定的热涨落下发生形变的方向. 给定负本征值一个步长为 0.2 的改变，经过一段时间的演化后，得到图 5(c) 中的三角扁盘形，该形状是不稳定的，再经过一个较长时间的演化，它会变成能量比它低的 D_{3h} 对称性的海星形(如果使用 Hessian_ seek 命令，该过程会非常迅速)，如图 5(d). 利用图 5(d) 中的海星形，固定其体积，逐步减小 c_0 并长时间演化，当 $c_0\leqslant -0.1$ 时，其又会不连续地变成双凹圆盘形. 对于其他的体积下，我们也做了大量的计算，其结论是 :三角扁盘通常是不稳定的，其要么变为双凹圆盘，要么变为海星形. 因此，双凹圆盘与海星形之间的相变是不连续的，其间很难存在稳定的三角扁盘形中间相. 在文献[11]中，曾用并不是普实方程(2)解的 Cassini 函数来获得三角扁盘形形状，其结果显然是不可靠的.

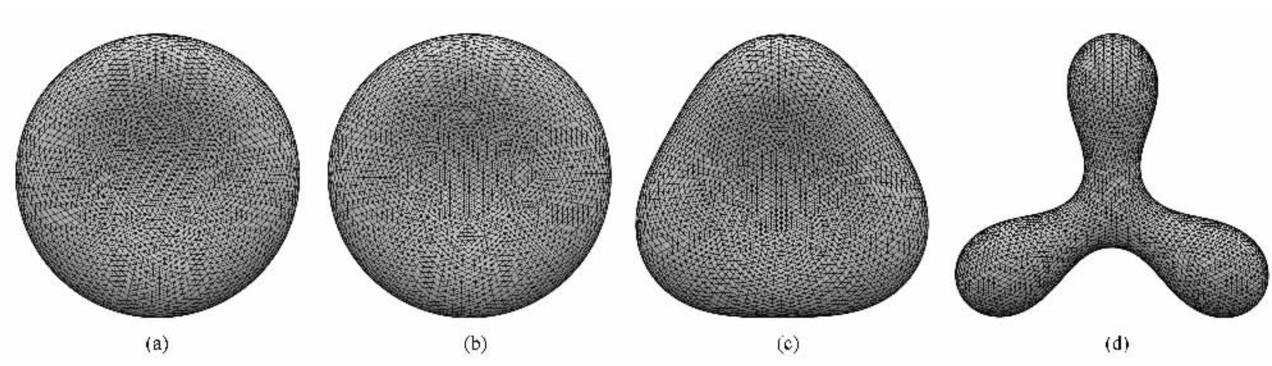


图 5　(a)双凹圆盘形，能量为 30.60，$R_0=1$，$c_0=1.3$，$v=0.53$，$m=1.04\times 4\pi$，$\lambda=3.96$，$P=-16.76$;(b)不稳定的双凹圆盘形，$c_0=1.4$，$v=0.53$;(c)不稳定的三角扁盘形 ;(d) D_{3h} 对称性的海星形，能量为 22.96，$R_0=1$，$c_0=1.4$，$v=0.53$，$m=1.57\times 4\pi$，$\lambda=4.5$，$P=-21.58$

表 1　本征值及其对应的变形模式

本征值	对应的变形模式
-1.1840910043788	三角扁盘
-1.1839849504631	三角扁盘
0.3776080003266	平移
0.7655720539026	旋转
0.7655720539128	旋转
0.9392163718540	平移
0.9392163719015	平移
4.1163856128133	椭圆扁盘
4.1163856129012	椭圆扁盘

利用图 1(a) 作为初始形状，细分两次后长时间演化，在固定面积、体积和 c_0 的条件下很容易得到图 6(a) 中的椭圆扁盘形形状. 在相当大的区域里，这种形状都将出现. 如果把图 6(a) 再次细分后演化一定时间，其会变成图 6(b) 中的双凹圆盘形. 但是，若不细分图 6(a)，无论演化多长时间，它都会停留在椭圆扁盘上. 我们认为这种现象是由于软件内部的激发能引起的. 我们知道，为了得到较为光滑的曲面，就不得不使用 {V} 和 {u} 命令，实践表明，这两个命令会使曲面的能量略微升高，其升高量我们称之为激发能. 该激发能的大小与许多因素有关，一般情况下，剖分越细，激发能越小. 因此，反复使用 {V}、{u} 和 {g} 命令所得到的曲面将会是激发能与积分下降能量相互竞争的结果，两者相消时，曲面形状将不

会变化.大量的计算表明,在同一个点上,椭圆扁盘的能量略高于双凹圆盘的能量,因此,在较粗的剖分下,激发能会使双凹圆盘变成椭圆扁盘.细分以后,激发能降低,长时间演化后其又会回到双凹圆盘.图7给出了 $v=0.62$ 时相同剖分面数条件下两种形状的能量与 c_0 的变化曲线,其中椭圆扁盘的能量始终

