

模拟囊泡形变动力学的新方法离散空间变分法^{*}

李剑锋[†] 张红东 邱 枫 杨玉良

(复旦大学高分子科学系, 教育部聚合物分子工程重点实验室, 上海 200433)

(2004 年 11 月 11 日收到, 2004 年 12 月 20 日收到修改稿)

提出了全新的离散空间变分法研究二维囊泡形变动力学过程, 克服了原先解析或数值解囊泡形状方程遇到的困难, 结果表明动力学终态与已有理论方法的计算结果完全一致, 说明这一方法正确而且解法稳定有效, 这一方法可进一步推广至研究三维无对称性的囊泡形状以及膜与膜之间有长程相互作用的情形, 这为囊泡形状的研究提供了新的理论手段.

关键词: 离散空间变分法, 囊泡, 动力学, Helfrich 方程

PACC: 0420F, 0420J, 8710, 8720

1. 引 言

近年来, 高分子自组装行为已经成为理论和实验上都活跃的研究课题^[1-3]. 而膜和囊泡就是由表面活性剂、生物或合成大分子组成的超分子体系. 双亲性分子溶解在水溶液中能自发形成亲水端指向水溶液的双层膜, 继而形成具有封闭性的囊泡, 具有丰富多彩的形态和形状^[4], 引起了人们的广泛兴趣. 自从 Helfrich^[5]和欧阳钟灿在膜和囊泡的形变开创性的工作特别是成功解释红血球的形状问题以后^[6], 大量相关的理论工作陆续涌现^[7-11]. 这些工作在不同程度上都是基于 Helfrich 自由能方程^[5]

$$F = \frac{\kappa}{2} \int (H - c_0)^2 dA + \Delta P \int dA + \lambda \int dA, \quad (1)$$

式中第一项为弯曲弹性能, κ 是膜的弯曲模量, H 是膜的平均曲率, 而 c_0 是膜的自发曲率; 第二项中 ΔP 是囊泡内外的压力差 ($P_{\text{out}} - P_{\text{in}}$); λ 可以认为是作用在膜上的拉伸应变或是膜的表面张力.

囊泡平衡态的形状方程可以由自由能对形变做变分得到^[12]

$$\frac{\delta F}{\delta r} = 0, \quad (2)$$

但通常情况下解这个方程存在一定的困难, 比如以往的方法一般都预先假定了囊泡的对称性^[13-16], 只

能在某些特定情况下得到有限的解析解, 而对方程离散求数值近似解时又会遇到稳定性和收敛性的限制, 它要求离散时间步长和空间步长都要无限小. 为此, 我们设计了全新的离散空间变分法去重新考虑这个问题, 这种方法解除了空间步长大小的约束, 只要时间步长足够小那么这种方法就是数值稳定的. 本文用该方法分别考察了不可自交叉和自交叉的情形, 虽然对于仅由油脂分子构成的双层膜来说膜与膜之间的自交叉似乎是不可想象的, 但也有人认为如果膜上接上高分子后, 其接点也可被视作交叉点^[17], 而且在微分几何中自交叉曲面属于正规子流形 (regular surface), 也是形状方程的一类解, 因此作为对新方法的系统验证, 给出自交叉情形的计算结果也是必要的.

由于模拟三维囊泡的变形太繁杂, 不适合用来描述一种新方法, 所以为了集中体现离散空间变分法的正确性与优越性, 本文只计算了最简单最基本的不考虑膜内部结构的二维囊泡 (即柱形囊泡) 的情形, 而且柱形结构也存在于大量细胞膜中^[18], 比如线粒体内嵴和神经元的轴突. 该方法向三维无对称性的囊泡拓展也没有任何实质性的困难.

2. 二维囊泡的离散空间变分法

在深入讨论具体的数学模型之前, 有必要介绍

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 20474011, 20234010), 国家自然科学基金创新群体基金 (批准号: 20221402) 和教育部全国优秀博士学位论文专项基金资助的课题.

[†] E-mail: 032044001@fudan.edu.cn

一下离散空间变分思想. 这种变分思想可表述成在数值求解一个物理模型的动力学过程时, 首先对该模型的物理空间坐标进行离散, 然后再写出在离散空间坐标下的自由能泛函, 接着对离散的自由能做变分直接得到已经离散好的差分方程, 最后就可以用这些差分方程去模拟具体的物理模型了.

