流体动力学影响下多组分脂质囊泡中几何与粗化的相互作用

Elena Bachini，[1]Veit Krause，[1]和 Axel Voigt[1,2,3]1)德累斯顿工业大学科学计算研究所，德国2)德累斯顿系统生物学中心，德国3)德累斯顿工业大学卓越集群“生命物理学”，德国

（日期：2023年2月9日）

我们研究曲面流体动力学对生物膜模型系统中粗化过程里曲率与组成相互作用的影响。研究内容包括标度律和平衡构型，并通过对带有额外相依赖弯曲项的曲面两相流问题进行计算研究来加以考察。这些额外项在几何上有利于特定构型。我们发现，与二维情况一样，流体动力学的影响很大程度上取决于组成。当组成允许实现几何上有利的构型时，流体动力学会促进系统向该构型演化。我们将模型和数值计算限制在静止曲面上，并通过多种基准问题和收敛性研究验证数值方法。

arXiv:2302.04028v1 [cond-mat.soft] 8 Feb 2023

I. 引言

曲率与组成之间的相互作用是生物膜普遍存在的结构特征，在生物学功能和合成膜应用中发挥着关键作用（参考 1）。人们开发了各种简化的膜模型，以模拟生物膜的异质组织，从而理解这种复杂的相互作用。其中包括具有液态有序相和无序相的多组分巨型单层囊泡（GUV）。这些合成系统的复杂性大大降低，因此非常适合用于研究脂质相的相分离与粗化。

参考文献2全面综述了这类研究结果。结合理论模型和模拟（参考文献3和4），不同且有时相互矛盾的粗化过程标度结果得以澄清。根据 Saffmann-Delbrück数（参考文献5）——这是一个流体动力学长度，关联着膜与周围体相流体的黏度$l_H = \eta_m/\eta_b$——在小于（大于）l_H的空间尺度上，流体动力学有效地呈二维（三维）。本文考虑$l_H \to \infty$的情形，此时可以忽略体相流体的影响。除了流体动力学的影响（主要在平坦膜上进行研究，见参考文献3和4）之外，组成也起着重要作用。实验和模拟研究探讨了曲率与组成之间的相互作用；各种研究方法见参考文献6–14。然而，直到近期，研究者才利用多组分支架脂质囊泡（SLV）（参考文献15–17）考察膜曲率对脂质相空间排列的作用。在这些系统中，非球形形状得以稳定，因此可以研究空间变化曲率对相分离和粗化的影响。研究结果表明，曲率会影响脂质相的空间排列和相图。不过，这些模型主要关注平衡态，并未考虑流体动力学的影响。得益于近期表面流体动力学方面的数值方法进展（参考文献18–23），本文结合这些不同的研究，考察其影响膜曲率对流体动力学作用下相分离和粗化的影响。

我们采用一种基于参考 24 的介观建模方法，该方法将经典的 Canham/Helfrich 模型（参考 25 和 26）扩展至两种脂质相，例如液态有序相和无序相。相应的能量为：

$$\mathscr{F}_{JL} = \sum_{i=1}^{2} \int_{\mathscr{S}_i} \kappa_i(\mathscr{H} - \mathscr{H}_{0,i})^2 + \overline{\kappa}_i \mathscr{K} \, \mathrm{d}\mathscr{S} + \sigma \int_{\Gamma} \mathrm{d}s, \quad (1)$$

其中，弯曲刚度为 κ_i，高斯弯曲刚度为 κ_i，自发曲率为 $\mathscr{H}_{0,\,i}$，平均曲率和高斯曲率为 $\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{K}$，界面线张力为 σ。这里，$\mathscr{S}_i$，$i = 1,\ 2$，表示第 $i-$ 种脂质相的表面积，其$\mathscr{S}_1 \cup \mathscr{S}_2 = \mathscr{S}$和 $\mathscr{S}_1 \cap \mathscr{S}_2 = \Gamma$。我们将 $\mathscr{S} \subset \mathbb{R}^3$ 视为无边界的闭合正则曲面。该模型可通过引入拉格朗日乘子进行扩展，以确保两相的面积守恒或局部不可伸展性。只要在 $\mathscr{S}$ 的可能演化过程中避免 $\kappa_1 = \kappa_2$ 和拓扑变化，式（1）中的高斯曲率项对能量仅有常数贡献，因此下文将忽略该项。式（1）（其中 $\kappa_i = 0$）可写成相场近似形式，得到：

$$\begin{aligned}\mathscr{F}_{PF} = &\int_{\mathscr{S}} \kappa(\phi)(\mathscr{H} - \mathscr{H}_0(\phi))^2 \, \mathrm{d}\mathscr{S} \\ &+ \tilde{\sigma} \int_{\mathscr{S}} \frac{\varepsilon}{2} \|\nabla_{\mathscr{S}} \phi\|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \, \mathrm{d}\mathscr{S}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中相场函数为 $\phi \in [-1, 1]$，双阱势为 $W(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2$,，界面厚度为 ε，重标度后的界面线张力为 $\tilde{\sigma} = \sigma \frac{3}{2\sqrt{2}}$，曲面梯度为 $\nabla_{\mathscr{S}}$。弯曲刚度 $\kappa(\phi)$ 和自发曲率 $\mathscr{H}_0(\phi)$ 在两相对应的取值之间平滑插值，使得：

$$f(\phi) = \begin{cases} f_1 & \text{if } \phi = 1 \\ \dfrac{f_1 + f_2}{2} + \dfrac{f_1 - f_2}{4}\phi(3 - \phi^2) & \text{if } -1 < \phi < 1 \\ f_2 & \text{if } \phi = -1 \end{cases}, \quad (3)$$

对于$f=\kappa,\mathscr{H}_0$。按照参考文献 10、12 和 27，通过形式上的匹配渐近方法或 Γ-收敛，可以建立方程 (2) 与 (1) 之间的联系。关于在相场框架下同时考虑高斯曲率项，以及面积和局部不可伸展性约束的可能性，已在参考文献 10、28 和 29 中讨论。

关于分别相对于$\mathscr{S}$和 Γ，或 $\mathscr{S}$和 ϕ对 $\mathscr{F}_{JL}$ 和 $\mathscr{F}_{PF}$ 进行最小化的问题，文献中已有讨论（例如参见参考文献 9、10、27、29–31）；本文则考虑静止曲面 $\mathscr{S}$这一特殊情形。这将问题简化为在给定曲面上 Γ 或 ϕ 的演化，在数学上与所谓的测地演化方程及其相场近似相关。 ϕ 的守恒演化是一个带有额外曲率项的曲面 Cahn–Hilliard 模型：

$$\partial_t\phi=\nabla_{\mathscr{S}}\cdot(m\nabla_{\mathscr{S}}\mu), \tag{4}$$

$$\mu=\kappa'(\phi)(\mathscr{H}-\mathscr{H}_0(\phi))^2-2\kappa(\phi)(\mathscr{H}-\mathscr{H}_0(\phi))\mathscr{H}_0'(\phi)+\tilde{\sigma}\left(-\varepsilon\Delta_{\mathscr{S}}\phi+\frac{1}{\varepsilon}W'(\phi)\right), \tag{5}$$

其中迁移率为m，化学势为 μ，曲面散度为$\nabla_{\mathscr{S}}\cdot$，拉普拉斯–贝尔特拉米算子为 $\Delta_{\mathscr{S}}=\nabla_{\mathscr{S}}\cdot\nabla_{\mathscr{S}}$。方程（4）和（5）定义在 $\mathscr{S}$ 上，并需补充适当的 ϕ初始条件。对于 $\varepsilon\to 0$，可得到相应的曲面穆林斯–塞克卡型模型（参考文献 12）；其平衡解已在参考文献 15 和 16 中得到详细分析。对于所考虑的静止曲面情形，相应的实验对象是前述具有两个脂质相的支架脂质囊泡（SLV）（参考文献 17）。它们是研究相分离和脂质畴粗化过程中曲率诱导效应的理想测试对象，也可用于验证。

随着曲面流体建模与模拟领域的最新发展（参考文献 19–21、32–38），研究这类系统中液相的曲面黏度以及其向平衡解演化的过程也变得可行。这将导出曲面两相流问题。与 Cahn–Hilliard 类似的方程（4）和（5）相对应的模型为：

$$\partial_t\mathbf{u}+\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{u}=-\nabla_{\mathscr{S}}\tilde{p}+\frac{2}{\mathrm{Re}}\mathrm{div}_{\mathscr{S}}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})+\mu\nabla_{\mathscr{S}}\phi, \tag{6}$$

$$\nabla_{\mathscr{S}}\cdot\mathbf{u}=0, \tag{7}$$

$$\partial_t\phi+\nabla_{\mathbf{u}}\phi=\nabla_{\mathscr{S}}\cdot(m\nabla_{\mathscr{S}}\mu), \tag{8}$$

$$\mu=\kappa'(\phi)(\mathscr{H}-\mathscr{H}_0(\phi))^2-2\kappa(\phi)(\mathscr{H}-\mathscr{H}_0(\phi))\mathscr{H}_0'(\phi)+\tilde{\sigma}\left(-\varepsilon\Delta_{\mathscr{S}}\phi+\frac{1}{\varepsilon}W'(\phi)\right), \tag{9}$$

切向曲面速度 u、重标度曲面压力~p、曲面应力张量 $\boldsymbol{\sigma}(\mathrm{u})=\frac{1}{2}(\nabla_{\mathscr{S}}\mathrm{u}+\nabla_{\mathscr{S}}\mathrm{u}^{\mathrm{T}})$、张量场的曲面散度 $\mathrm{div}_{\mathscr{S}}$，以及曲面雷诺数 Re。对流项定义为 $[\nabla_{\mathbf{u}}\mathrm{u}]_i=\nabla_{\mathscr{S}}\mathrm{u}_i\cdot\mathrm{u}$，$\mathrm{i}=0,1,2$，以及 $\nabla_{\mathscr{S}}\phi\cdot\mathrm{u}$。方程 (6)–(9) 定义在 $\mathscr{S}$上，并辅以 ϕ 和 u 的初始条件。我们考虑 $\mathrm{u}(\mathrm{x},\mathrm{t})=(\mathrm{u}_1(\mathrm{x},\mathrm{t}),\mathrm{u}_2(\mathrm{x},\mathrm{t}),0)$，其分量对应局部基向量 $\mathbf{e}_1(\mathbf{x})$，$\mathbf{e}_2(\mathbf{x})$ 和曲面法向量 $\boldsymbol{\nu}(\mathbf{x})$。由于存在如下关系：

$$\begin{aligned}2\,\mathrm{div}_{\mathscr{S}}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u})&=\mathrm{div}_{\mathscr{S}}(\nabla_{\mathscr{S}}\mathbf{u})+\mathrm{div}_{\mathscr{S}}(\nabla_{\mathscr{S}}\mathbf{u})^T\\&=-\Delta_{\mathscr{S}}^{dR}\mathbf{u}+\mathscr{K}\mathbf{u}+\nabla_{\mathscr{S}}(\nabla_{\mathscr{S}}\cdot\mathbf{u})+\mathscr{K}\mathbf{u}\\&=-\Delta_{\mathscr{S}}^{dR}\mathbf{u}+2\mathscr{K}\mathbf{u},\end{aligned}$$

其中，Laplace-de Rham算子为 $\Delta_{\mathscr{S}}^{dR}$；曲面 Navier–Stokes 部分对应于先前针对固定曲面的表述（参考文献18、32、34、35、39–43）。

