

VEZIKULUMOK INSTABILITÁSÁNAK VIZSGÁLATA VISZKÓZUS ÁRAMLÁSBAN

Vadászné Bognár Gabriella¹, Csáti Zoltán²

¹Intézetigazgató egyetemi docens, Miskolci Egyetem, Gép- és Terméktervezési Intézet
3515 Miskolc, Miskolc-Egyetemváros, e-mail: v.bognar.gabriella@uni-miskolc.hu

²MSc hallgató, Miskolci Egyetem, Gépészmérnöki és Informatikai Kar
3515 Miskolc, Miskolc-Egyetemváros, e-mail: csati.zoltan@freemail.hu

Összefoglalás

Ebben a dolgozatban célunk, hogy vezikulumok dinamikai vizsgálatára viszkózus áramlásban bemutassunk egy egyszerű matematikai analízist. Egy nem régi tanulmány [Misbah, Phys. Rev. Lett. 96, 028.104 (2006)] kimutatta, hogy a vezikulumok dinamikájában, az ún. "vacillating-breathing" (VB) mód az, ahol a vezikulum főtengelye oszcillál az áramlási irányára és alakja lélegző mozgást végez. A „tank-treading” (TT) és „tumbling” (TB) rendszerek nem végeznek lélegző mozgást. A célunk az, hogy megvizsgáljuk az ezeket a módokat leíró egyenletek analitikus megoldásait és a numerikus közelítéseket a vezikulum hajlásszögére és az alakjának deformációjára vonatkozóan.

Kulcsszavak: vezikulum, egzakt megoldás, differenciálegyenlet-rendszer, fázissík

Abstract

In this paper our aim is to show a simple mathematical analysis to reexamine vesicle dynamics in viscous flow. In this context, a recent paper [Misbah, Phys. Rev. Lett. 96, 028104 (2006)] revealed a dynamic referred to as the vacillating-breathing (VB) mode where the vesicle main axis oscillates around the flow direction and the shape undergoes a breathing like motion. The tank-treading (TT) and tumbling (TB) regimes do not perform breathing motion. Our goal here is to examine these modes by obtaining explicit analytical solutions and numerical approaches of the vesicle inclination angle and the shape deformation.

Keywords: vesicle, exact solution, system of differential equations, phase plane

1. Bevezetés

A fizikában és a biológiában gyakran előfordulnak olyan jelenségek, amelyek folyadékba merített kis részecskék mozgásának megismerését teszik szükségessé. Einstein 1905-ben megjelent cikkében folyadékban mozgó gömb alakú szilárd részecskére alkotott matematikai modellt [3]. Jeffrey 1922-ben ellipszoid alakú részecskékre vonatkozóan adott elméleti eredményeket [7], amelyeket később Taylor kísérletileg igazolt [13], [14]. Először Taylor vizsgált olyan esetet, amikor a folyadékban nem szilárd test, hanem egy folyadéksepp mozog [14]. A mozgásegyenlet felírása során három feltételezéssel élt:

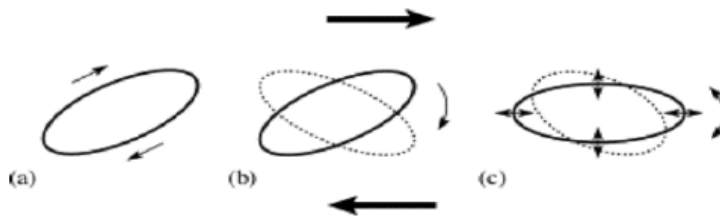
- a folyadéksepp annyira kicsi, hogy közel gömb alakú marad,
- nincs csúszás a sepp felületén és a sepp felületén a csúsztatófeszültségek folytonosak,
- a két folyadék határán nem ébred normálfeszültség.

Később ezeket a modelleket alkalmazták vezikulumok és vörösvérsejtek elméleti vizsgálata esetén.