在离散空间坐标之前, 为了便于理解, 我们先回到原来连续的自由能形式. 如图 1 所示, 这里考虑的二维囊泡其实就是高度方向无限延伸的柱形囊泡. 假设它由不可压缩的流体膜组成. 这就意味着不仅仅囊泡的总周长固定不变, 而且它的每个线元长度在形变过程中也是固定的. 实际上, 由于膜上单位面积里的双亲性分子的数目是固定的, 所以囊泡在很大程度上是不可压缩的. 另外当我们只考虑单独的一个囊泡时, 使尺寸发生变化的囊泡的分裂融合现象也可以被忽略. 因此线元不可压缩 (local incompressible) 的假设是合理的.

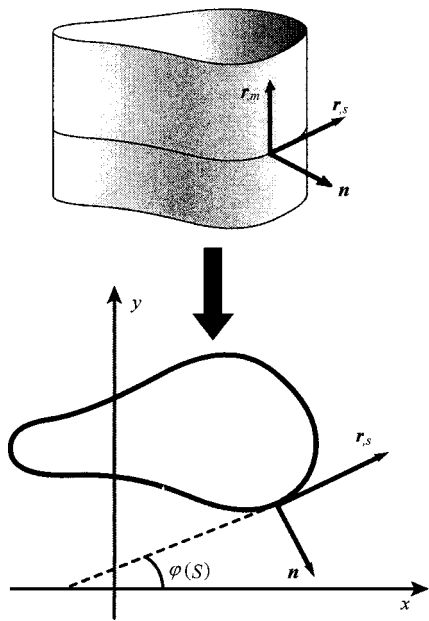


图 1 二维囊泡与柱对称性, s, m 为参数坐标, 切向量 $r_s = \partial r / \partial s$, 它与 x 轴的交角为 $\varphi(s)$, 平行于母线的切向量 $r_m = \partial r / \partial m$, 它被定义成绝对值为 1 的常向量, n 为指向柱外的法向量

由上面的讨论, Helfrich 自由能 (1) 可改写成

$$F = \frac{\kappa}{2} \int H(s) \sqrt{g} ds + \frac{\Delta P}{2} \int r n \sqrt{g} ds + \int \chi(s) \sqrt{g} ds, \quad (3)$$

式中 g 是度规张量行列式的值, $\sqrt{g} ds$ 为线元长度, s 为参数坐标, $r(s)$ 表示膜的形状, $n(s)$ 定义成指向泡外的法向量; $H(s) = g^{-1} n \cdot d^2 r / ds^2$ 其实就是平

面曲线的曲率, $\chi(s)$ 是为了保证其线元不可压缩的拉格朗日乘因子^[19], 其中线元不可压缩的数学表达为 $\partial \sqrt{g} / \partial t = 0$. 因为对于简单的二维封闭曲线有 $\int H(s) \sqrt{g} ds = 2\pi$, 而由线元不可压缩性式 $\int \sqrt{g} ds$ 的值为常数, 因此可推出

$$\begin{aligned} & \frac{\kappa}{2} \int (H - c_0) \sqrt{g} ds \\ &= \int H^2 \sqrt{g} ds - 2c_0 \int H \sqrt{g} ds + c_0^2 \int \sqrt{g} ds \\ &= \int H^2 \sqrt{g} ds + \text{const}, \end{aligned}$$

由此可知自发曲率对自由能的贡献仅为常数, 所以式中忽略了膜的自发曲率^[13].

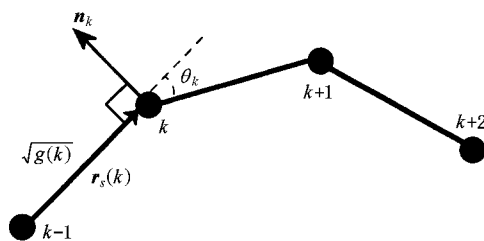


图 2 二维囊泡的离散, 图中点 $(k-1)$ 到点 k 的距离为 $\sqrt{g}(k)$ 垂直于 $n(k)$, 并且与点 k 到点 $(k+1)$ 构成的线段的交角为 $\theta(k)$. 而 $r_s(k) = r(k) - r(k-1)$ 可视为离散的切向量.