该模型是一个曲面 Navier–Stokes-Cahn–Hilliard 类方程，是经典“模型H”（参考文献 44 和 45）在曲面上的推广。为简便起见，我们仅考虑两相具有等密度和等黏度的情形。通过考虑参考文献 46 中比较的模型并将其推广到曲面，可以得到更一般的方法。关于将参考文献 47 提出的热力学一致模型推广到曲面的内容，请参阅参考文献 23。参考文献 12 中针对曲面Cahn–Hilliard方程的渐近分析，与针对 Navier–Stokes-Cahn–Hilliard 方程的匹配渐近分析（参考文献 47–49）相结合，应当能够得到相应的尖锐界面曲面两相流问题。此前对方程（6）–（9）的数值研究，如参考文献 19、22 和 23 所示，仅限于单连通曲面、特殊几何形状，或只考虑低阶方法。此前的方法均未考虑由弯曲能产生的附加曲率项。

本文提出一种基于曲面有限元方法（SFEM）的离散化方案。我们采用高阶曲面近似，并通过算子分裂方法求解方程（6）—（9）。标量值对流曲面Cahn–Hilliard方程采用标量SFEM（参考文献50）求解，而曲面纳维–斯托克斯方程则采用向量值曲面有限元方法（参考文献51）求解。时间离散采用半隐式有限差分方法。我们对各个部分进行验证，并展示其收敛性可能达到最优阶。

该总体方案用于研究曲率诱导的相分离和粗化效应。考虑具有两个不同平均曲率区域的几何结构，并相应地选择κ_i 或 $\mathscr{H}_{0,\,i}$ 即可确定脂质相的空间排列。弯曲刚度 κ 中的相依赖性质会影响粗化过程：弯曲刚度较低的脂质相会被引导至平均曲率较高的区域，而弯曲刚度较高的脂质相则会被引导至平均曲率较低的区域。这种行为在平衡构型中已为人所知，并且已有实验对此进行了验证，同时还证明了相图受到几何结构的影响（参考文献 17）。通过将自发曲率 $\mathscr{H}_{0,\,i}$ 设定为与不同区域平均曲率相匹配的数值，也可以实现相同的效果。不仅相图和平衡排列会受到底层几何结构的影响，向该状态演化的过程也会发生变化。与二维和三维情况一样，粗化过程会受到流动的影响，并可能导致更快的粗化。然而，界面长度的黏性流体动力学标度预测 $l\sim t^{-1}$ 并未被观测到。根据组分和雷诺数 Re，我们得到 $l\sim t^{-\alpha}$，其

– $\frac{1}{3} \le \alpha \le \frac{2}{3}$，这与二维中的理论和模拟结果（参考文献 3 和 4）以及参考文献 22 中的模拟结果一致。此外，已有多项关于巨型单层囊泡（GUV）的实验对其进行了测量；综述请参见参考文献 2。我们还考察了各相的拓扑和几何性质。当形成岛状结构时，如果考虑流动，它们会变得更加圆形。这是低组分条件下流动会减缓粗化过程的原因之一。利用零阶贝蒂数作为各相连通性的拓扑度量（参考文献 52 和 53），并利用界面形状分布（ISD）作为孤立斑块的几何度量（参考文献 54 和 55），可以进一步量化其标度行为。弯曲能产生的附加曲率项不仅会对动力学产生全局影响，还会在局部影响流场。我们通过建立相分离区域中曲面平均曲率与速度之间的关系，对这一行为进行了量化。

本文结构如下。第二节详细介绍数值方法，并对每个子问题进行收敛性研究；第三节则系统考察相分离和粗化的结果。第四节中，我们讨论结果、得出结论，并展望可能的模型扩展。

II. 数值方法

本节介绍离散设置，首先说明曲面的近似方法，再介绍离散函数空间，最后给出方程（6）—（9）的离散形式。我们还将讨论实现方面，并通过考察各子问题的基准问题来验证数值方法。

A. 曲面近似

我们假设光滑曲面 $\mathscr{S}$ 由离散的k阶近似 $\mathscr{S}_h$逼近。若 $k = 0$， $\mathscr{S}_h^0$ 由顶点位于 $\mathscr{S}$ 上的互不相交的平三角形组成。对于$k \ge 1$，我们考虑双射映射 $\boldsymbol{X}: \mathscr{S}_h^0 \to \mathscr{S}$ 且$I_h^k(\boldsymbol{X}) = \mathscr{S}_h{}^k$。我们可以写为 $\mathscr{T}_h(\mathscr{S}) = \cup_{i=1}^{N_T} T_i = \mathscr{S}_h{}^k$。下文中，我们使用$k = 2$。需要时，曲面量由近似曲面 $\mathscr{S}_h$计算得到。具体而言，曲面法向量 $\boldsymbol{\nu}_h$ 和平均曲率 $\mathscr{H}_h$的近似值均通过这种方式计算。关于高阶曲面近似构造的更详细说明，参见文献 56 和 57。使用自适应网格对界面上的单元进行细化，该界面由 $\phi(\mathbf{x},t) = 0$隐式描述。

B. 曲面有限元函数空间

我们考虑如下定义的曲面有限元空间：

$$
\begin{aligned}
V_h(\mathscr{S}_h) &= \{v_h \in C^0(\mathscr{S}_h) \cap W_0^1 \mid v_h|_T \in \mathscr{P}_{k_v}(T)\},\\
Q_h(\mathscr{S}_h) &= \{q_h \in L_0^2(\mathscr{S}_h) \mid q_h|_T \in \mathscr{P}_{k_q}(T)\},\\
W_h(\mathscr{S}_h) &= \{\psi_h \in C^0(\mathscr{S}_h) \mid \psi_h|_T \in \mathscr{P}_{k_\psi}(T)\},
\end{aligned}
$$

其中k_v, k_q, k_ψ 表示多项式阶数。我们将空间V_h 扩展到$\mathbf{V}_h(\mathscr{S}_h) = (V_h)^3$,，即（三维）向量函数空间。纳维–斯托克斯方程采用经典的泰勒–胡德元，速度$\mathbf{u}$ 的多项式阶数为 2，压力 $\tilde{p}$的多项式阶数为 1。 $\mathscr{P}_2$ 用于离散化相场函数 ϕ 和化学势 μ。

C. 离散形式

现在可以写出方程（6）–（9）的半离散形式。类似曲面 Cahn–Hilliard 方程和类似曲面Navier–Stokes方程采用算子分裂方法分别求解。在每个时间步$t^n \in [0,T]$,，我们首先求解类似曲面 Cahn–Hilliard 方程（8）和（9），然后求解类似曲面Navier–Stokes方程（6）和（7）。对于时间离散化，这两个系统均采用隐式 Euler 格式。

下文中，我们用 $(\cdot,\cdot)_{\mathscr{S}_h}$ 表示近似曲面 $\mathscr{S}_h$上L^2内积的求积规则近似。请注意，求积阶数必须足够高，以确保测试函数、试探函数和面积元都能得到充分积分。

问题 1（半离散表面 Cahn–Hilliard 型问题） 求 $(\phi_h, \mu_h) \in W_h \times W_h$ 使得：

$$
\begin{aligned}
(\partial_t \phi_h^n, \psi_h)_{\mathscr{S}_h} + (\nabla_{\mathbf{u}^{n-1}} \phi_h^n, \psi_h)_{\mathscr{S}_h} &= -m(\nabla_{\mathscr{S}} \mu_h^n, \nabla_{\mathscr{S}} \psi_h)_{\mathscr{S}_h},\\
(\mu_h^n, \xi_h)_{\mathscr{S}_h} &= \left(\kappa'(\phi_h^{n-1})\left(\mathscr{H}_h - \mathscr{H}_0(\phi_h^{n-1})\right)^2, \xi_h\right)_{\mathscr{S}_h}\\
&\quad - 2\left(\kappa(\phi_h^{n-1})\mathscr{H}_0'(\phi_h^{n-1})\left(\mathscr{H}_h - \mathscr{H}_0(\phi_h^{n-1})\right), \xi_h\right)_{\mathscr{S}_h}\\
&\quad + \tilde{\sigma}\varepsilon(\nabla_{\mathscr{S}} \phi_h^n, \nabla_{\mathscr{S}} \xi_h)_{\mathscr{S}_h} + \frac{\tilde{\sigma}}{\varepsilon}\left(W'(\phi_h^n), \xi_h\right)_{\mathscr{S}_h},
\end{aligned}
$$

对所有 $(\psi_h, \xi_h) \in W_h \times W_h$均成立。

这是用于标量的经典SFEM方法（参考文献50），值曲面偏微分方程。 请注意，与 Cahn- 的标准情形一样，

Hilliard方程中，我们通过对双阱势的导数进行一阶泰勒展开来线性化，即，$W'(\phi_h^n) \approx W'(\phi_h^{n-1}) + W''(\phi_{n-1h})(\phi_{nh} - \phi_{n-1h}) = -2(\phi_{n-1h})^3 + \left(3(\phi_{n-1h})^2 - 1\right)\phi_{nh}$。遵循参考文献49，我们考虑$m = \gamma\varepsilon^2$，其中 $\gamma > 0$。

对于曲面Navier–Stokes类问题，我们不再要求$\mathbf{u}$ 为切向量，而是通过罚方法施加这一条件。这样便可以采用全局坐标系，即嵌入空间 $\mathbb{R}^3$ 的全局坐标系，并对每个分量应用经典的标量SFEM方法（参考 50）；一般性讨论见参考 51，具体实现见参考 20、35、58 和 59。在此设置下，我们令 $\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = (u_1(\mathbf{x},t), u_2(\mathbf{x},t), u_3(\mathbf{x},t))$，其分量分别对应于全局基向量$\mathbf{e}_1$,$\mathbf{e}_2$ 和$\mathbf{e}_3$，它们属于 $\mathbb{R}^3$。假设添加的惩罚项能够强制$\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\nu} = 0$，则式（6）和（7）写作:

$$\partial_t \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{u} = -\nabla_{\mathscr{S}}\tilde{p} + \frac{2}{\mathrm{Re}}\operatorname{div}_{\boldsymbol{P}}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) + \mu\nabla_{\mathscr{S}}\phi + \beta(h)(\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\nu})\boldsymbol{\nu}, \tag{10}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{P}}\cdot\mathbf{u} = 0, \tag{11}$$

