

УДК 531/534: [57+61]

## МИКРОМЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРИОДОНТАЛЬНОЙ СВЯЗКИ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ И СДВИГЕ: НЕЛИНЕЙНЫЕ СООТНОШЕНИЯ НАПРЯЖЕНИЕ–ДЕФОРМАЦИЯ В ЗАМКНУТОЙ ФОРМЕ

Ф. Дженна \*, М.Н. Перельмутер \*\*

\* Department of Civil Engineering, University of Brescia, Via Branze, 43–25123, Brescia, Italy, e-mail: francesco.genna@ing.unibs.it

Кафедра гражданской инженерии, Университет г. Брешиа, Брешиа, Италия

\*\* Институт проблем механики РАН, Россия, 119526, Москва, пр. Вернадского, 101–1, e-mail: perelm@pmnet.ru

**Аннотация.** Рассмотрены две модели механического поведения образца из периодонтальной связки при растяжении и сдвиге (образец содержит достаточно большое число волокон). На основе микромеханического анализа структуры периодонтальной связки для каждой из моделей получены макроскопические (осредненные), нелинейные соотношения между напряжениями и деформациями в замкнутой форме. Первая модель является развитием известной из литературы модели, которая была первоначально разработана для различного типа соединительных тканей (сухожилий, артерий, хрящей и кожи). Применение этой модели в случае периодонтальной связки, содержащей волокна коллагена, обладающие специальными свойствами, не позволяет получить удовлетворительного аналитического описания экспериментальных кривых напряжение – деформация. Предложена и изучена также новая, аналитически более простая, чем предыдущая, модель периодонтальной связки. Новая модель позволяет учесть в замкнутой форме обе составляющие деформирования периодонтальной связки, необходимые для правильного моделирования ее макроскопического поведения, – геометрическую (связанную с наклоном волокон) и механическую (связанную с нелинейным поведением волокон). Сопоставление теоретических и экспериментальных (полученных для свиных тканей) результатов демонстрирует хорошие потенциальные возможности новой модели. Рассмотренные модели являются полезными для понимания деталей механического поведения периодонтальной связки, а также служат основой для разработки микромеханического закона деформирования, необходимого при использовании метода конечных элементов для анализа системы кость / зуб.

**Ключевые слова:** периодонтальная связка, микромеханика, нелинейные конститутивные модели, механическое поведение.

### 1. Введение

С механической точки зрения, периодонтальная связка может рассматриваться как тонкий слой наноконпозиционного материала, состоящего из волокон, являющихся пучками фибрилл коллагена, погруженных в гелеобразную матрицу, содержащую также соединительную ткань, кровь, лимфатическую жидкость и нервы. Все известные

экспериментальные исследования подтверждают, что именно наличие периодонтальной связки между корнем зуба и окружающей костью приводит к существенно нелинейному механическому поведению зубов при силовом нагружении [1] и, таким образом, влияние механических свойств периодонтальной связки должно быть учтено при создании механической модели системы зуб / кость.

До настоящего времени все попытки моделирования механического поведения периодонтальной связки были сделаны на феноменологических моделях сплошной среды с учетом многофазности, анизотропии, а также возможных больших деформаций и перемещений. Большинство результатов численного моделирования основаны на простом, но весьма нереалистичном предположении о линейной упругости периодонтальной связки. В ряде недавних работ используются подходы, основанные на нелинейной теории упругости (с приложением к другим типам тканей, см. [1, 2]; см. также ссылки, указанные там). Среди немногих работ, посвященных численному моделированию периодонтальной связки с учетом нелинейных свойств, отметим работы [31] и [38], в которых использованы кусочно-линейные упругие модели; в работе [24] взяты вязкоупругие определяющие соотношения, а в работах [21] и [26] применен нелинейно-упругий закон деформирования в сочетании с моделями накопления повреждений. В работах [25], [28] и [39] рассмотрено применение теории пороупругости для анализа периодонтальной связки, рассматриваемой как двухфазная среда.

На необходимость разработки закона деформирования периодонтальной связки для описания механического поведения тонкого слоя между зубом и костью указано впервые в работе [12], в которой была разработана феноменологическая модель периодонтальной связки. Там же отмечена предпочтительность микромеханического подхода для моделирования периодонтальной связки.

Методика разработки микромеханических моделей, начиная с работ по поликристаллам и вплоть до работ для сложных композиционных материалов [36], в настоящее время достаточно хорошо развита, а микромеханическое моделирование имеет ряд преимуществ по сравнению с обычным феноменологическим подходом.

Укажем эти очевидные преимущества:

- возможность получения макроскопических законов деформирования, основываясь на ясных, физически мотивированных допущениях относительно геометрии и механического поведения материала на микроуровне, вместо использования произвольной интерпретации (обычно недостаточных) экспериментальных результатов;
- как следствие этого, вместо необходимости идентификации параметров, не имеющих физического содержания, возможность использования для описания закона деформирования экспериментально определяемых материальных параметров, имеющих ясный физический смысл;
- микромеханические модели, основанные даже на чрезвычайно простых предположениях, позволяют описывать естественным путем достаточно сложное макроскопическое поведение, например, анизотропию.

