B121 有限要素解析による関節軟骨におけるプレストレスに及ぼす電気化学効果の影響に関する検討

Investigation of electrochemical effects on pre-stress state in articular cartilage by finite element analysis

○正 陳 媛 (東大) 正 陳 献 (東大) 正 久田 俊明 (東大)

Yuan CHEN, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo

Xian CHEN, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo

Toshiaki HISADA, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo

Key Words: Triphasic Theory, Soft Tissue, Finite Element Analysis, Pre-stress

1. 緒言

関節軟骨や椎間板のような軟組織はプロテオグリカン凝集体やコラーゲン線維からなる固体基質と重量にして約80%の水分より構成されている⁽¹⁾。プロテオグリカン凝集体に含まれるグリコサミグリカンの強い陰性荷電 (FCD: Fixed Charge Density) に起因する軟組織内外のイオン濃度差はDonnan浸透圧 (Donnan osmotic pressure) を生じ、このDonnan浸透圧は化学的荷重として水分を軟組織内に浸透させることにより軟組織が膨張 (swelling) する。その結果、軟組織内部流体の圧力が上昇し、外力によって発生する基質の弾性変形及び応力を低減させる役割を果たす。一方、骨端から切除された軟骨は骨端面に対して凸に湾曲し、外部流体のイオン濃度によってこの湾曲をさらに増強させる現象が実験により確認されている⁽²⁾。これは切除前に骨端を覆う軟骨はプレストレス状態にあり、外部流体イオン濃度の変化がこのプレストレス状態に影響を及ぼすことを意味している。本研究では電気化学効果を考慮した3相理論 (Triphasic Theory)⁽³⁾ に基づく有限要素解析により、軟骨内厚み方向のFCD分布は、Donnan浸透圧の不均一性、ひいては軟骨内部膨張の不均一性を生じ、その結果、軟骨のプレストレスの大きな要因となっていることを示す。また軟骨疾患などによるFCD分布の変化が軟骨プレストレス状態に及ぼす影響についても検討を行う。

2. 3相理論基礎方程式及び有限要素定式化

三相理論では軟組織を固体相 (プロテオグリカン凝集体やコラーゲン繊維)、流体相 (間質液) 及びイオン相からなる混合体として、巨視的に同じ空間位置を同時に占有する各相を表すため、各相の微小実質体積 dV^a の混合体微小体積 dV に対する比を体積率 ϕ^a として次のように定義する。

$$\phi^a = \frac{dV^a}{dV}, \quad \sum_a \phi^a = 1 \quad (\alpha=s, w, +, -) \quad (1)$$

ここで添え字 α は固体 (s)、流体 (w)、陽イオン ($+$) 及び陰イオン ($-$) を表す。連続体力学理論を各相に適用すると、イオン相の体積を無視して固体相及び流体相の非圧縮性仮定より

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}^s + \mathbf{w}) = 0 \quad (2)$$

が成り立つ。但し $\mathbf{v}^a$ は各相の速度、 $\mathbf{w} = \phi^w (\mathbf{v}^w - \mathbf{v}^s)$ は固体・流体間の見かけの相対速度である。 $\tilde{c}^F$ 及び $\tilde{c}^+$ 、 $\tilde{c}^-$ を混合体単位体積における陰性荷電密度及び陽イオン、陰イオンモル濃度として、陰性荷電の存在による軟組織内の電気的中性条件は次式となる。

$$\tilde{c}^F = \tilde{c}^+ - \tilde{c}^- \quad (3)$$

本研究では大変形を考慮するため、変形前の固体相を参照配置として定義すると共に、固体相の変形勾配 $\mathbf{F}$ 及び体積変化 J を用いた Piola 変換により、流体の相対速度 $\mathbf{w}$ 及びイ

オンの相対モル流束 $\mathbf{j}^\alpha = \tilde{c}^\alpha (\mathbf{v}^\alpha - \mathbf{v}^s)$ ($\alpha = +, -$) を参照配置へ変換すると $\mathbf{W} = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{w}$ と $\mathbf{J}^\alpha = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{j}^\alpha$ となる。また現配置における流体の透過率 (permeability) κ 及びイオンの拡散係数 (diffusion coefficient) $d^\pm$ を基準配置において $\mathbf{K} = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1} \cdot \kappa \cdot \mathbf{F}^{-T}$ 及び $\mathbf{D}^\pm = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1} \cdot d^\pm \cdot \mathbf{F}^{-T}$ のように定義する。以上の変換により参照配置における各相に関する運動方程式は以下のように導かれる。

