



VÉLETLEN RÚDHÁLÓZATOK MECHANIKAI VISELKEDÉSE: A SEJTVÁZ MODELLEZÉSE

BME Építészmérnöki Kar, Szilárdságtani és Tartószerkezeti Tanszék
2021. TDK konferencia

szerző: **Tábi Dávid**,
szerkezet-építőmérnök mesterszakos hallgató

konzulens: **Dr. Károlyi György**,
egyetemi tanár, Nukleáris Technikai Intézet

Tartalomjegyzék

ABSZTRAKT	2
ABSTRACT	3
1. BEVEZETÉS, ALAPFOGALMAK	4
1.1. VÉLETLEN RÚDHÁLÓZATOK	4
1.2. A SEJTVÁZ FOGALMA, SZEREPE, FELÉPÍTÉSE	4
1.3. A KUTATÁS CÉLKITŰZÉSE	5
2. VÉLETLEN RÚDHÁLÓZATOK MECHANIKAI MODELLEZÉSE	5
2.1. „MAROKKÓ” MODELL.....	5
2.2. A MODELL KITERJESZTÉSE.....	7
3. VÉLETLEN RÚDHÁLÓZAT GENERÁLÁSA, NUMERIKUS SZIMULÁCIÓK.....	7
3.1. A PROGRAM FELÉPÍTÉSE	7
3.2. HÁLÓZATGENERÁLÁS	7
3.3. RUGALMAS ENERGIÁK TÁROLÁSA, EGYENSÚLYI HELYZETEK KERESÉSE	10
4. FUTTATÁSOK, EREDMÉNYEK MEGJELENÍTÉSE.....	12
4.1. KIINDULÁSI PARAMÉTEREK, FUTÁSOK	12
4.2. EREDMÉNYEK	13
5. ÖSSZEFOGLALÁS, TOVÁBBLÉPÉSI LEHETŐSÉGEK.....	18
5.1. ÖSSZEFOGLALÁS	18
5.2. TOVÁBBLÉPÉSI LEHETŐSÉGEK	18
KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS.....	20
HIVATKOZÁSOK.....	21

Absztrakt

Szálas szerkezetű anyagok [1] gyakran előfordulnak mind az élő természetben (sejtvázak, porózus csontok szerkezete), mind pedig az építő- (szálerősítéses beton) és egyéb mérnöki gyakorlatban (szálerősítéses polimer kompozitok). E hálózatok mechanikai, illetve matematikai modellezése céljából gyakran alkalmaznak rugalmas rudakból álló véletlen hálózatot, ahol az egyes rúdelemeket keresztkötések kapcsolják egymáshoz. A kapcsolt rudak alakváltozásai a korábbi kutatási eredmények alapján a hálózat sűrűségének függvényében jellemzően vagy hajlított, vagy pedig normál jellegűek [2-4]. A keresztkötések jellegétől függően az egyes (kapcsolt) rúdelemek egymáshoz képest szabadon elfordulhatnak, sarokmereven csatlakozhatnak, illetve egyes modellek figyelembe veszik az összekötések elfordulás elleni merevségét is. Jelen TDK dolgozat elsődleges célkitűzése inhomogén (eltérő merevségű és anyagi tulajdonságú) rudakból álló véletlen hálózat generálása és mechanikai vizsgálata, annak érdekében, hogy megértsük a polimerek komplex hálózatából álló sejtvázak mechanikai viselkedését. A sejtvázat lényegében három, különböző méretű és mechanikai szempontból eltérő tulajdonságú polimerszál építi fel: az aktinszálak, a mikrotubulusok és az intermedier filamentumok [5]. A kutatás során alkalmazott, numerikus számításokon alapuló programkód alapjául a Wilhelm és Frey által 2003-ban publikált [4] modell szolgált, amely négyzet alaprajzzal határolt síkrészben elszórt véletlen pozíciójú és irányultságú, homogén rúdelemek hálózata, periodikusan ismétlődő határokkal.

A sejtváz analógiájára három eltérő merevségű rúdelemből (polimerszálból) álló (inhomogén felépítésű) hálózat esetében azt tapasztaltuk, hogy fixált darabszámú elemkészlet esetében bizonyos merevségi arányok mellett a tárolt rugalmas energiának maximuma van (a hálózat nyírómerevsége maximális), az optimum a három rúdtípus együttes alkalmazása. A vizsgálatok során szerzett tapasztalatok hasznosak lehetnek az egyes száltípusok (komponensek) mechanikai teherviselésben betöltött szerepének és egymással való kölcsönhatásának megértésében, továbbá a mérnöki gyakorlatban alkalmazott szálerősítéses anyagok vizsgálatában egyaránt.

Abstract

Filamentary networks [1] play an important role in biology (e.g. cytoskeleton or structural component of porous bones) and in engineering (fiber-reinforced concrete, polymer composites). A simple mechanical and mathematical model consists of a random network of elastic filaments attached to each other by cross-links. Investigations revealed that depending on the density of the network, either the bending or the normal strains dominate [2-4]. Most often, these cross-links form hinges, sometimes they are rigid connections, however, certain models include moment bearing hinges at the cross-links. The main goal of this study is to generate and analyse the mechanical properties of a randomized network built of a set of elastic rods that differ in size and material. The motivation comes from studies on the cytoskeleton, which is the part of cells that gives its resistance against external mechanical effects and consists of a complex network of polymers. Three different types of filaments build up the cytoskeleton: the actin microfilaments, the microtubules and the intermediate filaments [5]. They differ in material, size and role. The applied computer simulations, based on the Mikado model published by Wilhelm and Frey in 2003 [4] consist of elastic rods placed randomly in a square domain, and attached by hinges to each other wherever they intersect. Periodic boundary conditions are used during the solution.

By analogy with the cytoskeleton, in the case of a (inhomogeneous) network of three different stiffness rod elements (polymer fibers), we found that for a fixed set of elements, the stored elastic energy has a maximum (maximum shear stiffness of the network) at certain stiffness ratios. Our results may contribute to the understanding of the interplay between the different filaments (components) in order to discover their mechanical role in the behaviour of the cytoskeleton under external mechanical load. The experience obtained from the model is expected to be useful in investigation of fiber reinforced materials in engineering as well.