В частном случае мягких волокнистых биологических тканей, содержащих волокна (периодонтальные связки, например), механическое моделирование, основанное на микромеханическом подходе, дает следующие преимущества:

- позволяет исследовать механическое поведение биологической ткани в естественном и поврежденном состояниях;
- может обеспечить получение более точных и обоснованных оценок критических механических параметров в отдельных компонентах биологической ткани, например, разрывной прочности волокна;

- позволяет избежать использования и анализа сложных элементарных ячеек для описания материала (см. например, [10]), которые, как правило, влекут за собой трудности с выбором граничных условий и моделированием «крупномасштабных» задач, например, системы челюсть / зубы.

Основная цель математического моделирования – исследование влияния физических и геометрических параметров материала на его структуру, и, ввиду этого, моделирование, основанное на микроструктурном подходе, особенно важно в биомеханике.

Отметим, что работы, посвященные микромеханическому анализу периодонтальной связки, отсутствуют. Однако значительное количество работ посвящено микромеханическому анализу других мягких биологических тканей, содержащих волокна коллагена. При разработке механических моделей сухожилий, кожи, хрящей, артерий и других волокнистых биологических тканей часто используется микромеханический (или даже молекулярный, не рассматриваемый здесь) подход. В работе [8] изучена механическая модель волокон коллагена, рассматриваемых как структура, обладающая естественной волнистостью и состоящая из элементов балок, соединенных упругими пружинами. Геометрически нелинейная модель балки предложена в работе [6], где пучки волокон коллагена моделируются геометрически нелинейной балкой, ось которой в исходном недеформированном состоянии имеет волнистую (синусоидальную) форму. В микроскопическом масштабе фибриллы коллагена рассматриваются как линейно-упругие, что, вместе с некоторыми другими допущениями, позволило авторам получить замкнутое решение для одного определенного типа граничных условий. Дальнейшее развитие эта модель получила в работах [4, 22, 23]. Подобные подходы, включающие также статистические аспекты, представлены в работах [7, 16–20]. Отметим также, что в работе [3] найдено решение для слоистой упругой среды, состоящей из слабоволнистых слоев, связанных наполнителем. Это решение дает результаты, подобные полученным в работе [6].

Однако, ввиду особой структуры периодонтальной связки, непосредственно использовать для ее моделирования микромеханические модели, разработанные для сухожилий, соединительных связок и т.д., затруднительно. К важнейшим особенностям механической структуры периодонтальной связки относятся:

- переменный угол наклона волокон по высоте корня зуба, обеспечивающий приспособляемость поддерживающего аппарата зуба при механическом нагружении;
- строение волокон, позволяющее выдерживать не только растягивающую, но также сдвиговую и сжимающую нагрузки;
- поведение при «вертикальном» сдвиге существенно отличается в зависимости от направления внешней нагрузки (растяжение или сжатие);
- перекрестное расположение волокон в плоскости, перпендикулярной корню зуба (как спицы у колеса велосипеда), обеспечивающее сопротивление крутильным нагрузкам, см. например [35];
- волокна погружены в вязкую гелеобразную матрицу, содержащую высокий процент жидкой фазы;
- приспособляемость волокон при изнашивании зуба;
- взаимодействие волокон с тканями кости, приводящее к восстановлению ее тканей;
- благодаря наличию сенсорных, нервных окончаний, волокна периодонта имеют чрезвычайно высокую проприоцептивную функцию.

Учет всех указанных особенностей периодонта при разработке механической модели чрезвычайно сложен. Только некоторые основные аспекты механического

поведения периодонтальной связки рассмотрены в данной статье, отражающей первый этап разработки микромеханической модели периодонтальной связки.

В предыдущей работе [12] закон деформирования периодонтальной связки, рассматриваемой как специальный соединительный элемент между подобластями (и, таким образом, требующий задания определенного закона деформирования), был получен непосредственно интерполяцией экспериментальных результатов, заимствованных из литературы, и ввиду этого, определялся параметрами, не имеющими ясного физического смысла и микромеханического обоснования.

В данной работе предложена и исследована микромеханическая модель, позволяющая получить уравнения и их аналитические решения для описания макроскопического механического поведения периодонтальной связки и пригодная для построения специального соединительного элемента между подобластями.

Использование уравнений, определяющих поведение специального соединительного элемента, дает возможность избежать трудностей при моделировании сложного напряженного состояния в рамках механики сплошных сред. Фактически, необходимо только получить «простые» соотношения между тремя компонентами напряжения (в пространственном случае – одна нормальная и две тангенциальных) и тремя соответствующими компонентами скачка смещения.

Двигаясь в этом направлении, необходимо также выяснить, насколько уже существующие исследования волокон коллагена в различных биологических тканях могут быть использованы при моделировании периодонта. При этом возникает два следующих вопроса:

- пригодны ли уже разработанные микромеханические модели для сухожилий для описания особенностей механического поведения периодонтальной связки при растяжении и сдвиге?
- применимо ли для периодонта общепринятое допущение о линейно-упругом поведении фибрилл коллагена?