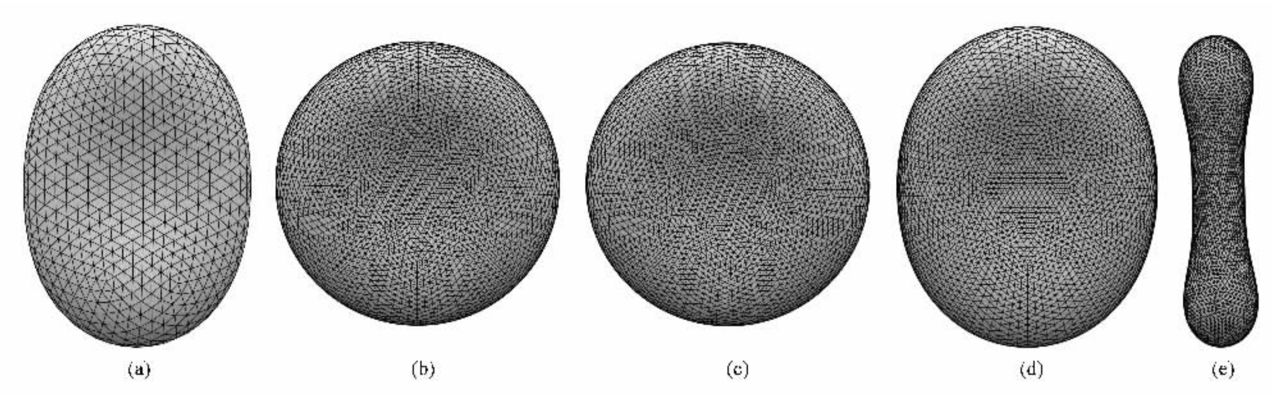


图6 (a)不稳定的椭圆扁盘形,$R_0=1$,$c_0=0.8$,$v=0.62$;(b)双凹圆盘形,能量为30.98,$R_0=1$,$c_0=0.8$,$v=0.62$,$m=1.04\times4\pi$,$\lambda=4.39$,$P=-15.76$;(c)不稳定的双凹圆扁盘形,$R_0=1$,$c_0=1$,$v=0.62$;(d)不稳定的椭圆扁盘形;(e)哑铃形,能量为21.33,$R_0=1$,$c_0=1$,$v=0.62$,$m=1.37\times4\pi$,$\lambda=4.88$,$P=-18.54$.

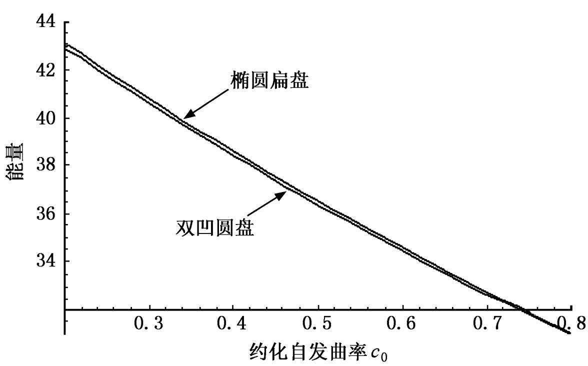


图7 $v=0.62$ 时两种膜泡的能量与 c_0 的变化曲线

处于双凹圆盘上方,两者相差很小.

利用图6(b)中的双凹圆盘形,固定其体积,逐步增大 c_0 并长时间演化,当 $c_0\geqslant1$ 时,其 hessian 矩阵会出现负的本征值.表2给出了图6(c)的 hessian 矩阵的前9个比较小的本征值的大小及其对应的变形模式.同样给定负本征值一个步长为0.2的改变,经过一段时间的演化后,得到图6(d)中的椭圆扁盘形,该形状是不稳定的,再经过一个较长时间的演化,它会变成能量比它低的哑铃形(如果使用 Hessian_seek 命令,该过程会非常迅速),如图6(e).若用图6(e)中的哑铃形,固定其体积,逐步减小 c_0 并长时间演化,一直到胃形胞的区域里[8],它都是稳定的.对于其他的体积下,我们也做了大量的计算,其结论是 椭圆扁盘通常是不稳定的,其要么变为双凹圆盘,要么变为哑铃形.因此,双凹圆盘与哑铃形之间的相变是不连续的,其间很难存在稳定的椭圆扁盘形中间相.

表2 本征值及其对应的变形模式

本征值	对应的变形模式
−0.5835032875520	椭圆扁盘
−0.5835032874991	椭圆扁盘
0.2463069651919	平移
0.5299537477505	旋转
0.5299537478432	旋转
0.5745187957209	平移
0.5745187957797	平移
3.0258300225462	三角扁盘
3.0260227893315	三角扁盘