使用切向梯度 $\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}(\nabla_{\boldsymbol{P}}\mathbf{u} + \nabla_{\boldsymbol{P}}\mathbf{u}^T)\nabla_{\boldsymbol{P}}\mathbf{u} = \boldsymbol{P}\nabla\mathbf{u}^e\boldsymbol{P}$，其中$\mathbf{u}^e$ 是沿法向保持常数的$\mathbf{u}$ 的延拓，$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{\nu}\otimes\boldsymbol{\nu}$ 是曲面投影，∇ 是嵌入空间 $\mathbb{R}^3$的梯度。切向散度定义为 $\nabla_{\boldsymbol{P}}\cdot\mathrm{u} = \mathrm{tr}[\boldsymbol{P}\nabla\mathrm{u}^e]$，而 $\operatorname{div}_{\boldsymbol{P}}$表示张量场对应的切向散度。项 $\nabla_{\boldsymbol{P}}\mathrm{u}$是纯切向张量场，并通过 $\nabla_{\boldsymbol{P}}\mathrm{u} = \nabla_{\mathscr{S}}(\boldsymbol{P}\mathrm{u}) - (\mathrm{u}\cdot\boldsymbol{\nu})\mathscr{B}$与协变算子相关，其中 $\mathscr{B}$是形算子，且 $\mathrm{B}i\mathrm{j} = -\nabla^i_{\mathscr{S}}\nu\mathrm{j}$。类似地，有 $\operatorname{div}_{\boldsymbol{P}}\mathrm{u} = \operatorname{div}_{\mathscr{S}}(\boldsymbol{P}\mathrm{u}) - (\mathrm{u}\cdot\boldsymbol{\nu})\mathscr{H}$，参见参考文献 60。方程（10）中的附加项对 u 的法向分量进行惩罚，其中 β(h)是一个依赖于网格尺寸的参数。因此，若 u 是切向的，方程（10）和（11）就与方程（6）和（7）一致。若切向性仅为近似满足，则方程（10）和（11）可近似方程（6）和（7）；此前已针对 $\mathrm{k} = 0$ 的曲面近似研究过这种方法，并通过实验表明其收敛（参考文献 20、53 和 61），u 的 L^2误差收敛阶为 1。关于曲面Stokes问题，才有更详细的结果（参考文献 60 和 62）。这些研究表明，对于 $\mathrm{k} = 2$ 的曲面近似，若将附加项 $(\mathrm{u}\cdot\boldsymbol{\nu})\mathscr{B}$ 和 $(\mathrm{u}\cdot\boldsymbol{\nu})\mathscr{H}$ 分别与 $\boldsymbol{\nu}$ 的二阶近似、惩罚项中 $\boldsymbol{\nu}$ 的三阶近似以及 $\beta(\mathrm{h}) = {}^{\beta}\mathrm{h}^2$一并考虑，则 u 的 L^2 误差具有 3 阶最优收敛阶。这些结果仅针对曲面向量拉普拉斯问题在解析上得到证明（参考文献 59 和 63），但预计对曲面Stokes问题也成立（参考文献 62 和 64）。然而，如果只考虑 u 的切向分量误差，则可以不再要求对 $\boldsymbol{\nu}$ 进行更高阶近似，参见参考文献 65。基于这些结果，我们考虑以下问题。

Prob引理 2（半离散曲面纳维–斯托克斯类问题） 求 $(\mathbf{u}_h, p_h) \in \mathbf{V}_h \times Q_h$ 使得 *t:*

$$(\partial_t \mathbf{u}_h^n, \boldsymbol{v}_h)_{\mathscr{S}_h} + (\nabla_{\mathbf{u}^{n-1}}\mathbf{u}_h^n, \boldsymbol{v}_h)_{\mathscr{S}_h} = (p_h^n, \nabla_{\mathscr{S}}\cdot\boldsymbol{v}_h)_{\mathscr{S}_h} - \frac{2}{\mathrm{Re}}((\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h^n), \nabla_{\mathscr{S}}\boldsymbol{v}_h)_{\mathscr{S}_h} + (\mu_h^n\nabla_{\mathscr{S}}\phi_h^n, \boldsymbol{v}_h)_{\mathscr{S}_h} + \frac{\beta}{h^2}((\mathbf{u}_h^n\cdot\boldsymbol{\nu}_h)\boldsymbol{\nu}_h, \boldsymbol{v}_h)_{\mathscr{S}_h},$$

$$(\nabla\cdot\mathbf{u}_h^n, q_h)_{\mathscr{S}_h} = 0,$$

对于（$\boldsymbol{v}_h$、q_h）$\in \mathbf{V}_h \times Q_h$。

D. 实现方面

上述离散化是在有限元工具箱 AMDiS（参考文献 66 和 67）中实现的，并使用 Dune-CurvedGrid 库（参考文献 57）处理曲面的近似。通过使用 PETSc 库，该环境可以直接实现并行化。我们采用带有完整LU 预条件子的理查森迭代法，并使用 MUMPS 作为直接线性求解器。

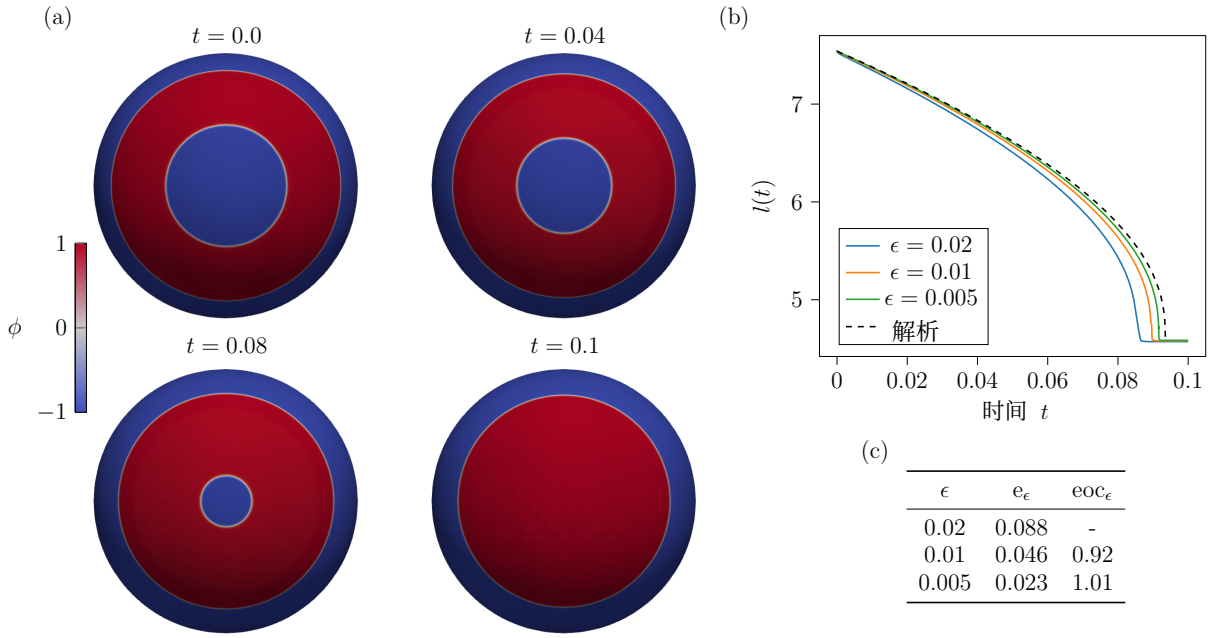
E. 数值方法的验证

我们首先分别考虑问题 1和问题 2，忽略耦合项和额外的曲率项。这样，问题就分别简化为曲面 Cahn-Hilliard 方程和曲面纳维–斯托克斯方程。

1. 曲面 *Cahn–Hilliard* 方程

针对球面上的曲面 Cahn–Hilliard 模型，人们提出了不同的基准问题。参考文献 68 构造了曲面 Mullins–Sekerka 问题的一个旋转对称解。由于该问题是曲面 Cahn–Hilliard 方程的尖锐界面极限（参考文献 12），因此可以研究问题 1 的解在界面厚度 $\varepsilon \to 0$ 下的收敛性。我们仅对其进行定性考察。定量的收敛性研究超出了本文的范围。关于二维情形下的理论结果，参见参考文献 69。

我们考虑单位球面 $\mathscr{S} = S^2\,(R = 1)$，其上有一个环形区域 $\mathscr{S}_1$，对应的相 $\phi = 1$ 由两个测地半径分别为$R_{\max} = 0.8$ 和$R_{\min} = 0.4$ 的同心圆界定，作为初始条件——



(c)

ϵ	e_ϵ	eoc_ϵ
0.02	0.088	-
0.01	0.046	0.92
0.005	0.023	1.01

图 1。基准问题（参考文献 68）中曲面 Cahn–Hilliard 模型的数值解。(a) 在时间 t = 0.0 0.04 0.08 0.1 $\varepsilon = 0.005$ ε ,,下的数值解，其中 。(b) 比较不同 取值情况下计算得到的界面长度与解析解。(c) 参数 ε 在时间区间 $[0,0.1]$内的实验收敛阶。误差考虑了随时间变化的界面长度差异。

始条件（见图 1-(a) 左上面板）。在方程 (4) 和 (5) 中，我们设定参数$m = 1$、 $\tilde{\sigma} = \frac{3}{2\sqrt{2}}$ 和 $\kappa = \mathscr{H}_0 = 0$。我们取 $\varepsilon = 0.02, 0.01, 0.005$，以研究$\varepsilon$的收敛性。与一般设定相同，我们使用 $\mathscr{P}_2$ 单元对相场函数 ϕ 和化学势μ进行离散。网格会自适应细化，以确保界面周围至少有 3 个自由度，即$\phi \in [-0.95, 0.95]$；时间步 τ则选为 $\tau \sim h^2$。

图 1-(a) 展示了 $t = 0.0, 0.04, 0.08$、0.1 时的演化过程，其中$\varepsilon = 0.005$。两个圆形界面均逐渐收缩，直至较小的界面塌缩；当 $\mathscr{S}_1$ 时，最终形成单个测地圆的最终构型。图 1-(b) 展示了针对不同 ε计算得到的界面长度 $l_\varepsilon = \mathscr{F}_{PF}[\phi]$，以及曲面 Mullins-Sekerka 问题的解析长度 l_*；详情参见参考文献 68。对于每个 ε取值，我们定义误差如下：

$$e_\varepsilon = \| l_\varepsilon - l_* \|_{L^2(0,T)}, \tag{12}$$

其中，时间积分在时间区间 [0,T]，上采用梯形法则近似，且 $T = 0.1$。实验收敛阶定义如下：

$$eoc_\varepsilon = \log\left(\frac{e_{\varepsilon,i-1}}{e_{\varepsilon,i}}\right) / \log\left(\frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_i}\right).$$

结果见图 1-(c)，表明在 ε 中呈现一阶收敛。

参考文献 70 研究了球面上更为现实的相分离与粗化情形。我们考虑所提出的基准问题，球的半径为$R = 100$，并初始条件定义如下：

$$\phi(\theta,\varphi) = c_0 + \varepsilon_{\mathscr{S}}\big[\cos(8\theta)\cos(15\varphi) + (\cos(12\theta)\cos(10\varphi))^2 + \cos(2.5\theta - 1.5\varphi)\cos(7\theta - 2\varphi)\big],$$

其中$c_0 = 0.5$、 $\varepsilon_{\mathscr{S}} = 0.05$ 以及 $\theta = \cos^{-1}(z/R)$ 和 $\varphi = \tan^{-1}(y/x)$ 分别为球坐标系中的极角和方位角。图 2-(a) 左上图显示了初始解。在式 (4) 和 (5) 中，我们设定$m = 5$、$\tilde{\sigma} = \frac{3}{2\sqrt{2}}$ 和$\kappa = \mathscr{H}_0 = 0$。我们进一步考虑修正后的双阱势 $W(\phi) = \frac{2}{5}(\phi^2 - 1)^2$和 $\varepsilon = 2$，以采用与参考文献 70 相同的模型和参数设置。图 2-(a) 显示了$t = 0, 200, 2000$、$3.7e+5$ 时的演化；图 2-(b) 展示了网格上界面长度l 随时间的标度变化，界面处的网格尺寸为$h = 0.41$。请注意，对于这一基准问题，我们采用一阶曲面近似，并使用 $\mathscr{P}_1$阶单元来表示相场函数 ϕ和化学势 μ。如参考文献 71 和 72 已通过数值计算所示，粗化过程完全由线张力驱动，球面几何不会影响标度行为。与二维情形的理论预测一致，我们得到$l \sim t^{-1/3}$。