Сложность микроструктуры как периодонта в целом, так и волокон коллагена, входящих в его состав, обуславливают отрицательный ответ на оба вопроса. Ввиду этого, ниже предлагается специальная модель, учитывающая конкретные особенности строения волокон периодонтальной связки (в частности, их наклон относительно направления нагружения).

При описании этой новой модели, мы, на основе известных литературных данных о геометрии и микроструктуре периодонтальной связки, ограничиваемся рассмотрением механического поведения периодонтальной связки при растяжении и сдвиге, включая область нелинейного деформирования (не доходя до зоны разрыва волокон). Растяжение и сдвиг являются, ввиду необходимости учета микроструктуры волокон, фактически наиболее интересными и одновременно наиболее сложными для описания видами нагружения периодонтальной связки.

## **2. Материалы и методы**

### **2.1. Эксперимент**

Экспериментальные данные для калибровки аналитических моделей взяты из работы [13], где приведены обширные результаты более чем 250 испытаний свиной периодонтальной связки. Экспериментальная установка подобна используемой при получении зависимости напряжения–деформация в большинстве испытаний на образцах периодонтальной связки (см., например, [9]).

Характерные экспериментальные результаты, полученные в работе [13] при растягивающих и сдвиговых нагрузках, представлены на рис. 1, где также показан образец, используемый для испытаний. Каждый такой образец содержит слой периодонтальной связки с площадью поперечного сечения, примерно равной  $4 \times 2$  мм. Согласно [35], радиус фибрилл коллагена составляет  $r \approx 27,5$  нм, а радиус пучка, состоящего из фибрилл коллагена,  $r_b \approx 2,5$  мкм. Объемная концентрация коллагена в периодонтальной связке, по данным работы [37],  $f = 0,51$ . Таким образом, образец периодонтальной связки содержит примерно 250000 пучков фибрилл коллагена и  $1,7 \times 10^9$  фибрилл коллагена, то есть достаточно большое число, подтверждающее предположение о макроскопической однородности образца, что является важным для последующих аналитических выкладок.

Рассмотренные в следующих разделах микромеханические модели, основанные на рассмотрении микроструктуры материала, разработаны для описания экспериментальных результатов, полученных при исследовании макроскопического поведения периодонтальной связки (см. рис. 1), при этом геометрические и материальные данные относятся к микроскопической структуре. Начальным этапом разработки микромеханической модели является изучение поведения отдельной фибриллы коллагена с последующим осреднением свойств по характерной области нагружения образца периодонтальной связки для получения кривых деформирования, подобных экспериментальным (см. рис. 1), приведенным в работе [13].

## 2.2. Модифицированная геометрически нелинейная балочная модель Комниноу и Яннаса [6]

Геометрия балки с криволинейной осью, моделирующей фибриллу коллагена (см. [6]), и ее усовершенствованный для использования при моделировании периодонтальной связки вариант показаны на рис. 2. Периодонтальная связка рассматривается как композиционный материал, содержащий волокна коллагена, помещенные в мягкую матрицу. Рассмотрение матрицы периодонта необходимо для исследования влияния жесткости матрицы на общую жесткость периодонтальной связки. В рамках этой модели фибриллы коллагена рассматриваются как непрерывные балки с начальной криволинейной осью, имеющей форму синусоиды (аналогичное допущение используется также в разделе 2.3). Пусть  $f$  объемное содержание фибрилл (т.е. отношение объема, занятого фибриллами коллагена, к полному объему периодонтальной связки). В усовершенствованном варианте модели Комниноу и Яннаса присутствие гелеобразной матрицы учитывается с помощью рассмотрения фибриллы коллагена, имеющей форму синусоиды, к которой присоединена пропорциональная объемному содержанию часть гелеобразного материала матрицы (см. рис. 2). Фибрилла коллагена, имеющая круговое поперечное сечение радиуса  $r$ , занимает центральную часть сечения балки; матрица в форме полого цилиндра, окружающая фибриллу, имеет внутренний радиус  $r$  и внешний радиус  $R$ , где

$$R = \frac{r}{\sqrt{f}}. \quad (1)$$

В предположении идеальной связи между фибриллой и матрицей будем рассматривать балку с усредненными свойствами. «Правило смеси» для параллельных волокон (усреднение по Фойгту) дает

