

ストークス流れ中の非球形カプセルの配向現象

石川 拓司¹, 大森 俊宏², 今井 陽介¹, 山口 隆美²

¹東北大学大学院・工学研究科

²東北大学大学院・医工学研究科

Takuji Ishikawa¹, Toshihiro Omori², Yohsuke Imai¹ and Takami Yamaguchi²

¹Department of Bioengineering and Robotics, Tohoku University

²Department of Biomedical Engineering, Tohoku University

要 旨

カプセルや細胞などの変形する粒子の力学は、膜の破断を取り扱う化学工学や医学分野等で重要となる。剛体楕円体のストークス流れ中の挙動は、Jefferyの理論によって記述されるが、楕円形状のカプセルの挙動は未だに不明な点が多い。本研究では、楕円体カプセルや赤血球を対象とし、定ずり流れ中の挙動を数値解析によって調べた。その結果、剛体楕円体の挙動は時間的に可逆的であるが、カプセルの場合には不可逆的となることが分かった。さらに、非球形カプセルは時間をかけて渦度方向またはせん断面に配向し、この配向現象は必ず速度によって分岐することが分かった。こうした非球形カプセルの配向現象は、粒子を整列・配向させる技術に応用できると考えられる。

1. 研究背景

血液は均質な流体ではなく、多数の赤血球が懸濁している液体である。そのため、血液のレオロジー特性や、血中物質の輸送を定量的に議論するためには、流動する赤血球の力学を理解する必要がある。赤血球膜は脂質二重層にスペクトリンのネットワークが裏打ちされた複合材料であり、内部にヘモグロビン溶液を含有しているため、力学的にはカプセルとしてモデル化できる。こうした変形するカプセルは赤血球に限ったものではなく、食品産業や化学工学、医工学等の分野で、重要な役割を担っている。

ストークス流れ中の剛体楕円体の挙動は、Jefferyの理論^[1]によって説明できるが、楕円形状のカプセルの挙動は未だに不明な点が多い。Jefferyの理論によれば、せん断流れ中の剛体楕円体は回転を続けるが、長い時間をかけてある方向に配向していくような挙動は示さない。一方、剛体楕円体の挙動に慣性が影響する場合^[2]や、剛体楕円体が粘弾性流体中にいるような場合^[3]には、せん断流れ中の剛体楕円体が長い時間をかけてある方向に配向することが知られている。では、粒子が変形能を持つ場合にはどうなるであろうか？エネルギー散逸が最小となるよう、運動形態を変化させるのであろうか、それともエネルギー散逸とは関係のない安定した運動モードがあるのだろうか？我々は最近、流体の慣性や粘弾性の無いニュートン流体のストークス流れにおける、楕円体カプセルや赤血球の挙動を数値解析により調べ、配向現象の詳細を解明したため^[4]、ここに報告する。

2. 支配方程式

カプセルの膜は十分に薄いものとし、2次元超弾性体としてモデル化する。応力値が0となる基準状態での膜面位置ベクトルを $\mathbf{X}$ とし、変形後の位置ベクトルを $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ とした時、変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ は次式で与えられる。

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} \quad (1)$$

さらに、膜面の変形は歪テンソル $\mathbf{E}$ によって記述される。

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} - \mathbf{I}) \quad (2)$$

ここで $\mathbf{I}$ は2次元単位行列を表す。

2次元膜の場合、膜面応力は厚み方向に積分された張力によって置き換えられる。曲げ変形による歪エネルギーを無視し、面内変形に対する歪弾性エネルギーを W とした時、コーシー張力 $\boldsymbol{\tau}$ は次式にて定義される。

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{J_s} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial W}{\partial \mathbf{E}} \cdot \mathbf{F}^T \quad (3)$$

