Github第1章
Surface Evolver

～ベシクルモデルの作成とv、daのパラメータ変化による変形～

遠藤辰也

①ベシクルモデルの作成（曲げ弾性エネルギーを定義）

- ベシクルの平衡形状は曲げ弾性エネルギーを最小化する形状として計算できる。

プログラム上では後述の{V;u;g}というコマンドでこの計算が実行される。

- BCモデルの曲げ弾性エネルギーは以下のように表される

$$W_{\mathrm{BC}} = \frac{\kappa}{2}\oint (2H)^2 dA$$

H ($=\frac{C_1+C_2}{2}$)は曲面の平均曲率、C_1とC_2 ($C_1 \geq C_2$)は主曲率($C_i = \frac{1}{R_i}$)、 κ は膜弾性率。

半径Rの球状ベシクルについて，曲げ弾性エネルギーW_{BC}を計算すると 、

$$W_{\mathrm{BC}} = \frac{\kappa}{2}\oint (2H)^2 dA$$

$$= \frac{\kappa}{2}\int \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R}\right)^2 \mathrm{dA}$$

$$= \frac{\kappa}{2}\left(\frac{4}{R^2}\right) 4\pi R^2$$

$$= 8\pi\kappa$$

①ベシクルモデルの作成
（曲げ弾性エネルギーを定義）

半径Rの球状ベシクルにおける曲げ弾性エネルギーW_{BC}で規格化された曲げ弾性エネルギーw_{BC}を

$$w_{\mathrm{BC}} = \frac{W_{\mathrm{BC}}}{8\pi\kappa} = \frac{\kappa}{2}\oint(2H)^2 dA \times \frac{1}{8\pi\kappa} = \frac{1}{4\pi}\oint H^2 dA$$

と表し、これをプログラムで定義すると以下のように表される。

QUANTITY benergy ENERGY modulus 1/4/pi method sq_mean_curvature global

①ベシクルモデルの作成（曲げ弾性エネルギーを定義）

- QUANTITYとは、メッシュの形状に応じて値が変化するプログラム変数である。
- QUANTITYの定義を分解して説明すると、、

QUANTITY benergy ENERGY modulus 1/(4*pi) method sq_mean_curvature global

QUANTITY 任意の名前として変数名を定義。

QUANTITYの属性

Energy：自由エネルギーに追加される

Fixed：拘束条件として設定される

Info_only：自由な値を取れる

modulus (係数)

$\frac{1}{4\pi}$

method (演算)

$\oint H^2 dA$

メッシュ全体を指定する

②拘束条件(換算体積v)について

- 換算体積(reduced volume)

→換算体積vはベシクルの持つ 膜面積 A から見た球状ベシクル(半径R_0)の体積と実際の体積Vの比を表す無次元数であり、次のように定義される。

$$v = \frac{V}{(4\pi/3){R_0}^3}$$

ここで、$R_0= \left(\frac{A}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$より、$v = \frac{6\sqrt{\pi}V}{A^{3/2}}$

V=1の時、Aについて解くと、

$$A= \left(\frac{6\sqrt{\pi}}{v}\right)^{\frac{2}{3}}$$ となる。

つまり、表面積Aを変化させることで換算体積vを変化させることができる。

・換算体積を変化させるプログラムは以下の通り(ここで“rev”は任意の換算体積を意味する)

```
farea.target := (body[1].target*6*(pi)**(1/2)/rev)**(2/3);
```

実際の動き（換算体積vを変化させる時）

- SEを起動し、

  j 0.01

  と入力し、

  farea.target := farea.value +○○（0.1などの実数）

  と入力し、換算体積をずらしてから

  {V;g;u} 1000

  と入力することで、パラメーターを変化させてのシミュレーションが行われる。Vは頂点を平均的に分布させる操作を実行し、uはスパイク防止の操作を実行、gは安定化計算を実行するがここでは3つのコマンドを1セットにして安定化計算を行なっている。

（上の例では1000回計算が行われる。）

③拘束条件（膜面積差da）について

- 膜面積差(area difference)

→もう一つのベシクルの幾何学的な拘束条件は二分子膜の外膜と内膜の面積差である。

球状ベシクル【半径$R_0 = \left(\frac{A}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$】の膜面積差$\Delta A_0$は以下のようになる。

$$\Delta A_0 = 2h\oint H dA = 2h\oint \left(\frac{C_1 + C_2}{2}\right) dA$$

（球状ベシクルでは$C_1 = C_2 = \frac{1}{R_0}$である。）

$$= 2h\oint \frac{1}{R_0} dA = 2h \times \frac{1}{R_0} \times 4\pi {R_0}^2 = 8\pi h R_0$$