$$E_h = f E_f + (1 - f) E_m, \quad (2)$$

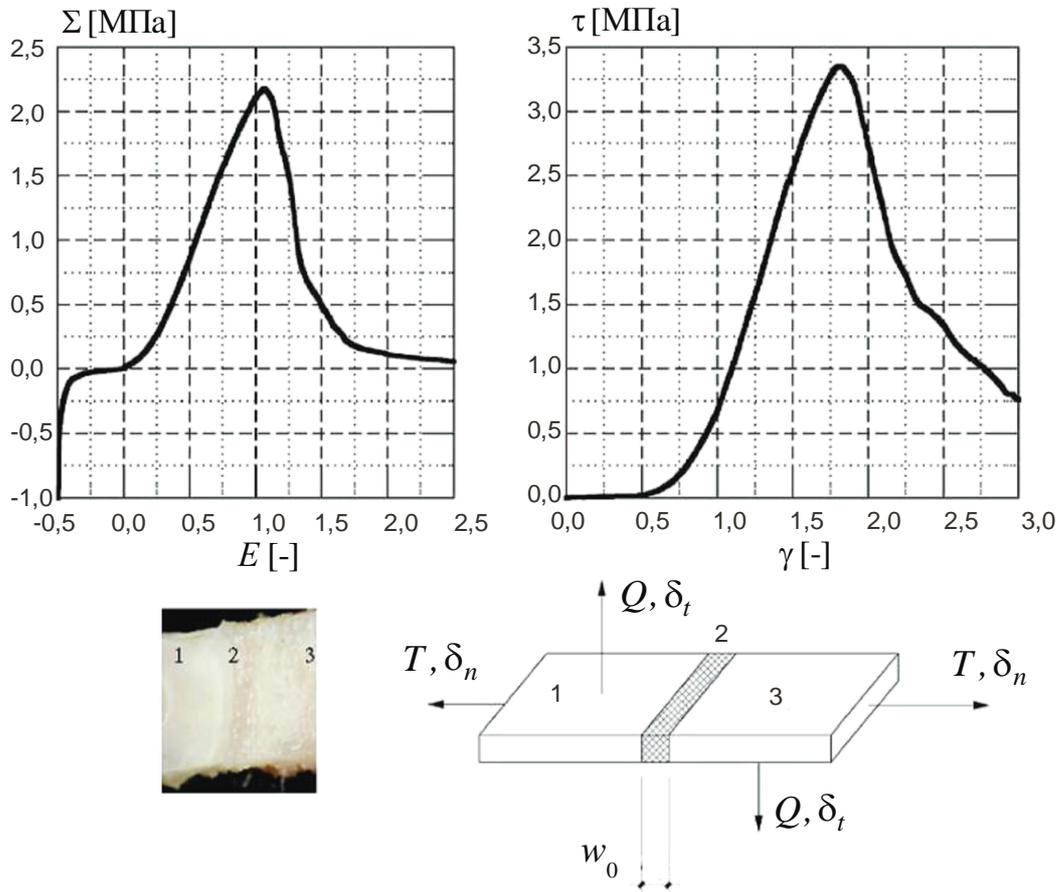


Рис. 1. Экспериментальные зависимости напряжение–деформация свиной периодонтальной связки (из работы [13]). Внизу – образец периодонтальной связки и схема нагружения (1 – кость, 2 – периодонтальная связка, 3 – корень зуба),  $T$  и  $\delta_n$  – сила и перемещение при растяжении;  $Q$  и  $\delta_t$  – сила и перемещение при сдвиге. Ось корня зуба совпадает с направлением силы  $Q$ ;  $\Sigma$  и  $E$  – второй тензор напряжений Пиола–Кирхгоффа и деформации Грина–Лагранжа, соответственно;  $\tau$  и  $\gamma$  – сдвиговые напряжения и сдвиговые деформации, соответственно

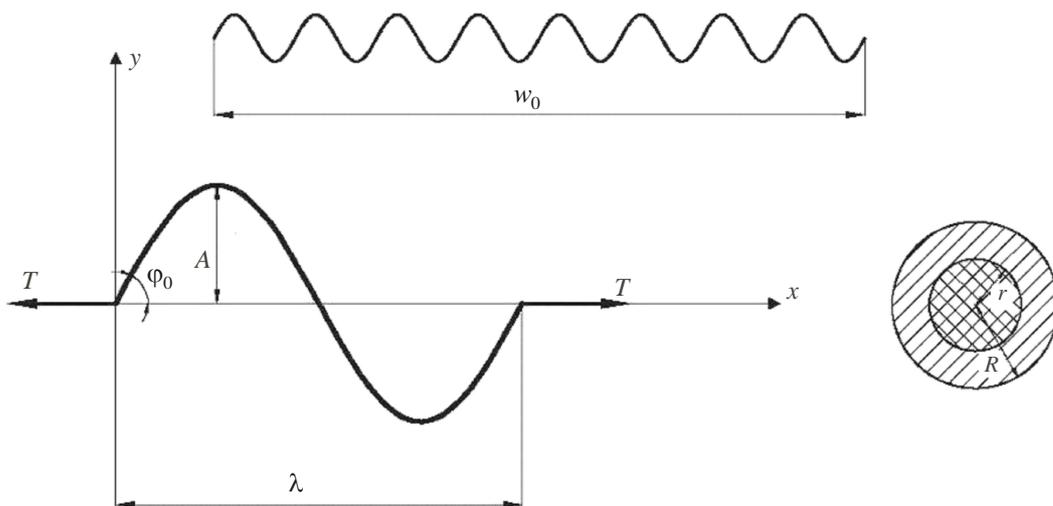


Рис. 2. Геометрия модели балки с осью в форме синусоиды [6], модификация для учета гелеобразной матрицы

