

# 半柔性网络剪切模量的计算<sup>\*</sup>

孙其诚<sup>1)†</sup> 张国华<sup>2)</sup> 王 博<sup>2)</sup> 王光谦<sup>1)</sup>

1) 清华大学水沙科学与水利水电工程国家重点实验室, 北京 100084)

2) 北京科技大学物理系, 北京 100083)

(2008 年 6 月 28 日收到, 2008 年 12 月 11 日收到修改稿)

采用 ANSYS 软件计算了二维半柔性网络的剪切变形, 得到了纤维绕交点可自由旋转和不可自由旋转的剪切模量  $G_{\text{fix}}$  和  $G_{\text{free}}$ , 分析了纤维交点数、长度、纤维力学参数对半柔性网络剪切模量的影响, 对比发现  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  存在极小值,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}} \approx 1.05$ .

关键词: 半柔性网络, 复杂网络动力学, 软凝聚态物质, 多尺度

PACC: 8120S, 6190

## 1. 引 言

复杂网络在自然界中广泛存在, 大多数由随机分布的纤维单元相互连接而成, 比如掺混在混凝土中起增强作用的钢纤维网络, 人工合成纤维网络, 以及微丝、微管和中间纤维组成的细胞骨架等等<sup>[1]</sup>. 其中钢纤维不易于发生弯曲和拉伸, 网络呈现刚性, 在外应力作用下一般只发生仿射变形; 人工合成纤维在交点处易于旋转和平移, 网络对外应力响应是各向同性的, 属于柔性网络. 在自然界中更常见的网络是半柔性网络, 比如细胞骨架网络, 它是贯穿细胞膜的复杂三维网络, 是自主装配的动态结构. 它既有足够高的强度来保护细胞, 又有一定的柔性使得细胞核在外界刺激下易于变形和运动, 试验检测发现半柔性网络具有对外界微小作用的敏感性和非线性响应等基本性质<sup>[2]</sup>. 柔性网络和半柔性网络对外应力响应特性差别的原因在于, 前者的能量变化取决于纤维交点间连接的构象数量的增加或减少, 此时交点间距离  $l_c$  是表示网络能量的唯一参数, 而後者的能量取决于单条纤维的拉伸压缩或弯曲以及纤维间的关联程度<sup>[3]</sup>.

刚性网络和柔性网络的力学特性易于理论分析, 而半柔性网络力学特性分析却十分困难. 我们认为, 半柔性网络涉及多尺度结构, 包括网络大小  $W$ ,

纤维长度  $L$ ,  $l_c$  以及纤维半径  $l_b$  等 4 个尺度, 尺度间关联就成为分析半柔性网络力学性能的关键. 在回答“应力或应变是如何在半柔性网络上传播的?”这一问题时, 既要考虑每条纤维的拉伸和弯曲, 又要考虑纤维间连接方式以及纤维在整个空间的分布. 通常采用的晶格结构或 Cayley 树图结构, 形变模式也局限于仿射形变或者弯曲形变, 显然过于简化.

Head 等人<sup>[4-6]</sup>分析了准静态半柔性微丝网络的剪切变形和模量. 基于细胞骨架的结构特征, 他们认为当两条微丝纤维相交时, 不能发生相对滑动, 因此交点为永久连接; 当施加微小应变时, 微丝纤维绕交点发生自由旋转, 采用共轭梯度方法求解整个网络哈密顿能量的极小值, 得到稳定的网络形态, 进而计算得到网络的剪切模量  $G$ . 他们发现  $l_c$ 、纤维弯曲刚度和拉伸刚度等不同时, 剪切模量变化近十倍. 他们提出了非仿射长度  $\lambda$  的重要概念,  $\lambda = l_c \left( \frac{l_c}{l_b} \right)^{1/3}$ ,

采用  $L$  与  $\lambda$  之比  $\frac{L}{\lambda} = \frac{L}{l_c} \left( \frac{l_b}{l_c} \right)^{1/3}$ , 标度准静态半柔性网络的  $G$ . 指数为自由参数, 他们经验性地取为 1/3 时, 可以较好的标度  $G$ . 我们分析认为  $l_b/l_c$  表征了相邻交点间线段  $l_c$  的压缩刚度和弯曲刚度的比值,  $L/l_c$  是微丝  $L$  上的交点数目, 而  $l_c = \pi/\rho$ ,  $\rho$  是纤维数密度  $\rho = \frac{NL}{W^2}$ , 显然  $L/\lambda$  考虑了微丝纤维网络的

<sup>\*</sup> 清华大学水沙科学与水利水电工程国家重点实验室自主项目(批准号 2008-ZY-6)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: qcsun@tsinghua.edu.cn

四个尺度结构.  $L/\lambda$  越大, 纤维上发生非仿射(亦即发生弯曲)的长度就越大, 纤维越“软”, 反之亦然.