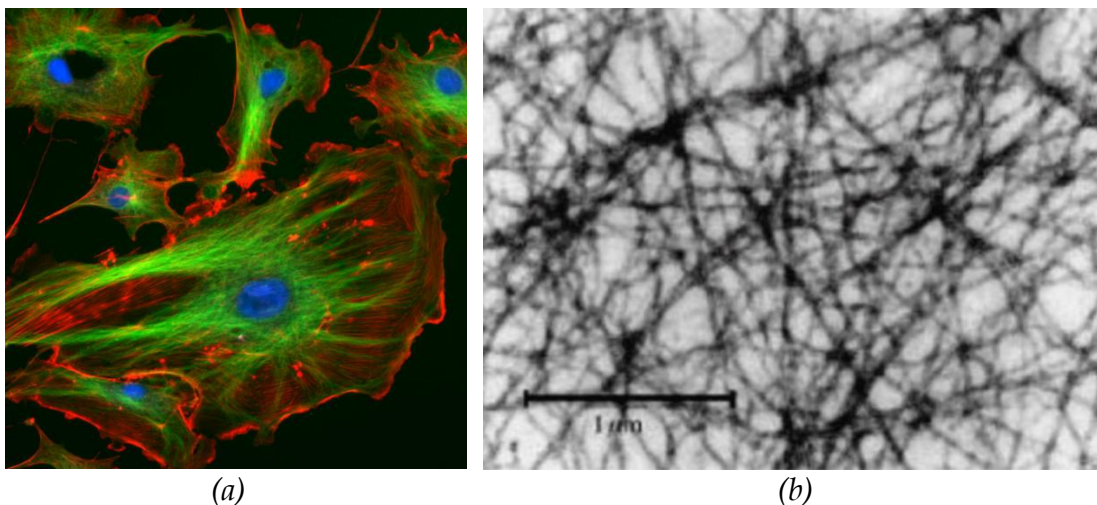
1. Bevezetés, alapfogalmak

1.1. Véletlen rúdhálózatok

Szálak szerkezetű anyagok [1] gyakran előfordulnak mind az élő természetben (sejtvázak, porózus csontok szerkezete), mind pedig az építő- (szálerősítéses beton) és egyéb mérnöki gyakorlatban (szálerősítéses polimer kompozitok). E hálózatok mechanikai, illetve matematikai modellezése céljából gyakran alkalmaznak rugalmas rudakból álló véletlen hálózatot, ahol az egyes rúdelemeket keresztkötések kapcsolják egymáshoz. A kapcsolt rudak alakváltozásai a korábbi kutatási eredmények alapján a hálózat sűrűségének függvényében jellemzően vagy hajlított, vagy pedig normál jellegűek [2-4]. A keresztkötések jellegétől függően az egyes (kapcsolt) rúdelemek egymáshoz képest szabadon elfordulhatnak, sarokmereven csatlakozhatnak, illetve egyes modellek figyelembe veszik az összekötések elfordulás elleni merevségét is.

1.2. A sejtváz fogalma, szerepe, felépítése

A sejtek az élő természet legkisebb alkotóelemei [3]. A sejtváz az eukarióta sejtek szerkezeti vázát képezi, amely eltérő méretű és anyagi tulajdonságú polimerek komplex hálózatoként írható le, melynek elsődleges feladata a sejt alakjának fenntartása, továbbá mechanikai ellenállásának biztosítása a külső terhekkel szemben [5]. A sejtváz és más, hasonló biológiai hálózatokat (kollagén, fehérjék, porózus csontok szerkezete) hajlékony szálak véletlen hálózatoként modellezzük. Lényegében három, mechanikai szempontból eltérő tulajdonságokkal rendelkező szál építi fel a sejtvázat [5-6]: az aktinszálak, a mikrotubulusok és az intermedier filamentumok. Az egyes száltípusok mind anyagukban, mind pedig átmérőjükben jelentősen különböznek egymástól, szerepük eltérő. Az aktin mikroszálak szerepe kiemelkedik a sejtvázban, a három száltípus közül ennek a legnagyobb a rugalmassági modulusa, a másik két szál szerepe egyrészt a magasabb terhelés esetén kialakuló ellenállás során, másrészt pedig a belső megtámasztásban jelenik meg.



1. ábra. (a) Fluoreszcenciamikroszkopikus kép az eukarióta sejtvázról. A sejtmag kék, az aktinszálak vörös, a mikrotubulusok pedig zöld színnel megjelenítve. (A kép

forrása: <http://rsb.info.nih.gov/ij/images>) (b) Elektronmikroszkopikus felvétel a sejtvázról [8].

1.3. A kutatás célkitűzése

Jelen TDK dolgozat elsődleges célkitűzése inhomogén (eltérő merevségű) rudakból álló véletlen hálózatok generálása és mechanikai vizsgálata, melyhez motivációként a (polimerek komplex hálózatából álló) sejtvázak viselkedésének megértése szolgál. A véletlen rúdhálózat (terhelés hatására kialakuló) egyensúlyi helyzetei a szerkezet potenciális energiájának számításával kereshetők: számítógépes szimulációk segítségével megkeressük a rudak nyúlásából, illetőleg hajlításából eredő alakváltozásban tárolt teljes rugalmas (potenciális) energia minimumhelyeit.

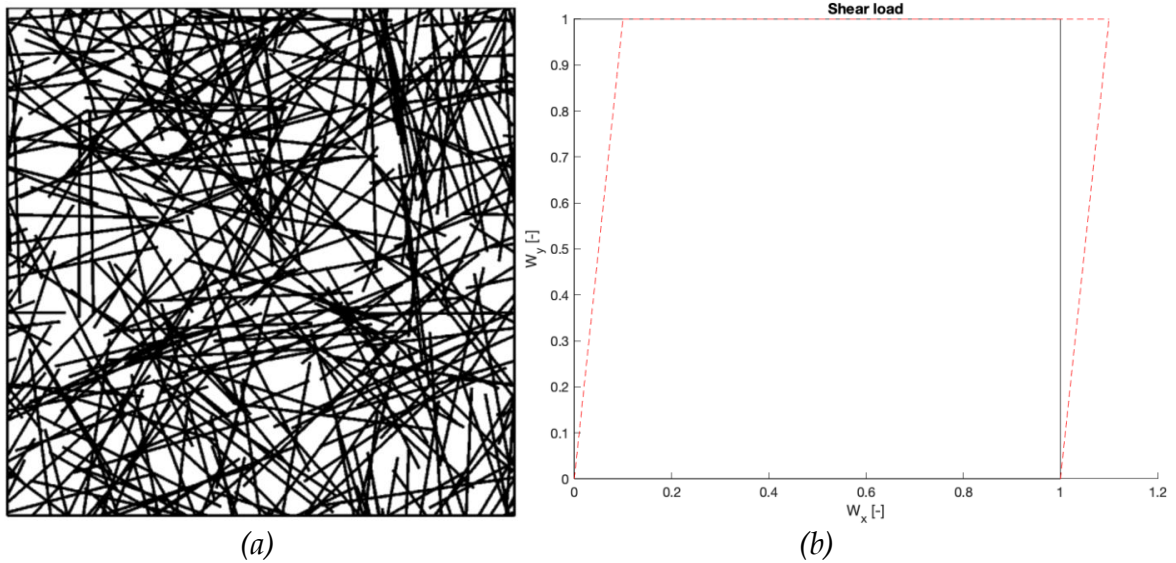
Három eltérő merevségű rúdból álló elemkészlet esetében fixált összelemszám mellett változtatjuk az egyes típusok darabszámának arányát, az így generált rúdhálóok egyensúlyi helyzeteinek keresésével meghatározzuk a külső terheléshez tartozó teljes rugalmas energiákat. A potenciális energiák aránya alapján következtetéseket vonhatunk le a tekintetben, hogy milyen kölcsönhatások és együttműködés van az eltérő szálak (polimerek) között, mi az egyes komponensek szerepe a mechanikai terhek viselésében.

A modellel szerzett tapasztalatok hasznosak lehetnek a fentebb tárgyalt sejtváza mechanikai viselkedésének megértésében, továbbá a mérnöki gyakorlatban alkalmazott szálerősítéssel anyagok vizsgálatában egyaránt. További cél a szakirodalomból ismert numerikus számítási modell kiterjesztése széleskörű parametrikus vizsgálatokhoz összetettebb, komplex hálózatok esetében.