где  $E_h$  – средний модуль упругости балки,  $E_f$  – модуль упругости фибриллы коллагена и  $E_m$  – модуль упругости гелеобразной матрицы. Уравнение оси композиционной балки в исходном (недеформированном) состоянии в системе координат  $x - y$  (см. рис. 2) имеет вид

$$y_0(x) = A \sin(\omega x). \quad (3)$$

Здесь  $A$  – амплитуда, связанная с начальным углом наклона кривой  $\varphi_0(0)$  соотношением  $\tan[\varphi_0(0)] = A\omega$ , где  $\omega = 2\pi/\lambda$ , а  $\lambda$  – длина волны синусоиды. Будем полагать, что длина проекции балки на ось  $Ox$  совпадает с толщиной периодонтальной связки  $w_0$ . В таком случае  $w_0 = n\lambda$ , где  $n$  «большое» целое число. Замкнутое аналитическое решение для уравнения деформированной оси балки может быть получено при следующих допущениях:

- 1) нагружение происходит только в плоскости  $x - y$ , балка является тонкой (т.е.  $R \ll \lambda$ );
- 2) ось балки является плоской и расположена вдоль оси  $Ox$ ;
- 3) рассматриваются только силовые граничные условия – на обоих концах балки приложены усилия  $T$ , направленные вдоль оси  $Ox$ , распределенные нагрузки отсутствуют, взаимодействие фибрилл не учитывается;
- 4) материалы фибрилл и гелеобразной матрицы являются однородными, изотропными и линейно-упругими;
- 5) угол наклона кривой  $\tan[\varphi(x)] = dy(x)/dx$  полагается малым, уравнения равновесия записываются для деформированной конфигурации балки (макроскопическая нелинейность возникает в результате рассмотрения геометрической нелинейности на микроуровне), полагая что  $\varphi(x) \approx \sin \varphi(x) \approx \tan \varphi(x)$  (приемлемо при  $\varphi(x) < \pi/6$ ); в предположении малой, по сравнению с длиной волны, начальной амплитуды  $A$  имеем  $\rho^2 = A^2\omega^2/4 \ll 1$ .

С учетом указанных выше допущений и следуя работе [6], получаем приближенное уравнение, описывающее деформированную ось балки:

$$y(x) \approx A\xi \sin(\omega x), \quad (4)$$

где

$$\xi = \left(1 + \frac{k^2}{\omega^2}\right)^{-1}; \quad k^2 = \frac{T}{a_1 E_f J_f} (1 + \eta); \quad \eta = \frac{T}{a_2 E_f A_f}; \quad (5)$$

$$a_1 = 1 + \frac{(1 - f^2) E_m}{f^2 E_f}; \quad a_2 = 1 + \frac{(1 - f) E_m}{f E_f}$$

и  $J_f = \pi r^4/4$  – момент инерции поперечного сечения фибриллы,  $A_f = \pi r^2$  – площадь поперечного сечения фибриллы.

Полученные выше результаты позволяют определить с помощью элементарных методов усреднения макроскопический закон деформирования для образца периодонтальной связки, содержащего несколько сотен тысяч пучков фибрилл. Этот закон деформирования также может быть использован при моделировании соединительного слоя в системе зуб / кость.

Средняя измеряемая в лабораторном эксперименте макроскопическая деформация периодонтальной связки  $E_B$  (по определению Био) определяется как

$$E_B = \frac{w - w_0}{w_0}, \quad (6)$$

где  $w$  – длина проекции балки на ось  $Ox$  после нагружения. Величину  $w$  получаем после ряда алгебраических преобразований из уравнения (4). Окончательное выражение для деформации  $E_B$  (очевидно, независимое от  $w_0$ ) имеет вид:

$$E_B = \frac{(1 + \rho^2)(1 + \eta)}{1 + \rho^2 \xi^2} - 1; \quad \rho^2 = \frac{A^2 \omega^2}{4}. \quad (7)$$

Средние (макроскопические) номинальные напряжения  $\Sigma_{nom}$  определяются стандартным образом

$$\Sigma_{nom} = \frac{T}{\pi R^2}. \quad (8)$$

Рассматривая усилия  $T$  как монотонно возрастающий параметр, можно из уравнений (7) и (8) получить зависимости напряжение – деформация для периодонтальной связки и сравнить их с данными эксперимента, см., например, рис. 1. Поскольку наблюдаемые деформации достаточно велики и экспериментальные результаты представлены (см., например, также [30]) в терминах напряжений второго тензора Пиола–Кирхгоффа  $\Sigma$  и деформаций (относительных удлинений) Грина–Лагранжа  $E$ , преобразуем уравнения (7) и (8) следующим образом:

$$E = E_B \left( \frac{E_B}{2} + 1 \right), \quad (9)$$

$$\Sigma = \frac{\Sigma_{nom}}{(E_B + 1)}. \quad (10)$$

Интересно отметить (это обсуждается также в работе [6]), что полученное выше аналитическое решение мало отличается от решения, следующего из более сложной модели [3], в которой рассматривается деформирование слоистого тела, составленного из большого числа упругих слоев, обладающих «малой волнистостью» и погруженных в мягкую упругую изотропную матрицу при умеренно больших деформациях.

Аналогичные уравнения могут быть также записаны при учете чистого сдвига, распределенных нагрузок, а также граничных условий в виде заданных перемещений. Отметим, что в этих случаях не удастся получить аналитические решения [29].