$$\nabla_0 \cdot \Pi = 0 \quad (4)$$

$$\rho_r^w \nabla_0 \mu^w = -\mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{W} - \frac{c^+ RT}{\phi^w} \mathbf{D}^{+1} \cdot \mathbf{W} - \frac{c^- RT}{\phi^w} \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{W} + \frac{RT}{\phi^w} \mathbf{D}^{+1} \cdot \mathbf{J}^+ + \frac{RT}{\phi^w} \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{J}^- \quad (5)$$

$$M^\alpha \nabla_0 \tilde{\mu}^\alpha = \frac{RT}{\phi^w} \mathbf{D}^{\alpha-1} \cdot \mathbf{W} - \frac{RT}{\tilde{c}^\alpha} \mathbf{D}^{\alpha-1} \cdot \mathbf{J}^\alpha \quad (\alpha = +, -) \quad (6)$$

但し、 Π は第1 Piola-Kirchhoff 応力； ρ_r^a は実質質量密度であり、混合体体積における各相の見かけ質量密度 ρ^a との関係は $\rho^a = \phi^a \rho_r^a$ のように定義される； μ^w は水分の化学ポテンシャル、 $\tilde{\mu}^+$ 及び $\tilde{\mu}^-$ は陽イオン及び陰イオンの電気化学ポテンシャル； M^+ 及び M^- は陽イオン及び陰イオンの原子量； R 及び T は気体定数及び絶対温度； c^a は単位流体体積におけるイオンモル濃度である。また、基準配置におけるイオンの初期モル濃度を $\tilde{c}_0^a$ として、軟骨表面単位面積から流出するイオン相の積算モル量ベクトル $\mathbf{Q}^\pm$ を次式

$$\dot{\mathbf{Q}}^\pm = \mathbf{J}^\pm \quad (7)$$

により定義すると、基準配置混合体単位体積におけるイオンモル濃度は次のようになる。

$$\tilde{c}^\pm = \tilde{c}_0^\pm - \nabla_0 \cdot \mathbf{Q}^\pm \quad (8)$$

さらに、流体に対して

$$\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{W} \quad (9)$$

となるように軟骨表面単位面積から流出する流体の積算流量ベクトルを定義すると、式 (2)、(3) の拘束条件は次のように置き換えられる。

$$J - 1 + \nabla_0 \cdot \mathbf{Q} = 0 \quad (10)$$

$$\tilde{c}^+ - \tilde{c}^- - \tilde{c}^F = 0 \quad (11)$$

ここで $\tilde{c}^F$ は基準配置におけるFCDである。また、 $\mathbf{N}$ を基準配置における表面外向き法線ベクトルとすると力学的及び電気化学的境界条件は次式により与えられる。

$$\Pi \cdot \mathbf{N} = \mathbf{t}^* \quad (12)$$

$$\mu^w = \mu^{w*}, \quad \tilde{\mu}^+ = \tilde{\mu}^{+*}, \quad \tilde{\mu}^- = \tilde{\mu}^{-*} \quad (13)$$

水分の化学ポテンシャル μ^w 及びイオンの電気化学ポテンシャル $\tilde{\mu}^\pm$ をイオン濃度、静水圧 p 及び電気ポテンシャル η によって表すと、運動方程式 (4) - (6)、拘束条件式 (10) - (11) に

より v^s , w , J^+ , J^- , p 及び η を独立変数とする有限要素解析における基礎方程式の弱形式が得られる⁽⁵⁾.

3. 軟骨プレストレスの数値解析及び検討

実際の軟骨は異方性及び不均一性を持つが、本研究では電気化学効果に注目するため、軟骨を均一な等方弾性体と仮定して解析を行った。解析では対称性を利用して厚み、幅及び奥行きが $2 \times 4 \times 0.85 \text{ mm}$ の軟骨切片をそれぞれ $6 \times 12 \times 3$ 要素で分割し、要素内の変位及び流速、イオンモル流束を 8 節点、圧力及び電気ポテンシャルを 1 節点での値によって混合補間する 6 面体要素を用いて有限要素モデルを作成した。図 1 にメッシュを示す。これは機械的・電気化学的負荷が全くない自然状態での形状に相当する。また、表 1 は解析に用いた軟骨の物性であり、透過率は固体相体積変化率 J の関数である⁽⁴⁾。図 2 は軟骨厚み方向の固体含有量 (solidity) 及び正常軟骨と繊維化軟骨の FCD 分布を示している。