2. Véletlen rúdhálózatok mechanikai modellezése

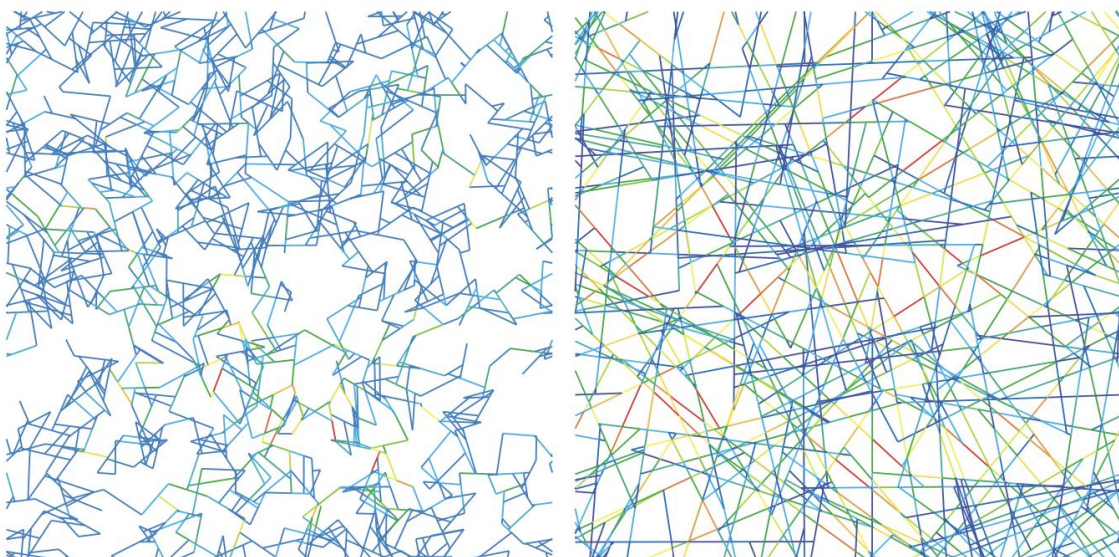
2.1. „Marokkó” modell

A számítási modell alapját a Wilhelm és Frey által 2003-ban publikált [4] „Marokkó” modell képezte, amely számos egyéb publikáció alapjául szolgált. A modell kétdimenziós, (W oldalhosszúságú) négyzet alaprajzú síktérben véletlenszerűen elszórt homogén, rugalmas rudak hálózata, E rugalmassági modulus paraméterrel, l hosszúsággal, valamint a kör keresztmetszethez tartozó r sugár értékekkel definiálva (2.a ábra). A rúdelemek középpontja (síkbeli pozíciója) és iránya (vízszintes tengellyel bezárt szöge) véletlenszerűen, egyenletes eloszlással generált. A metsződő rúdelemeket csuklós keresztmetszések kapcsolják egymáshoz. A határoló élek mentén túlnyúló rúdelem-szakasz a szemközti oldalon megjelenik, mintegy periodikusan ismétlődő határokat képezve a szegmensek által. A rúdhálózatot két párhuzamos él egymáshoz viszonyított eltolódása, a tartomány (cella) elnyíródása terheli (2.b ábra).



2. ábra. (a) Kétdimenziós véletlen rúdháló, „Marokkó” modell [7]. (b) Nyírási terhelés a szemközi élek elmozdításával W_x , illetve W_y oldalhosszúságú tartomány (cella) esetében.

Azt tapasztalták, hogy a $\rho = Nl/A$ hálózatsűrűség (ahol N a rúdelemek száma, l a hosszúsága, és $A=W^2$ a tartomány területe) függvényében jellemzően három, domináns alakváltozás tekintetében határolt tartomány különíthető el (3. ábra). Nagyon alacsony hálózatsűrűség esetében a rúdhálózat instabil, terhek viselésére alkalmatlan, növelve a rúdelemek számát azonban a hajlításból eredeztethető alakváltozás válik jellemzővé: a keresztkötések közti rúdszegmensek hossza elegendően nagy a hajlítási deformáció kialakulásához. Magasabb sűrűségű tartományban a keresztkötések darabszámának emelkedésével párhuzamosan a szabad rúdszegmensek hossza lecsökken, a nyúlási (normál értelmű) alakváltozás válik dominánssá.



3. *ábra.* 2D „Marokkó” hálózat alacsony, illetve magas hálózatsűrűség esetében: a színek a rúdelemek terheinek (belső feszültségeinek) indikátorai a kék színtől a vörös felé haladva [4].

Az ilyen fajta viselkedés megfigyelhetővé vált olyan módosított, kétdimenziós rúdhálózatok esetében is, ahol az egyes rúdelemeket csuklók helyett nyomatékbíró, sarokmerev keresztkötések kapcsolnak egymáshoz.

2.2. A modell kiterjesztése

A fent tárgyalt „Marokkó” modellt a sejtvázas mechanikai sajátosságainak figyelembevételével kiterjesztettük. Az eredeti modell [4] eredendően homogén felépítésű (azonos méretű és mechanikai tulajdonságú) rúdelemekből áll, a sejtvázas (és egyéb fehérjehálózatok) azonban inhomogén, eltérő mechanikai tulajdonságú és geometriájú szálakból épül fel, így modellünkben három eltérő merevségű rúdelemet alkalmazunk.

3. Véletlen rúdhálózat generálása, numerikus szimulációk

3.1. A program felépítése

A vizsgálat céljából numerikus szimulációkat végzünk egy véletlen rúdhálózat generáló programkód segítségével. A kód C programnyelven íródott. A program alkalmas:

- véletlen (inhomogén geometriai és mechanikai tulajdonságú rúdelemekből álló) rúdhálózat generálására széles paramétertartományon;
- nyírás alakváltozás (terhelés) hatására kialakuló egyensúlyi helyzetek keresésére a szerkezet potenciális energiájának minimalizálása útján (konjugált gradiens módszer);
- az eredmények tárolására, külső fájlba történő kiíratására.

A számított adatokat a programban tároljuk, majd kiértékeljük. A kapott eredményeket grafikusán ábrázoljuk a változó paraméterek függvényében. Megállapításokat teszünk a hálózat globális mechanikai viselkedésére, továbbá az egyes száltípusok teherviselésben betöltött szerepére vonatkozóan. Az utolsó fejezetben továbblépési lehetőségként javaslatokat teszünk a program kiterjesztésére, a modell továbbfejlesztésére.

3.2. Hálózatgenerálás

Az előző fejezetben kiterjesztett „Marokkó” modell [4] analógiájára egy $W_x \times W_y$ alapterületű tartományban rendre N_1 , N_2 , illetve N_3 darabszámú, L hosszúságú rugalmas rudat helyezünk el véletlenszerűen generált középponttal (egyenletes eloszlásban a cellán belül), illetve véletlenszerű iránnyal deklarálva (a vízszintes, x tengellyel bezárt ϑ szöggel a $[-\pi/2, +\pi/2]$ intervallumban). Az így generált

rúdhálózat elemeinek tulajdonságait pointerláncban tároljuk, a lánc elemei tartalmazzák az adott rúd adatait, továbbá a következő láncelem (rúd) helyét (*pointer*) a számítógép memóriájában (az utolsó rúd esetében *nullpointert*-t). Egy láncelem (struktúra) esetében tárolt adatok az alábbiak:

- x, y a rúd középpontjának koordinátái;
- $teta$ a vízszintes, x tengellyel bezárt ϑ szög a $[-\pi/2, +\pi/2)$ intervallumon;
- $\tan \vartheta, \sin \vartheta, \cos \vartheta$ (tt, sit, cot) trigonometrikus kifejezések;
- x_0, y_0 , illetve x_1, y_1 összetartozó értékpárok, a rúd (kezdeti, deformáció előtti) végpontjainak koordinátái;
- EI a rúd hajlítással szembeni merevsége;
- EA a rúd nyújtással szembeni merevsége;
- L a rúd hossza;
- $type$ a rúdelem típusa (száltípus, melyből a fentiek alapján hármat deklarálunk);
- végül a következő rúdelemre mutató *pointer* (mutató), az utolsó elem esetében *nullpointer*.