### 2.3. Новая модель нелинейных нитей

Рис. 3 иллюстрирует эту модель для случая растягивающих нагрузок (случай нагружения сдвигом аналогичен, в предположении задания вертикальных, а не горизонтальных смещений). Полагаем, что фибрилла коллагена представляет собой растяжимую нить, имеющую начальную форму синусоиды в направлении оси  $x$  (см. уравнение (1)), составляющей угол  $\beta_0$  с горизонтальной осью  $X$ . В данной модели для простоты, а также ввиду того, что на модели композиционной балки установлено, что влияние жесткости материала матрицы незначительно (см. следующий раздел), пренебрегаем наличием гелеобразной матрицы (при необходимости влияние матрицы может быть учтено аналогично предыдущей модели).

Пусть один конец нити закреплен, а к другому приложено горизонтальное смещение  $\delta_n$ . Фибрилла удлиняется без деформации до полного ее выпрямления. Обозначим как  $l = n\lambda$  проекцию начальной длины одной фибриллы на ось  $x$  (это

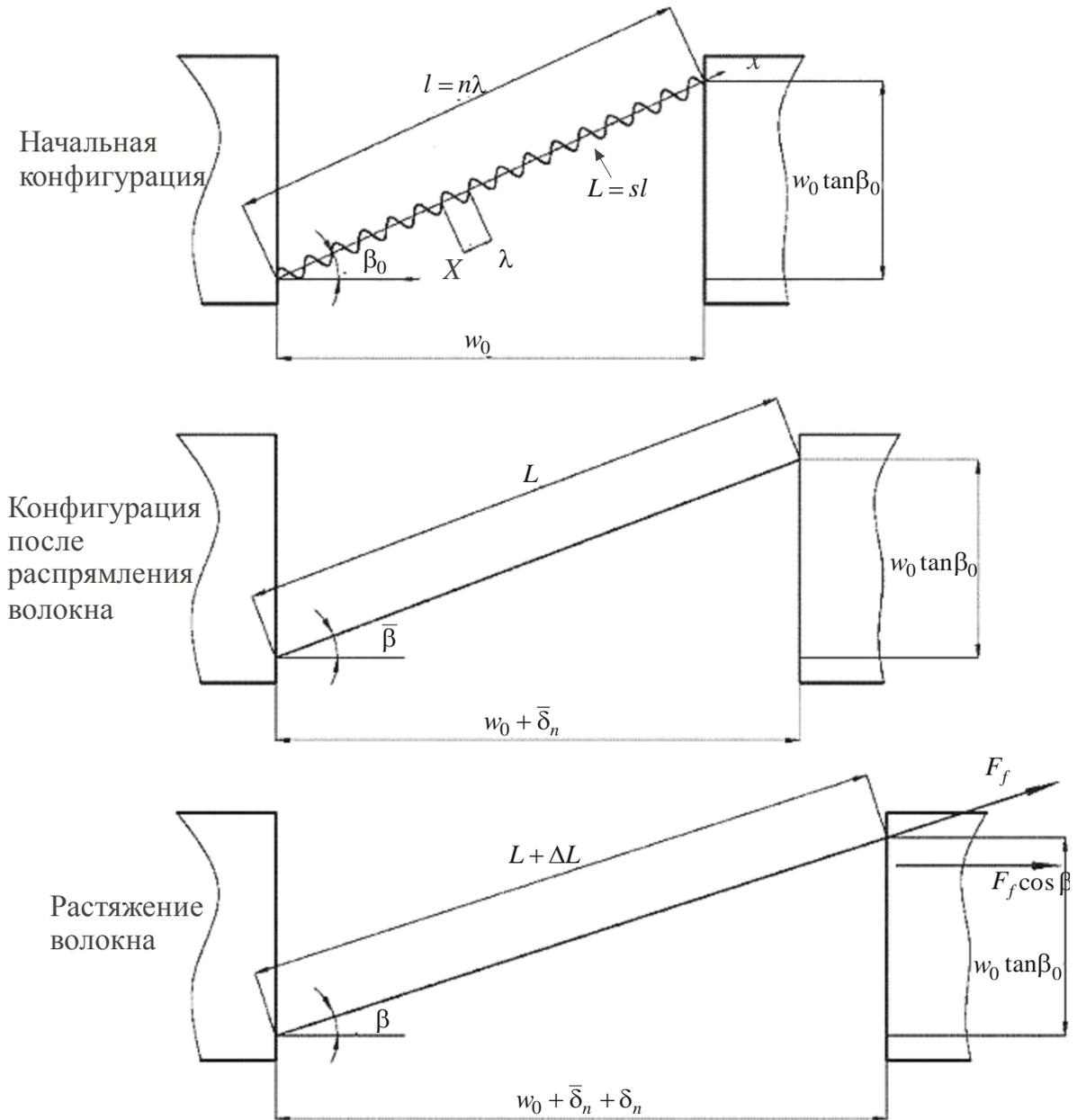


Рис. 3. Схематическое изображение модели нелинейной нити. Вверху: геометрия недеформированного волокна; в центре: конфигурация после распрямления волокна; внизу: растяжение волокна