下面根据离散空间变分思想离散其坐标空间, 同时写出它的离散形式的自由能. 如图 2, 把构成囊泡的围线分解成 N 个离散的格点, 用 $k = 1, 2, 3, \dots, N$ 来标记. 在这 N 个格点上, 自由能可写成

$$\begin{aligned} DF &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{\kappa}{2} H(k) \right) \frac{\sqrt{g}(k) + \sqrt{g}(k+1)}{2} \\ &+ \frac{\Delta P}{2} \sum_{k=1}^N r(k) n(k) \sqrt{g}(k) \\ &+ \sum_{k=1}^N \chi(k) \sqrt{g}(k), \end{aligned} \quad (4)$$

式中, $\left(\frac{\kappa}{2} H(k) \right) = \kappa H(k) / 2$. 参照图 2 其他相关的量分别为

$$\begin{aligned} r_s(k) &= r(k) - r(k-1), \\ \sqrt{g}(k) &= \sqrt{r_s(k) \cdot r_s(k)}, \\ \tilde{r}_s(k) &= r(k+1) - r(k-1), \\ \tilde{\sqrt{g}}(k) &= \sqrt{\tilde{r}_s(k) \cdot \tilde{r}_s(k)}, \\ n(k) &= \frac{(-r_{sy}(k), r_{sx}(k))}{\sqrt{g}(k)}, \\ \theta_x(k) &= \frac{r_s(k+1) \cdot r_s(k)}{\sqrt{g}(k+1) \sqrt{g}(k)} = \cos \theta(k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\theta_y(k) &= \frac{\mathbf{r}_s(k+1)\mathbf{n}(k)}{\sqrt{g(k+1)}}, \\ \bar{\theta}_x(k) &= \frac{\mathbf{r}_s(k+1)\mathbf{r}_s(k-1)}{\sqrt{g(k+1)}\sqrt{g(k-1)}}, \\ \bar{\theta}_x(k) &= \frac{\mathbf{r}_s(k+1)\mathbf{n}(k-1)}{\sqrt{g(k+1)}}, \\ H(k) &= \frac{2\theta_y(k)}{\sqrt{\tilde{g}(k)}},\end{aligned}\quad (5)$$

式中 $\mathbf{r}(k)$ 为第 k 个格点的空间位置, r_{sx}, r_{sy} 分别为 \mathbf{r}_s 在 x 轴和 y 轴的分量, 曲率 $H(k)$ 为三角形 $(k-1)-(k)-(k+1)$ 的外接圆半径的倒数. 相对于定义 $H(k) = \theta(k)/\sqrt{g(k)}$ 而言, 由 $\theta_y(k) = \sin(\theta(k)) = \theta(k) - \theta(k)^3/6 + O(\theta(k)^5)$ 可知这个定义在 $\theta(k)$ 角度很大时都是合理而准确的.

现在用最简单的耗散模型(相当于最速下降法)可以得到模型的动力学方程

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{r}(k)}{\partial t} &= -L_r \frac{\delta DF}{\delta \mathbf{r}(k)} = -L_r [A_{\perp}(k)\mathbf{n}(k) \\ &+ A_s(k)g^{-1}(k)\mathbf{r}_s(k)]\bar{G}(k),\end{aligned}\quad (6)$$

式中第二个等号隐含了离散空间变分思想的第三步: 对离散的自由能做变分直接得到差分方程. 其中相关的参数的说明如下: $\bar{G}(k) = ((\sqrt{g(k)} + \sqrt{g(k+1)})/2)^{-1}$; L_r 为动力学因子, 和溶液体系的黏度及囊泡本身的性质有关; A_{\perp}, A_s 分别为自由能的变分结果在法向和切向的分量, 它们可表示成

$$\begin{aligned}A_{\perp}(k) &= \sum_{i=\{-1,0,1\}} [2A_{H_i}^{\perp}(k-i)G_A(k-i)] \\ &+ \frac{\Delta P}{2} [\theta_x(k)\sqrt{g(k+1)} + \sqrt{g(k)}] \\ &- \bar{\gamma}(k+1)\theta_y(k), \\ A_s(k) &= \sum_{i=\{-1,0,1\}} [2A_{H_i}^s(k-i)G_A(k-i)] \\ &- \frac{\Delta P}{2}\theta_y(k)\sqrt{g(k+1)}\sqrt{g(k)} \\ &+ \bar{\gamma}(k)\sqrt{g(k)} - \bar{\gamma}(k+1)\theta_x(k)\sqrt{g(k)},\end{aligned}\quad (7)$$