膜の構成方程式には、neo-HookeanとSkalak^[5]の2つを用いる。赤血球膜は、脂質二重層にスペクトリンのネットワークが裏打ちされた複合材料である。また、その膜厚は、およそ10nm程度であり、自身のスケール（直径約8 μm ）に対して非常に薄い。生理条件下において、脂質分子は共有結合によって強く結ばれ、分子間距離が一定に保たれる。そのため、赤血球膜は面積変化に対して強い抵抗を有する。また、スペクトリンのネットワーク構造により、非常に高い弾性を有し、容易に大変形することが知られている。このような膜の力学を表現するため、Skalakらは下記の構成則を提案した。

$$W = \frac{G_s}{4} (I_1^2 + 2I_1 - 2I_2 + CI_2^2) \quad (4)$$

ここで G_s はせん断弾性係数であり、不変量 I_1, I_2 は下式で与えられる。

$$I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 - 2, \quad I_2 = \lambda_1^2 \lambda_2^2 - 1 = J_s^2 - 1 \quad (5)$$

λ_i ($i = 1$ or 2)は、膜面の主伸長比を表し、ヤコビアン $J_s (= \lambda_1 \lambda_2)$ は、膜面の面積変化を表す。従って、膜面が完全に非圧縮を満たす時、 $J_s = 1$ となり、 I_2 は0となる。面積弾性係数 K_s とせん断弾性係数 G_s との間には、 $K_s = G_s (1 + 2C)$ の関係が成り立つ。そのため、無次元パラメータ C を大きく取ることにより、膜面の面積非圧縮を表現することが出来る。過去の研究^[6]より、 $C = 10$ で面積非圧縮をよく表現できることが示されているため、本研究ではこの値を採用する。

続いて、無限流体中に置かれたカプセル周りの、ストークス流れの基礎式を示す。カプセル膜外部流体を密度 ρ 、粘性 μ の非圧縮性ニュートン流体と仮定し、内部流体は密度 ρ 、粘性 $\lambda\mu$ の非圧縮性ニュートン流体と仮定する。膜内外の流れ場がストークス流れとすると、膜面の速度ベクトル $\mathbf{v}$ は、膜面 S 上の境界積分方程式として記述される^[7]。

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(\mathbf{x}) = & \frac{2}{1 + \lambda} \mathbf{v}^\infty(\mathbf{x}) - \frac{1}{4\pi\mu(1 + \lambda)} \int \mathbf{J}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{q}(\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) \\ & + \frac{1 - \lambda}{4\pi(1 + \lambda)} \int \mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{y}) dS(\mathbf{y}) \end{aligned} \quad (6)$$

$\mathbf{v}^\infty$ は粒子が存在しない時の流れ場であり、 λ は膜内外流体の粘性比である。 $\mathbf{n}$ は外向き単位法

線ベクトル, $\mathbf{J}$, $\mathbf{K}$ は次式で定義されるグリーン関数である.

$$\mathbf{J} = \frac{1}{r} - \frac{\mathbf{r} \wedge \mathbf{r}}{r^3}, \quad \mathbf{K} = -6 \frac{\mathbf{r} \wedge \mathbf{r} \wedge \mathbf{r}}{r^5}, \quad \text{with } r = \|\mathbf{r}\|, \quad \mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y} \quad (7)$$

また, $\mathbf{q}$ は膜面の荷重であり, 膜面を挟んだ流体の粘性応力の不連続を表す.

$$\mathbf{q} = [\boldsymbol{\sigma}^{out} - \boldsymbol{\sigma}^{in}] \cdot \mathbf{n} \quad (8)$$

3. 数値計算手法

計算においては, 任意の膜面位置ベクトル $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ をラグランジュ的に追跡する. 基準配置 $\mathbf{X}$ と比較することにより, 膜面の変形が各計算時間ステップにおいて既知になる. そして構成則を(3)式に代入することで, 膜面の張力 $\boldsymbol{\tau}$ が計算される. 仮想仕事の原理に基づき, 膜面平衡方程式は弱形式で次のように記述される^[6].

$$\int \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{q} dS = \int \hat{\mathbf{e}} : \boldsymbol{\tau} dS \quad (9)$$

