小约化体积膜泡形状的研究 *

康文斌[1] 张劭光[2] 张鹏程[1] 王建国[1] 罗 红[1] 吴 静[1]

(1 湖北医药学院卫生管理与卫生事业发展研究中心 湖北 十堰 442000；
2 陕西师范大学物理学与信息技术学院 陕西 西安 710062)

摘要 目的：研究 ADE 模型下小约化体积膜泡的形状。方法：应用数值计算方法中的打靶法，运用 Mathematica 7.0 软件进行编程。结果：在 ADE 模型下，计算得到了一系列小约化体积的膜泡的形状，解决了已往小约化体积区域内不存在稳定膜泡的问题。结论：研究表明，在 ADE 模型下通过适当的边界条件把黏附双层区域的接触势能考虑进去，数值计算结果与实验上的非常相似。

关键词：膜泡；ADE 模型；小约化体积；数值解法

中图分类号：Q73 文献标识码：A 文章编号：1673-6273(2012)02-348-03

Research of the Small Reduced Volume Vesicles Shapes*

KANG Wen-bin[1], ZHANG Shao-guang[2], ZHANG Peng-cheng[1], WANG Jian-guo[1], LUO Hong[1], WU Jing[1]

(1 Research Centre of Health Management and Health Development, Hubei University of Medicine, Shiyan, Hubei, 442000, China;
2 College of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an, Shaanxi, 710062, China)

ABSTRACT Objective: To investigate the small reduced volume vesicles shapes based on the Area Difference Elasticity Model (ADE). Methods: The shooting method and Mathematica 7.0 software were used to calculate the shapes of vesicles. Results: We calculated series small reduced volume vesicles based on the ADE model and solved the problem which was vesicles will be self-intersected at small reduced volume. Conclusion: Studies have shown that regarding small reduced vesicle is consisted of two parts which are connected by proper boundary conditions based on the ADE model and our computation results are much similar to experimetal results.

Key words: Vesicle; ADE Model; Small reduced volume; Numerical method

Chinese Library Classification: Q73 Document code: A

Article ID:1673-6273(2012)02-348-03

前言

生物膜的研究现在已成为生物物理学的热点课题[1,2]。尤其是关于膜泡形状的研究是目前国内外的一大热点问题。虽然膜泡的形状问题的研究已经取得了很大的进展，但是过去的研究表明，在小的约化体积的情况下，扁椭球形(oblate)和胃形膜泡(stomatocyte)将自交[3]，因而在相图上该区域不存在稳定的扁椭球形和胃形膜泡。在实验上近来人们观察到在小约化体积下也存在稳定的扁椭球形和胃形膜泡(见图 1)，只不过在膜泡的中央区域膜泡并没有自交，而是黏附在一起。因而我们面临的问题是，已往的 W.Helfrich 弹性理论在该情况下是否适用，如何扩展以解释新的实验事实?

1 理论模型

1.1 面积差弹性模型

目前，与实际情况最接近的物理模型为面积差弹性模型(Area-Difference-Elasticity Model)[5]。该模型的特点在于其认为膜泡双层之间的面积差 $\triangle A$ 不必保持为恒量，而可以偏离某一初始值 $\triangle A_0$，该偏离将贡献一弹性能：$\frac{1}{2}k_r\frac{\pi}{Ah^2}(\triangle A-\triangle A_0)^2$。

则膜泡的总能量为局部弹性能 W_b 与非局部弹性能 W_r 的总和：

$$W_{el}=W_b+W_r$$
$$=\frac{k_c}{2}\int(C_1+C_2-C_0)^2dA+\frac{k_r}{2Ah^2}(\triangle A-\triangle A_0)^2$$

其中 k_r 为非局部弯曲弹性模量，A 是膜的面积，h 是双层膜间的厚度。根据能量最低原理，处于平衡状态的生物膜泡的形状能量必然处于最小值，所以能量泛函的一阶变分为零。我国物理学家欧阳钟灿等导出了膜泡的普适方程[6]，并给出了双凹盘形解[6,12]、球形解等解析解。

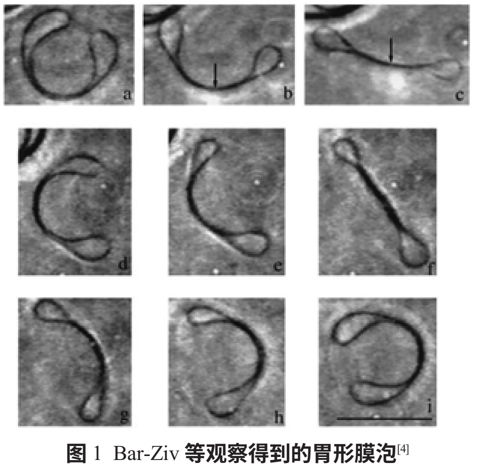

图 1 Bar-Ziv 等观察得到的胃形膜泡[4]