величина равна начальному расстоянию между точками крепления фибриллы, см. рис. 3). Полагая начальную толщину периодонтальной связки в направлении оси  $X$  равной  $w_0$ , имеем  $l = n\lambda = w_0 / \cos \beta_0$ , и полная (после выпрямления) длина недеформированной нити равна  $L$ . Для каждой фибриллы можно записать  $L = sl$ ,  $s(A, \lambda) \geq 1$ , где  $s$  – отношение длины дуги синусоиды, соответствующей одному периоду, к длине волны  $\lambda$ , задаваемое выражением

$$s = \frac{2}{\pi} \sqrt{1 + \frac{4A^2 \pi^2}{\lambda^2}} E \left[ \frac{4A^2 \pi^2}{\lambda^2 + 4A^2 \pi^2} \right], \quad (11)$$

где  $E[\cdot]$  определяет полный эллиптический интеграл второго рода. Первая часть смещения конца нити  $\bar{\delta}_n$  происходит до полного ее выпрямления. Длина нити после выпрямления численно равна сумме начальной толщины периодонтальной связки  $w_0$  и перемещений  $\bar{\delta}_n$ , так что

$$w_0 + \bar{\delta}_n = L \cos \bar{\beta}, \quad (12)$$

а угол  $\bar{\beta}$  определяется из условия наложения чисто горизонтального смещения конца нити

$$\sin \bar{\beta} = \frac{l \sin \beta_0}{L} = \frac{\sin \beta_0}{s}. \quad (13)$$

Из уравнений (12) и (13) получаем выражение для смещения  $\bar{\delta}_n$ :

$$\bar{\delta}_n = w_0 \left( \frac{1}{\cos \beta_0} \sqrt{s^2 - \sin^2 \beta_0} - 1 \right). \quad (14)$$

При приложении дополнительных смещений к концу нити после ее полного выпрямления происходит деформация нити. Положим, как и в предыдущей балочной модели, что фибриллы коллагена деформируются в рамках линейной упругости, и обозначим, как и ранее, модуль упругости фибриллы  $E_f$ . Деформация удлиненного волокна (по Био),  $\varepsilon_f$ , постоянна вдоль всего волокна и определяется выражением

$$\varepsilon_f = \frac{\Delta L}{L}, \quad (15)$$

где  $\Delta L$  изменение длины вытянутого волокна, которое находится из рассмотрения геометрии деформированной фибриллы как

$$\Delta L = \sqrt{(w_0 + \bar{\delta}_n + \delta_n)^2 + w_0^2 \tan^2 \beta_0} - \frac{sw_0}{\cos \beta_0}. \quad (16)$$

Соответствующая осевая сила в фибрилле определяется как

$$F_f = E_f A_f \varepsilon_f. \quad (17)$$

Найдем теперь среднее напряжение и деформацию для образца периодонтальной связки по аналогии с предыдущей моделью. Средняя вытяжка образца периодонтальной связки задается выражением

$$\Lambda = \frac{(w_0 + \bar{\delta}_n + \delta_n)}{w_0}, \quad (18)$$

тогда средняя нелинейная деформация Грина–Лагранжа будет

$$E = \frac{1}{2}(\Lambda^2 - 1) \quad (19)$$

и среднее напряжение, соответствующее второму тензору напряжений Пиолы–Кирхгоффа в направлении оси  $X$ , будет

$$\Sigma = \frac{fF_f \cos \beta}{A_f \Lambda}, \quad (20)$$

где

$$\cos \beta = \frac{(w_0 + \bar{\delta}_n + \delta_n)}{\sqrt{(w_0 + \bar{\delta}_n + \delta_n)^2 + w_0^2 \tan^2 \beta_0}} \quad (21)$$

и учтено, что среднее (макроскопическое) напряжение определяется относительно среднего поперечного сечения образца, представляющего периодонтальную связку, равного, поскольку материал матрицы не обладает жесткостью,  $A_f / f$ . При рассмотрении модели нити, как и в предыдущей балочной модели, учитывается только геометрически нелинейное поведение нити на микроуровне, которое и приводит к нелинейному макроскопическому закону деформирования нити.

Вследствие простоты модели нелинейной нити, на ее примере возможно – и фактически очень важно, как показано ниже, – получить замкнутое решение без предположения о линейной упругости фибриллы коллагена. Модифицируем линейный закон деформирования фибриллы коллагена (см. уравнение (17)) и запишем его в терминах микроскопической деформации Грина–Лагранжа и второго тензора напряжений Пиола–Кирхгоффа (при этом, как и ранее, будем использовать обозначения  $\varepsilon_f$  и  $\sigma_f$ ):

$$\sigma_f = c_1 \varepsilon_f + c_2 \varepsilon_f^2 \text{ при } \varepsilon \geq 0; \quad \sigma_f = 0 \text{ при } \varepsilon = 0. \quad (22)$$

Усредненную (макроскопическую) кривую деформирования получаем в этом случае, прикладывая смещения  $\delta_n$  и вычисляя макроскопическое удлинение  $\lambda_f$  и деформацию  $\varepsilon_f$  фибриллы коллагена

$$\lambda_f = \frac{L + \Delta L}{L}; \quad \varepsilon_f = \frac{1}{2}(\lambda_f^2 - 1). \quad (23)$$

Сила, действующая в волокне,  $F_f$ , определяется как

$$F_f = A_f \lambda_f \sigma_f, \quad (24)$$

где  $\sigma_f$  дается уравнением (22), и затем используются уравнения (18–21).