$\hat{\mathbf{u}}$ は仮想変位であり, $\hat{\mathbf{e}} = \frac{1}{2}(\nabla \hat{\mathbf{u}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}^T)$ は仮想ひずみである. 有限要素法を用いて, 式(9)を離散化する. 膜面張力 $\boldsymbol{\tau}$ が既知であり, 膜面の荷重 $\mathbf{q}$ が未知量である. 膜面の格子点数を N とすると, (9)式は, 右辺に $3N$ 元のベクトル, 左辺に $3N \times 3N$ の剛性マトリックスを持つ連立一次方程式へと離散化される. 解法には, 反復法の一つである安定化双共役勾配法を用いた. 続いて, 膜面の荷重 $\mathbf{q}$ を(6)式に代入し, 膜面速度ベクトルの更新を行う. 膜面のno-slip条件より, 膜面の速度ベクトルは $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{v}$ として表現することができる. 位置ベクトルの更新は, 2段2次の陽的ルンゲクッタ法を用いて行う. 以上のプロセスをくり返し行うことで, 時間発展的な赤血球の変形挙動解析を行った.

流れ場は単純せん断流れとし, $\mathbf{v}^\infty$ はせん断速度 γ を用いて

$$v_1^\infty = \gamma x_2, \quad v_2^\infty = v_3^\infty = 0 \quad (10)$$

で与える(cf. Fig.1(a)). また, カプセルの基準配置は楕円体または両凹板形状とする. これにより膜面が非等方的な物性を有することになり, 流れ場におけるカプセルの向きが重要となる. カプセルの配向を効率的に記述するため, Fig.1(b)に示す様に, 楕円体や赤血球の回転軸上の基準点 P と渦度方向($=x_3$ 軸)との間の角度を θ として定義する.

Capillary数は膜面に働く流体粘性応力と膜面の弾性の比として定義され, 次式で与えられる.

$$Ca = \frac{\mu a \gamma}{G_s} \quad (11)$$

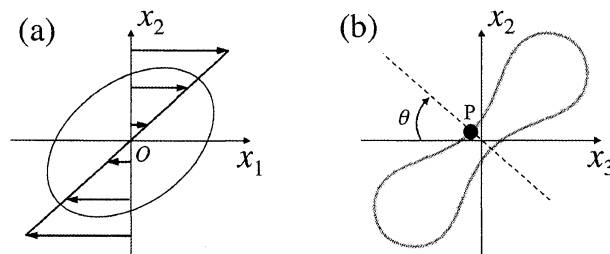


Fig.1:(a)Schematic illustration of a deformed capsule in the shear plane. (b) θ is defined as the angle between the vector $\mathbf{OP}$ and the x_3 -axis. The membrane material point P is initially located at the revolution axis of the capsule.

ここで a は赤血球と同じ体積を持つ球形カプセルの半径である。

計算精度を保証するため、格子解像度と時間解像度を十分に小さく取る必要がある。本研究では、膜面を5120個の線形三角形要素で離散化し、無次元時間ステップを $5 \times 10^{-6} \leq \gamma \Delta t \leq 5 \times 10^{-3}$ の範囲で計算を行った。

4. 結果と考察

単純せん断流れ下における、赤血球の運動の解析結果をFig.2に示す。赤血球の初期姿勢は $\theta = \pi/4$ であり、Ca数は2.0、粘度比 λ は1である。赤血球は流れ方向に伸長され、膜面が回転するtank-treading運動を示す。この時、両凹板形状の非等方的な基準形状のため、赤血球は周期的な振動を繰り返す。しかしながら、振動を繰り返しながら変形しているうちに、赤血球の回転軸（物質点P）が徐々に x_3 軸に収束する様子が確認された。十分に点Pが x_3 軸に収束すると、膜面が渦度方向に対して対称になるため、赤血球は定常なtank-treading運動を示す(cf. Fig.2(a) $\gamma t = 380, 388, 390$).

運動の遷移を定量的に見るため、角度 θ の時間変化を求め、Fig.2(b)に示す。このグラフより、始め $\pi/4$ に配置された物質点Pが、徐々に x_3 軸に収束し、最終的に $\theta = 0$ に収束する様子が確認できる。比較のため、赤血球と同じ面積/体積比をもつ剛体扁平楕円体の結果^[1]も示す。剛体楕円体の場合、配向の遷移は起こらず、周期的な振動を繰り返すことが分かる。