纤维间的连接方式多样, 有时纤维绕交点可自由旋转, 有时纤维绕交点不可自由旋转. 而 Head 等人<sup>[4-6]</sup>仅考虑了微丝纤维可绕交点自由旋转时的半柔性网络的力学性能, 因此有必要考察纤维绕交点不可自由旋转的纤维网络力学性能, 并与纤维绕交点可自由旋转的网络力学性能进行对比. 本文以微丝网络为例, 构建了二维半柔性网络力学模型, 分别考虑了纤维绕交点可自由旋转和不可自由旋转的两种情况, 采用有限元软件 ANSYS 进行求解, 得到了小变形时两类网络的剪切模量. 这些结果对理解颗粒体系力链网络结构的力学性质也有指导意义<sup>[7,8]</sup>.

## 2. 二维半柔性网络

在本工作中,  $N$  条长度  $L$ 、半径  $r$  的纤维在  $W \times W$  的正方形区域内生成, 其位置和方向均随机分布, 如图 1(a) 所示. 纤维间的交点为永久性连接, 亦即纤维沿着交点不可相对滑动, 否则会造成细胞的结构破坏和功能丧失. 两纤维绕交点可自由旋转, 在 ANSYS 中只需耦合两纤维交点处的两个自由度来实现, 即每根纤维上交点处的  $\{X, Y\}$  坐标值相同, 此时纤维绕交点的旋转不消耗能量; 如果两纤维绕交点不能自由旋转, 则需耦合两纤维交点处的三个自

由度来实现, 即每根纤维上交点处的  $\{X, Y, Z\}$  坐标值均相同. 正方形区域的左右边界采用周期性边界条件, 在上边界施加  $0.5\Delta$  的水平位移, 在下边界施加  $-0.5\Delta$  的水平位移, 在网络上产生的简单剪切 (simple shear) 应变为  $\gamma = \Delta/W$ , 此时纤维发生拉伸和弯曲并通过交点相互牵连. 本工作仅考虑准静态和小变形的情况, 取  $\gamma = 0.002$ , 忽略在剪切形变过程中纤维间新形成的交点. 我们采用 ANSYS 有限元软件计算纤维达到力平衡时的形态, 此时整个网络的哈密顿能量必然处于极小值, 与 Head 等人<sup>[5]</sup>通过求解哈密顿能量极小值, 进而得到稳定网络形态的思想一致. 图 1(b) 是纤维绕交点可以自由旋转时微丝网络的剪切形变, 其中单条纤维的杨氏模量  $Y$  等参数的数值取细胞微丝的相应数值,  $Y = 10^9 \text{ N/m}^2$ ,

$W = 5 \mu\text{m}$ ,  $L = 2 \mu\text{m}$ , 泊松比  $\nu = 0.5$ .  $l_b = \sqrt{\frac{\kappa}{\mu}} = \sqrt{\frac{IY}{AY}} \approx 0.5R$ ,  $\kappa$  和  $\mu$  分别为纤维弯曲系数和拉伸系数,  $\kappa = IY$ ,  $\mu = AY$ ,  $I$  是截面的惯性矩,  $A$  是截面积,  $R$  是纤维半径. 通过改变  $R$  得到不同的  $L/\lambda$ .

除交点外, ANSYS 把纤维自动划分成若干点, 从而获得高精度的数值, 然后计算每点达到力平衡时的位置. 从图 1(b) 中可以清晰地看到纤维上各点的弯曲和拉伸情况, 箭头指向达到平衡时的位置, 长短表示位移大小. 注意到, 网络中间区域的纤维发生了旋转.