A program az összes rúdelem adatait tárolja és képes azokat külső fájlba kiíratni. A hálógenerálást (lánc létrehozását) követően az első lépés az, hogy megkeressük az egyes rudak (láncelemek) metszéspontját mind egymással, mind pedig a határoló élekkel (négyyszög oldalával). Vizsgáljuk először az utóbbi esetet: tekintve, hogy periodikusan ismétlődő határokat feltételezünk, abban az esetben, ha valamely rúdelem metszi a kerületet, a kilógó rúdszegmens megjelenik („belóg”) a szemközti oldalon, eltolva az elmozdulás jellegű tehernek megfelelően, ezáltal ténylegesen periodikus peremfeltételeket teremtve. A következő lépésben elvégezzük a metszészvizsgálatot a lánc összes rúdelemének figyelembevételével. A feladat nehézségét az okozza, hogy a láncban tárolt összes elem túlnyúlhat az éleken, a periodikusan ismétlődő határokat tekintve a túlnyúló rúdszakaszok akár más rudakkal, akár egyéb, ugyancsak belógó rúdszakaszokkal is metsződhetnek. Megjegyezzük, hogy az $L < \min\{W_x/2, W_y/2\}$ feltétel teljesülése mellett két rúdelem legfeljebb egy pontban metszheti egymást, ezt a hálózat generálása során ki kell kötnünk. E kikötés jelentősen leszűkíti a vizsgálandó esetek számát, csökkentve a program számítási igényét a szimuláció során. A metsződéseket a rudakkal analóg módon ugyancsak láncban tároljuk. Adott láncelem (csukló) esetében tárolt adatok az alábbiak:

- ser az adott keresztmetszés (csukló) sorszáma;
- x_0, y_0 , illetve x, y összetartozó értékpárok, a csukló eredeti (alakváltozás előtti), illetve aktuális (külső terhelés utáni) koordinátái;
- $pointer\ rod1$, illetve $pointer\ rod2$ mutatók, melyek a metsződő rudak helyét jelölik a számítógép memóriájában;
- $pointer\ st1..st4$ a kapcsolódó rúdszegmensek (lentebb részletezve) helyei a memóriában;
- $pointer\ n1..n4$ azon csuklók helye a memóriában, melyek a metsződő rúdszegmensek átellenes végéhez kapcsolódnak;

- pointer $mp1..mp4$ a kapcsolódó rúdszegmensekhez tartozó középpontok (lentebb részletezve) helyei a memóriában;
- a következő láncelemre mutató *pointer*, az utolsó elem esetében *nullpointer*.

A következő lépésben megkeressük a szomszédos csuklók közti rúdszakaszokat, melyeket rúdszegmensként, vagy másnéven *stick*-ként definiálunk. Ehhez első lépésben minden rúd esetében megkeressük azokat a csuklókat, amelyek az adott rúdhhoz tartoznak (amennyiben nincs ilyen, ugrunk a láncban soron következő rúdelemre).

A rúdszegmensek (*sticks*), illetve azok középpontjainak (*midpoints*) adatait az előzőekkel analóg módon láncban tároljuk. Adott rúdszegmens (*stick*) esetében tárolt adatok:

- pointer $n1$, illetve pointer $n2$ a rúdszegmens két végéhez kötődő csuklók helye a számítógép memóriájában;
- pointer mp a rúdszegmens középpontjának mutatója;
- pointer rod a rúdszegmenst tartalmazó rúd helye a számítógép memóriájában;
- len a rúdszegmens eredeti hossza;
- a következő láncelemre mutató *pointer*, az utolsó elem esetében *nullpointer*.

Adott középpont (*midpoint*) esetében tárolt adatok:

- ser az adott középpont sorszáma;
- $x0, y0$, illetve x, y összetartozó értékpárok, a középpont eredeti (alakváltozás előtti), illetve aktuális (külső terhelés utáni) koordinátái;
- pointer st annak a rúdszegmensnek a helye a memóriában, amely tartalmazza az adott középpontot;
- pointer $n1$, illetve $n2$ a szomszédos csuklók helye a számítógép memóriájában.
- $n1x, n1y$, illetve $n2x, n2y$ indikátorok, melyek értéke attól függően változik, hogy a szomszédos keresztkötések kívül esnek-e a tartományon (lentebb részletezve);
- pointer $rod1$, illetve pointer $rod2$ mutatók, melyek a metsződő rudak helyét jelölik a számítógép memóriájában.

Tároljuk, hogy a rúdszegmensek végein a csuklók merre lógnak ki a cellából az alábbi paraméterek függvényében:

$$n_{1x} = \begin{cases} 0, & \text{ha nem lóg ki az } n1 \text{ csukló } x \text{ irányban} \\ +1, & \text{ha jobbra kilóg} \\ -1, & \text{ha balra kilóg} \end{cases}$$

$$n_{1y} = \begin{cases} 0, & \text{ha nem lóg ki az } n1 \text{ csukló } y \text{ irányban} \\ +1, & \text{ha felfelé kilóg} \\ -1, & \text{ha lefelé kilóg} \end{cases}$$

Hasonlóan $n2x$, illetve $n2y$ esetében. A hálógenerálást követő lépésben megkeressük a külső terhelés hatására kialakuló egyensúlyi helyzeteket.

3.3. Rugalmas energiák tárolása, egyensúlyi helyzetek keresése

A hálózat egyensúlyi helyzetei a szerkezet potenciális energiájának segítségével kereshetők. Az egyes rúdelemek külső teher okozta alakváltozásaiban tárolt rugalmas energiákat két csoportra különítjük el: nyújtási, illetve hajlítási rugalmas energiákra. Ahogyan arról már a korábbi fejezetben szó esett, a külső terhet a cella két szemközti, párhuzamos élének elmozdításával (elnyírásával) modellezzük (a szomszédos élék normál alakváltozásával egyidejűleg). Az élék elmozdításával egyidejűleg megváltoznak az egyes keresztmetszetek (csuklók) közötti távolságok, amely a rúdszegmensek alakváltozásaiban tárolt potenciális energia megnövekedését idézi elő.

A nyúlásban tárolt rugalmas energia a rúdszegmensek esetében a két félszegmens energiájából tevődik össze: a középpont és egyik félszegmens, továbbá a középpont és másik félszegmens alakváltozásából. Amennyiben (x_i, y_i) , illetve (x_j, y_j) összetartozó értékpárok rendre az adott rúdszegmens végpontjának, illetve középpontjának koordinátái, a fél (!) rúdszegmensben tárolt energia képlet-szerűen:

$$\delta H_s = \frac{EA}{2} \left(\frac{\delta l}{l_0} \right)^2 l_0$$

ahol EA a rúd normál merevsége. Itt l_0 a fél (!) rúdszegmens eredeti, deformáció előtti hossza, amely kifejezhető az alábbi összefüggés alapján:

$$l_0 = \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}$$

δl pedig a hosszváltozás a külső teher hatására:

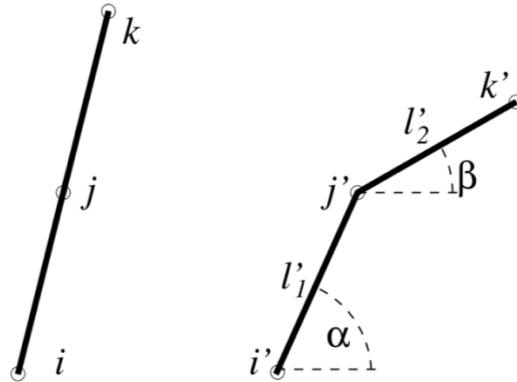
$$\delta l = l_0 + \delta l - l_0$$

$$\delta l = \sqrt{(x'_j - x'_i)^2 + (y'_j - y'_i)^2} - \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}$$

ahol (x'_i, y'_i) , illetve (x'_j, y'_j) összetartozó értékpárok a rúdszegmens végpontjának, illetve középpontjának koordinátái a deformált állapotban. A fenti értékek az egyes rúdszegmensek mindkét felére számítandók.

A hajlítási energia a rudak görbületéből számítandó. Tekintve, hogy a program a csuklók, illetve a rúdszegmensek középpontjainak koordinátáit tárolja, az energiákat is ebben az alakban kell felírunk. Tekintsük az i, j , illetve k folytatólagos pontokat egy rúdon (4. ábra), ahol a pontok csuklók vagy rúdszegmenshez tartozó középpontok.

Jelöljük (x_i, y_i) , (x_j, y_j) , illetve (x_k, y_k) összetartozó értékpárok az alakváltozás előtti koordinátákat.