A vezikulum egy zárt foszfolipid membrán, amely a belsejében lévő folyadékot elválasztja a membránon kívül lévő folyadéktól. A foszfolipidek kettős lipid réteget képesek alkotni. A kettős hártya vastagsága körülbelül 5 nm , a körül határolt térrész jellemző sugara ennek ezerszerese, de léteznek $10\text{-}100\ \mu\text{m}$ nagyságú óriás vezikulumok is [16]. A vezikulum alapvetően különbözik más membrán által határolt testektől, például a polimer kapszuláktól. A vezikulumoknak több egyensúlyi helyzetük van és külső áramlás hatására komplexebb nem-egyensúlyi állapotok is kialakulnak. A különbség a kapszulák és a vezikulumok között az, hogy a vezikulumok feszültségi állapota főleg hajlításból származik, míg a polimerizált membránok jellemző igénybevétele nyírás és húzás. Ezen kívül a lipid membránok külső erő hatására úgy végeznek alakváltozást, hogy a felületük állandó marad. A hőhatás is jelentősen befolyásolja a vezikulumok dinamikáját, mivel a testek mikrométeres nagyságúak.

A lipid hárták biológiai jelentősége miatt egyre növekszik irántuk a fizikusok érdeklődése az oxigén transzport, anyagminták és gének célzott testbe juttatása esetén. Fontos szerepük van a vörösvérsejtek vizsgálatában és a membránok biofizikájában is. Viszkózus áramlásban elhelyezett vezikulumok dinamikájának tanulmányozása különösen jelentős, mert ezen keresztül más – bonyolultabb viselkedésű – sejtek, mint például a vörösvérsejtek viselkedése megérthető [10]. A modell és a számítás helyessége összehasonlítható kísérleti eredményekkel, mérésekkel (lásd pl. [10], [15]). Amennyiben a vezikulumok deformációjára vonatkozó modellt lépésről lépésre finomítjuk, akkor fokozatosan eljuthatunk a valódi sejtek tulajdonságaihoz. Megfigyelték, hogy viszkózus áramlás hatására a vezikulumoknak három alapvető mozgásformája alakul ki [6]. Az egyik az úgynevezett "tank-treading" (TT), amikor a vezikulum ellipszoid alakúvá deformálódik és főtengelye az áramlás irányával Θ szöget zár be, ahol $0 < \Theta < \pi/4$. A második mozgástípus a "tumbling" (T), amikor a membrán merevtestszerű forgómozgást végez – kivéve, ha a vezikulum gömb alakú. A fenti két mozgás ellipszoid alakú vezikulumokra értelmezhető, amelyeket először Keller és Skalak írtak le [8]. Létezik egy köztes állapot is, melyet "vacillating-breathing"-nek neveznek (VB) és Misbah származtatta a [11] cikkben (lásd 1. ábra). Ilyen típusú mozgásnál a vezikulum az áramlás iránya mentén rezgőmozgást végez, miközben alakja légzőmozgáshoz hasonlóan változik. A továbbiakban ezt a pontosabb modellt fogjuk vizsgálni.

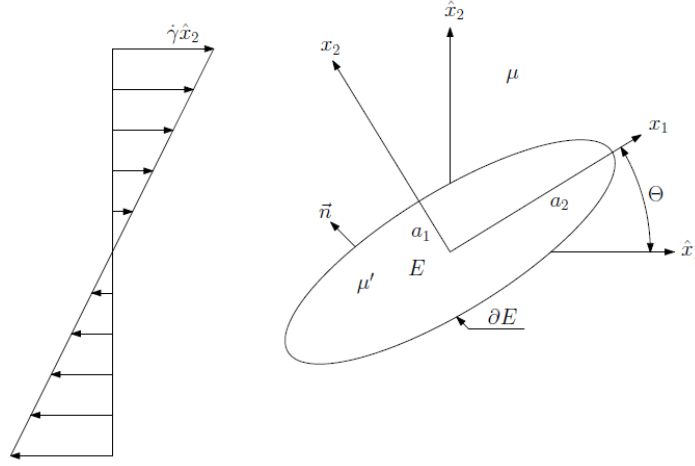
Dolgozatunk célja a Misbah-féle modelltől származtatott csatolt, közönséges, nem-lineáris differenciálegyenlet-rendszer vizsgálata és egzakt megoldások keresése a vezikulumok alakjának meghatározására.



