

# A kollagén rost többszintű mechanikai modellezése

## Multilevel modelling of collagen tissues

CZÉTÉNYI András<sup>1</sup>, SÁROSINÉ LAKATOS Ilona Éva<sup>2</sup>,  
HORVÁTHNÉ TÓTH Brigitta<sup>2</sup>, KISS Rita<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Gépészmérnöki Kar,  
Mechatronika Optika és Gépészeti Informatika Tanszék,

<sup>2</sup>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Építőmérnöki Kar, Tartószerkezetek Mechanikája Tanszék,  
Budapest, Műegyetem rakpart 3., 1111, Telefon: +36-1-463-2602, Fax: +36-1-463-1110,  
Email: czetenyi.andras@mogi.bme.hu, Web: http://mogi.bme.hu

### Abstract

*The role what the collagen structure plays in it's unique material properties has been the subject of investigation for a long time. The aim of this research was to create a finite element model of collagen fibers and fibrils, using geometry found in previously published literature, and to validate the results of our simulations. As a result a more accurate representation of fibrillar collagen and a refined geometric model of fiber could be represented, using material properties found in previous articles the results of the former were validated. The results of the fiber model are not accurate enough, so it is still in need for further improvements.*

**Keywords:** Biomechanics, Collagen, Fiber, Finite element, Simulation

### Kivonat

*A kollagén szerkezetének anyagi tulajdonságokra gyakorolt hatása régóta a tudományos érdeklődés tárgya. A kutatás célja, hogy az ínrostot és a rostszálat az irodalomban talált geometriákkal és azok kiegészítésével modellezzük, majd a kapott anyagtulajdonságokat validáljuk. A geometriák megalkotása után az anyag és az elemek közötti kapcsolat paramétereinek segítségével történő modellezéssel sikerült egy eddigieknél pontosabb geometriával rendelkező rostszál modellt alkotni, amelynek anyagjellemzői egybeesnek az irodalomban található eredményekkel. A rostot új típusú megközelítéssel ábrázoltuk, de a szimulációja során kapott eredmények még nem megfelelőek, így a modell további pontosításra szorul.*

**Kulcsszavak:** biomechanika, kollagén, rost, szimuláció, végelem módszer

## 1. BEVEZETÉS

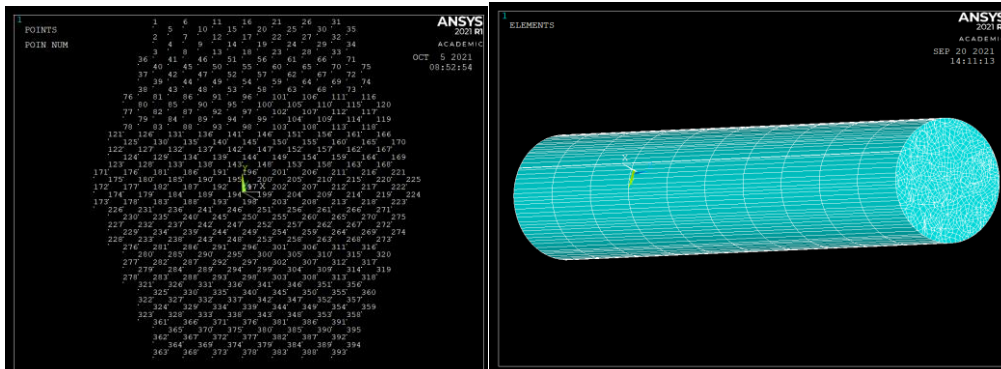
A kollagén hierarchikus felépítésű anyagnak tekinthető [1], különleges tulajdonságainak okát már régóta vizsgálják makro-, és mikroszkopikus szinten is, azonban a molekuláris felépítés és a mechanikai tulajdonságok közötti kapcsolat feltérképezése még hiányos. A kísérletekben mért és a szimulációk során számolt anyagjellemzők nem magyarázzák a kollagén viselkedését és összetett viszkoelasztikus tulajdonságait[1]. Vélhetően ezek oka az alacsonyabb szinteken (mikroszkopikus és molekuláris) keresendő.

A kutatás célja, hogy az irodalomban talált geometriákkal és azok kiegészítésével a ínrostot és a rostszálat modellezzük, majd az irodalomban talált anyagjellemzőkkel [1, 2, 3] validáljuk. A kutatás első részében először áttekintettük a kollagén előfordulását és alapvető jellemzőit, majd ANSYS Mechanical APDL-ben (ANSYS 2021 R1 Academic) megterveztük az ínrost és a molekulák geometriáját, és végelem szimulációt végeztünk. A kutatás során számtalan egyszerűsítéssel éltünk, mint a rostszál csavarodásának elhagyása, a kémiai kötések rendszerének és erősségének egyszerűsítése, továbbá rostot felépítő térfogatokat homogénnek tekintettük. A mikroszintű modell anyagjellemzői irodalmi adatok, majd a rostszál program által számolt jellemzőket az irodalomban talált adatokkal hasonlítjuk össze [1, 2, 3].