表面積Aをもつベシクルの面積差は球状ベシクルの膜面積差ΔA_0を用いて，次のように規格化される。

$$\Delta a = \frac{\Delta A}{\Delta A_0} = \frac{\Delta A}{8\pi h R_0}$$

$$= \frac{1}{8\pi h R_0} \times 2h \oint H dA = \frac{1}{4\pi R_0}\oint H dA = \frac{1}{\sqrt{4\pi A}}\oint H dA$$

③拘束条件（膜面積差da）について

・膜面積差Δaを表すプログラムは以下の通り

```
da := mci.value/(4*pi*(farea.value/4/pi)**0.5);
```

ここで、 mci ($\oint HdA$)を拘束条件に設定した上でdaの値を変化させることで膜面積差Δaを変化させることができる。

mci ($\oint HdA$)はQUANTITYで定義されている。

③拘束条件（膜面積差da）について

■ QUANTITYとは、メッシュの形状に応じて値が変化するプログラム変数である。

■ mci ($\oint HdA$)は以下のように定義されている。

QUANTITY mci INFO_ONLY method mean_curvature_integral global

QUANTITY 任意の名前
として変数名を定義。

QUANTITYの属性

Energy：自由エネルギーに追加される

Fixed：拘束条件として設定される

Info_only：自由な値を取れる

method (演算)

$$\oint HdA$$

メッシュ全体を指定する

実際の動き（膜面積差daを変化させる時）

- SEを起動し、

  fix mci

と入力し、mciを動かせるようにしてから

  mci.target := ○○(99などの実数)

と入力し、mciを拘束条件に設定する。その後、

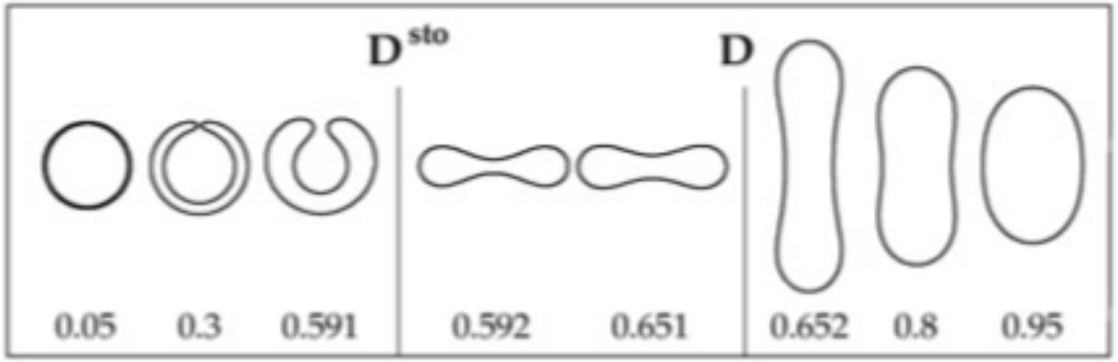
c_da(初期値(実数),目的値(実数),1回ごとのdaの変化幅(実数))