1. ábra. Vezikulumok három deformáció típusa (a) (TT), (b) (T) (c), (VB) [6]

2. Matematikai modell

Helyezzük a vezikulumot kétdimenziós viszkózus áramlásba, newtoni közeget feltételezve. A zavartalan áramlási sebesség $\mathbf{U}_0 = (\dot{\gamma}y, 0, 0)$, ahol $\dot{\gamma}$ a deformáció sebesség. Az áramlást a vezikulumon kívül és belül a Stokes-egyenletek írják le, mivel $\mathbf{Re} \ll 1$. Jelölje x_i a pillanatnyi, \hat{x}_i pedig a referencia koordináta-rendszer koordináta tengelyeit ($i = 1, 2, 3$) (lásd 2. ábra).



2. ábra. Viszkózus áramlásba helyezett ellipszis alakú membrán

A Keller-Skalak modell [8] a lineáris anyagegyenletű viszkózus áramlásba helyezett ellipszoid alakú membrán és az azon belül lévő folyadék mozgását írja le. A membrán belsejében lévő folyadék mozgását az alábbi differenciálegyenlet írja le:

$$\dot{\Theta} = \bar{A} + \bar{B} \cos 2\Theta, \quad (1)$$

ahol \bar{A} a $\dot{\gamma}$ -tól, \bar{B} pedig a $\lambda = \mu' / \mu$ viszkozitási hányadostól és az ellipszoid főtengelyeinek a_2/a_1 , illetve a_3/a_1 arányaitól függ. Itt μ' a belső, μ a külső folyadék viszkozitását jelöli.

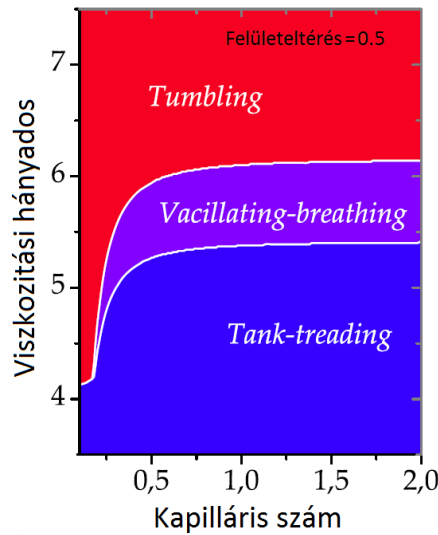
A (VB) esetre a Misbah-féle modell perturbációs sorfejtéssel származtatható [11]. Ebben az esetben a megoldandó differenciálegyenlet-rendszer a vezikulum R alakváltozására és a Θ elhajlásszögre:

$$\varepsilon \frac{\partial R}{\partial t} = h \left[1 - 4 \frac{R^2}{\Delta} \right] \sin 2\Theta, \quad (2)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\frac{1}{2} + \frac{h}{2R} \cos 2\Theta, \quad (3)$$

ahol A a vezikulum felülete, Δ a vezikulum gömbhöz képesti felület eltérése: $\Delta = (A - 4\pi r_0^2) / r_0^2$ és a h paraméterre fennáll: $h = 60\sqrt{2\pi/15} / (32 + 23\lambda)$. A (2)

egyenlet a membrán alakváltozását, a (3) egyenlet pedig a vezikulum áramló közegben bekövetkező szögelfordulást írja le. Megjegyezzük, hogy a folyadékcseppekre ([1], [4]) és a kapszulákra [2] vonatkozó modelleknél a származtatott differenciálegyenletek lineárisak lesznek, míg vezikulumokra nemlineáris rendszert kapunk. Ez a nemlinearitás a lokális felület-összenyomhatatlansági feltételből adódik. További érdekesség, hogy (2) és (3) nem függ a C_a kapillaritási számtól, amelyre $C_a = \mu \dot{\gamma} r_0^3 / \kappa$ és κ a membrán hajlítási merevségét jelöli. A Misbah-féle elmélet a $C_a \rightarrow \infty$ esetnek felel meg. Ha a sornak több tagját vesszük figyelembe, akkor már megjelenik a C_a tényező is. A három típus kialakulását a 3. ábrán látható $\lambda - C_a$ diagram szemlélteti.