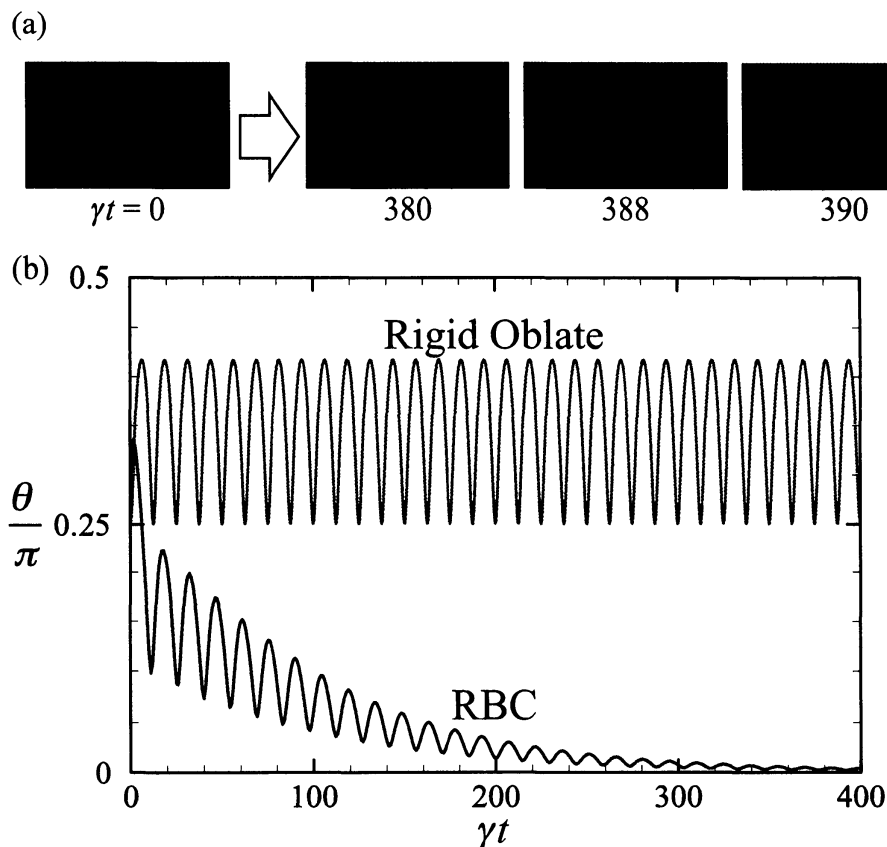


Fig.2: Motion of the RBC in shear flow. (a) Profiles of the RBC in the shear plane. The material point P is represented by the blue dot. (b) Time change of θ . For comparison, the result of rigid oblate body ^[1], which has the same area-volume ratio of the RBC, is also shown in the figure.

一方、Ca数が低い条件下では、赤血球の回転軸（物質点P）が徐々に $x_1 - x_2$ 平面に移動し、 $\theta = \pi/2$ に収束する様子が確認された。このように、赤血球の場合には、せん断流れ下でも長い時間をかけてある方向に配向することが分かった。また、配向方向はCa数によって変化することが明らかとなった。こうしたカプセルの配向挙動を解明するため、我々はまず始めにカプセル内外の流体のエネルギー散逸量と、運動モードの変化に関連があるか調べた。しかしながら、両者に明確な関係は見つからず、カプセルは必ずしもエネルギー散逸を最小とする運動をしていないことが分かった。

そこでさらに問題を簡略化し、楕円体カプセル（neo-Hookean膜）の振動伸長流れ中の挙動を調べた。伸長流れを $v_1^{\infty} = \gamma \sin \omega t x_2$, $v_2^{\infty} = \gamma \sin \omega t x_1$, $v_3^{\infty} = 0$ で与えた際の結果を、Fig.3に示す。Ca数が低い条件下では、流れが弱くなる時間帯のカプセルの張力が十分低くなり、ほぼ準定常的に振動変形を繰り返していることが分かる。このような条件下では、楕円体の回転軸（物質点P）が徐々に $x_1 - x_2$ 平面に移動し、 $\theta = \pi/2$ に収束する様子が確認された。一方、Ca数が高い条件下では、流れが弱くなる時間帯にもカプセルに大きな張力が残っており、非定常的に振動変形を繰り返していることが分かる。このような条件下では、楕円体の回転軸（物質点P）が徐々に x_3 軸に移動し、 $\theta = 0$ に収束する様子が確認された。このように、配向現象の遷移は、変形量の大きさと、非定常性の強さが関連していることが分かった。