式中 $G_A(k) = (\partial\alpha(k)\partial H(k))\bar{G}(k)^{-1}$, 向量 $\bar{\gamma}(k) = \gamma(k) + (\alpha(k-1) + \alpha(k))/2$, 由线元不可压缩关系式 $\partial\sqrt{g(s)}/\partial t = 0$ 可知 $\bar{\gamma}(k)$ 满足下式: $-\theta_y(k-1)A_{\perp}(k-1)\bar{G}(k-1) + A_s\bar{G}(k)g(k)^{-1/2} - \theta_x(k-1)A_s(k-1)\bar{G}(k)g(k-1)^{-1/2} = 0$. (8) 而(7)式中 $A_{H_i}^{\perp}$ 和 $A_{H_i}^s$ 分别为曲率的变分在法向和切向的分量, 即

$$\delta H(k) = \sum_{j=\{-1,0,1\}} \sum_{i=\{-1,0,1\}} 2A_{H+i}^j \psi^j(k+i), \quad (9)$$

其中 ψ^s, ψ^{\perp} 是无限小的 N 维向量, 它们满足 $\delta \mathbf{r}(k) = \psi^s(k)\mathbf{r}_s(k) + \psi^{\perp}(k)\mathbf{n}(k)$. $A_{H_i}^{\perp}$ 和 $A_{H_i}^s$ 分列如下:

$$\begin{aligned}A_{H_i}^{\perp} &= \frac{\theta_x(k)}{\sqrt{g(k+1)}\sqrt{\tilde{g}(k)}} \\ &- H(k) \frac{\tilde{\mathbf{r}}_s(k)\mathbf{n}(k+1)}{\tilde{g}(k)}, \\ A_{H_0}^{\perp} &= \frac{\theta_y^2(k) - 1 - \frac{\sqrt{g(k+1)}}{\sqrt{g(k)}}\theta_x(x)}{\sqrt{g(k+1)}\sqrt{\tilde{g}(k)}}, \\ A_{H_{-1}}^{\perp} &= \frac{\theta_y(k-1)\theta_y(k) + \bar{\theta}_x(x)}{\sqrt{g(k)}\sqrt{\tilde{g}(k)}} \\ &+ H(k) \frac{\tilde{\mathbf{r}}_s(k)\mathbf{n}(k+1)}{\tilde{g}(k)}, \\ A_{H_i}^s &= -H(k) \frac{\tilde{\mathbf{r}}_s(k)\mathbf{r}_s(k+1)}{\tilde{g}(k)}, \\ A_{H_0}^s &= \frac{\theta_y(k)\theta_x(k)\sqrt{g(k)}}{\sqrt{g(k+1)}\tilde{g}(k)}, \\ A_{H_{-1}}^s &= \frac{[\theta_x(k-1)\theta_y(k) - \bar{\theta}_y(x)]\sqrt{g(k-1)}}{\sqrt{g(k)}} \\ &\frac{\sqrt{\tilde{g}(k)}}{\tilde{g}(k)} \\ &+ H(k) \frac{\tilde{\mathbf{r}}_s(k)\mathbf{r}_s(k-1)}{\tilde{g}(k)},\end{aligned}\quad (10)$$

式中陌生的变量请参照(5)式.

结合(6)(7)(8)和(10)式就可以模拟二维囊泡动力学过程了.

3. 结果与讨论

在下面的模拟中, 参数的设置分别为 $\sqrt{g} = 0.01$, $\Delta s = 1.0$, $N = 100$, $\Delta t = 0.005$, $\kappa = 1.0$. 囊泡的初态皆为圆, 不过有偏离圆周的随机小扰动.

为方便比较, 先给出用 Kawakatsu^[13]的方法对膜的自由能取极小导出的方程及其得出的一般性结论. 上述方法一般先假设囊泡具有 n 重对称轴, 而对于 n 重对称轴的囊泡其形状方程可写成

$$\begin{aligned}\kappa \ddot{\alpha}(s) &= \Delta P [x(s)\cos\varphi(s) + (y(s) \\ &- y(\frac{L}{2n})/2 - x(\frac{L}{2n})\alpha/2)\sin\varphi(s)]\end{aligned}$$

$$+ \frac{\Delta P \kappa \left(\frac{L}{2n}\right)}{2} [\cos \varphi(s) - \alpha \sin \varphi(s)], \quad (11)$$

式中 L 为二维囊泡的总周长在这里设为 1, 如图 1 所示 $\varphi(s)$ 为切向量与 x 轴的交角, $\varphi(L/(2n)) = \pi/n$, 当 $n=1$ 镜像对称时 $\alpha=0$, 当 $n>1$ 时 $\alpha = \cos(\pi/n)$.