3. ábra. $\lambda - C_a$ diagram [6]

A (2) és (3) helyett vizsgáljuk meg az általánosabb

$$\frac{dR}{dt} = (\alpha - \beta R^2) \sin 2\Theta,$$

$$\frac{d\Theta}{dt} = -\frac{q}{2} + \frac{\alpha}{2R} \cos 2\Theta$$

differenciálegyenlet-rendszert, ahol $\alpha, \beta, q \in \mathbb{R}^+$. A továbbiakban a deriváltak a t változó szerinti deriváltat jelölik. Bevezetve az új $x(t)$ és $y(t)$ változókat az

$$x(t) = R \cos 2\Theta,$$

$$y(t) = R \sin 2\Theta$$

alakban, a (2) és (3) differenciálegyenletekből az

$$x' = y(q - \beta x) \quad (4)$$

$$y' = \alpha - qx - \beta y^2 \quad (5)$$

differenciálegyenlet-rendszert származtatjuk.

Ahhoz, hogy a (VB) mozgást tudjuk vizsgálni, fenn kell állnia az

$$R \leq \frac{\sqrt{\Delta}}{2}$$

egyenlőtlenségnek, azaz – felhasználva a bevezetett α és β paramétereket – a következő feltétel adódik:

$$x^2 + y^2 \leq \frac{\alpha}{\beta}. \quad (6)$$

3. Egzakt megoldás

A (4)-(5) egyenletrendszer megoldását és a megoldások stabilitását különböző eljárásokkal kereshetjük [5], [9], [12]. Először keressük ezt az egyenes mentén

$$y = ax + b.$$

Az (5) összefüggést behelyettesítve (4)-be, az alábbi differenciálegyenletet nyerjük:

$$x' = -a\beta x^2 + \left(\frac{\alpha}{b} - 2b\beta\right)x + \frac{\alpha - \beta b^2}{a}. \quad (7)$$

Látható, hogy a (7) az általános $x'(t) = P(t)x^2 + Q(t)x + R(t)$ Riccati-féle differenciálegyenletnek egy speciális esete, amely az

$$x(t) = -\frac{w'(t)}{Pw(t)}$$

helyettesítéssel a

$$w'' - Qw' + PRw = 0$$

lineáris, másodrendű differenciálegyenletté transzformálható [12]. Visszatérve az eredeti $x(t)$ függvényre, az általános megoldás az

$$x(t) = \frac{1}{a\beta} \frac{C \left(\frac{\alpha}{b} - \beta b\right) e^{\left(\frac{\alpha}{b} - \beta b\right)t} + (C-1)\beta b e^{-\beta b t}}{C e^{\left(\frac{\alpha}{b} - \beta b\right)t} + (1-C)e^{-\beta b t}}$$

alakban írható fel a $C \in \mathbf{R}$ integrálási állandóval.

4. Vizsgálatok a fázissíkon

Redukáljuk a (4), (5) differenciálegyenlet-rendszert a következő elsőrendű differenciálegyenletre:

$$(\alpha - qx - \beta y^2)dx + y(\beta x - q)dy = 0. \quad (8)$$

A (8) egyenlet a

$$k(x) = \frac{1}{|q - \beta x|^3}$$

integrál szorzóval egzakt típusú differenciálegyenletté alakítható át, mellyel a (8) általános megoldása implicit alakban a következőképpen írható fel:

$$\frac{q}{\beta^2} \frac{1}{q - \beta x} + \frac{\alpha\beta - q^2 - \beta^2 y^2}{2\beta^2} \frac{1}{(q - \beta x)^2} = D,$$

ahol $D \in \mathbb{R}$ integrálási állandó.

A (4), (5) differenciálegyenlet-rendszer elemzéséhez lineáris stabilitás vizsgálatot végzünk. Az egyensúlyi pontok osztályozását az alábbi módon végezzük:

- 1) Meghatározzuk az egyensúlyi/kritikus pontokat
- 2) Kieértékeljük a Jacobi-mátrixot az egyensúlyi pontokban
- 3) A linearizált differenciálegyenlet-rendszert visszavezetjük sajátérték feladatra és a sajátértékek és sajátvektorok segítségével vázoljuk a fázisportrét.