## 2. MÓDSZER

A kutatásban ínrostok viselkedését vizsgáljuk. A szimulációkat ANSYS Mechanical APDL-ben (ANSYS 2021 R1 Academic) végeztük. A kutatás során elsőként a rostszál vizsgálatához molekulákból és a köztük kialakuló pirimidolin segítségével létrejövő keresztkötésekből alkotott geometriát síkban elhelyezett pontok

(1./a ábra) megfelelő rétegzésével alkottunk meg. A kötésrendszer létrehozása során az irodalomban talált megoldásokat [3] úgy finomítottuk, hogy térbeli modellre is használhatók legyenek. A terhelt keresztmetszet nagysága  $A = 952,32 \text{ nm}^2 = 9,5232 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ . A második modellünk a rostszálakból felépített rost, amelynek geometriáját két dimenziós voronoi-cellák segítségével alkottuk meg. Ezt bővítettük ki a három dimenziós modellhez. Az egyes térfogatok közötti kémiai kötések kontakt elemek segítségével modelleztük (1./b ábra). A terhelt keresztmetszet nagysága ebben az esetben  $A = 3,14159 \text{ } \mu\text{m}^2 = 3,14159 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$



1. ábra a) Az első geometria alapjául szolgáló pontrendszer b) A második modell 3 dimenziós geometriája

A rostszál esetében BEAM188 hajlított gerenda elemet, a rost modelljében SOLID186 elemet választottunk. A végeelemes modell összeállítás  $Z = 0$  koordinátájú nodejait három ( $U_x, U_y, U_z$ ) szabadsági fok szerint megkötöttük, határozottan rögzítve azokat. A szimulációhoz használt terhelésnek egy időfüggő elmozdulást választottunk a molekulák hosszanti irányával megegyező tengely mentén. Ezt az  $U_z$  szabadságfokra adott idő/megfelelő érték kényszerrel tettük meg (ez a rostszál esetében 10 nm/min, rostnál 10  $\mu\text{m}/\text{min}$ ). Az eddig nem említett szabadságfokoknak ( $ROT_x, ROT_y, ROT_z$ ) mind 0 értéket adtunk, megkötve azokat.

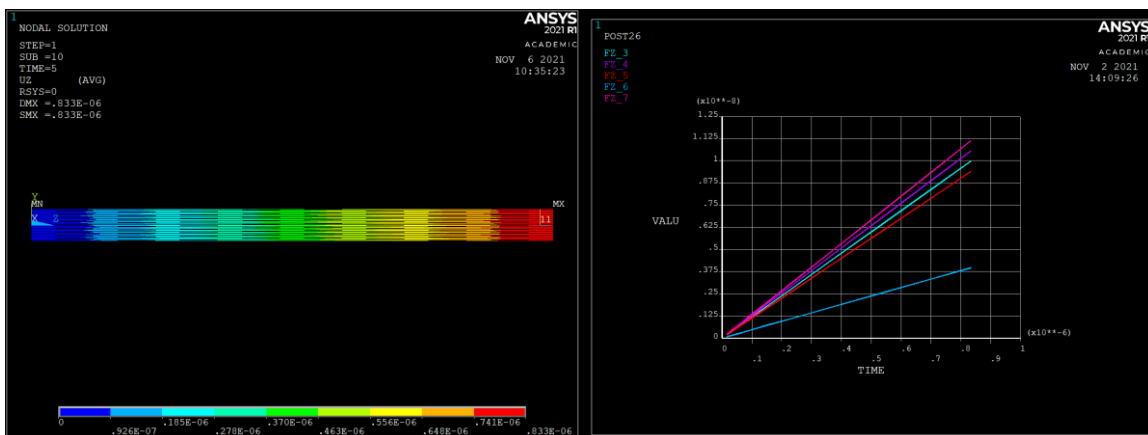
A kollagén viszkoelasztikus tulajdonságai miatt egy közvetett tartós kúszást (implicit creep) leíró egyenletet választottunk, melynek konstansait a Kelvin-Voigt anyagmodell alapján számoltuk [1]:

$$\epsilon(t) = \frac{\sigma_0}{E} (1 - e^{-\frac{t}{\tau}}) \quad (1)$$

Az (1) egyenletben található a rugalmassági modulus ( $E$ ) és relaxációs idő ( $\tau$ ) a rostszál esetén  $E = 5,4 \text{ GPa}$ ;  $\tau = \frac{E}{\eta} = 0,5 \cdot 10^{-9} \text{ s}$ , a rostnál  $E = 2,4 \text{ GPa}$ ;  $\tau = \frac{E}{\eta} = \frac{1}{55} \text{ s}$ .