と入力することで、パラメーターを変化させてのシミュレーションが行われる。（例: c_da(0.95,0.6,0.001)）

上の例では0.95から0.6まで0.001刻みの計算が行われる。

④課題

1. SE上で以下の図における右3つのベシクル形状を再現する。
(図の数値はそれぞれの換算体積を示している。)



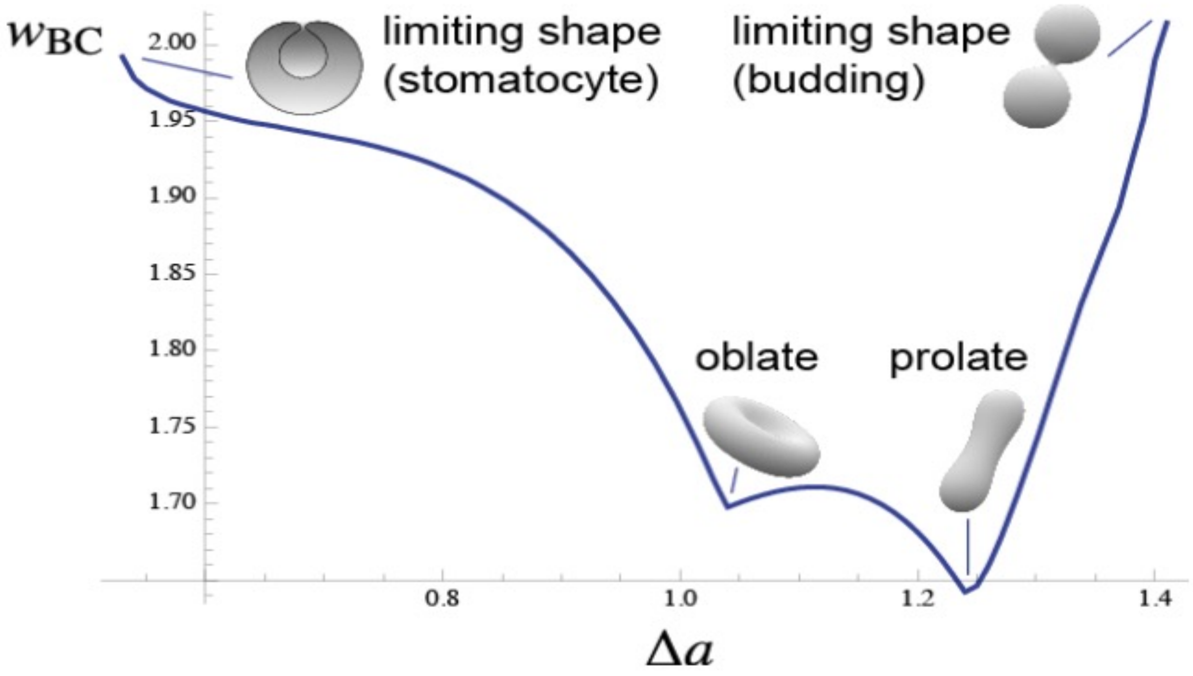
$$A=\left(\frac{6\sqrt{\pi}}{v}\right)^{\frac{2}{3}}$$

→上の式より各換算体積における表面積Aを求め、
(体積Vは1で固定)SE上でAを変化させていく。

④課題

2. 換算体積vを0.7に固定した状態で膜面積差を増減させることでoblate, stomatocyteを再現する。（下図は換算体積v=0.7の時の曲げ弾性エネルギープロファイルを示している。）

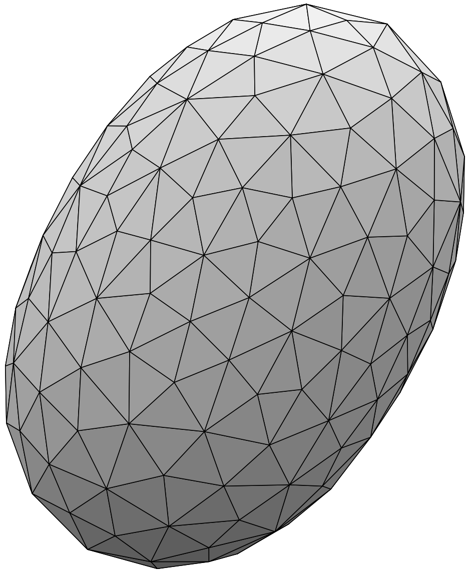
→膜面積差は少しずつ動かすと良い。



⑤解答

1. SE上で以下の図における右3つのベシクル形状を再現する。
(図の数値はそれぞれの換算体積を示している。)

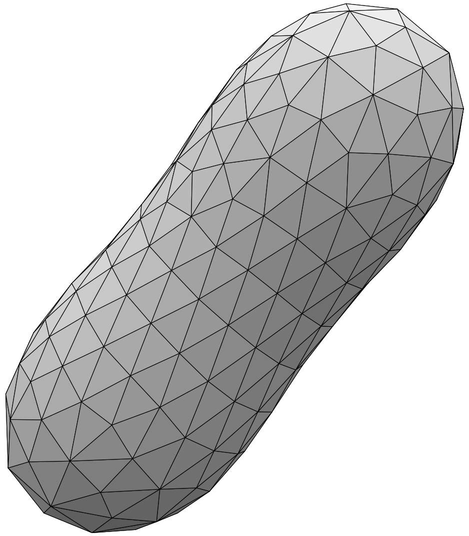
→ v＝0.95　の時 A＝5.00420366… より、
farea.target を設定して計算すると下のようなベシクル形状が得られる。