Az egyensúlyi pontok a következők:

$$P_1\left(\frac{\alpha}{q}, 0\right), P_2\left(\frac{q}{\beta}, \frac{1}{\beta}\sqrt{\alpha\beta - q^2}\right), P_3\left(\frac{q}{\beta}, -\frac{1}{\beta}\sqrt{\alpha\beta - q^2}\right).$$

Meghatározzuk a \mathbf{J}

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} -\beta y & q - \beta x \\ q & -2\beta y \end{bmatrix}$$

Jacobi-mátrix elemeit a P_1, P_2, P_3 pontokban, ahonnan látható, hogy az $\alpha\beta > q^2$, $\alpha\beta = q^2$ és $\alpha\beta < q^2$ eseteket kell megvizsgálnunk. A $\det(\mathbf{J} - r\mathbf{I}) = 0$ egyenletből a mátrix sajátértékeit határozzuk meg:

a. Ha $\alpha\beta > q^2$,

- a P_1 pontban a két sajátérték valós és eltérő előjelű, ezért P_1 egy nyeregpont;
- a P_2 pontban a két sajátérték valós és negatív, ezért P_2 egy aszimptotikusan stabil csomópont;
- a P_3 pontban a két sajátérték valós és pozitív, ezért P_3 egy labilis csomópont.

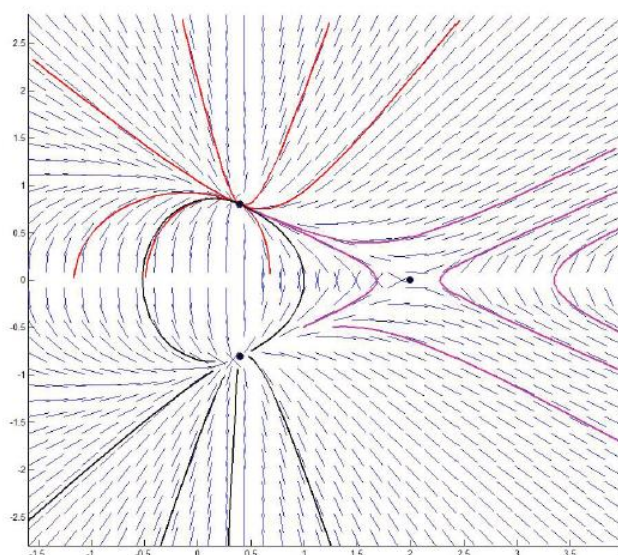
b. Ha $\alpha\beta = q^2$, akkor P_2 és P_3 pontok ordinátái nullák, és a pontok abszcisszái is megegyeznek. Tehát a három pont egybeesik. Perturbáció hatására bármely az előző pontban leírt stabilitási pont előállhat. Ilyenkor az ábrázolást egy saját készítésű MATLAB programmal oldottuk meg.

c. Ha $\alpha\beta < q^2$, akkor a P_1 az egyetlen stabil centrum.

Mindhárom esetben meghatározzuk a sajátvektorokat és vázoljuk a fázisportrékat. A differenciálegyenlet-rendszer fázisképének elemzésére a MATLAB numerikus programcsomag felhasználásával egy **PhasePlaneAnalysis** nevű programot írtunk. Ilyen célú vizsgálatra a MATLAB-ben nincs beépített eszköz. A program dokumentációja a

<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/45575-phase-plane-analysis>

honlapról letölthető. Ennek segítségével vázoljuk a fázis diagramokat a három esetben.



	Stability	Type	xCoord	yCoord
1	unstable	saddle	2	0
2	asympt. stable	sink node	0.4000	0.8000
3	unstable	source node	0.4000	-0.8000

