细胞模型及参数匹配

组会

周吕文

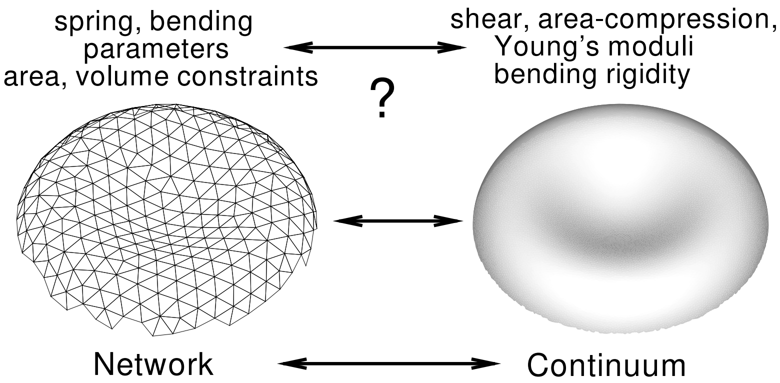
中科院力学研究所

2013 年 8 月 30 日

1. 红细胞网状模型
2. 物理参数的无量纲化

Outline

网状模型和连续模型


spring, bending
parameters
area, volume constraints
?
shear, area-compression,
Young's moduli
bending rigidity
Network
Continuum

网状模型和连续模型

笛卡尔坐标系下的节点 $\{\mathbf{x}_i\}, i \in 1 \cdots N_v$ 构成二维三角形网络. 节点间由 N_s 个弹簧构成了 N_t 个三角形. 系统的势能

$$V(\{\mathbf{X}_i\}) = V_{\text{in-plane}} + V_{\text{bending}} + V_{\text{area}} + V_{\text{volume}}$$

每个节点的受力

$$\mathbf{f}_i = -\frac{\partial V(\{\mathbf{x}_i\})}{\partial \mathbf{x}_i}, \ i \in 1 \cdots N_v$$

面能 $V_{\text{in-plane}}$

膜上弹性能

$$V_{\text{in-plane}} = \sum_{j\in 1\cdots N_s} U_s(l_j) + \sum_{k\in 1\cdots N_t} \frac{C_q}{A_k^q}$$

其中 U_s 可以是 U_{WLC}, U_{FENE}, $\cdots$

$$U_{WLC} = \frac{K_B T l_m}{4p} \frac{3x^2 - 2x^3}{1-x}, \quad U_{FENE} = -\frac{k_s}{2} l_m^2 \log[1 - x^2]$$

其中 $x = l/l_m \in (0,1)$, 由平衡时的势能最小可推得

$$C_q^{WLC} = \frac{\sqrt{3} A_0^{q+1} k_B T (4x_0^2 - 9x_0 + 6)}{4pq l_m (1-x_0)^2}, \quad C_q^{FENE} = \frac{\sqrt{3} A_0^{q+1} k_s}{q(1-x_0^2)}$$

弯曲能 V_{bending}

由 Helfrich 模型得到弹性模弯曲的能量

$$E_c = 8\pi k_c (1 - R/R_0)^2 + 4\pi k_g$$

网状模型中膜弯曲的势能

$$V_{\mathrm{bending}} = \sum_{j \in 1 \cdots N_s} k_b [1 - \cos(\theta_j - \theta_0)] = \frac{4\pi k_b}{\sqrt{3}} \left(1 - \frac{R}{R_0}\right)^2$$