4. ábra. Geometria az alakváltozás előtt és után a hajlítási rugalmas energiák számításához.

Ezzel analóg módon (x'_i, y'_i) , (x'_j, y'_j) , illetve (x'_k, y'_k) a deformált állapotban, ahol:

$$l' = (l'_1 + l'_2)/2$$

a deformáció utáni hosszak:

$$l'_1 = \sqrt{(x'_j - x'_i)^2 + (y'_j - y'_i)^2}$$

$$l'_2 = \sqrt{(x'_k - x'_j)^2 + (y'_k - y'_j)^2}$$

A hajlításban tárolt rugalmas energia:

$$\delta H_b = \frac{EI}{2} \left(\frac{\delta \vartheta}{l'} \right)^2 l'$$

ahol EI a rudak hajlítási merevsége.

A terhelés hatására deformálódott alakot (egyensúlyi helyzeteket) a rugalmas energiák kiszámításával és azok minimalizálásával határozzuk meg. A minimumhelyeket konjugált gradiens módszerrel keressük.

A számított energiákat, továbbá az átrendeződött rúdhálózat adatait a programban tároljuk. A kapott eredményeket ábrázoljuk a változó paraméterek (rúdelemszámok) függvényében. Összehasonlítjuk a nyúlásban, illetve hajlításban tárolt rugalmas energiákat a generált hálók esetében, amely alapján következtetéseket vonunk le az egyes típusú rúdelemek szerepét, darabszámának arányát illetően.

A program lefutását követően utolsó lépésként felszabadítjuk a láncokban tárolt adatok számára a számítógépben lefoglalt memóriát.

4. Futtatások, eredmények megjelenítése

4.1. Kiindulási paraméterek, futások

A sejtvezeték analógiájára három eltérő merevségű rudat deklarálunk. A merevségi paramétereket úgy választjuk meg, hogy egyik típus merevsége se legyen szignifikánsan nagy a másik kettőéhez képest, ezáltal olyan tartományokat keresünk, ahol optimuma lehet a rugalmas energiáknak. Abban az esetben, ha valamely típusú rúdelem normál, illetve hajlítási merevsége egyaránt nagyobb a másik két típus merevségeihez képest, a megoldás valószínűleg triviális.

Tekintsük az alábbi merevségi paramétereket:

$$EA1 = 0,01$$

$$EA2 = 0,1$$

$$EA3 = 1,0$$

$$EI1 = 10^{-8}$$

$$EI2 = 10^{-9}$$

$$EI3 = 5 \times 10^{-10}$$

ahol $EA1$, $EA2$, illetve $EA3$ rendre az 1-es, 2-es, illetve 3-as típusú rúdelem normál merevsége, hasonlóan az $EI1$, $EI2$, $EI3$ értékek az egyes rúdelemek hajlítási merevsége. A választott paraméterek dimenziótlannak tekinthetők, tekintve, hogy a vizsgálat szempontjából az egymáshoz viszonyított arányok relevánsak.

A rúdhosszak az egyes típusok esetében azonosak:

$$L1 = L2 = L3 = 0.2$$

a cella befoglaló méretei:

$$WX = WY = 1.0$$

így teljesül az $L < \min\{W_x/2, W_y/2\}$ feltétel (azaz két rúdelem legfeljebb egy pontban metszheti egymást). A változó paraméterek az $N1$, $N2$, illetve $N3$ rúdelemszámok, az összes elemszámot tekintve azonban rögzítjük, hogy:

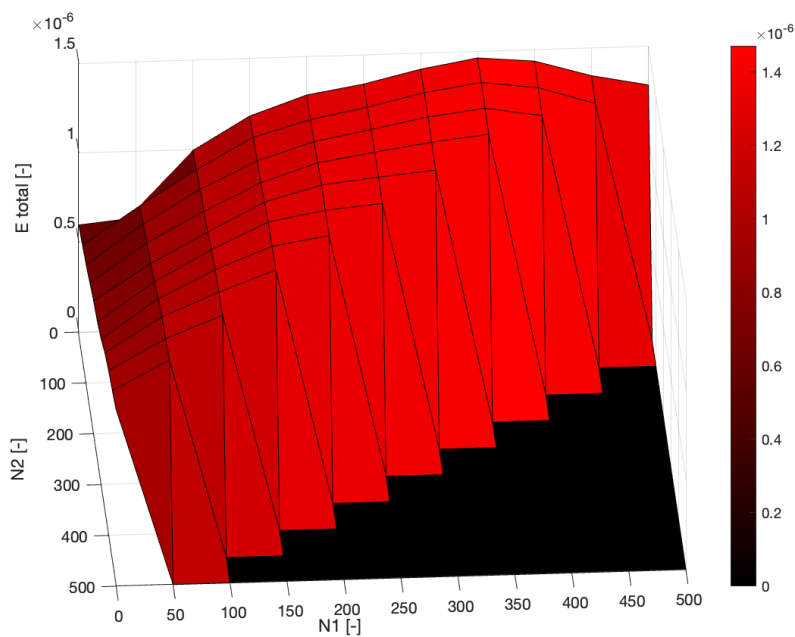
$$N1 + N2 + N3 = 500$$

feltétel teljesül az összes háló esetében. A független paraméterek száma így kettő, a harmadik elemszám meghatározható a másik kettő függvényében. A futásokat 50-es méretlépcsőben végezzük, kitolva a szélekig a tartományokat (egy rúdtípus esetében 0, illetve 500 darab is lehetséges). A terhelést a cella felső élének elmozdításával értelmezzük, ahol:

$$SHEARDISPL = 0,01$$

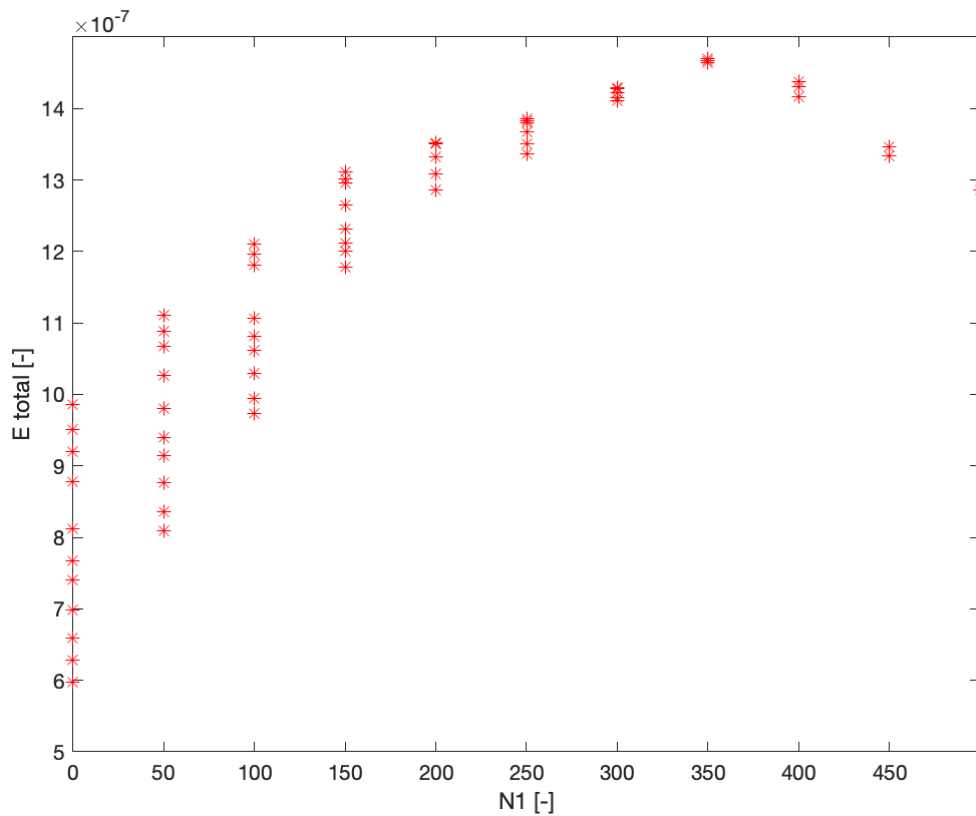
4.2. Eredmények

A program futását követően ábrázoljuk a hálózatban tárolt teljes rugalmas energiát az $N1$, illetve $N2$ elemszámok függvényében (rögzített elemkészlet esetében $N3$ nem független változó):