按照前一个基准问题中的类似定义，对于固定的 $\varepsilon = 2$，我们计算不同网格加密程度下的误差及相应的实验收敛阶。我们从相同的初始条件开始（见图 2-(a) 左上图），然后对区域 $\phi \in [-0.95, 0.95]$ 进行逐步加密，界面处的网格尺寸为 $h = 1.26$，0.89，0.63，0.41，0.31，0.22 和$h_* = 0.11$，并将后者设为参考层级。我们考虑终止时间$T = 200$，并为所有模拟选取固定的时间步 $\tau = 1$。

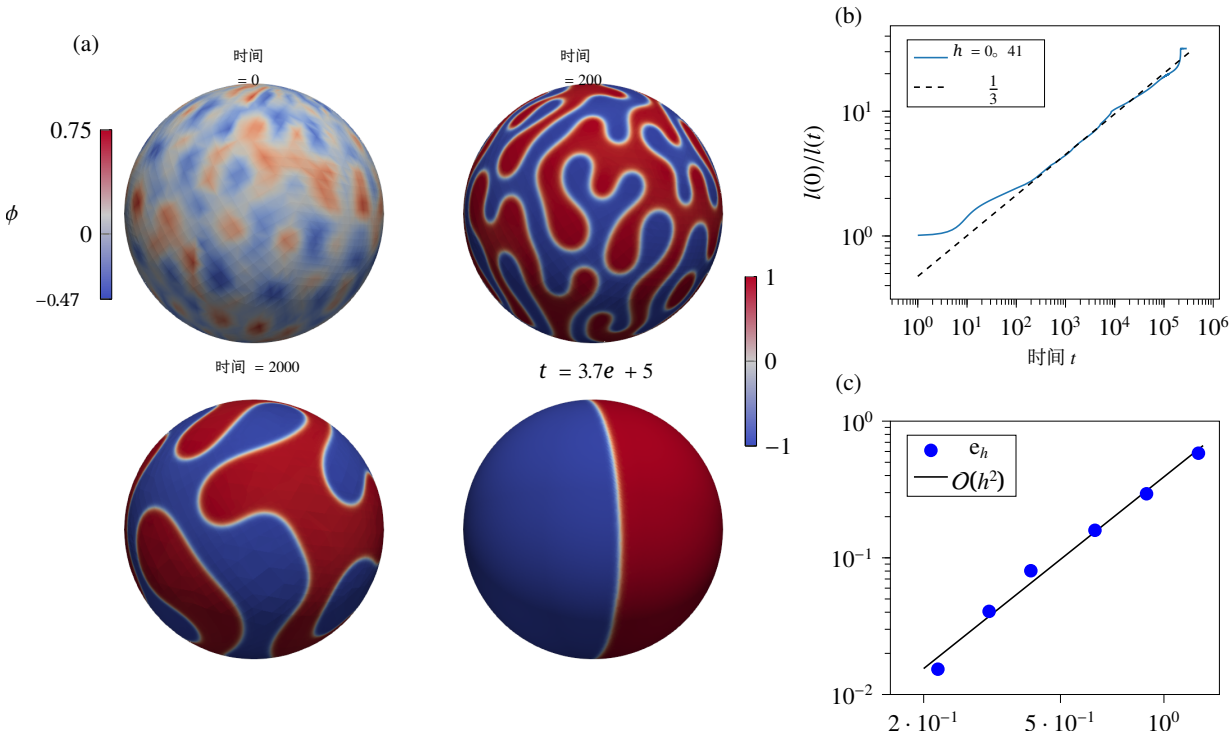


图 2. 基准问题上的曲面 Cahn–Hilliard 模型的数值解（参考文献 70）。（a）在时间 $t = 0, 200, 2000, t = 3.7e + 5$ 时的近似解。（b）近似界面长度随时间变化的倒数（以初始长度归一化），以及阶数为 $1/3$ 的插值线。（c）时间区间 $[0, 200]$ 内随网格参数 h 细化的实验收敛阶。

数值解在定性上与图 2-(a) 所示的解等效。图 2-(c) 展示了误差值，并表明h具有二阶收敛。

2. 曲面 ***Navier–Stokes*** 方程

已有多种数值方法被提出，用于求解静止曲面上的不可压缩曲面 Navier–Stokes 方程。一种可行方案是采用涡量/流函数公式：先将问题转化为一组曲面标量偏微分方程，再利用成熟的方法求解，例如曲面有限元法（参考文献 19、32 和 34）、迹有限元法（参考文献 60）以及谱方法（参考文献 73）。采用 u、p 变量的公式需要处理切向量场，相关方法包括离散外微分法（DEC）（参考文献33）、曲面有限元法（参考文献 20、21、37 和 74）以及迹有限元法（参考文献 23 和 60）。此外，也已开发出格子玻尔兹曼方法来求解曲面纳维–斯托克斯方程（参考文献 22）。目前尚未提出精确的基准问题。本文考虑一种曾用于比较不同数值方法的设定（参见参考文献33），并将几何和拓扑影响纳入考量。曲面 $\mathscr{S}$ 由水平集函数 $\varphi(\mathrm{x}) = (\mathrm{a}^2 + \mathrm{x}_1^2 + \mathrm{x}_2^2 + \mathrm{x}_3^2)^2 - 4\mathrm{a}^2(\mathrm{x}_1^2 + \mathrm{x}_2^2) - \mathrm{c}^4$, 定义，其中 $\mathrm{x} = (\mathrm{x}_1, \mathrm{x}_2, \mathrm{x}_3) \in \mathbb{R}^3$，且 $\mathrm{a} = 0.72$、$\mathrm{c} = 0.75$[75]。初始速度定义为 $\mathrm{u}_0 = \boldsymbol{\nu} \times (0, 1, 1)$，如图 3-(a) 所示。我们考虑向 Killing 向量场弛豫的过程，并计算动能 $E = \frac{1}{2}\int_{\mathscr{S}} \|\mathbf{u}\|^2 \, \mathrm{d}\mathscr{S}$。该能量不断耗散，且下界为最终形成的 Killing 向量场的能量。当 $\mathrm{Re} = 10$ 时，演化过程以流线形式展示于图 3-(d)。最终解在对称轴上有两个涡旋。除了与参考文献33在定性上相符之外，我们还分析了不可压缩误差 $e_{\mathrm{div}_P} = \|\mathrm{div}_P \mathbf{u}\|_{L^\infty(L^2)}$和能量误差 $e_E = \|E - E_{ref}\|_{L^\infty}$相对于 h和τ的变化，其中 $\tau \sim h^2$。对于 $\mathrm{Re} = 10$, 我们以参考文献33中的离散外微分解作为参考 E^{ref}。图 3-(b) 显示，不可压缩误差 e^{div_P}呈二阶收敛，这与参考文献 60 中针对曲面 Stokes 模型得到的结果相符，并被认为是最优的。图 3-(c) 还显示，能量误差 e_E呈二阶收敛。图 3-(e) 展示了不同细化层级下动能E 的演化，并同时给出了取自参考文献33的参考解。

3. 耦合

对于耦合，我们采用二维 Navier–Stokes–Cahn–Hilliard 方程中成熟的方法。这些方法已在基准问题（参考文献 46）上得到充分测试，并且可以一对一地扩展到曲面。因此，我们只需在每个时间步分别迭代问题 1 和问题 2 一次。额外的曲率项阶数较低，不应影响算法的数值性质。

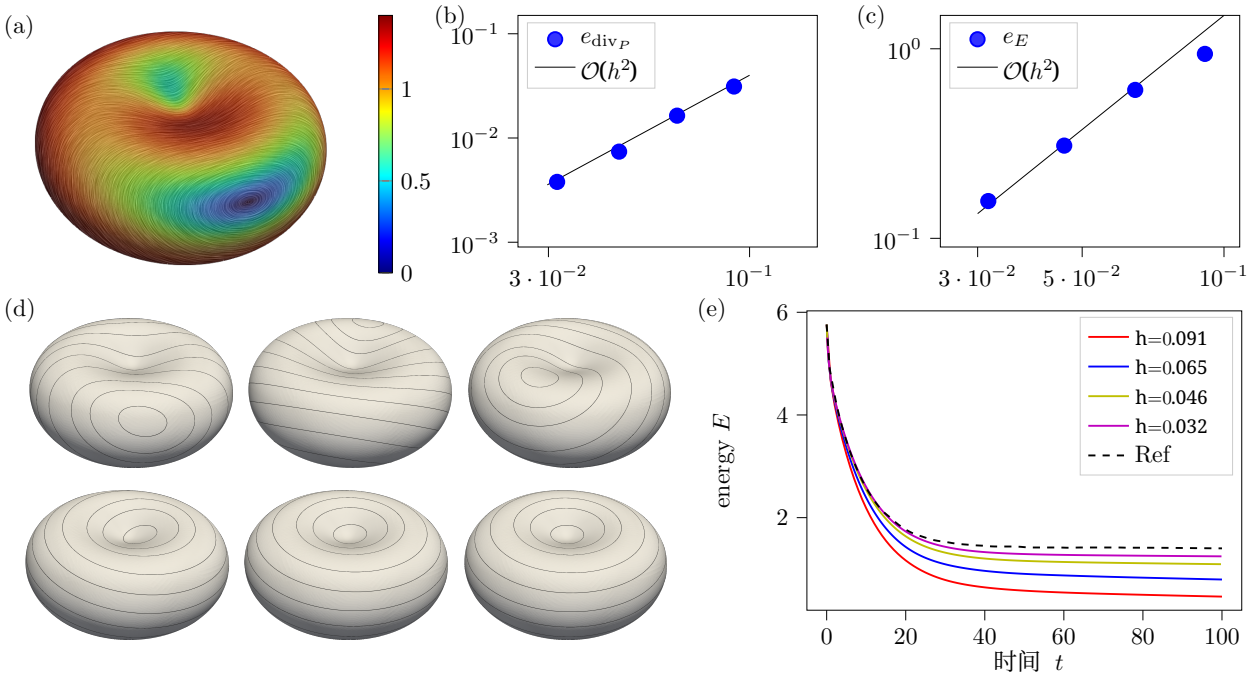


图3. 曲面 Navier–Stokes 方程的数值解。(a) 速度的初始值，颜色编码由 LIC 滤波器根据速度大小突出显示。(b) 不可压缩误差 e_{div_P} 的收敛性研究。(c) 能量误差 e_E 的收敛性研究，并以参考文献33中的相应离散外微分解为参考。(d) 速度场的弛豫过程，以流线快照呈现，时间为$t = 0$，10，20，50，75，100，最终得到 Killing 向量场。(e) 不同细化层级下动能E的演化，并与参考解进行比较。

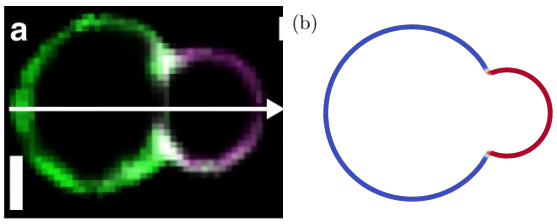


图4. 平衡构型。相分离态赤道平面的图像。(a) 支架脂质囊泡（SLV）沿对称轴的荧光强度。经许可转载自参考文献17，图 3。(b) 我们模拟得到的同一赤道平面上的最终相分离态。

III. 结果

我们开展了一系列数值实验，旨在研究流动以及弯曲贡献所产生的额外曲率项对两相脂质膜粗化的影响。我们考虑一种与参考文献 17 中的非对称哑铃形（“雪人形状”）相似的几何形状。它由两个半径不同的球体并集构成：半径为 $R_1 = 1$ 的球面与半径为 $R_2 = 0.5$的球面相交，并对交界处进行平滑处理。图 4 展示了沿对称轴的剖面，以及与一个取自参考文献 17 的支架脂质囊泡（SLV）实验结果。