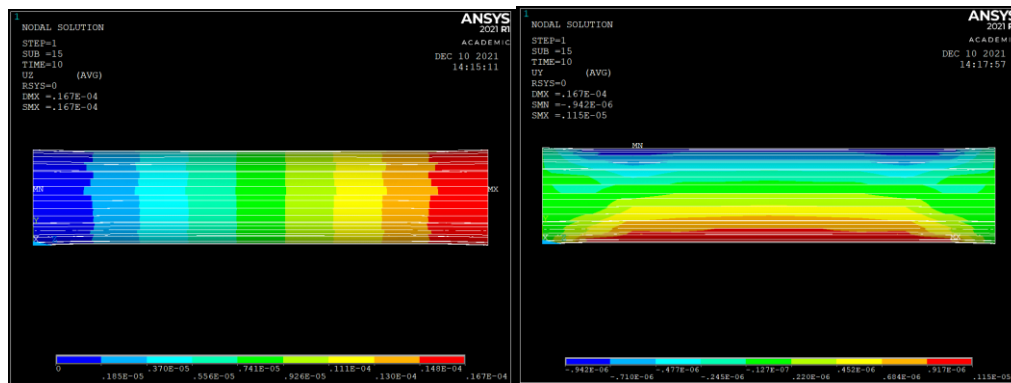
### 3. EREDMÉNYEK

A rostszál modell esetén az időfüggő elmozdulás hatására létrejövő elmozdulás a 2. ábrán látható. A teljes rostszál rugalmassági modulusának meghatározásához a terhelt csomópontok reakcióerejét összegeztük, amely a linearitás miatt elegendő a meredség számolásához. A mechanikai feszültséget az erő és a keresztmetszet hányadosaként számolhattuk ki. A három feszültség nagysága  $\sigma_1 = 71,72 \text{ MPa}$ ;  $\sigma_2 = 654,45 \text{ MPa}$ ;  $\sigma_3 = 3596,69 \text{ MPa}$ , a fajlagos nyúlások rendre  $\epsilon_1 = 0,0297$ ;  $\epsilon_2 = 0,2706$ ;  $\epsilon_3 = 1,483$ .



2. ábra a) Az időben változó terhelés hatására bekövetkező z irányú alakváltozás b) Az időben változó terhelés hatására bekövetkező z irányú elmozdulás 5 db húzott pontban

A rost vizsgálatának eredményeként a különböző tengelyek mentén való alakváltozások a 3. ábrán láthatók. A rost anyagi tulajdonságainak vizsgálatához összegeztük a 0 elmozdulás kényszerrel terhelt kör terület csomópontjaiban ébredő reakcióerők abszolút értékét, és négy időlépésben írtuk ki a z irányú elmozdulásokkal egyetemben. A mechanikai feszültséget itt is az erő és a keresztmetszet hányadosaként számoltuk.



3. ábra a) A z irányú elmozdulások a szimuláció végén b) Az y irányú elmozdulások a szimuláció végén

## 4. ÖSSZEFOGLALÁS

A kutatás célja egy korábbiaknál pontosabb, inakat felépítő egyes típusú kollagén rostról készült mikro-, és mezoszintű modell megalkotása szakirodalom felhasználásával, majd ennek segítségével egy rostszál és rost rugalmassági modulusának meghatározása volt. Mindkét modell esetén a Kelvin-Voigt anyagmodellt használtuk [1] a módszer fejezet végén adott jellemzőkkel. A gerendaelemet használó szimuláció alapján a teljes rostszál modell rugalmassági modulusára 2,4 GPa értéket kaptunk, amely az irodalomban [1,4] található mérések és szimulációk során kapott tartományban található. Megállapítható, hogy az egyszerűsítések ellenére is megfelelő pontosságú modellt alkottunk. A SOLID186 elemet használó modell esetében a választott sűrűdési együtthatótól és anyagi tulajdonságoktól függően (a rostszálra általunk számolt 2,4 GPa és a [1] cikkben olvasott 0,9 GPa-t választva a két szélső értéknek) 1 és 3 GPa közötti eredményeket kaptunk rugalmassági modulusra melyek egy nagyságrenddel eltér az irodalmi értéktől [4], ennek megfelelően a modellt módosítani kell vélhetően az anyagi szerkezet változtatásával. Összefoglalva, a rost és rostszál modell geometriája a valóságot jobban leírja. A rostszál modell alkalmazásával végzett a szimulációk eredményei azt mutatják, hogy a valós szövet mechanikai viselkedését megfelelően pontosan leírja.

## 5. IRODALOMI HIVATKOZÁSOK

- [1] Alfonso Gautieri, Simone Vesentini, Alberto Redaelli, Markus J. Buehler, Viscoelastic properties of model segments of collagen molecules, *Matrix Biology* 31, 141-149, 2012
- [2] David J. Hulmes, Building Collagen Molecules, Fibrils and Suprafibrillar Structures, *Journal of Structural Biology* 137, 2–10 2002
- [3] David R. Eyre, Mary Ann Weis, Jiann-Jiu Wu, Advances in collagen cross-link analysis, *Methods*, 45(1):65-74., 2008
- [4] Dutov P, Antipova O, Varma S, Orgel JP, Schieber JD., Measurement of Elastic Modulus of Collagen Type I Single Fiber, *PLoS One*. 2016;11(1):e0145711., 2016

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerző konferencia részvételét a BME Gépészmérnöki Kar NTP-HHTDK-21-0051 pályázata támogatta.