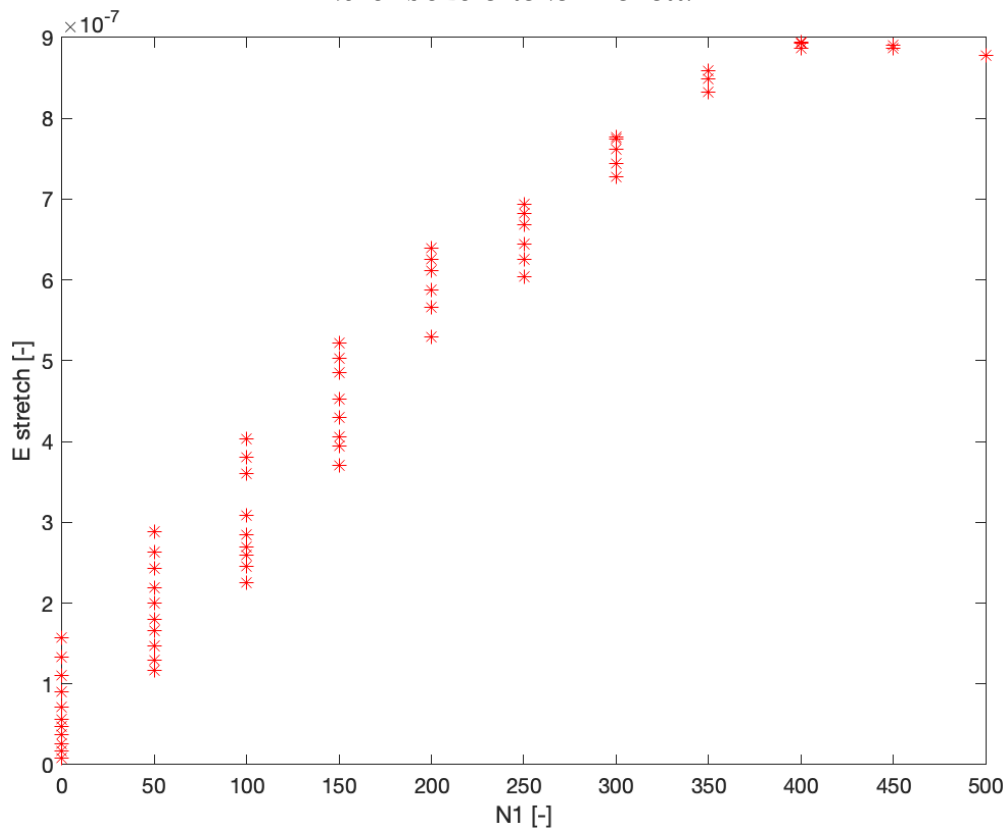


5. ábra. A hálózatban tárolt teljes rugalmas energia az $N1$, illetve $N2$ elemszámok függvényében.

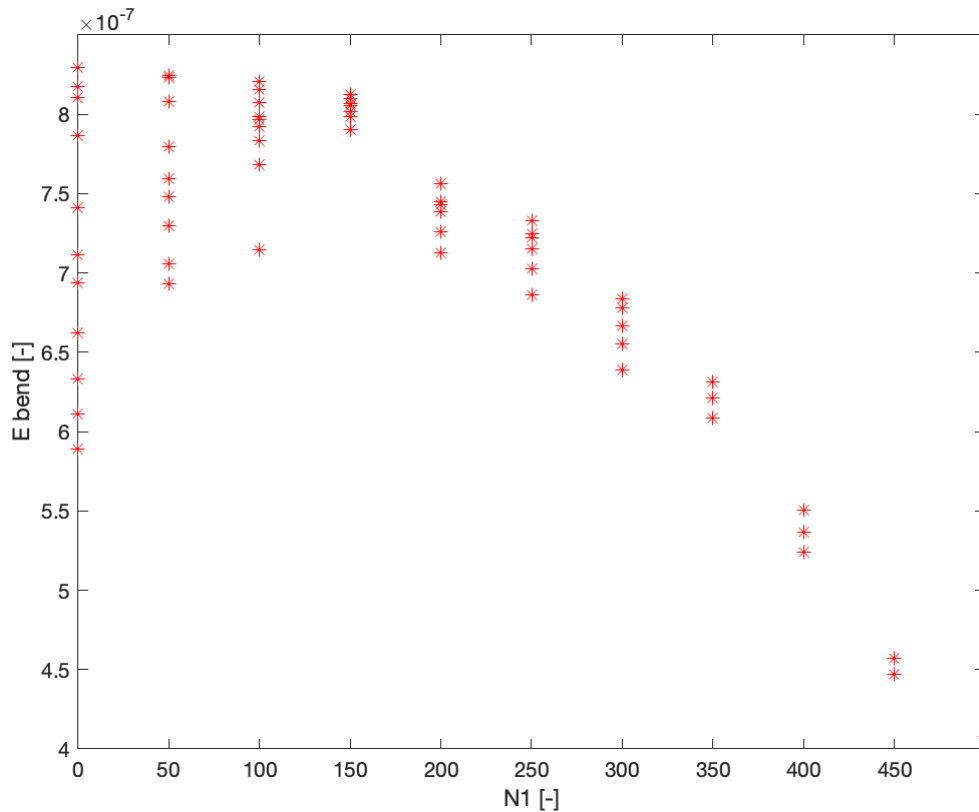
Tekintsük az alábbi ábrákat, ahol az $N1$ elemszám függvényében ábrázoljuk a nyúlásban, hajlításban, továbbá a rúdhálóban tárolt teljes rugalmas energiát (megjegyzés: egy elemszámhoz több energiaérték is párosul, hiszen azonos $N1$ darabszám függvényében $N2$ paraméter értékei változhatnak):



6. ábra. Rúdhálóban tárolt teljes rugalmas energia az N_1 elemszám függvényében, N_2 különböző értékei mellett.



7. ábra. Nyúlásban tárolt rugalmas energia az N_1 elemszám függvényében, N_2 különböző értékei mellett.



8. ábra. Hajlításban tárolt rugalmas energia az $N1$ elemszám függvényében, $N2$ különböző értékei mellett.