所考虑的几何非常适合研究附加曲率项的影响。参考文献 17 已研究了这种影响对平衡构型和几何对相图的影响。因此，此处我们只关注动力学。我们考虑式 (3) 中定义的$\kappa(\phi)$，其中 $\kappa_1 = 0.001$ $\kappa_2 = 0.1$，并指定 $\mathscr{H}_0(\phi) = \mathscr{H}_0 = 0$。我们改变雷诺数 Re $= 3$，1 和 0。1，并考虑三组初始构型。具体而言，我们为相$\phi = 1$设置均匀分布的圆形区域，并在其他位置设置 $\phi = -1$，使平均值分别为 0。5、0。35 和 0。16，以表示组成分别为 50 : 50、65 : 35 和 84 : 16 的情况。后一种情况对应于相 $\phi = -1$ 占据大球、相 $\phi = 1$ 占据小球的情形，正如在与实验数据（图 4）的定性比较以及粗化过程和表面流的示意图（图 5）中所考虑的那样。此外，为了比较，我们通过求解问题 1 并令$\mathbf{u}^{n-1} = 0$，来考虑无流动时的演化。结果标记为 CH。图 5 展示了相场函数 ϕ 和速度$\mathbf{u}$ 随时间演化的快照，以 Re $= 1$且组成为 84 : 16 的情况为例。我们得到一个经典粗化过程，其中岛状结构不断合并并粗化。然而，由于弯曲项和相特定弯曲刚度 κ所产生的附加曲率项，

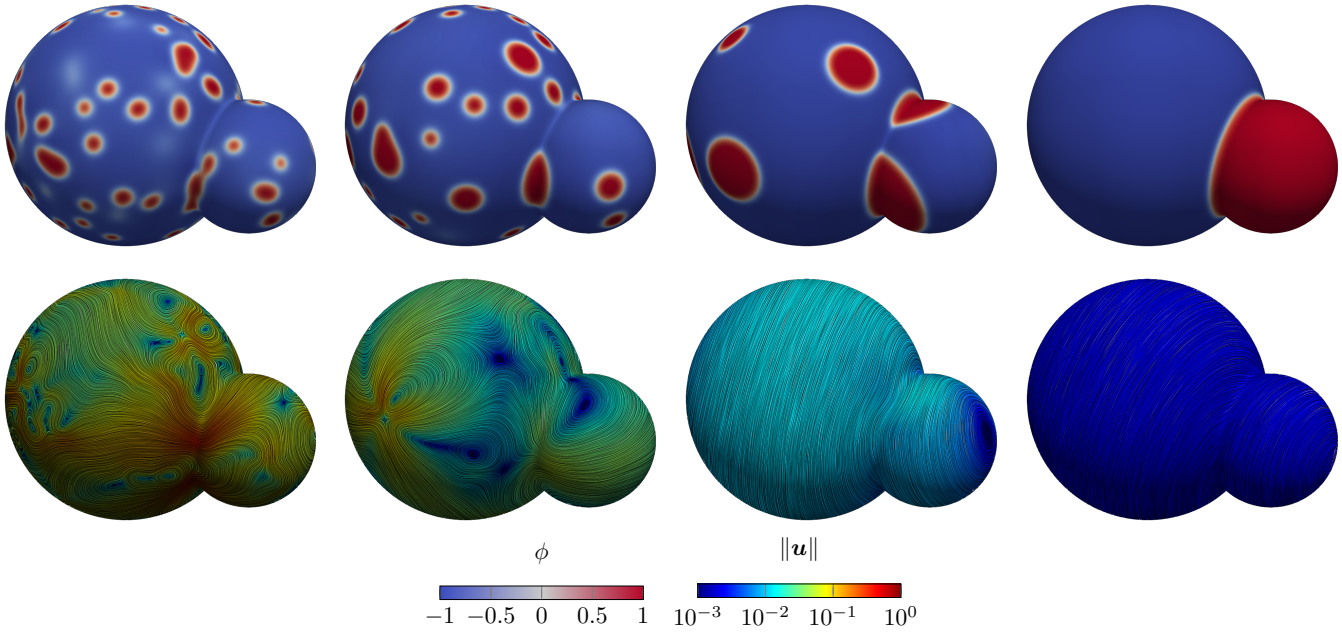


图 5. 两相流问题在$t = 0.2$，1。0，10，1200 时刻的演化快照（从左到右）。上排：相场函数 ϕ。下排：速度 **u**，通过线积分卷积滤波器进行可视化，并按速度大小以对数尺度着色。

该过程会朝着最终构型演化，其中相 $\phi = -1$ 占据大球，而相 $\phi = 1$占据小球。表面流受到几何的影响，但主要受脂质斑块变化的影响；这些变化在合并事件发生时幅度较大。在较晚时刻，速度几乎为零。

我们首先讨论界面长度的标度行为。图 6 的 (a)–(c) 面板展示了所研究组分和雷诺数 Re 下的结果，以及针对二维提出的理论标度指数：-1 黏性流体动力学标度，$-1/2$ 惯性流体动力学标度，以及 $-1/3$ 扩散标度。我们从未观察到与黏性流体动力学标度相关的快速粗化。只有在组成为 50 : 50 时，我们才观察到标度指数依赖于 Re，至少在某些时间段内如此。参考文献 76 中，作者认为流动的影响下不存在自相似生长，标度指数源于快速黏性流体动力学标度与缓慢扩散标度的相互作用，其取值介于 $-2/3$ 和$-1/3$ 之间，具体取决于 Re。我们关于指数依赖于 Re 的结果证实了这一发现，适用于所研究的曲面。不过，我们的结果还显示，粗化会在较长时间段内停滞。解会稳定在局部极小值处。下文将分析这些局部极小值是由曲面的几何性质引起的。只有在某些情况下，解才会脱离这些构型，继续粗化至平衡态。对于其他组分，即 65 : 35 和 84 : 16，流场的影响很小，已无法加速粗化过程。对于所有研究的 Re，直到较晚时间，我们均得到 $l \sim t^{-1/3}$。这与参考文献 22 中关于环面所得的结果一致。

他们对这一效应的解释与以下因素有关：在流动作用下，孤立斑块更快地弛豫至圆形；此外，圆形斑块遵循扩散标度。为确认这一结果，我们分析了各相的连通性以及孤立斑块的界面形状。这可以通过计算拓扑和几何度量来实现。我们考虑的第一个度量由零阶贝蒂数N_{betti}定义，它统计相 $\phi = 1$ 的孤立斑块数量；类似的表征方法见参考文献 52 和 53。我们对每个时间点计算这一量，并将结果展示于图 6 的 (d)–(f) 面板中。贝蒂数对雷诺数的依赖性较弱，但我们清楚地看到它与组成有关。对于组成比 50 : 50，早期贝蒂数较低，随后随时间推移进一步下降；对于 65 : 35，贝蒂数明显较大，但随时间的下降也更显著。较大的贝蒂数源于孤立斑块的形成，而较快的下降则可能与粗化过程早期频繁发生的合并事件有关。组成比为 84 : 16 时的行为与 65 : 35 的情况相似，早期贝蒂数更大，下降也更显著。在这种情况下，斑块更小、更孤立，因此合并事件较少，贝蒂数的降低主要由扩散过程造成。球形单层囊泡上的斑块数量也曾得到类似的定性研究（参考文献 77）。我们通过计算界面形状分布（ISD）来测量孤立斑块的界面形状。ISD 是一个概率密度函数，表示在界面上找到具有特定主曲率的点的概率。ISD 是材料科学和流体力学中用于几何表征界面形态的一种成熟方法（参考文献 54、55、78 和 79）。针对我们的研究情境进行调整后

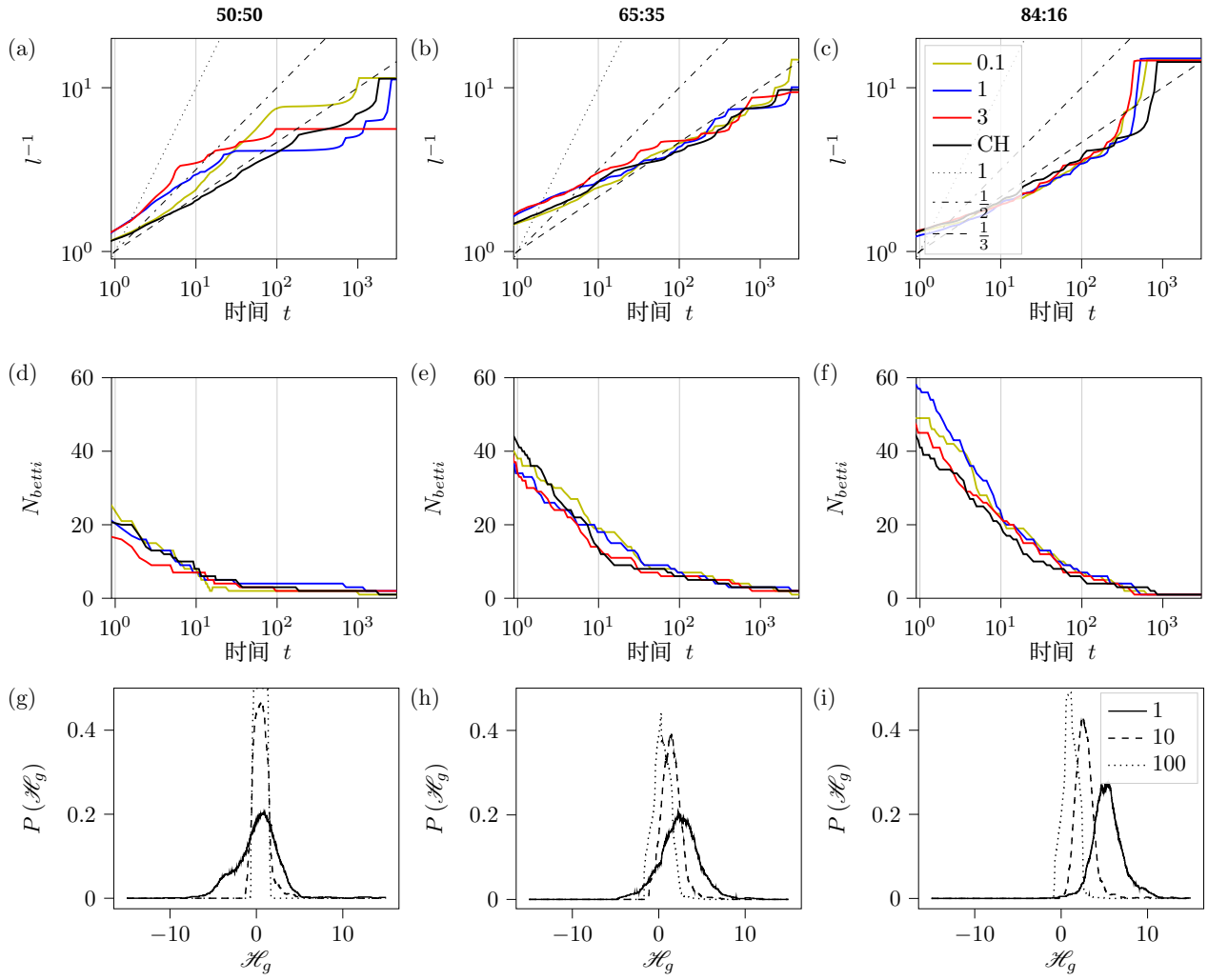


图 6. 不同组成和雷诺数 Re 下界面长度、拓扑性质及几何特征的标度关系。(a)-(c) 界面长度的标度关系及二维中的理论预测指数。图例适用于所有面板，并标示 Re 的取值。(d)-(f) 零阶贝蒂数的演化。(g)-(i) 不同时间点的测地曲率界面形状分布 (ISD) $\mathscr{H}_g$ $t = 1$, 10，100，Re $= 1$。对应的时间点在面板 (a)-(f) 中突出显示。