由 (11) 式发现当 $\Delta P/\kappa < P_c(782)$ 时圆形最稳定 (此时泡外压力大), $\Delta P/\kappa = P_c$ 时圆形和一重轴对称 (镜像对称) 是简并态, 当 $\Delta P/\kappa = P_c$ 时镜像对称是最稳定的, 而当压力差大于 $P_j(1300)$ 时镜像对称仍是最稳定的, 不过此时开始出现膜与膜的交叉现象. 我们对交叉与不可交叉情形分别作了讨论.

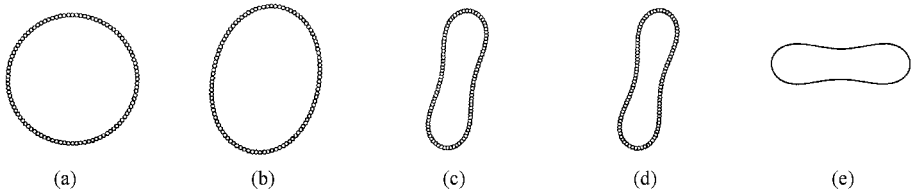


图 3 $\Delta P/\kappa = 1000$, (a)–(d) 分别为 $t = 500, 5000, 7500$ 和 25000 时的形态图 (e) 为 (11) 式的计算结果

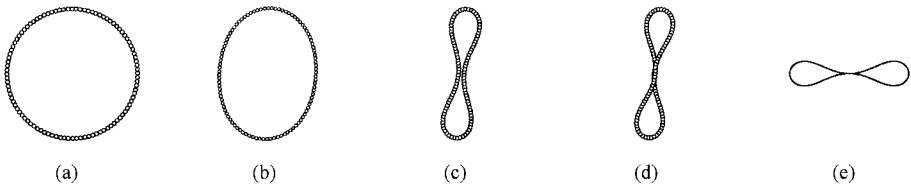


图 4 $\Delta P/\kappa = 1300$ (a)–(d) 分别为 $t = 500, 2500, 3500$ 和 25000 时的形态图 (e) 为 (11) 式的计算结果

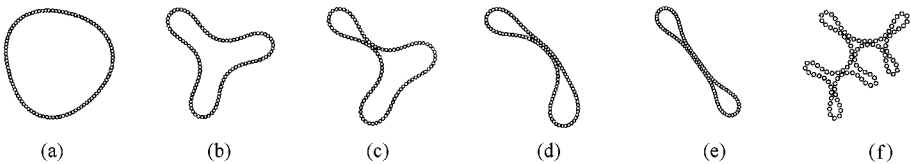


图 5 (a)–(e) 在 $\Delta P/\kappa = 4000$, 且分别为 $t = 250, 500, 850, 1100$ 和 5000 时的形态图 (f) 为 $\Delta P = 10^5$ 时的最终形态图. 在这里膜与膜不能发生自交叉

当压力差大于 P_j 时, 由 (11) 式计算出来的膜就不可避免有自交叉的现象, 而在本文的算法中只要在总的离散自由能中添加长程相互作用能项

$$DF_l = \sum_k \sum_i U(\mathbf{r}(k), \mathbf{r}(i)) \sqrt{g(k)} \sqrt{g(i)} \quad (12)$$

就可得以避免. 式中 $U(\mathbf{r}(k), \mathbf{r}(i))$ 表示第 k 个和

3.1. 不可自交叉的膜

当压力差小于 P_c 时, 初态为圆的二维囊泡不发生变形, 但当压力差逐渐增加直到超过 P_c 时, 情况就不一样了, 比如像图 3 所示当压力差等于 $1000 (< P_j)$ 时, 囊泡最后被压瘪成了双凹碟形, 有点类似于红血球, 不过它只有一重对称轴, 这在压力差升到 4000κ 时的平衡态结果会看得更清楚一点, 此时从其平衡态结果很容易看出它是左右对称但上下并不对称的镜像对称的形状. 加大泡外压力使压力差升至 $P_j(1300)$ 时, 基于离散空间变分法的动力学的结果也出现临界交叠现象 (如图 4 所示).