A rúdhálóban tárolt teljes energiának az $N1$ függvényében jól látható optimuma van (6. ábra), ekkor maximális a hálózat nyírómerevsége, tekintve, hogy az energia lineárisan rugalmas anyagot feltételezve:

$$E = \frac{1}{2} G \gamma^2$$

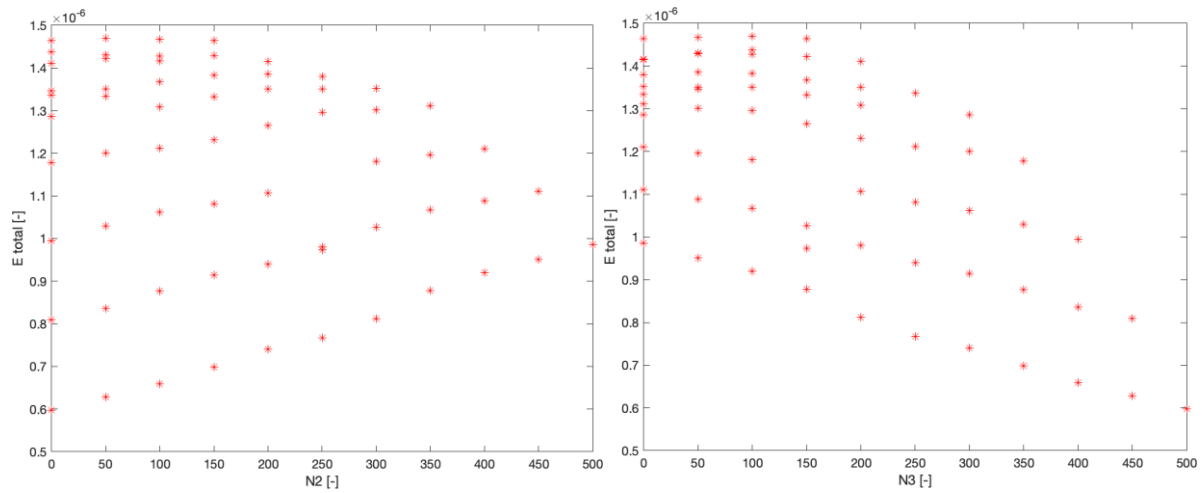
összefüggés alapján határozható meg, ahol γ nyírási alakváltozás:

$$\gamma = \frac{SHEARDISPLACEMENT}{L}$$

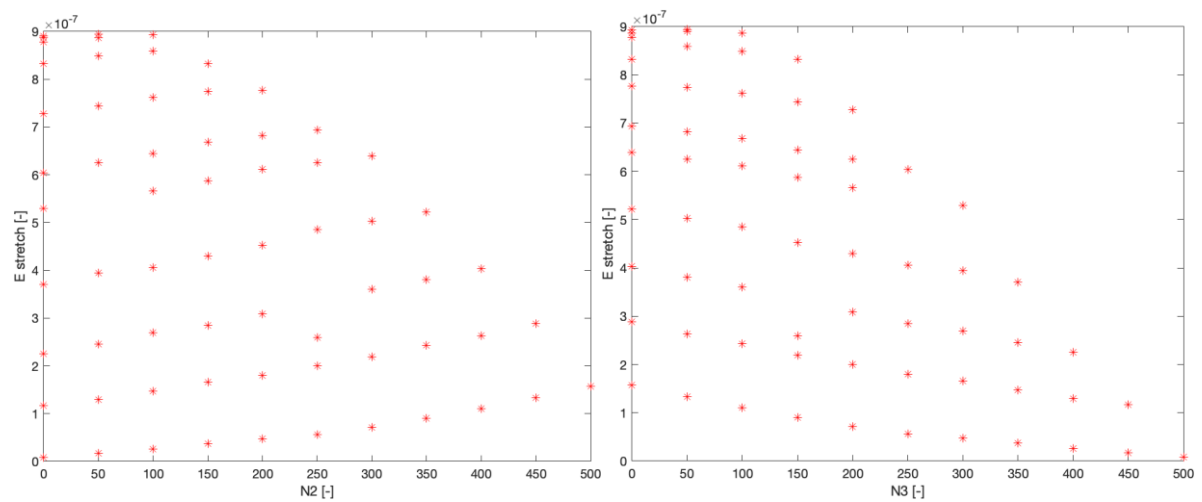
azaz G és E arányos egymással (vagyis a hálózatban tárolt teljes rugalmas energia arányos a nyírómerevséggel).

Az $N1$ elemszám növelésével párhuzamosan nő a nyúlási rugalmas energia (7. ábra), ezzel egyidejűleg csökken a hajlítási energia (8. ábra), de a kettő összege maximumot mutat. Előbbi nem meglepő, hiszen az egyes típusú rúdelem normál merevsége a legkisebb, hajlítási merevsége pedig a legnagyobb a háromfajta rúdból álló elemkészletben.

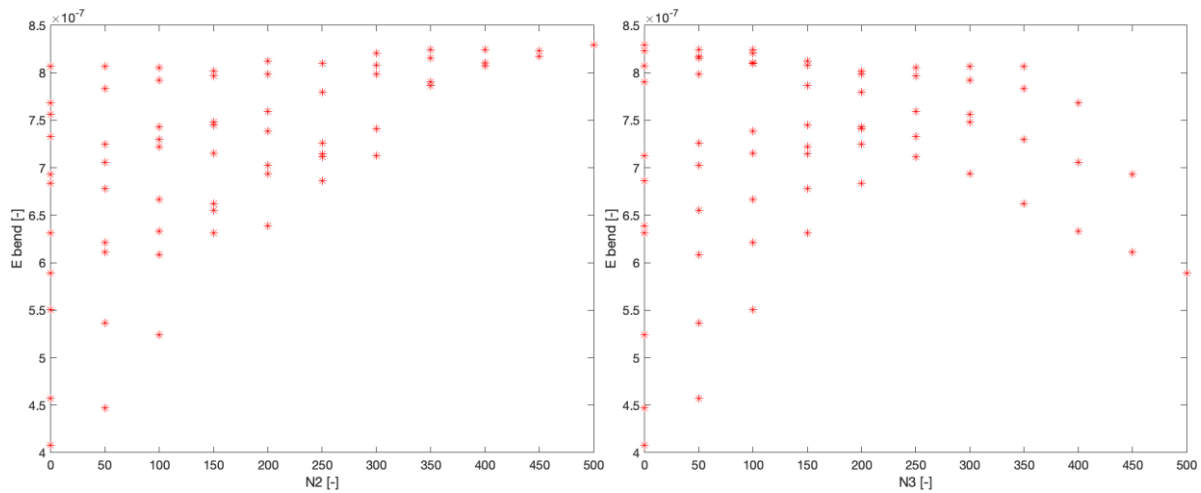
Az $N1$ elemszám analógiájára ábrázoljuk az energiákat a másik két rúdtípus függvényében is, $N1$ különböző értékei mellett.



9. ábra. Rúdhálóban tárolt teljes rugalmas energia az $N2$, illetve az $N3$ elemszám függvényében, $N1$ különböző értékei mellett.



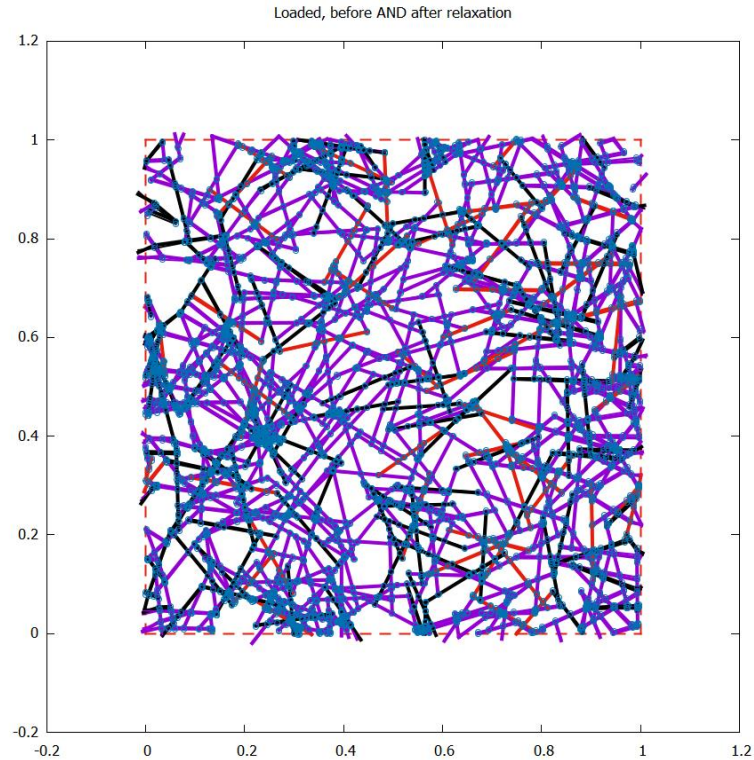
10. ábra. Nyúlásban tárolt rugalmas energia az $N2$, illetve $N3$ elemszám függvényében, $N1$ különböző értékei mellett.