对于曲面上两相之间的界面，该方法考虑测地曲率 $\mathscr{H}_g$ 以及相应的概率密度$P(\mathscr{H}_g)$。

我们采用相场近似来计算 $\mathscr{H}_g$。在二维中，平均曲率 $\mathscr{H}$ 可以用化学势来近似，即 Cahn-Hilliard 能量 $\mathscr{F}_{CH} = \int_\Omega \frac{\varepsilon}{2}\|\nabla\phi\|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)d\Omega$ 的变分导数；可参见经典 Allen-Cahn 方程的匹配渐近分析（参考文献 80）。在我们的情况下，化学势 μ（如方程（5）中所考虑的，其中 $\kappa = \mathscr{H}_0 = 0$ 和 $\tilde{\sigma} = \frac{2\sqrt{2}}{3}$）提供了测地曲率 $\mathscr{H}_g$ 的弥散界面近似；相应的匹配渐近分析见参考文献 81。通过考虑弱形式，可以根据相场函数 ϕ 计算化学势 μ。因此，我们通过卷积将 $\mathscr{H}_g$ 近似为：

$$\mathscr{H}_g(\boldsymbol{y}) = \int_{\mathscr{S}} \frac{\varepsilon}{2}(\nabla_{\mathscr{S}}\phi(\mathbf{x}), \nabla_{\mathscr{S}}\psi(\mathbf{x},\boldsymbol{y})) + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi(\mathbf{x}))\psi(\mathbf{x},\boldsymbol{y}), \mathrm{d}\mathscr{S}$$

其中，$\psi(\mathbf{x}\ \boldsymbol{y})$ 是一种磨光函数，$\mathbf{x} \in \mathscr{S}$和 $\boldsymbol{y} \in \{\phi = 0\}$。我们考虑雷诺数 Re $= 1$，并比较$P(\mathscr{H}_g)$ 在时间$t = 1, 10, 100$ 时的情况，见图 6 的 (g)-(i) 面板。对于所有组分，界面形状分布随时间变得更加尖锐，平均值逐渐趋于较小的正值，表明其演化方向是形成较大的圆形。然而，不同组分之间也存在差异。对于 50 : 50 的组分，在早期，界面形状分布在负 $\mathscr{H}_g$ 区域占有显著比例，因此存在凹陷部分，这表明其结构更类似双连续结构。相比之下，对于组分

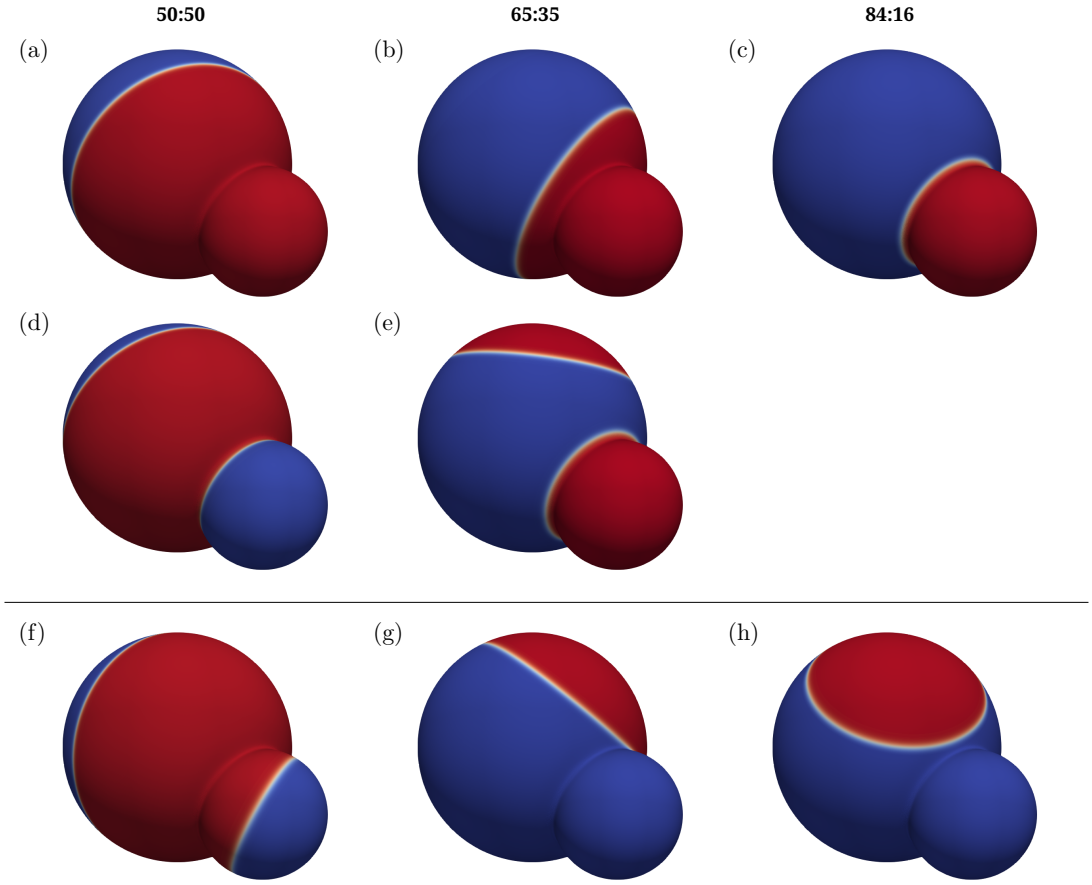


图7. 不同组分对应的不同最终构型。(a)–(e) 有弯曲力。(f)–(h) 无弯曲力。这些构型取决于初始条件。

84:16，界面形状分布完全位于 $\mathscr{H}_g$ 为正的区域，因此存在凸起部分，这是孤立圆形岛的特征。这些结果证实了参考文献 22 中的论点。值得指出的是，图 6-(g) 中$t = 100$ 时、组分为 50 : 50 所对应的显著峰值，与图 6-(a)（蓝色曲线）中的平台相对应，源于由大小相同的圆形岛构成的构型。图 6-(c) 中晚期的急剧增加，对应于界面与颈部的排列。对于组分 84 : 16，平衡构型对应于相 $\phi = -1$ 占据大球面、相 $\phi = 1$ 占据小球面的情况，如图4和图5所示。

图7展示了最终构型的若干不同可能性。这些构型取决于初始条件。虽然在第 II E 1 节的球面基准问题中，最终解的任意旋转都具有相同的能量，但所考虑的“雪人形”几何打破了这种对称性。最终构型的界面长度取决于其位置，而对于组分 84:16，这种依赖性最为明显。图 7中的(c)和(h)展示了两种构型，一种包含弯曲项，另一种不包含。最优解出现在界面沿颈部分布的情况下；这种情况在包含弯曲项时得以实现，而一个测地圆在没有弯曲的情况下，大球面上会形成该相。界面l_ε 的长度由能量中的 Cahn-Hilliard 部分测量。根据第 II E 1 节中所述的方法计算长度值，我们得到$l_\varepsilon = 3.1$（有弯曲，图7-(c)）和$l_\varepsilon = 4.6$（无弯曲，图7-(h)）。因此，弯曲项有利于形成最优构型。这些构型之间的能量势垒很高，因为几何形状要求先增大界面，才能将图7-(h)中的解转变为图7-(c)中的解。对于其他组分，颈部也起着重要作用。在图7的(a)、(b)、(e)三个面板中，小球被相 $\phi = 1$ 完全覆盖；由于其弯曲刚度较低，这在能量上更有利。在图7-(d)中情况相反：小球被相 $\phi = -1$ 完全覆盖，部分界面沿着颈部分布，而相 $\phi = 1$ 位于能量上不利的大球面上。然而，若要通过缩短界面或重新分配各相来进一步降低能量，就需要将界面移离颈部，而这只有先增大界面才能实现。因此，几何形状再次造成了能量势垒。这些构型解释了图 6-(a)中观察到的平台。没有弯曲时，不会偏好任何空间构型。最终构型完全由界面长度最小化决定。

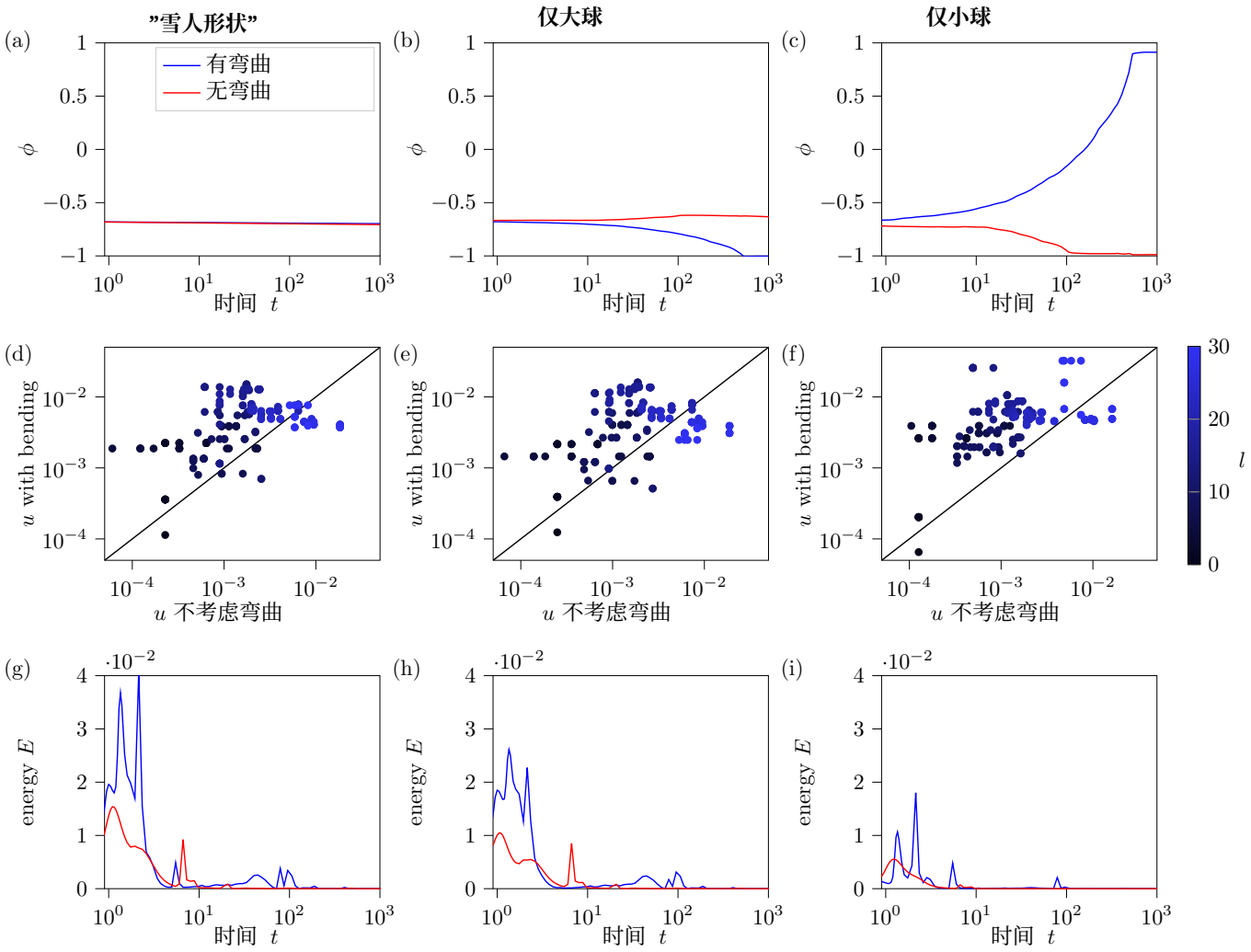


图8. 弯曲力对“雪人形状”中分布 84 : 16 的演化的影响。结果分别展示了整个几何结构、大球和小球上的情况。我们比较了有弯曲力和无弯曲力的模拟结果。(a)-(b)-(c) ϕ 随时间的平均值。(d)-(e)-(f) 平均速度 u 的大小与界面长度 l的关系。将无弯曲项时的数值与有弯曲项时对应的数值进行比较，并以颜色表示数据点对应的界面长度。(g)-(h)-(i) 有弯曲项和无弯曲项时动能 E 的演化。