⑤解答

1. SE上で以下の図における右3つのベシクル形状を再現する。
(図の数値はそれぞれの換算体積を示している。)

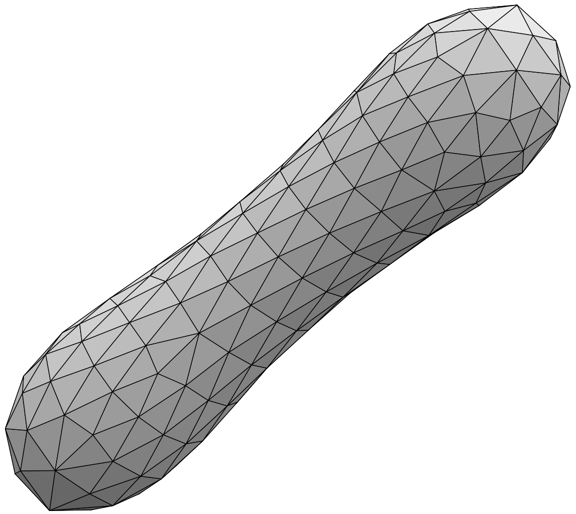
→ v = 0.8　の時 A = 5.6116518… より、
farea.target を設定して計算すると下のようなベシクル形状が得られる。



⑤解答

1. SE上で以下の図における右3つのベシクル形状を再現する。
(図の数値はそれぞれの換算体積を示している。)

→ v＝0.652　の時 A＝6.43159935… より、
farea.target を設定して計算すると下のようなベシクル形状が得られる。

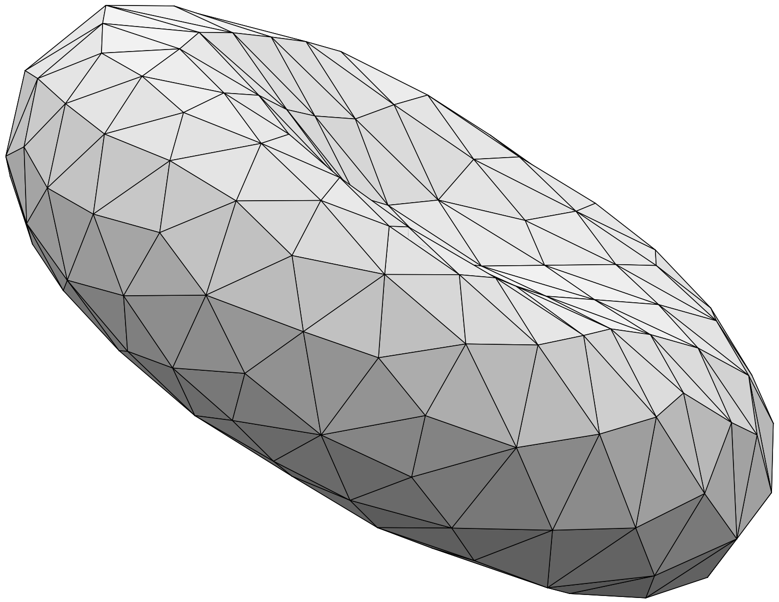


⑤解答

2. 換算体積vを0.7に固定した状態で膜面積差を増減させることでoblate, stomatocyteを再現する。

◯ oblate

→エネルギープロファイルをもとにΔaを計算すると、下図のようなベシクル形状が得られる。



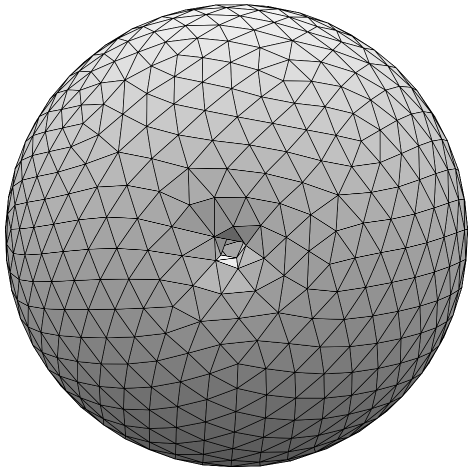
⑤解答

2. 換算体積vを0.7に固定した状態で膜面積差を増減させることでoblate, stomatocyteを再現する。

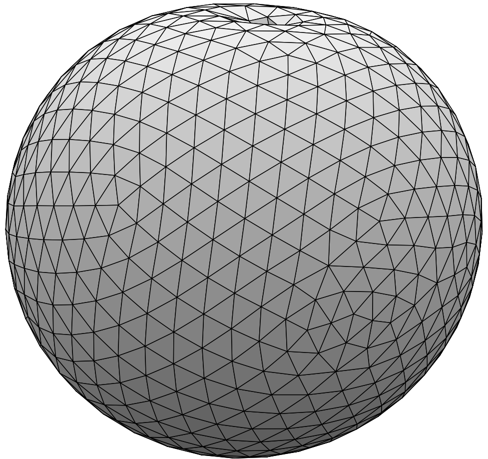
◯ stomatocyte

→エネルギープロファイルをもとにΔaを計算すると、下図のようなベシクル形状が得られる。

上から見た図



横から見た図



横から見た図(辺のみ表示)
→内部に空洞がある