11. ábra. Hajlításban tárolt rugalmas energia az N_2 , illetve N_3 elemszám függvényében, N_1 különböző értékei mellett.

A fenti grafikonok tanulságai alapján a hálózat teljes rugalmas energiája az 1-es típusú szál részarányának növelésével csak korlátozott mértékig növelhető, a normál alakváltozás mellett a hajlítás is szerepet kap a teljes hálózat mechanikai viselkedésében, az optimum a három típusú rúdelem együttes alkalmazása.

A program adatai alapján jelenítsük meg grafikusán az optimumhoz legközelebb eső ($N_1=350$; $N_2=50$; $N_3=100$) rúdháló deformált (terhelés utáni) alakját:



12. ábra. Az optimumhoz (hálózat maximális nyírómerevség) legközelebb eső rúdháló ($N_1=350$; $N_2=50$; $N_3=100$) grafikus megjelenítése.

Az eredmények összefoglalására a következő fejezetben kerül sor.

5. Összefoglalás, továbblépési lehetőségek

5.1. Összefoglalás

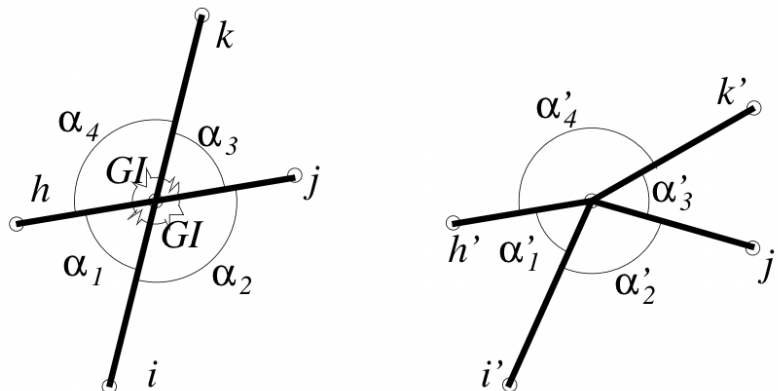
A sejtváza analógiájára felépített három eltérő merevségű rúdelemből (polimerszálból) álló (inhomogén) rúdháló esetében azt tapasztaltuk, hogy rögzített darabszámú elemkészlet esetében bizonyos merevségi arányok mellett a tárolt rugalmas energiának maximuma van (a hálózat nyírómerevsége maximális), az optimum a három rúdtípus együttes alkalmazása. A futások tanulságai alapján tehát a merevségi arányok (egyelőre még tisztázatlan) arányának alkalmas megválasztása nemtriviális megoldáshoz vezet az optimumhoz tartozó elemszámok tekintetében. A rúdhosszak változtatásával, továbbá az elemkészlet bővítésével a merevségi arányok különbözőek lehetnek.

A modell kiterjesztésével vizsgálatokat végezhetünk széles paramétertartományon, amely során szerzett tapasztalatok hasznosak lehetnek a kutatás motivációjaként szolgáló sejtváza, és egyéb komplex hálózatok mechanikai viselkedésének, továbbá az egyes száltípusok (polimerek) teherviselésben betöltött szerepének megértésében.

5.2. Továbblépési lehetőségek

A számítógépes modell felépítése során számos egyszerűsítéssel éltünk. A közelítések révén csökkent a számítási kapacitás, ugyanakkor a modellel csak a lineáris tartományban vizsgálható az elmozdulások szerepe. Továbblépési lehetőségként javaslatokat teszünk a modell kiterjesztésére, a program fejlesztésére.

A számítások alapjául szolgáló modellben a metsződő rúdelemek csuklósan kapcsolódnak egymáshoz, ez kiterjeszthető rugalmas keresztkötések használatára. Figyelembe véve az elfordulás elleni merevséget vizsgálható a hálózat nyírási alakváltozásának szerepe a korábban tárgyalt nyújtással/hajlítással szemben. Illesszünk GI merevségű elfordulási rugókat az azonos keresztkötéshez tartozó rúdszegmensek közé az ábrán látható módon:



13. ábra. Geometria az alakváltozás előtt és után a nyírási rugalmas energiák számításához.

A nyírásban tárolt rugalmas energia így:

$$\delta H_r = \frac{GI}{2} [(\varphi_1 - \varphi'_1)^2 + (\varphi_2 - \varphi'_2)^2 + (\varphi_3 - \varphi'_3)^2 + (\varphi_4 - \varphi'_4)^2]$$

ahol φ_i a rúdszegmensek által bezárt szög a deformáció előtt, φ'_i pedig az alakváltozás utáni állapotban. Azt várjuk, hogy a keresztkötések rugalmas elfordulásban tárolt energia nyírás által dominált állapotokhoz vezet a paraméterek egy széles tartományán.

A program által generált rúdháló esetében a rudak vízszintessel bezárt szöge véletlenszerű a $[-\pi/2, +\pi/2)$ intervallumon egyenletes eloszlásban, a terheléstől függetlenül. A rúdhálózat előterhelésével preferenciákat szabhatunk a metsződő rúdszegmensek szögét illetően, növelve a hálózat teherbírását.

További, kutatás szempontjából releváns célkitűzések és továbblépési lehetőségek: ráncosodás vizsgálata (azaz a terheletlen állapotnak megfelelő síkból történő kilépés vizsgálata); keresztkötések időbeli degradációja. Utóbbi egyfajta tönkremeneteli valószínűséget rendel az idő függvényében a kapcsolatokhoz, amely a hálózat egyensúlyi alakjának újrendeződéséhez, annak esetleges összeomlásához vezethet a terhelés mértékétől függően. A hálózat alakváltozásait nem csak a keresztkötések időbeli degradációjával, hanem a rúdelemek szilárdsági teherbírásának kimerülésével is korlátozhatjuk.

Lépéseket tehetünk a modell kétdimenzióról 3D-re történő kiterjesztésére.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom konzulensemnek, Dr. Károlyi Györgynek (Nukleáris Technikai Intézet), akinek útmutatása és témavezetése nélkül ez a dolgozat nem szülehetett volna meg.

Továbbá köszönettel tartozom a Nukleáris Technikai Intézetnek (NTI), amiért lehetővé tették számomra a számítógépes klaszter használatát a futtatásokhoz.

A kutatást az NKFIH K-128584 jelű pályázata segíti.

Hivatkozások

- [1] M. Sheinman, C.P. Broedersz, F.C. MacKintosh: Nonlinear effective-medium theory of disordered spring networks. *Physical Review E* 85 (2012) 021801.
- [2] M. Das, F.C. MacKintosh, A.J. Levine: Effective Medium Theory of Semiflexible Filamentous Networks. *Physical Review Letters* 99 (2007) 038101
- [3] S. Roy, H.J. Qi: Micromechanical model for elasticity of the cell cytoskeleton. *Physical Review E* 77 (2009) 061916.
- [4] J. Wilhelm, E. Frey: Elasticity of Stiff Polymer Networks. *Physical Review Letters* 91 (2003) 108103.
- [5] D. Stamenovic, N. Wang: Stress transmission within the cell. *Comprehensive Physiology* 1 (2011) 499-524.
- [6] P. A. Janmey, U. Euteneuer, P. Traub, and M. Schliwa. Viscoelastic properties of vimentin compared with other filamentous biopolymer networks. *The Journal of Cell Biology*, 113(1):155–160, 1991.
- [7] D. A. Head, A. J. Levine, and F.C. MacKintosh, *Phys. Rev. E* 68, 061907 (2003).
- [8] E. Frey, *ChemPhysChem* 3, 270 (2002).