不过，这一过程也受几何形状影响，因为该长度对应于测地线长度。针对相应组分计算界面l_ε 的长度，得到：对于 50 : 50 组分，$l_\varepsilon = 6.3$ （有弯曲，图7-(a)）、$l_\varepsilon = 9.14$ （有弯曲，图7-(d)）和$l_\varepsilon = 3.4$ （无弯曲，图7-(f)）；对于 65: 35 组分，$l_\varepsilon = 5.5$ （有弯曲，图7-(b)）、$l_\varepsilon = 8.2$ （有弯曲，图7-(e)）和$l_\varepsilon = 6.1$ （无弯曲，图7-(g)）。这些例子表明，如果只考虑界面长度，弯曲项也可能导致非最优解。这一观察结果与参考 17 一致；该文探讨了组成与几何形状在平衡构型中的复杂相互作用。

现在我们讨论弯曲项对演化的影响。最终的空间排列并非唯一受到影响不仅取决于几何性质，也取决于随时间的演化。为此，我们考察“雪人形状”中两个不同球体子区域上的粗化过程。图8展示了组成比为 84:16、雷诺数为 $=1$时，有弯曲项和无弯曲项的模拟结果。图8-(a)显示了“雪人形状”上 ϕ 的平均值，这基本上只是验证了守恒演化；(b) 和 (c) 分别显示了大球和小球上的平均值。我们比较了有弯曲项和无弯曲项时的模拟结果。有弯曲时（无弯曲时），大球上的解收敛到一个 $\phi = -1$ 的状态（基本保持在其平均值），而小球上的解则收敛到一个 $\phi = 1$ （$\phi = -1$）的状态。这是因为大球的面积更大，因此相更有可能出现在大球上。在图8的 (d)-(f) 中

我们考察弯曲项对速度 **u** 的影响。我们在每个时间步计算整个区域、大球和小球上的平均速度。为了比较有弯曲和无弯曲时的结果，我们选取界面长度 l 相同的时刻，并比较这些数值。图8-(d)-(f)展示了平均速度大小 u 与界面长度 l 的关系。位于对角线以上的点表示弯曲力使速度增大。在三幅图中，这一效应都很显著，在小球上尤为明显。数据点的颜色对应界面长度 l。在有弯曲项和无弯曲项两种情况下，较长的界面（对应较早的时间）都与较大的速度相关。至少从定性上看，图8-(g)-(i)所示的动能 E 演化也印证了这些结果。有弯曲力时，动能显著高于无弯曲力时；但在两种情况下，动能都会随时间衰减并趋于零。

IV. 讨论

我们对理想化生物膜中膜曲率对脂质相空间排列及其演化的作用进行了详细的计算研究。我们研究多组分支架脂质囊泡（SLV），考察膜黏度、相依赖弯曲刚度和相依赖自发曲率对粗化过程及其形成的平衡构型的影响。该数学模型源自对具有表面流的 Jülicher-Lipowski 能量（参考 24）的相场近似。模型建立在静止曲面上，可视为带有额外相依赖弯曲项的表面 Navier-Stokes-Cahn-Hilliard 模型。我们采用曲面有限元方法（参考 50 和 51）求解这些方程，并结合曲面斯托克斯方程的数值分析结果以确保收敛。我们通过对涉及的子问题开展收敛性研究，仔细验证了该算法。对于这些子问题的耦合，我们借鉴了二维领域中成熟的策略。在物理研究中，我们考虑了与参考 17 中实验相同的“雪人形状”几何结构。我们分析了雷诺数 Re 和组分对标度行为的影响，并通过考察拓扑和几何度量来解释结果，同时确定弯曲项对演化过程及最终平衡形状的影响。关于标度行为，二维研究中已知的流体动力学和组分的影响，在曲面上至少在定性层面上也同样存在，并且可以用类似的论据加以解释。不过，从定量角度看，颈部等局部几何特征（如“雪人形状”中的颈部）可能导致粗化过程中出现多个局部极小值和延展平台。当组分允许实现几何上有利的构型时，流体动力学会加快系统向该构型的收敛。在我们的设定中，这对应于 84 : 16 的组分：$\phi = 1$ 相位于小球上，$\phi = -1$ 相位于大球上，而界面 $\phi = 0$ 沿着颈部延伸。弯曲刚度和自发曲率的相依赖性质会影响粗化过程。这些性质会引导弯曲刚度较低的脂质相移向平均曲率较高的区域，引导弯曲刚度较高的脂质相移向平均曲率较低的区域，并引导具有自发曲率的相移向曲率值相对应的区域。这些弯曲项是流场的额外驱动力，并会导致观察到的动能增加。

自发曲率会影响粗化过程。这些性质会引导弯曲刚度较低的脂质相移向平均曲率较高的区域，引导弯曲刚度较高的脂质相移向平均曲率较低的区域，并引导具有自发曲率的相移向曲率值相对应的区域。这些弯曲项是流场的额外驱动力，并会导致观察到的动能增加。

尽管所考虑的“雪人形状”看起来可能是一个非常特殊的情形，观察到的现象也像是人为构造出来的，但我们预计，只要允许曲面演化，这些效应就会产生更广泛的影响。在曲面演化的情形下，“雪人形状”可以与内吞作用和胞吐作用中观察到的形态联系起来。流体动力学增强的相演化可能是这些过程中的一个关键力学因素。然而，虽然内吞作用和胞吐作用的研究采用了相场模型，却没有考虑曲面黏度。用于求解演化曲面上曲面纳维–斯托克斯方程的数值工具，即所谓的流体可变形曲面，已经得到开发（参考文献 36、37 和 74）。这些方法还需要扩展到两相流。不过，在演化曲面上推导相应的热力学一致的两相流问题，还需要进一步斟酌，见参考文献 82–85。

致谢

本研究得到德国研究联合会（DFG）研究单元“矢量值与张量值曲面偏微分方程”（FOR 3013）的资助。此外，我们还感谢德累斯顿工业大学 ZIH 和于利希研究中心 JSC 分别通过 WIR 和 PFAMDIS 项目提供计算资源。