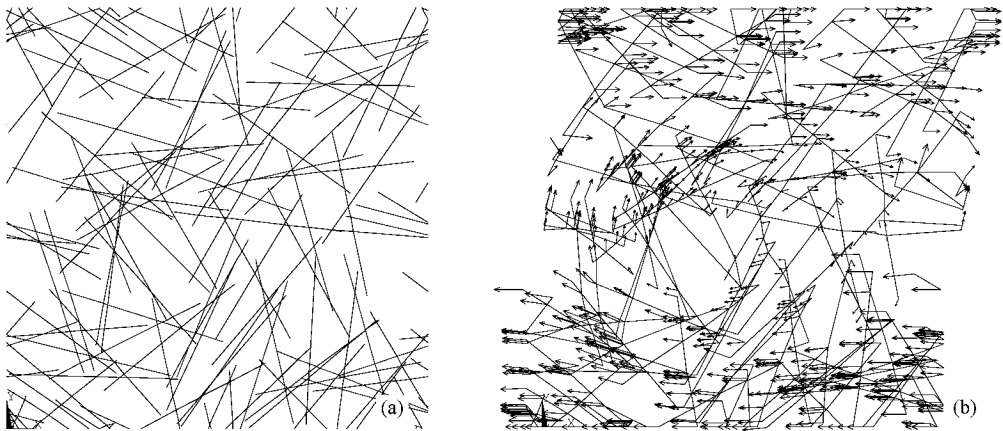


图 1 纤维绕交点可自由旋转时, 二维半柔性网络发生的剪切形变(其中  $\gamma = 0.002$ ,  $L/l_c = 15.0$ ,  $\lambda = 0.483$ ) (a) 网络的初始分布; (b) 纤维上各点的位移

当网络发生  $\gamma$  的剪切形变时, 纤维  $i$  发生弯曲和拉伸(或压缩), 其哈密顿能量为

$$H_i = H_{i,B} + H_{i,S}, \quad (1)$$

其中  $H_{i,B}$  为弯曲能量  $H_{i,B} = \frac{1}{2} \kappa \int ds (\nabla^2 u)^2$ ,  $H_{i,S}$  为拉伸能量  $H_{i,S} = \frac{1}{2} \mu \int ds \left( \frac{dK(s)}{ds} \right)^2$ ;  $u(s)$  是纤维的

横向位移  $u(s)$  是纵向位移,如图 2 所示。

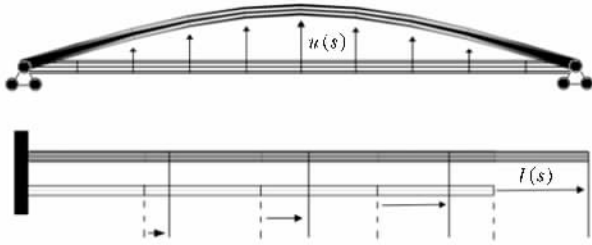


图 2 单条纤维的拉伸变形和弯曲变形示意图

图 3 对应着图 1(b) 变形网络中各纤维的哈密顿能量分布,可以看出能量大小差异较大,其中浅灰

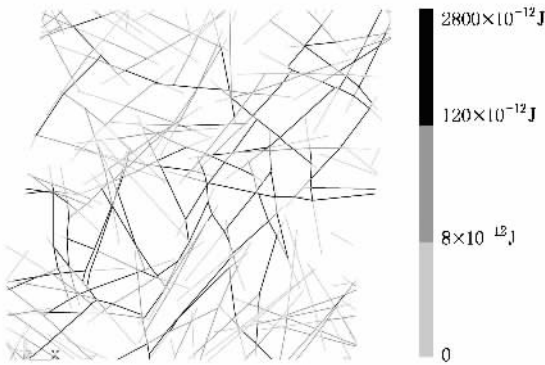


图 3 二维半柔性网络剪切变形时纤维的哈密顿能量分布,其中纤维绕交点可自由旋转(见图 1(b)的变形)

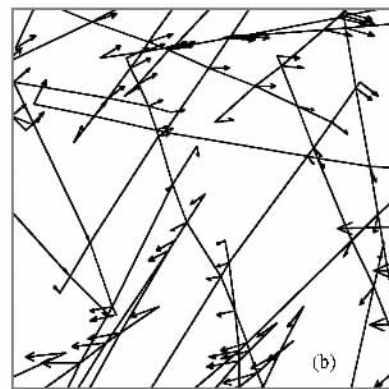
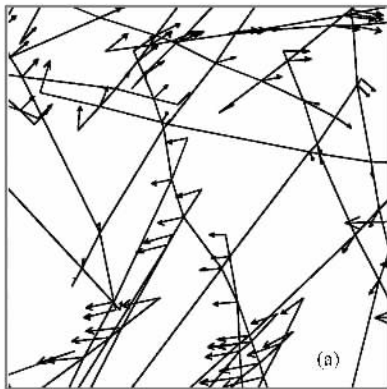