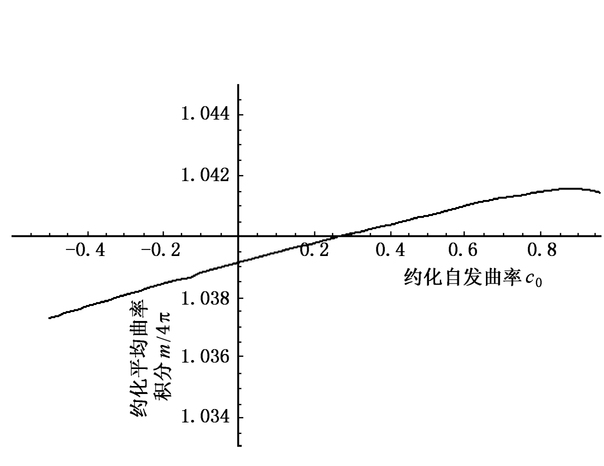


图8 $v=0.62$ 时双凹圆盘的 $m/4\pi$ 值与 c_0 的变化曲线

对于稳定的双凹圆盘形，计算表明，其 m 值始终集中在 $1.04\times 4\pi$ 左右. 图 8 给出了 $v = 0.62$ 时 m 与 c_0 的变化曲线，当 v 取其他值时也有类似结果. 图 8 中，当 $c_0 < -0.5$，双凹圆盘形会出现负的本征值，长时间演化后会不连续地变为胃形胞.

5. 结　　论

（1）同一个点上，轴对称形状的能量始终低于非轴对称形状的能量，比如图 2 中的三种海星形形状，其能量都高于相同点上的哑铃形状. 在球形拓扑下，我们目前所获得的几种非轴对称的稳定形状在 SC 模型下都是以亚稳态形式存在的.

（2）利用 hessian 矩阵对膜泡进行稳定性分析是获得稳定膜泡的有效方法. 可以通过跟踪 hessian 矩阵的本征值及其对应的变形模式，从而确定膜泡相变的途径. 我们的计算表明，三角扁盘和椭圆扁盘很可能是满足方程（2）的解，但并不是稳定解，并且，SC 模型中的大部分相变都是不连续的.

（3）不同形状应该有其对应的稳定区间，因此，就应该有稳定形状的相图. 该相图与文献[8,9]中利用比较能量高低获得的基态相图有一定的差别. 我们现在正在通过跟踪不同形状的本征值来获得稳定形状的相图，这显然需要较大的计算量.

[1] Canham P B 1970 *J. Theor. Biol.* **26** 61

[2] Helfrich W 1973 *Z. Naturforsch.* C **28** 693

[3] Ou-Yang Z C, Helfrich W 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2486

[4] Zhang S G, Ou-Yang Z C 1996 *Phys. Rev.* E **53** 4206

[5] Ou-Yang Z C 1990 *Phys. Rev.* A **41** 4517

[6] Naito H, Okuda M, Ou-Yang Z C 1993 *Phys. Rev.* E **48** 2304

[7] Naito H, Okuda M, Ou-Yang Z C 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4345

[8] Seifert U, Berndl K, Lipowsky R 1991 *Phys. Rev.* A **44** 1182

[9] Jülicher F, Seifert U, Lipowsky R 1993 *J. phys. II France* **3** 1681

[10] Wintz W, Döbereiner H G, Seifert U 1996 *Europhys. Lett.* **33** 404

[11] Sekimura T, Hotani H 1991 *J. theor. Biol.* **149** 326

[12] Hotani H 1984 *J. Mol. Biol.* **178** 114

[13] Miao L, Seifert U, Wortis M, Döbereiner H G 1994 *Phys. Rev.* E **49** 5389

[14] Svetina S, Zeks B 1989 *Eur. Biophys. J.* **17** 101

[15] 该软件的免费下载网址为 http://www.susqu.edu/facstaff/b/brakke/

[16] Yan J, Liu Q H, Liu J X, Ou-Yang Z C 1998 *Phys. Rev.* E **58** 4730

[17] Zhou J J, Zhang Y, Zhou X, Ou-Yang Z C 2001 *In. J. Mod. Phys.* B **15** 2977

[18] Zhang Y, Zhou X, Zhou J J, Ou-Yang Z C 2002 *In. J. Mod. Phys.* B **16** 511

[19] Du Q, Liu C, Wang X Q 2006 *J. Comput Phys.* **212** 757

[20] 有关该软件的详细说明请参见 Surface Evolver 的说明文档 http://www.susqu.edu/facstaff/b/brakke/

Obtaining and stability analysis of spherical topological vesicles with complex configurations*

Zhou Xiao-Hua† Zhang Shao-Guang

(*College of Physics and Information Technology*, *Shaanxi Normal University*, *Xi'an* 710062, *China*)

(Received 28 December 2005; revised manuscript received 16 February 2006)

Abstract

Through building some initial shapes which are similar to target shapes in Surface Evolver, after a long time of evolvement, we obtain the starfish vesicles with D_{2h} and D_{3h} symmetry, which are supported by experiment. Through tracing the eigenvalues of Hessian matrix of different shapes, we find that between the oblate and the star-fish vesicles, and between the oblate and prolate vesicles, there are two discontinuous phase transformation, and the biconcave triangular shapes and the biconcave elliptic shapes are usually unstable in the SC model.

Keywords: SC model, vesicle, Surface Evolver

PACC: 8720, 8720E, 0240

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10374063) and the National Science Research Plan of Shannxi Province, China (Grant No. 2003A08).

† E-mail: zxhua@stu.snnu.edu.cn