第 i 个离散格点间的相互作用能, 一般可采用硬势阱函数.

通过在自由能中加入长程相互作用项我们模拟了压力差 ($\Delta P/\kappa$) 升至 4000 的情形, 观察到细杆哑铃状的囊泡 (如图 5 所示); 而当泡外部压力远远大于泡内压力时, 囊泡被挤压成了树枝状, 这和蒙特卡罗方法的模拟结果总体上是一致的^[20].

3.2. 可自交叉的膜

虽然对于自交叉的膜是否有存在的可能性还存争议,但为了验证本文方法的正确性,我们仍然给出与现有理论相对应的计算结果.为了与(11)式的计算结果比较,我们重新把压力差设为4000,但去掉长程相互作用项,此时发现长程相互作用项对膜发生自交叉之前的形态演化没有影响,只对避免膜产生交叉起作用(如图6、图7所示).而且此时离散空间变分法的最终结果和(11)式的计算结果是完全符

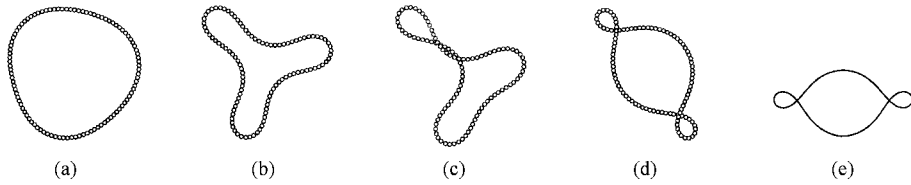


图6 $\Delta P/\kappa = 4000$ (a)–(d)分别为 $t = 250, 500, 850$ 和 5000 时的形态图 (e)为(11)式的计算结果

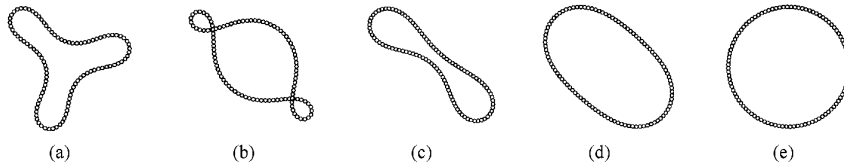


图7 当 $t = 0$ 到 5000 时 $\Delta P/\kappa = 4000$, $t > 5000$ 时 $\Delta P/\kappa = 700 (< P_c)$ (a)–(e)分别为 $t = 500, 5000, 5500, 7500$ 和 50000 时的形态图

根据上面的计算模拟,两种方法模拟结果的总体行为是一致的,这就说明了离散空间变分法在模拟二维囊泡动力学时是正确的.而且,通过比较不同压力下平衡态计算出的囊泡的形状和离散空间变分法得出的最终态的囊泡的形状,可以发现它们在细节部分也是相当一致的,也就是说离散空间变分法还是一种相当精确的动力学模拟方法.同时,离散空间变分法还可以考虑膜与膜之间的长程相互作用来避免现有理论所难以克服的膜自交叉行为.

同时,相比于蒙特卡罗方法^[21,22],这种方法除了保留了与之相媲美的稳定性之外还具有它所没有的光滑性,比如当 $\Delta P/\kappa < 4000$ 时构成囊泡的格点数 N 可减小到34,而且点数更少时也不是因为程序崩溃而是因为模拟结果失真及模拟用时短的特点,计算一个 $\Delta P/\kappa = 700$ 的结果普通的PC只要10min左右.而相比于分子动力学方法它也具有相类似的

优点.

为了验证囊泡的最终形状不受初态的影响,我们设想设置一个任意形状的囊泡来检验它是否能回复到一定参数条件下所预言的平衡态形状.先把压力差升至4000,经过一段时间后得到一个特殊形状的囊泡,再把压力差降为700 ($< P_c$),然后考察它的演化,看它能否还原;不出所料,从图3中可看出最终囊泡被还原成了圆.这样我们也重新验证了压力差小于 P_c 时,其稳定的形状是圆这个由(11)式计算得出的结论.

优点.