Fig.1 Some stomatocyte vesicles were observed by Bar-Ziv

* 基金项目：湖北省高校人文社会科学重点研究基地资助

作者简介：康文斌，(1985-)，男，助教，主要从事软物质理论与理论生物物理学方面的研究 E-mail:kwb_010@163.com

(收稿日期：2011-07-05 接受日期：2011-07-30)

1.2 ADE 模型中膜泡的参量化以及欧拉方程组

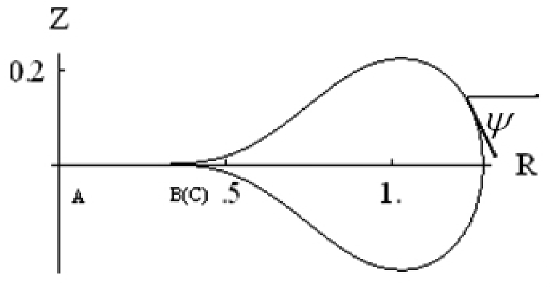

图 2 小约化体积膜泡形状的参量化

Fig.2 Parametrization of small reduced volume vesicle shape

对于旋转对称性膜泡可以用轮廓线的弧长 S 为自变量得到欧拉 - 拉格朗日方程组。为此建立如图 2 所示的坐标系,Z 轴表示旋转对称轴,水平轴 R 轴与 Z 轴垂直。角度 ψ 表示曲面轮廓线上的一点的切线与 R 轴正向的夹角,S 表示沿旋转曲面轮廓线的弧长。曲面上有三点我们需要说明,A 点代表起始点,位于膜泡的北极点;B、C 点代表两层的双层的边缘的点,但是它们的弧长不同。AB 区域膜泡是黏附的(接触)。

加上体积约束与面积约束时,膜泡能量的泛函为:

$$G=W_b+W_r-P\oint dv+\oint dA$$

$$=\frac{k_c}{2}\oint(C_1+C_1-C_0)^2+\frac{k_r}{2Ah^2}(\triangle\text{-}A\text{-}\triangle A_0)^2-\triangle P\oint dV+\lambda\oint dA$$

考虑到曲面的主曲率为 $C_1=\dot\psi$ 和 $C_2=\frac{\sin\psi}{r}$ 以及面积元 $dA=2\pi r ds$ 体积元 $dV=\pi r^2\sin\psi ds$。

为了方便数值计算,将能量泛函表示成无量纲的形式[7]:$g=w_b+w_r-M(v-v_0)+L(a-1)$ 这里拉格朗日未定数乘子为 $M=\frac{R_0^3\triangle P}{6kc}$、$L=\frac{\lambda R_0^2}{2kc}$。(这里约化体积为 $v=\frac{3V}{4\pi R_0^3}$ 和约化面积为 $\alpha=A/4\pi R_0^2=1$ 是固定的)。

本文把膜泡考虑为由两部分组成来计算,第一部分是黏附(接触)部分,第二部分是通常所说的自由部分。对能量泛函做变分 $\delta g=\delta\int_A^B l_1 ds+\delta\int_B^C l_2 ds$,这里把对两部分(i=1 或 2)的拉格朗日函数写为:

$$l_i=\frac{(3-i)}{8}\left(\frac{\sin\psi}{r}+\dot\psi-C_0\right)^2+(i-1)N\frac{\sin\psi+r\dot\psi}{4}-(i-1)M\frac{3r^2\sin\psi}{4}+(3-i)L\frac{r}{2}+\Gamma(\dot r-\cos\psi)+Fi(\dot z+\sin\psi)$$

运用标准的变分法得到确定膜泡轮廓的两个欧拉 - 拉格朗日微分方程组[11](即膜泡总的形状方程):

$$\begin{cases}\dot\psi=U\\ \dot U=-\frac{U}{r}\cos\psi+\frac{\cos\psi\sin\psi}{r^2}+\frac{2\Gamma\sin\psi}{r}+\frac{2F_1\cos\psi}{r}\\ \dot\Gamma=\frac{(U-C0)2}{4}-\frac{\sin 2\psi}{4r2}+L\\ \dot r=\cos\psi\\ \dot z=-\sin\psi\end{cases}$$