Ca = 0.3

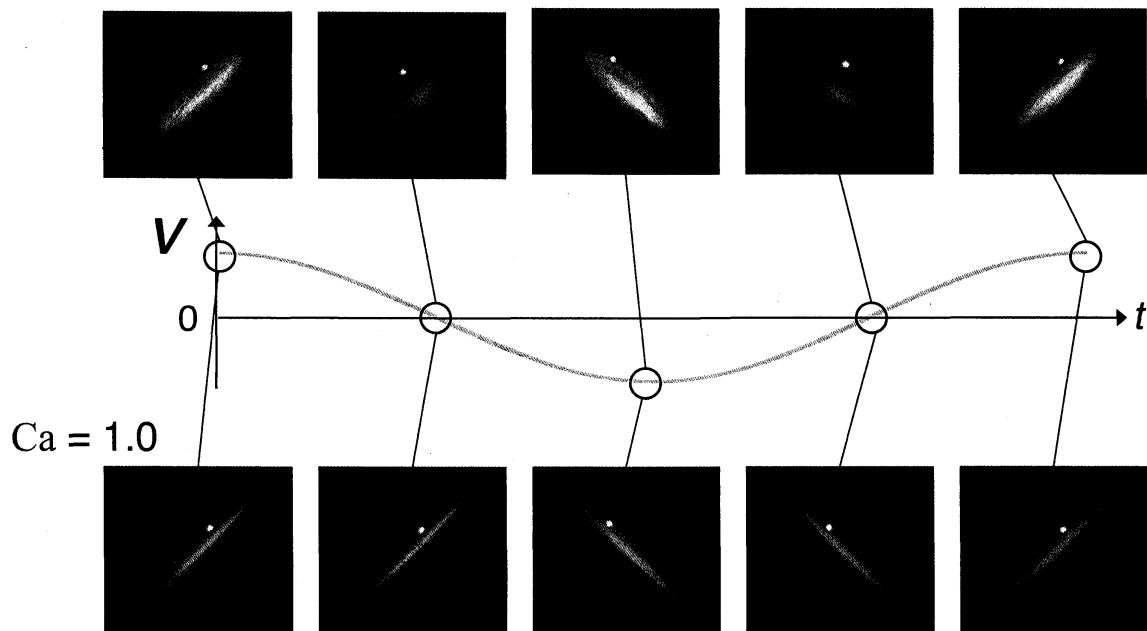


Fig.3: Motion of an oblate capsule in oscillating planar elongational flow with $Ca = 0.3$ and 1.0 . The green curve schematically indicates the oscillation of the flow field. A white dot is placed at P as a tracer, and the color contour indicates the magnitude of the in-plane principal elastic tension.

5. 結論

本研究では、楕円体カプセルや赤血球の定ずり流れ中の挙動を数値解析によって調べた。その結果、剛体楕円体の挙動は時間的に可逆的であるが、カプセルの場合には不可逆的となることが分かった。さらに、非球形カプセルは時間をかけて渦度方向またはせん断面に配向し、この配向現象はずり速度によって分岐することが分かった。こうした非球形カプセルの配向現象は、粒子を整列・配向させる技術に応用できると考えられる。

参考文献

- [1] G. Jeffery, *Proc. R. Soc. Lond. A*, 102, 161 (1922)
- [2] Z. Yu, N. Phan-Thien, and R. Tanner, *Physical Rev. E*, 76, 026310 (2007)
- [3] Y. Iso, D. Koch, and C. Cohen, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 62, 115 (1996)
- [4] Omori, T. et al, *Phys. Rev. Lett.*, 108, 138102 (2012)
- [5] Skalak, R. et al., *Biophys. J.*, 13, 245 (1973)
- [6] Walter, J. et al., *J. Fluid Mech.*, 676, 318 (2011)
- [7] Foessel, E et al., *J. Fluid Mech.*, 672, 462 (2011)