由 $E_c = V_{\mathrm{bending}}$，且 $k_g = -4k_c/3$ 得

$$k_b = \frac{2}{\sqrt{3}} k_c$$

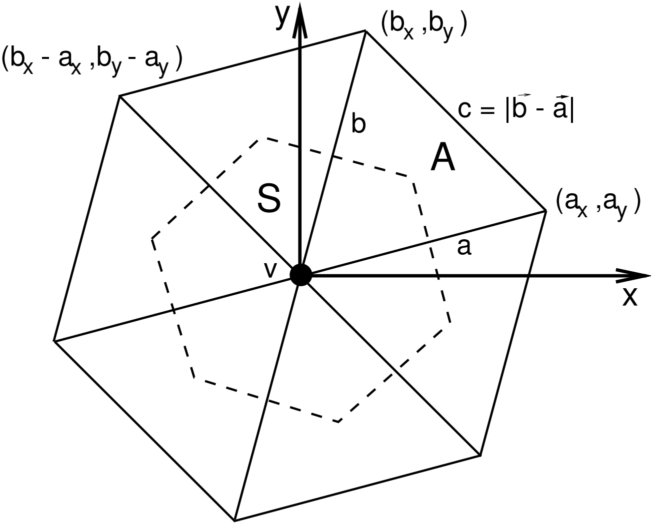
面积能 V_{area} 和体积能 V_{volume}

表面积和体积守恒的能量

$$V_{\text{area}} = \frac{k_a(A - A_0^{tot})^2}{2A_0^{tot}} + \sum_{j\in 1\cdots N_t} \frac{k_d(A_j - A_0)^2}{2A_0}$$

$$V_{\text{volume}} = \frac{k_v(V - V_0^{tot})}{2V_0^{tot}}$$

对应参数的确定



对应参数的确定

在 V 节点周围 $S = 2A$ 的面积上的 Cauchy 应力

$$\tau_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2A}\left[\frac{f(a)}{a}a_\alpha a_\beta + \frac{f(b)}{b}b_\alpha b_\beta + \frac{f(c)}{c}c_\alpha b_\beta\right] - \\ -\left(q\frac{C_q}{A^{q+1}} + \frac{k_a(A_0^{tot} - N_t A)}{A_0^{tot}} + \frac{k_d(A_0 - A)}{A_0}\right)\delta_{\alpha\beta}$$

剪切模量可由 $\mu_0 = \partial\tau_{xy}/\partial\gamma|_{\gamma=0}$($\gamma$ 是微小的剪切应变) 得到

$$\mu_0^{FENE} = \frac{\sqrt{3}k_s}{4}\left(\frac{x_0^2}{(1-x_0^2)^2} + \frac{2}{1-x_0^2}\right)$$

对应参数的确定

面内压力

$$P = -\frac{1}{2}(\tau_{xx} + \tau_{yy}) = \frac{3lf(l)}{4A} + q\frac{C_q}{A^{q+1}} + \frac{(k_a + k_d)(A_0 - A)}{A_0}$$

由 $K = -\frac{\partial P}{\partial \log(A)}\Big|_{A=A_0} = -\frac{1}{2}\frac{\partial P}{\partial log(x)}\Big|_{x=x_0}$ 得到抗压模量

$$K^{FENE} = \frac{\sqrt{3}ks}{1-x_0^2}\left[q + 1 + \frac{x_0^2}{1-x_0^2}\right] + k_a + k_d$$

如果取 $q = 1$, 由于 $k_a + k_d \gg \mu_0 \Rightarrow K \gg \mu_0$, 二维膜的 Young 氏模量

$$Y = \frac{4K\mu_0}{K + \mu_0},\ Y \to 4\mu_0 \text{ if } K \to \infty$$

粗粒化

节点数 N_v, 边数 (弹簧数)N_s 及面数 (三角形数)N_t 满足

$$N_v - N_s + N_t = 2, N_s = 3N_t/2 \Rightarrow N_t = 2N_v - 4$$

则球面上均分 N_v 个节点时, 其平均二面角

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{1}{6}\left[6\left(\frac{R^2}{a^2} - \frac{1}{4}\right)\right] \Rightarrow \theta_0 = \cos^{-1}\left(\frac{\sqrt{3}(N_v-2)-5\pi}{\sqrt{3}(N_v-2)-3\pi}\right)$$