(i=1 是膜泡黏附部分形状方程)

$$\begin{cases}\dot\psi=U\\ \dot U=-\frac{U}{r}\cos\psi+\frac{\cos\psi\sin\psi}{r^2}+\frac{4\Gamma\sin\psi}{r}+\frac{4F_1\cos\psi}{r}-3Mr\sin\psi\\ \dot\Gamma=\frac{(U-C_0)^2}{8}-\frac{\sin 2\psi}{8r^2}+\frac{L}{2}-\frac{3Mr\sin\psi}{2}+\frac{N}{4}U\\ \dot r=\cos\psi\\ \dot z=-\sin\psi\end{cases}$$

(i=2 是膜泡自由部分形状方程)

总的边界条件写为:

$$\begin{cases}\Psi_A=0,r_A=0\\ \Psi_B+=\Psi_{B-},U_{B+}=U_{B-}\\ r_B=r_C,z_B=z_C\\ \Psi_C=\Psi_B+\pi,U_{B-}=U_{B+}=-U_{C-},\Gamma_{B-}=\Gamma_{B+}-\Gamma_{C-}\end{cases}$$

1.3 方法

打靶法是求解常微分方程的边值问题常用的一种数值解法[8,10,11]。用该方法解上述欧拉方程组的边值问题,可以得到可能稳定的膜泡形状的解,至于稳定性问题还得通过膜泡能量的二阶变分来判断。

2 结果

下面我们将分别列出数值计算得到膜泡的形状和相对应的参数[11]:

2.1 自发曲率 $C_0=0$、参数 $F_1=F_2=0$ 时仅仅由膜泡自由部分形状方程得到的结果

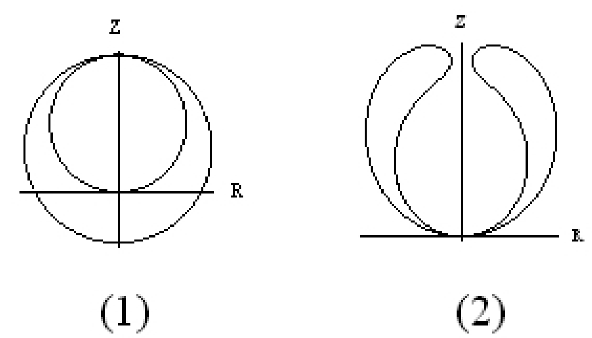

图 3 约化体积 的一些形状

Fig.3 Some vesicle shapes for reduced volume

2.2 自发曲率 $C_0=0$、参数 $F_1=F_2=0$ 时由膜泡两部分形状方程得到的结果

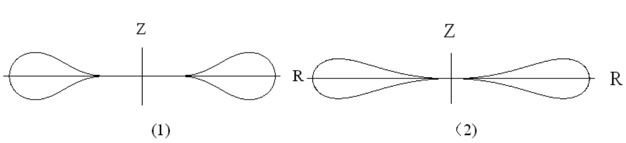

图 4 约化体积 由两个方程组得到的一些形状

Fig.4 Some vesicle shapes for reduced volume by the two equations

表 1 约化体积 一些形状的参数

Tab.1 Paramaters of some vesicle shapes for reduced volume

序号	U_0	M	L	N	S
(1)	-1.69984642	0.31733692	0.10474200	0.45321183	4.3841
(2)	-1.75785524	-0.28765818	-0.09845793	-0.30833301	4.3207

表 2 F_1=0 和 U_0=0.000001 约化体积 v=0.325 的一些形状的参数

Tab.2 Paramaters of some vesicle shapes for reduced volume 0.325 by the two equations when F_1=0 and U_0=0.000001

序号	M	L	N	F_2	S_{bn}	S_{cn}
(1)	-6.09411955	-5.16094945	4.21302241	-1.85219865	0.299916	2.59117
(2)	-4.50434279	7.91743409	-19.01829525	-0.04664214	0.00088411	2.79519

表 3 约化体积 v=0.35 的两个方程组得到的一些形状的参数

Tab.3 Paramaters of some vesicle shapes for reduced volume v=0.35 by the two equations

序号	U_0	M	L	N	F_2	S_{bn}	S_{cn}
(1)	0.03647278	-4.90412962	-2.06018381	-0.98439579	-0.870815	0.186017	2.69988
(2)	1.59766235	-1.42634273	-0.51755865	-1.02332362	-0.231404	0.201191	3.77752
(3)	1.58575996	-2.51057270	-0.93166901	-1.16451412	-0.493633	0.256997	3.29638
(4)	1.48899182	-0.43158329	-0.16008844	-0.43607697	-0.0185614	0.00007396	4.26795
(5)	1.59927039	-2.36785835	-0.87395600	-1.15961031	-0.46057	0.256784	3.34881