图 4 局部放大的纤维位移情况(其中  $\gamma = 0.002, L/l_c = 15.0, \lambda = 0.483$ ) (a) 纤维绕交点可自由旋转 (b) 纤维绕交点不可自由旋转

Chaudhuri 等人<sup>[3]</sup>的试验检测中显示了微丝半柔性网络中的细微变形,以及对网络整体能量和弹性模量的重要影响,这一点可以从图 5 可以看出。

从图 5 可以看出,对某一  $L/l_c$ , 纤维绕交点可以自由旋转情况下的拉伸能量与总能量之比较大,

色线对应的能量范围为  $[0, 8 \times 10^{-12} \text{ J}]$ ,深灰色线对应的能量范围为  $(8 \times 10^{-12} \text{ J}, 120 \times 10^{-12} \text{ J}]$ ,黑色线对应的能量范围为  $(120 \times 10^{-12} \text{ J}, 2800 \times 10^{-12} \text{ J}]$ 。高哈密顿能量的纤维基本沿着剪切方向分布,主要是因为沿着这一方向发生了较大的拉伸形变,见图 1(b)。

纤维网络体系的哈密顿能量和剪切模量分别为

$$H_T = \sum_{i=1}^N H_i; G = \frac{2H_T}{W^2 \gamma^2}. \quad (2)$$

若纤维只发生拉伸或压缩形变,则网络发生仿射形变(affine),剪切模量的理论解为

$$G_{\text{affine}} = \frac{\pi \mu}{16 L} \left( \frac{L}{l_c} + 2 \frac{l_c}{L} - 3 \right).$$

当纤维同时发生拉伸或压缩和弯曲时,半柔性网络的剪切模量只能通过数值求得。

### 3. 剪切模量的对比

图 4 是图 1(b) 的局部放大,从中可以看出纤维绕交点可自由旋转和不可自由旋转两种情况的细微变形差异。如纤维绕交点可自由旋转,纤维在交点处的旋转不消耗能量,因此纤维更易于发生拉伸或压缩;如纤维绕交点不可自由旋转时,则纤维更易于弯曲。这样,对整体的力学性能必然较大影响。

说明纤维绕交点自由旋转所引起的弯曲形变比不可自由旋转时的要小;随着  $L/l_c$  的增加,两种情况下的拉伸能量占总能量的比例越来越大,这说明在稠密的纤维网络中纤维形变以拉伸为主。

图 6 是不同  $L/l_c$  时,  $G/G_{\text{affine}}$  随  $L/\lambda$  的变化。可

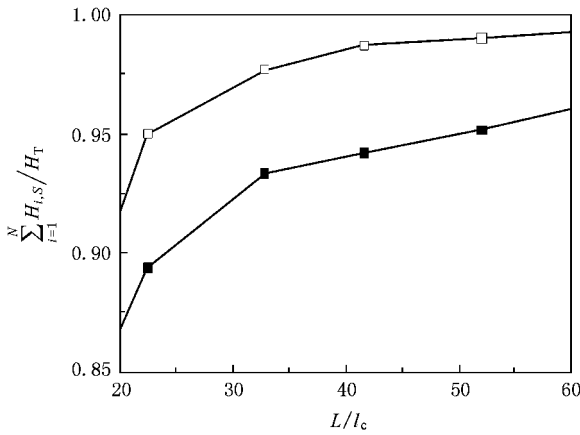


图5 网络体系拉伸(压缩)能量与总哈密顿能量的比值  $\sum_{i=1}^N H_{i,s}/H_T$  随  $L/l_c$  的变化(其中  $R=1.6$ ,  $\square$ 和 $\blacksquare$ 分别表示纤维绕交点可以自由旋转和不可自由旋转的情况)

可以看出,当  $\lambda \in [22, 52]$  时,采用  $L/\lambda$  可以很好的标度  $G/G_{\text{affine}}$ ,对于纤维绕交点可自由旋转和不可自由旋转均适合,其中纤维绕交点可自由旋转与文献[5]得到的结果一致.从理论上说,当  $G/G_{\text{affine}} \equiv 1$  时才为严格的仿射应变,但是从图6中我们发现当  $L/\lambda > 8$  时,  $G/G_{\text{affine}}$  变化缓慢,且已经接近于1.所以在本文中,我们定义当  $L/\lambda > 8$  时,该半柔性网络发生仿射应变,内部纤维以发生拉伸或压缩为主,而当  $L/\lambda < 8$  时发生非仿射应变,内部纤维以发生弯曲形变为主.