Fig.1 FEM model Fig.2 Distributions of FCD⁽¹⁾ and solidity⁽⁶⁾

Tab.1 Material properties⁽⁷⁾

Aggregate modulus $H_A = \lambda_s + 2\mu_s = 0.3 \text{ MPa}$
Diffusion coefficient of cation $d^+ = 0.5e - 3 \text{ mm}^2/\text{s}$
Diffusion coefficient of anion $d^- = 0.8e - 3 \text{ mm}^2/\text{s}$
Permeability $\kappa = 10^{-3} \left(J - 1 + \phi_0^w \right) / \phi_0^w \text{ EXP} \left(J^2 - 1 \right) \text{ mm}^4/\text{Ns}$
Temperature $T = 298 \text{ K}$

(a) Experimental results (b) Numerical results
Fig.3 Curling deformation obtained by experiments and FEA

軟骨のプレストレス状態に対する外部流体のイオン濃度による影響を調べるため、まず骨端部から切除後の軟骨を NaCl 溶液に浸す状態をシミュレートし、外部流体のイオン濃度変化に対する軟骨の膨張変形を解析した。図 3 に示すように外部流体イオン濃度の低下につれ軟骨の変形が大きくなる。また、軟骨表面付近では FCD が低く、骨端に近い部分では FCD が高い (図 2) ため、軟骨厚み方向に沿って Donnan

浸透圧も骨端部に向かって高くなり、その結果骨端部付近の膨張が最も大きくなり、軟骨全体の湾曲変形を生じる。図 3 (b) 左列に示す正常軟骨の FCD を用いた解析結果は図 3 (a) の実験結果⁽²⁾と比較してよい一致を示している。

切除された軟骨の湾曲変形は切除前の軟骨がプレストレスにあることを意味している。外部溶液イオン濃度が高い (2.0M) 場合は軟骨から流体が流出し、平衡状態では軟骨内流体相が占める体積が最も少なくなるため、この状態の軟骨を元の位置に戻した場合に生じる応力が主に固体相 (基質) の変形からの寄与分になると見なすことができる。そこで、この応力を軟骨の機械的プレストレスと近似すると図 4 (a) に示すようになる。一方、外部溶液イオン濃度が低くなると、Donnan 浸透圧による軟骨内部流体圧力の上昇が切除された軟骨の湾曲度を増大させ、この状態から軟骨を元の位置に戻すと電気化学効果によるプレストレスを生じ、これが機械的プレストレスに上乗せして軟骨全体のプレストレスになると考えられる (図 4 (b))。機械的及び電気化学効果によるプレストレスについて考察すると、例えば骨端部付近では図 4 (a) より機械的プレストレスの最大値が約 $6.86e - 2 \text{ MPa}$ となっているのに対し、図 4 (b) では全プレストレスが約 $1.38e - 1 \text{ MPa}$ である。これは無負荷状態の軟骨におけるプレストレスは浸透圧による分の方が大きいことを意味している。この浸透圧の寄与によるプレストレスは軟骨厚みを増し、その結果、外部圧縮荷重を受けた場合には固体相の変形を低減させることにより軟骨基質を保護する役割を果たす。このような保護機能が、図 2 に FCD 分布を仮定した線維化軟骨の場合は著しく劣ることが、図 4 (c) に示す解析結果 (骨端部付近のプレストレス最大値が正常軟骨の約 54%) から分かる。

Fig.4 Pre-stress in cartilage (von Mises stress, MPa)

4. 結論

本研究では力学的・電気化学的現象の連成を考慮した 3 相理論に基づき、軟骨におけるプレストレスに関する非線形有限要素解析を行った。機械的プレストレスは比較的に小さく、無負荷状態における軟骨のプレストレスは主に電気化学効果によるものであることを示した。また、繊維化軟骨のような軟骨疾患では電気化学効果によるプレストレスは著しく低下することを明らかにした。

参考文献

- (1) Maroudas, Adult Articular Cartilage, Pitman Medical Kent UK, 215-290, 1979.
- (2) Setton et al., J. Biomech. Eng. 120:355-361, 1998.
- (3) Lai et al., J. Biomech. Eng., 113:245-258, 1991.
- (4) Holmes et al., J. Biomech. 17:377-394, 1984.
- (5) 陳献, 日本機械学会論文集 (A 編), 70:1216-1223, 2004
- (6) Mow et al., J. Biomech. 23:1145-1156, 1990.
- (7) Sun et al., Int. J. Num. Meth. In Eng., 45:1375-1402, 1999.