作者声明

作者贡献

E.B. 和 V.K. 编写了代码，完成了所有模拟，分析了数据，并参与了概念构思和论文撰写。A.V. 负责监督研究，并参与了概念构思、数据分析和论文撰写。

利益冲突

作者声明不存在任何竞争性利益。

数据可用性

支持本研究结论的数据可在提出合理请求后向通讯作者获取。

[1]H. T. McMahon 和 J. L. Gallop，《膜曲率与细胞膜动态重塑的机制》，《自然》438，590–596（2005年）。[2]C. A. Stanich、A. R. Honerkamp-Smith、G. G. Putzel、C. S. Warth、A. K. Lamprecht、P. Mandal、E. Mann、T.-A. D. Hua 和 S. L. Keller，《脂质膜中畴的粗化动力学》，《生物物理学杂志》105，444–454（2013年）。[3]J. Fan、T. Han 和 M. Haataja，《流体动力学对平面脂质双层膜旋节线分解动力学的影响》，《化学物理杂志》133，235101（2010年）。[4]B. A. Camlay 和 F. L. H. Brown，《准二维膜相分离动力学中的动态标度》，《化学物理杂志》135，225106（2011年）。[5]P. G. Saffman 和 M. Delbrück，《生物膜中的布朗运动》，《美国国家科学院院刊》72，3111–3113（1975年）。[6]T. Baumgart、S. T. Hess 和 W. W. Webb，《对生物膜模型中曲率与线张力耦合所致共存流体畴的成像》，《自然》425，821–824（2003年）。[7]T. Baumgart、S. Das、W. W. Webb 和 J. T. Jenkins，《流体相共存的巨型囊泡中的膜弹性》，《生物物理学杂志》89，1067–1080（2005年）。[8]X. Wand 和 Q. Du，《通过弥散界面方法对多组分脂质膜和开放膜进行建模与模拟》，《数学生物学》56，347–371（2008年）。[9]J. S. Lowengrub、A. Rätz 和 A. Voigt，《多组分囊泡动力学的相场建模：旋节线分解、粗化、出芽与裂变》，《物理评论E》79，031926（2009年）。[10]C. M. Elliott 和 B. Stinner，《两相生物膜的表面相场模型》，《工业与应用数学学会应用数学杂志》70，2904–2928（2010年）。[11]E. L. Elson、E. Fried、J. E. Dolbow 和 G. M. Genin，《生物膜中的相分离：理论与实验的结合》，《生物物理学年度评论》39，207–266（2010年）。[12]H. Garcke、J. Kampmann、A. Rätz 和 M. Röger，《用于模拟细胞膜脂筏形成的表面 Cahn–Hilliard–体扩散耦合系统》，《数学模型与应用科学方法》26，1149–1189（2016年）。[13]P. Gera 和 D. Salac，《多组分三维囊泡建模》，《计算机与流体》172，362–383（2018年）。[14]C. Zimmermann、D. Toshniwal、C. M. Landis、T. J. Hughes、K. K. Mandadapu 和 R. A. Sauer，《变形表面相变的等几何有限元公式》，《计算机方法在应用力学与工程中的应用》351，441–477（2019年）。[15]P. Fonda、M. Rinaldin、D. J. Kraft 和 L. Giomi，《曲面基底上二元混合物的界面几何》，《物理评论E》98，032801（2018年）。[16]P. Fonda、M. Rinaldin、D. J. Kraft 和 L. Giomi，《曲面上二元混合物的热力学平衡》，《物理评论E》100，032604（2019年）。[17]M. Rinaldin、P. Fonda、L. Giomi 和 D. J. Kraft，《支架脂质囊泡中的几何钉扎与反混合》，《自然·通讯》11，4314（2020年）。[18]M. Arroyo 和 A. DeSimone，《流体膜的弛豫动力学》，《物理评论E》79，031915（2009年）。[19]I. Nitschke、A. Voigt 和 J. Wensch，《流形上不可压缩两相流的有限元方法》，《流体力学杂志》708，418–438（2012年）。[20]S. Reuther 和 A. Voigt，《利用曲面有限元求解不可压缩曲面 Navier–Stokes 方程》，《流体物理学》30，012107（2018年）。[21]T.-P. Fries，《流形上不可压缩 Navier–Stokes 流的高阶表面有限元法》，《国际数值方法：流体》88，55–78（2018年）。[22]V. E. Ambrus、S. Busuioc、A. J. Wagner、F. Paillusson 和 H. Kusumaatmaja，《曲面上的多组分流：一种 vielbein 格子玻尔兹曼方法》，《物理评论E》100，063306（2019年）。[23]M. Olshanskii、Y. Palzhanov 和 A. Quaini，《流形上 Cahn–Hilliard 模型与 Navier–Stokes–Cahn–Hilliard 模型的比较》，《越南数学杂志》50，929–945（2022年）。[24]F. Jülicher 和 R. Lipowsky，《畴诱导囊泡出芽》，《物理评论快报》70，2964–2967（1993年）。[25]P. B. Canham，《最小弯曲能可能解释人类红细胞的双凹形状》，《理论生物学杂志》26，61–76（1970年）。[26]W. Helfrich，《脂质双层的弹性性质——理论与可能的实验》，《自然研究杂志C辑》28，693–703（1973年）。[27]C. M. Elliott、L. Hatcher 和 B. Stinner，《近球形两相生物膜相场模型的尖锐界面极限》，《界面与自由边界》24，263–286（2022年）。[28]S. Aland、S. Egerer、J. Lowengrub 和 A. Voigt，《黏性流体中局部不可伸展囊泡的弥散界面模型》，《计算物理学杂志》277，32–47（2014）。[29]F. Haußer、W. Marth、S. Li、J. S. Lowengrub、A. Rätz 和 A. Voigt，《双组分囊泡的热力学一致模型》，《国际生物数学与生物统计学杂志》2，19–48（2013）。[30]J. S. Lowengrub、J.-J. Xu 和 A. Voigt，《多组分液滴与囊泡的简单模型中的表面相分离与流动》，流体动力学、材料与过程 3，1–19（2007）。[31]H. Garcke 和 R. Nurnberg，《轴对称两相生物膜梯度流的保结构离散化》，IMA 数值分析杂志 41，1899–1940（2021）。[32]S. Reuther 和 A. Voigt，《曲面上流动中的曲率与涡旋相互作用》，多尺度建模与仿真 13，632–643（2015）。[33]I. Nitschke、S. Reuther 和 A. Voigt，《曲面 Navier–Stokes 方程的离散外微分法（DEC）》，载于《流体界面中的输运过程》，D. Bothe 和 A. Reusken 编（施普林格国际出版社，2017），第177–197页。[34]S. Reuther 和 A. Voigt，《勘误：“曲面上流动中的曲率与涡旋相互作用”》，多尺度建模与仿真 16，1448–1453（2018）。[35]T. Jankuhn、M. A. Olshanskii 和 A. Reusken，《嵌入曲面上的不可压缩流体问题：建模与变分形式》，《界面与自由边界》20，353–377（2018）。[36]A. Torres-Sánchez、D. Millán 和 M. Arroyo，《流体可变形曲面的建模：重点关注生物界面》，《流体力学杂志》872，218–271（2019）。[37]S. Reuther、I. Nitschke 和 A. Voigt，《流体可变形曲面的数值方法》，《流体力学杂志》900，R8（2020）。[38]P. L. Lederer、C. Lehrenfeld 和 J. Schöberl，《曲面上不可压缩流的无散切向有限元方法》，《国际数值方法工程杂志》121，2503–2533（2020）。[39]A. Yavari、A. Ozakin 和 S. Sadik，《变形环境空间中的非线性弹性》，非线性科学杂志 26，1651–1692（2016）。[40]H. Koba、C. Liu 和 Y. Giga，《演化曲面上不可压缩流体系统的能量变分方法》，应用数学季刊 75，359–389（2017）。[41]T.-H. Miura，《关于运动薄区域中不可压缩流体的奇异极限方程》，应用数学季刊 76，215–251（2018）。[42]H. Koba、C. Liu 和 Y. Giga，《“演化曲面上不可压缩流体系统的能量变分方法”勘误》，应用数学季刊 76，174–152（2018）。[43]J. Prüss、G. Simonett 和 M. Wilke，《关于曲面上的纳维–斯托克斯方程》，演化方程杂志 21，3153–3179（2021）。[44]P. C. Hohenberg 和 B. I. Halperin，《动态临界现象理论》，现代物理评论 49，435–479（1977）。[45]M. Gurtin、D. Polignone 和 J. Vinals，《用序参量描述的两相二元流体与不互溶流体》，数学模型与应用科学方法 6，815–831（1996）。[46]S. Aland 和 A. Voigt，《二维气泡动力学弥散界面模型的基准计算》，《国际数值方法：流体》69，747–761（2012）。[47]H. Abels、H. Garcke 和 G. Grün，《具有不同密度的不可压缩两相流的热力学一致、客观弥散界面模型》，数学模型与应用科学方法 22，1150013（2012）。[48]H. Abels，《关于匹配密度的黏性不可压缩流体两相流弥散界面模型》，理论与应用力学档案 194，463–506（2009）。[49]F. Magaletti、F. Picano、M. Chinappi、L. Marino 和 C. M. Casciola，《二元流体 Cahn–Hilliard/纳维–斯托克斯模型的尖锐界面极限》，《流体力学杂志》714，95–126（2013）。[50]G. Dziuk 和 C. M. Elliott，《曲面偏微分方程的有限元方法》，数值数学学报 22，289–396（2013）。[51]M. Nestler、I. Nitschke 和 A. Voigt，《向量值与张量值曲面偏微分方程的有限元方法》，《计算物理学杂志》389，48–61（2019）。[52]O. Mickelin、J. Slomka、K. J. Burns、D. Lecoanet、G. M. Vasil、L. M. Faria 和 J. Dunkel，《球面上主动驱动流中的反常链式湍流》，《物理评论快报》120，164503（2018）。[53]M. Rank 和 A. Voigt，《曲面上的主动流动》，《流体物理学》33，072110（2021）。

[54]R. Mendoza、J. Alkemper 和 P. W. Voorhees，《粗化过程中枝晶微结构的形态演化》，《冶金与材料学报 A》34，481（2003）。[55] Y. Kwon、K. Thornton 和 P. W. Voorhees，《非守恒与守恒动力学下畴粗化过程中的形态与拓扑》，《哲学杂志》317-335，90（2010）。[56]A. Demlow，《曲面椭圆问题的高阶有限元方法与逐点误差估计》，《SIAM 数值分析杂志》47，805–827（2009）。[57]S. Praetorius 和 F. Stenger，《DUNE-CurvedGrid——用于曲面参数化的 DUNE 模块》，《数值软件档案》22，1–22（2020）。[58]M. Nestler、I. Nitschke、S. Praetorius 和 A. Voigt，《曲面上的取向有序：拓扑、几何与动力学的耦合》，非线性科学杂志 28，147–191（2018）。[59]P. Hansbo、M. G. Larson 和 K. Larsson，《曲面向量拉普拉斯算子有限元方法的分析》，IMA 数值分析杂志 40，1652–1701（2020）。[60]P. Brandner、T. Jankuhn、S. Praetorius、A. Reusken 和 A. Voigt，《曲面斯托克斯方程速度–压力形式与流函数形式的有限元离散方法》，《SIAM 科学计算杂志》44，A1807–A1832（2022）。[61]M. Nestler 和 A. Voigt，《曲面上的活性向列相动力学——几何力对拓扑缺陷运动模式的影响》，《计算物理通讯》31，947–965（2022）。[62]H. Hardering 和 S. Praetorius，《私人通信》。[63]T. Jankuhn 和 A. Reusken，《曲面向量拉普拉斯方程的迹有限元方法》，IMA 数值分析杂志 41，48–83（2021）。[64]T. Jankuhn、M. A. Olshanskii、A. Reusken 和 A. Zhiliakov，《曲面斯托克斯方程高阶迹有限元方法的误差分析》，《数值数学杂志》29，245–267（2021）。[65]H. Hardering 和 S. Praetorius，《张量曲面有限元的切向误差》，IMA 数值分析杂志（2022），10.1093/imanum/drac015。[66]S. Vey 和 A. Voigt，《 AMDiS：自适应多维模拟》，《计算机视觉与科学》 10，57–67（2007）。[67]T. Witkowski、S. Ling、S. Praetorius 和 A. Voigt，《可扩展自适应并行有限元方法的软件概念与数值算法》，《计算数学进展》41，1145–1177（2015）。[68]A. Rätz，《曲面卡恩–希利亚德方程的基准问题》，《应用数学快报》56，65–71（2016）。[69]X. Feng 和 A. Prohl，《Allen-Cahn 方程的数值分析及平均曲率流的近似》，《数值数学》94，33–65（2003）。[70]A. Jokisaari、P. Voorhees、J. Guyer、J. Warren 和 O. Heinonen，《相场模型数值实现的基准问题》，《计算。材料科学**126**, 139–151 (2017年). [71]A. Rätz and A. Voigt, “曲面上的偏微分方程——一种弥散界面方法,” 《数学科学通讯》**4**, 575–590 (2006). [72]T. Witkowski, R. Backofen, and A. Voigt, “膜结合蛋白对细胞膜中相分离和粗化的影响,” 《物理化学化学物理》**14**, 14509–14515 (2012年). [73]B. Gross and P. J. Atzberger, “曲面上的流体动力学流动：径向流形形状的谱数值方法,” 《计算物理学杂志》**371**, 663–689 (2018年). [74]V. Krause and A. Voigt, “具有守恒包围体积的流体可变形曲面的数值方法,” arXiv (2022), 10.48550/ARXIV.2210.03585.[75]我们注意到参考文献33中有一处排印错误，作者已确认这一点。 [76]A. Wagner and J. Yeomany, “相分离二元流体粗化过程中尺度不变性的破缺,” 《物理评论快报》**80**, 1429 (1998). [77]Y. Wang, Y. Palzhanov, A. Quaini, M. Olshanskii, and S. Majd, “多组分脂质囊泡中的脂质域粗化和流动性：一种基于连续介质的模型及其实验验证,” 《生物化学与生物物理学报》（BBA）—生物膜**1864**, 183898 (2022). [78]H. Henry and G. Tegze, “粗化动力学对微观结构有显著影响：黏度反差诱导的自相似性破缺,” 《物理评论E》**100**, 013116 (2019年). [79]W. B. Andrews, K. L. M. Elder, P. W. Voorhees, and K. Thornton, “传输机制对双连续结构粗化的影响：体扩散与表面扩散的比较,” 《物理评论材料》**4**, 013401 (2020年).[80]P. C. Fife and O. Penrose, “具有非守恒序参量的热力学一致相场模型的界面动力学,” 《电子微分方程杂志》**16**, 1–49 (1995). [81]M. Benes, M. Kolar, J. M. Sischka, and A. Voigt, “退化面积保持型表面 Allen-Cahn 方程及其尖锐界面极限,” arXiv (2023). [82]S. C. Al-Izzi and R. G. Morris, “发育过程中的主动流动与可变形曲面,” 《细胞与发育生物学研讨会》**120**, 44–52 (2021年). [83]L. A. Hoffmann, L. N. Carenza, J. Eckert, and L. Giomi, “缺陷介导形态发生理论,” 《科学进展》**8**, eabk2712 (2022). [84]I. Nitschke and A. Voigt, “运动曲面上的观察者不变时间导数,” 《几何与物理学杂志》**173**, 104428 (2022). [85]I. Nitschke, S. Sadik, and A. Voigt, “可变形曲面上的切向张量场——如何推导一致的 L^2-梯度流,” arXiv (2022), 10.48550/arXiv.2209.13272.