球面表面积与边长及节点数间的关系

$$A = N_t \cdot A_0 = (2N_v - 4) \cdot \frac{\sqrt{3}l_0^2}{4}$$

粗粒化

粗粒化 (coarse-graining) 模型与标准 (“fine”) 模型参数的关系

$$l_0^c = l_0^f \sqrt{\frac{N_v^f - 2}{N_v^c - 2}}, \quad l_m^c = l_m^f \sqrt{\frac{N_v^f - 2}{N_v^c - 2}}, \quad k_s^c = k_s^f(\mathsf{FENE})$$

Outline

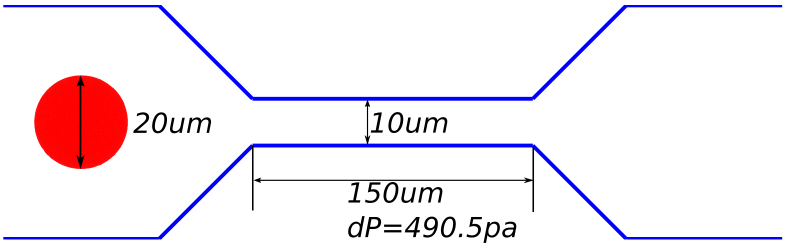
物理参数的无量纲化

Table：物理量的无量纲过程

量纲	无量纲量	物理量
Energy	$E^* = E/\varepsilon$	$E = \varepsilon E^*$
Length	$L^* = L/\lambda$	$L = \lambda L^*$
Mass	$m^* = m/\mu$	$m = \mu m^*$
Temperature	$T^* = k_B T/\varepsilon$	$T = \varepsilon T^*/k_B$
Density	$\rho^* = \lambda^3 \rho$	$\rho = \rho^*/\lambda^3$
Force	$F^* = \lambda F/\varepsilon$	$F = \varepsilon F^*/\lambda$
Pressure	$P^* = \lambda^3 P/\varepsilon$	$P = \varepsilon P^*/\lambda^3$
Time	$t^* = t\sqrt{\varepsilon/\mu}/\lambda$	$t = t^* \lambda \sqrt{\mu/\varepsilon}$

加速度的无量纲化 $g^* = \dfrac{F^*}{m^*} = \dfrac{\lambda F}{\varepsilon}\dfrac{\mu}{m} = \dfrac{\lambda\mu}{\varepsilon} g$

实验构造



实验中的物理量数值

参数	物理值
diameters of the cell	$20 \pm 5\mu m$
diameters of the nucleus	$15 \pm 5\mu m$
temperature	22-24$^\circ C$
cortical stiffness	0.01dyn/cm(0.005-0.035dyn/cm)
Elasticity	0.001dyn/cm^2
pressure	Δp=490.5pa, 3.33pa/um

加速度与压差的关系

$$g = \frac{3.33\mathrm{pa}/\mu\mathrm{m} \times S\Delta h}{S\Delta h\rho} = \frac{3.33 \times 10^6\mathrm{pa}/\mathrm{m}}{1 \times 10^3\mathrm{kg}/\mathrm{m}^3} = 3.33X10^3 m/s^2$$

物理参数的无量纲化

选取体系的单位能量，长度，质量分别为

$$\varepsilon = k_B T = 1.381 \times 10^{-23} \times (23 + 273.15) = 4.0898 \times 10^{-21}\mathrm{J}$$

$$\lambda = 1\mu\mathrm{m}$$

$$\mu = 1 \times 10^3 kg/m^3 \times (1 \times 10^{-6}\mathrm{m})^3/4 = 2.5 \times 10^{-16} kg$$

加速度的无量纲化

$$g^* = \frac{\lambda\mu}{\varepsilon} g = \frac{1 \times 10^{-6}\mathrm{m} \times 2.5 \times 10^{-16}\mathrm{kg}}{4.0898 \times 10^{-21}\mathrm{J}} \times 3.33X10^3\mathrm{m/s^2} = 203.56$$

Thank You!!!