内插图中的两曲线是纤维绕交点可自由旋转时,  $L/l_c = 11$  和  $L/l_c = 82$  时  $G/G_{\text{affine}}$ .当  $L/l_c$  较小时,如  $L/l_c = 11$ ,交点间的平均距离  $l_c$  较大,易于弯曲、而不易拉伸和压缩,无法发生仿射形变,所以  $G/G_{\text{affine}}$  最大只能达到0.2.当  $L/l_c$  很大时,如  $L/l_c = 82$  时,交点间距离非常小,不易弯曲而易于拉伸,则网络易于发生仿射形变,  $G/G_{\text{affine}}$  的增加速率较大,因而很快趋近于1.

图7是纤维绕交点不可自由旋转时的网络剪切模量  $G_{\text{fix}}$  与纤维绕交点可自由旋转时的网络剪切模量  $G_{\text{free}}$  之比,发现  $G_{\text{fix}}$  恒大于  $G_{\text{free}}$ ,对于这一点不难理解.对于相同的剪切形变,当纤维绕交点不可自由旋转时,需要额外的能量(或外力)来克服交点的约束,因此  $G_{\text{fix}}$  较大.但是在  $L/\lambda \approx 8$  时,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  达到一极小值,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}} \approx 1.05$ .我们的初步分析如下:当  $L/\lambda < 8$  时,网络处于非仿射区,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  随着  $L/\lambda$  的增加而减小,此时纤维较“软”,单条纤维上大部分长

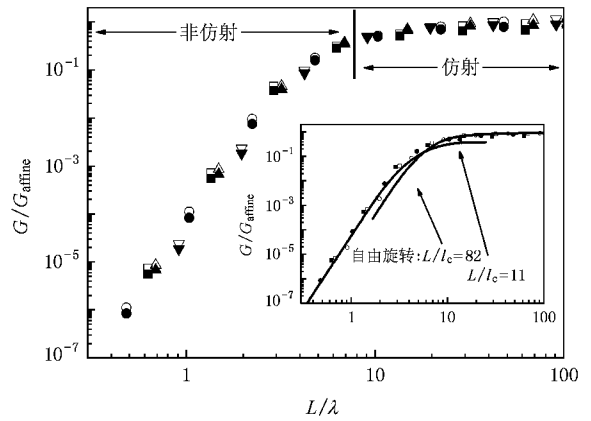


图6 不同  $L/l_c$  时,  $G/G_{\text{affine}}$  随  $L/\lambda$  的变化(内插图中的两曲线是纤维绕交点可自由旋转时,  $L/l_c = 11$  和  $82$  时  $G/G_{\text{affine}}$ .  $\blacksquare$ 和 $\square$ 表示  $L/l_c = 22$ ,  $\bullet$ 和 $\circ$ 表示  $L/l_c = 32$ ,  $\blacktriangle$ 和 $\triangle$ 表示  $L/l_c = 42$ ,  $\blacktriangledown$ 和 $\triangledown$ 表示  $L/l_c = 52$ .实心符号表示纤维绕交点可以自由旋转的情况,空心符号为纤维绕交点不可自由旋转的情况)

度都易于弯曲变形,交点对纤维的变形影响较小,因此同一  $L/l_c$  的  $G_{\text{fix}}$  与  $G_{\text{free}}$  重叠在一起.但是随着  $L/\lambda$  的增加,亦即纤维上可发生弯曲的份额减小,而较易于发生拉伸或压缩.

当  $L/\lambda > 8$  时,网络处于仿射区,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  随着  $L/\lambda$  的增加而增加,此时纤维较“硬”,单条纤维上大部分长度主要发生拉伸或压缩.当  $L/l_c$  较小时,纤维上交点的距离较大,相对于纤维绕交点不可自由旋转的情况,绕交点可自由旋转的纤维具有较大的发生弯曲变形的趋势,因此对于同一  $L/\lambda$ ,  $L/l_c$  越小  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  的增加就越快.但是目前,我们尚无法理解为何在  $L/\lambda \approx 8$  时,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  达到一极小值,这也是我们下一步工作中着重开展的工作之一.