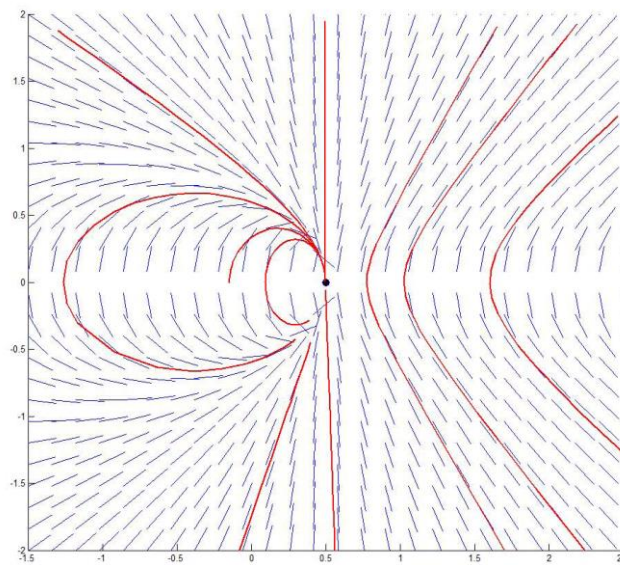
4. ábra. $\alpha = 4, \beta = 5, q = 2$ ($\alpha\beta > q^2$)

Az $\alpha\beta > q^2$ esetet a 4. ábra, az $\alpha\beta = q^2$ az 5. ábra és az $\alpha\beta < q^2$ esetet a 6. ábra szemlélteti. A 4-6. ábrákból észrevehető, hogy a (4), (5) megoldásai a fázissíkon az x -tengelyre szimmetrikusak. A program alkalmazásával megvizsgálható az egyes esetekben a stabilitás kérdése, a stabilitás helye és típusa. Az $\alpha = 3, \beta = 1, q = 2$ esetre az általunk meghatáro-

zott egzakt megoldást a 7. ábrán mutatjuk be. Ez megmutatja az ode45 solver hibáját ezen paraméter értékek választásakor.

5. Összefoglalás

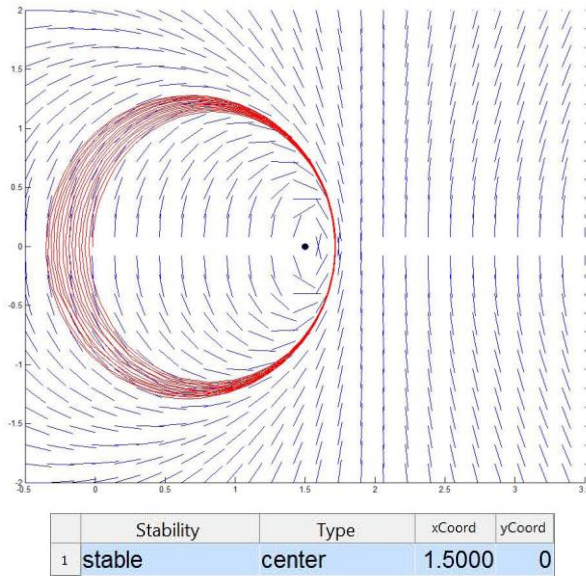
A vezikulum egy zárt foszfolipid membrán, amely a belsejében lévő folyadékot választja el a membránon kívül levő folyadéktól. A lipid hárták dinamikájának megértése biológiai szempontból jelentős. Viszkózus áramlásban elhelyezett vezikulumok mozgásának tanulmányozása elősegíti más, bonyolultabb viselkedésű sejtek, például a vörösvérsejtek viselkedésének értelmezését. A vezikulumoknak több egyensúlyi helyzete van, vizsgálatuk a matematikai modellben szereplő differenciálegyenletek nem-linearitás miatt bonyolult.



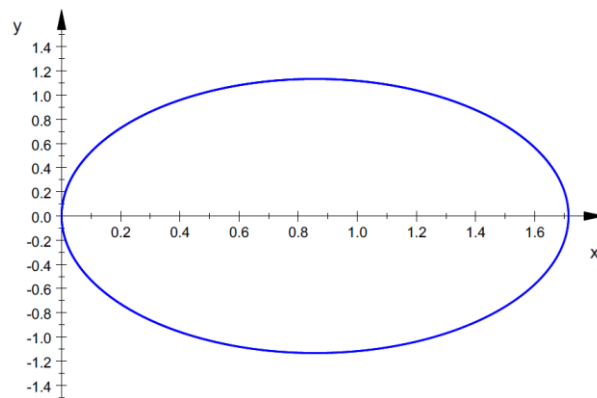
	Stability	Type	xCoord	yCoord
1	asyp. stable	degenerate node	0.5000	0