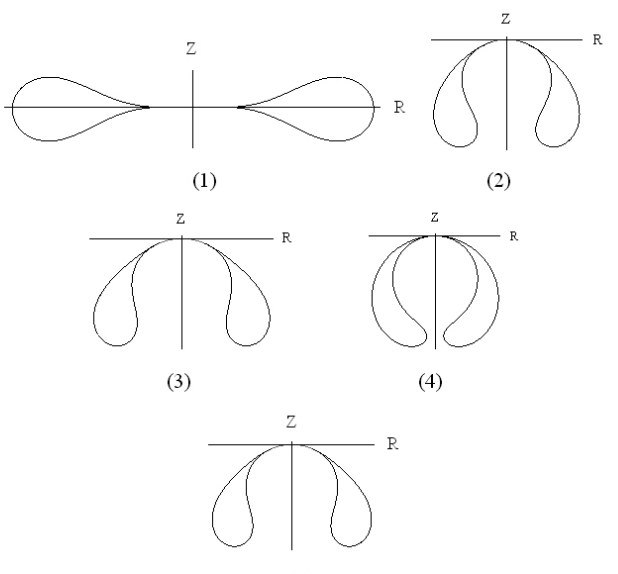

图 5 约化体积 的两个方程组得到的一些形状

Fig.5 Some vesicle shapes for reduced volume by the two equations

3 结论

本文考虑到膜泡中央部分黏附在一起的情况，将膜泡看成由两部分组成来数值求解，也就是说分别计算膜泡黏附（接触）部分和自由部分，然后通过一定的数学约束条件来衔接组成膜泡的整体形状。从而解决了以前研究认为在小约化体积区域内膜泡出现自交的情况问题[3]，即就是说我们研究发现在相图中这一区域依然是存在稳定的膜泡的，只不过是膜泡的中央区域是黏附(接触)在一起的。我们继 J. Majhenc[7]等人的研究基础上找到了其他约化体积情况下的一些膜泡。研究发现数值计算的结果与 J. Majhenc 等人在实验上和理论上得到的结果非常吻合[7]。进一步表明了这样的处理方法是可靠的，关于小约化体积膜泡形状问题的相图尚需做进一步的探讨。

参考文献(References)

[1] Yang Fu-yu. Biomembrane[M]. Science Press,2005:1-451

[2] Wang Ying. Study on the new opening up vesicles under the spontanous-curvature model [D] . Thesis for master degree, Shaanxi Normal University, 2009:1-79

[3] Seifert U, Berndl K, Lipowsky R.Shape transformation of vesicles: Phase diagram for spontanous-curvature and bilayer-coupling models [J]. Phys.Rev.A,1991,44(22):1182-1202

[4] Bar-Ziv R,Moses E,Nelson P. Dynamic excitations in Membranes induced by optical tweezers [J].Biophys.J, 1998, 75:294-320

[5] Miao L, Seifert U, Wortis M, et al. Budding transitions of Fluid bilayer vesicles:The effect of area-difference elasticity [J].Phys. Rev. E, 1994,49:5389-5407

[6] Ou-Yang Zhong Can,W. Helfrich.Bending energy of vesicle membranes:General expressions for the first,second,and third varition of the shape energy and applications to sphere and cylinders [J].Phys. Rev.E,1989,39:5280-5288

[7] Majhenc J, Bozic B, Svetina S, et al. Phospholipid membrane bending as assessed by the shape sequence of giant oblate phospholipid vesicles [J]. Biochimica et Biophysica Acta, 2004, 1664(2):257-266

[8] Wang Ying, Zhang Shao-guang, Hu Kai-fu,et al. Research on Vesicles by Numerical Method [J]. Progress in Modern Biomedicine, 2009, 9 (2): 260-262

[9] Frank Jü licher ,Udo Seifert. Shape equations for axisymmetric vesicles: A clarification [J] .Phys. Rev. E,1994,49:4728 - 4731

[10] Kang Wen Bin,Zhang Shao Guang,et al. Research of the biomembrane vesicle shapes with the Mathematica [J]. Journal Applied Optics, 2009, 30(Sup): 95-98

[11] Kang Wen Bin. The research of shapes of the small reduced volume and adhering vesicle [D]. Thesis for master degree, Shaanxi Normal University, 2011:1-87

[12] LI Shu-Ling, Zhang Shao-Guang. An analytical solution for opening-up vesicle based on the circular bicave shape [J]. Acta Physica Sinica, 2010,59(8):5203-5208