4. 结 论

本文提出了一种新的动力学模拟方法:离散空间变分法.这种方法采用了先离散再变分的思想,成功地对二维囊泡动力学过程进行了模拟,并且和已有的理论方法的计算结果进行了比较,发现它们精确地一致,证明了离散空间变分法的正确性.同时从模拟结果也可以发现这种模拟方法具有稳定、光滑和模拟速度快的特点,更重要的是它能考虑膜与膜之间的长程相互作用.离散空间变分法在一定程度上解决了 Helfrich 自由能方程的数值计算问题,这种方法并不需要预先假设囊泡的对称性,这就意味着直接推广到更一般的三维囊泡和多组分的囊泡^[23]也是可行的.

- [1] Langevin D , Meunier J and Boccaro N 1987 *Physics of Amphiphilic Layers* (Berlin : Springer).
- [2] Fludisj Safian S A and Clark N 1987 *Physics of Complex and Supermolecular* (New York : Wiley)
- [3] Rong L X , Wei L H , Dong B Z , Wang J , Li F M and Li Z C 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1773 (in Chinese) 荣利霞、魏柳荷、董宝中、王俊、李福绵、李子臣 2002 *物理学报* **51** 1773]
- [4] Discher D E and Eisenberg A 2002 *Science* **297** 967
- [5] Helfrich W 1973 *Z. Naturforsch.* **28c** 693
- [6] Ou-Yang Z C and Helfrich W 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2486
- [7] Deuling H J and Helfrich W 1976 *Biophys. J.* **16** 861
- [8] Helfrich W 1978 *Z. Naturforsch.* **33a** 305
- [9] Ostrowsky N and Peyraud J 1982 *J. Chem. Phys.* **77** 2081
- [10] Leibler S and Maggs A 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 406
- [11] Seifert U 1991 *Phys. Rev. A* **43** 6803
- [12] Ou-Yang Z C , Li J X and Xu Y Z 1999 *Geometric Methods in the Elastic Theory of Membranes in Liquid Crystal Phases* (Singapore : World Scientific)
- [13] Kawakatsu T , Andelman D , Kawasaki K and Taniguchi T 1993 *J. Phys. II France* **3** 971
- [14] Taniguchi T , Kawasaki K , Andelman D and Kawakatsu T 1994 *J. Phys. II France* **4** 1333
- [15] Seifert U , Bemd K and Lipowsky R 1991 *Phys. Rev. A* **44** 1182
- [16] Zhang S G and Ou-Yang Z C 1996 *Phys. Rev. E* **53** 4206
- [17] Zhang S G 1997 *Acta Phys. Sin.* (Overseas Ed.) **6** 641
- [18] Fawcett D W 1981 *The Cell* (Philadelphia : W B Saunders Corp)
- [19] Taniguchi T 1996 *Phys. Rev Lett.* **76** 4444
- [20] Gompper G and Kroll D M 1995 *Phys. Rev. E* **51** 514
- [21] Morikawa R and Saito Y 1995 *J. Phys. Soc. Jpn.* **64** 3562
- [22] Ye J S and Hu X J 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1108 (in Chinese) [叶健松、胡晓君 2002 *物理学报* **51** 1108]
- [23] Tobias B , Samuel T H and Watt W W 2003 *Nature* **425** 821

A New approach to study the dynamics of the deformation of vesicles discrete-space variational method^{*}

Li Jian-Feng Zhang Hong-Dong Qiu Feng Yang Yu-Liang

(Department of Macromolecular Science , Fudan University , Key Laboratory of Molecular Engineering of Polymers , Ministry of Education , Shanghai 200433 , China)

(Received 11 November 2004 ; revised manuscript received 20 December 2004)

Abstract

A new approach , namely discrete-space variational method (DSVM) is developed to study the dynamics of deformation of a two-dimensional vesicle . It can overcome the difficulties in the previously analytical or numerical methods which were designed to solve the shape-equation of the vesicle . Also it is a correct and stable method because its computational results accord well with those gained by the other methods . Furthermore , it can be used to describe the three-dimensional vesicle without any symmetry , and takes into account the long-range interaction for avoiding the intersection of membranes .

Keywords : discrete-space variational method , vesicle , dynamics , Helfrich function

PACC : 0420F , 0420J , 8710 , 8720

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grants Nos. 20474011 and 20234010) and a Grant for the Excellent Research Group (No. 20221402) and the National Special Fund for Excellent Ph. D. Dissertation of China.