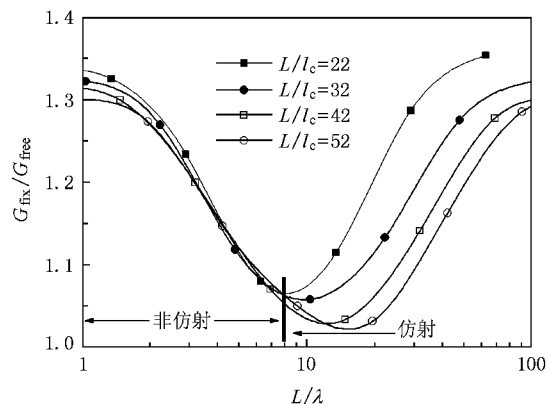


图7 不同  $L/l_c$  时,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  随  $L/\lambda$  的变化

## 4. 结 论

半柔性网络的复杂结构与其力学性能,如剪切模量等,是复杂网络动力学研究的核心命题,它涉及多个尺度结构,因此尺度间的关联就成为分析半柔性网络力学性能的突破点. Head 等人提出的非仿射长度  $\lambda$  的概念,以及基于纤维长度  $L$  与  $\lambda$  的比值对

剪切模量的标度很好的体现了半柔性网络多尺度结构特征. 本文采用 ANSYS 软件得到的纤维绕交点可自由旋转和不可自由旋转两种情况的剪切模量都可以采用  $L/\lambda$  予以很好的标度,同时得到了  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  随  $L/\lambda$  的变化的新规律,发现  $L/\lambda \approx 8$  时,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}}$  达到一极小值,  $G_{\text{fix}}/G_{\text{free}} \approx 1.05$ . 目前我们尚不能对这一规律做理论上的分析.

- [ 1 ] Pollard T D , Borisy G G 2003 *Cell* **112** 453
- [ 2 ] Storm C , Pastore J J , MacKintosh F C , Lubensky T C , Janmey P A 2005 *Nature* **435** 191
- [ 3 ] Chaudhuri O , Parekh S H , Fletcher D A 2007 *Nature* **445** 295
- [ 4 ] Head D A , Levine A J , MacKintosh F C 2003 *Phys. Rev. E* **68** 061907
- [ 5 ] Levine A J , Head D A , MacKintosh F C 2004 *J. Phys. - Condens. Mat.* **16** S2079
- [ 6 ] Head D A , Levine A J , MacKintosh F C 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 108102
- [ 7 ] Sun Q C , Wang G Q , Hu K H 2009 *Prog. Nat. Sci.* **19** 523
- [ 8 ] Sun Q C , Wang G Q , 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4667 ( in China )  
[ 孙其诚、王光谦 2008 物理学报 **57** 4667 ]

## Shear modulus of semi-flexible networks in two dimensions\*

Sun Qi-Cheng<sup>1)†</sup> Zhang Guo-Hua<sup>2)</sup> Wang Bo<sup>2)</sup> Wang Guang-Qian<sup>1)</sup>

1) *State Key Laboratory for Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China*

2) *Department of Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China*

( Received 28 June 2008 ; revised manuscript received 11 December 2008 )

### Abstract

Organized semiflexible networks composed of a large number of cross-linked quasi-linear filaments, such as actin filament semiflexible networks which determines cell stiffness and transmits force during cellular shape changes. The mechanical property of semiflexible networks plays an essential role in numerous physiological processes, and is a major research topic in the domain of complex network dynamics as well. In this work, by using the ANSYS code, we studied the shear modulus of semiflexible networks with both fixed crosslinks and free crosslinks. The scale factor  $L/\lambda$ , where  $L$  is the length of filament and  $\lambda$  the non-affine length, is appropriate for characterizing the shear modulus. The ratio of the two cases was calculated and we found a minimal value at  $L/\lambda \approx 1.05$ .

**Keywords** : semi-flexible network, complex network dynamics, soft matter, multiscale structure

**PACC** : 8120S, 6190

\* Project supported by the Research Fund From the State Key Laboratory of Hydrosience and Engineering, Tsinghua University ( Grant No. 2008-ZY-6 ).

† E-mail : qcsun@tsinghua.edu.cn