5. ábra. $\alpha = 1, \beta = 4, q = 2$ ($\alpha\beta = q^2$)

A dolgozatban vezikulumok mozgását leíró autonóm differenciálegyenlet-rendszer vizsgálatával foglalkoztunk. Egyes paraméter értékekre egzakt adtunk. A differenciálegyenlet-rendszer kvalitatív vizsgálatára lineáris stabilitásvizsgálatot végeztünk a fázissíkon, amelyből megmutatható, hogy milyen esetekben létezik periodikus megoldás. A fázisgörbéket egy saját készítésű MATLAB programmal szemléltettük, amellyel kirajzoljuk az iránymező, és a sajátértékek alapján elvégezzük az egyensúlyi pontok osztályozását és megállapítjuk a stabilitást.



6. ábra. $\alpha = 3, \beta = 1, q = 2$ ($\alpha\beta < q^2$)



7. ábra. Egzakt megoldás $\alpha = 3, \beta = 1, q = 2$ ($\alpha\beta < q^2$)

6. Köszönetnyilvánítás

A cikkben ismertetett kutató munka a Miskolci Egyetem stratégiai kutatási területén működő Innovációs Gépészeti Tervezés és Technológiák Kiválósági Központ keretében valósult meg.

7. Irodalom

- [1] Cox, R.G.: The deformation of a drop in a general time-dependent fluid flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 37: 601-623, 1969.
- [2] Drochon, A.: Rheology of dilute suspensions of red blood cells: experimental and theoretical approaches. *Eur. Phys. J. Appl. Phys*, 22: 155-162, 2003.
- [3] Einstein, A.: *Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen*. PhD thesis, Universität Zürich, Bern, 1905.
- [4] Frankel, N.A., Acrivos, A.: The constitutive equation for a dilute emulsion. *Journal of Fluid Mechanics*, 44: 65-78, 1969.
- [5] Glendinning, P.: *Stability, Instability and Chaos: An Introduction to the Theory of Nonlinear Differential Equations*. Cambridge University Press, 1994.
- [6] Guedda, M., Abaidi, M., Benlahsen, M., Misbah, C.: Dynamic modes of quasispherical vesicles: Exact analytical solutions. *Phys. Rev.*, 86: 051915, 2012. doi:10.1103/PhysRevE.86.051915.
- [7] Jeffrey, G.B.: The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proc. Roy. Soc. London*, 102: 161-179, 1922.
- [8] Keller, S.R., Skalak, R.: Motion of a tank-treading ellipsoidal particle in a shear flow. *J. Fluid Mech.*, 120: 27-47, 1982.
- [9] Khader, M.M.: Computational Approaches for Solving the Logistic Differential Equation Using VIM-Padé and Chebyshev-Spectral Techniques. *IJNS*, 15 (2): 157-167, 2013.
- [10] Mader, M.A., Vitkova, V., Abkarian, M., Viallat, A., Podgorski, T.: Dynamics of viscous vesicles in shear flow. *Eur. Phys. J. E*, 19: 0 389-397, 2006.
- [11] Misbah, C.: Vacillating breathing and tumbling of vesicles under shear flow. *Phys. Rev. Lett.*, 96 (2): 028104, 2006.
- [12] Polyanin, A.D., Zaitsev, V.F.: *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations*. Chapman and Hall/CRC, second edition, 2002.
- [13] Taylor, G.I.: The motion of ellipsoidal particles in a viscous fluid. *Proc. Roy. Soc. London*, 103: 58-61, 1923.
- [14] Taylor, G.I.: The viscosity of a fluid containing small drops of another fluid. *Proc. Roy. Soc. London*, 138: 41-48, 1932.
- [15] Vitkova, V., Mader, M.A., Biben, T., Podgorski, T.: Tumbling of lipid vesicles, enclosing a viscous fluid, under a shear flow. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 7 (1): 0 261-264, 2005.
- [16] Vlahovska, P.M., Podgorski, T., Misbah, C.: Vesicles and red blood cells in flow: From individual dynamics to rheology. *C. R. Phys.*, 10: 775-789, 2009.