Аналогичные уравнения могут быть получены и при сдвиговой нагрузке. Пусть смещение  $\bar{\delta}_t$  направлено вертикально вверх (см. рис. 3), и  $\bar{\delta}_t$  значение смещения, соответствующее полному выпрямлению нити, тогда закон деформирования может быть получен из следующих соотношений:

$$\bar{\delta}_t = w_0 \left( \frac{1}{\cos \beta_0} \sqrt{s^2 - \cos^2 \beta_0} - \tan \beta_0 \right), \quad (25)$$

$$\Delta L = \sqrt{(w_0 \tan \beta_0 + \bar{\delta}_t + \delta_t)^2 + w_0^2} - \frac{sw_0}{\cos \beta_0}, \quad (26)$$

$$F_f = A_f \lambda_f \sigma_f. \quad (27)$$

Здесь  $\lambda_f$  и  $\varepsilon_f$  определяются из уравнения (23),  $\sigma_f$  – из (22);

$$\gamma = \frac{(\bar{\delta}_t + \delta_t)}{w_0}, \quad (28)$$

$$\tau = \frac{f F_f \sin \beta}{A_f}, \quad (29)$$

$$\sin \beta = \frac{(w_0 \tan \beta_0 + \bar{\delta}_t + \delta_t)}{\sqrt{(w_0 \tan \beta_0 + \bar{\delta}_t + \delta_t)^2 + w_0^2}}, \quad (30)$$

где  $\tau$  и  $\gamma$  макроскопические сдвиговые напряжения и деформации, использованные для представления экспериментальных результатов в работе [13] и на рис. 1.

#### 2.4. Параметры модели

Для использования уравнений (9–11), (18–21) и (28–29) необходим следующий набор параметров:

- $E_f$  – модуль упругости фибриллы коллагена. В работе [5] указан диапазон значений  $12 \leq E_f \leq 2900$  МПа. Результаты экспериментов, приведенные в [34], дают для волокон коллагена в хрящах величину, близкую к 400 МПа. В работе [20] предлагается использовать для этой величины диапазон значений  $300 \leq E_f \leq 680$  МПа, но в ряде работ используются также значения от 9 до 43 МПа. В рамках численной модели периодонтальной связки в [17] и [32] для волокон коллагена используются значения  $10 \leq E_f \leq 90$  МПа. Неопределенность данных отражает тот факт, что коллаген, по крайней мере на наивысших иерархических уровнях (биологическая ткань, пучок, волокно), не является линейно-упругим материалом. Однако, для целей данной работы в предположении, что фибриллы коллагена деформируются линейно-упруго, и с учетом данных экспериментов, приведенных в [13], следует принять для модуля упругости фибриллы коллагена относительно малую величину. Далее, как для балочной модели, так и для модели нити, используется значение модуля упругости фибриллы коллагена, равное  $E_f = 30$  МПа;
- $E_m$  – модуль упругости материала матрицы (требуется только для усовершенствованной балочной модели Комниноу и Яннаса), информация об этом параметре практически отсутствует. С учетом диапазона значений, приведенных в [27] для гелей, а также данных работ [17], [21] и [32] для расчетов принимается величина  $E_m = 2$  МПа;
- $r$  – радиус фибриллы коллагена, следуя работе [35], полагаем в расчетах  $r = 27,5$  нм;
- $f$  – объемная концентрация коллагена в периодонтальной связке, по данным работы [37] –  $f = 0,51$ ; далее для расчетов используем значение  $f = 0,5$ ;
- $\lambda$  – длина волны фибриллы, в работе [11] приведено значение  $\lambda = 16$  мкм, которое и используется далее в расчетах;
- $\varphi_0(0)$  – начальный угол отклонения синусоиды в недеформированном состоянии: ниже используется значение  $25^\circ$ , приведенное в [11], такой угол отклонения соответствует значению  $s = 1,05232$  (см. уравнение (11)).

При рассмотрении микроскопически нелинейно-упругого деформирования коллагена в модели нити (см. (22) и далее) принимаем следующие параметры:  $c_1 = 1$  МПа и  $c_2 = 20$  МПа. В этом случае касательный модуль упругости (производная напряжения по деформации) изменяется от 1 до 38 МПа при изменении деформации от 0 до 100% (отметим, что деформации Грина–Лагранжа в фибрилле коллагена могут достигать величины 60% при разрыве образца периодонтальной связки, см. случай растяжения, рис. 1). Таким образом, жесткость такого материала близка по порядку величины к базовому значению модуля упругости  $E_f = 30$  МПа, принятому для случая линейно-упругой модели. Отметим, что закон деформирования (22) не следует рассматривать как действительно реалистичную модель механического поведения фибриллы коллагена (см. комментарий ниже). Основной нашей целью является аппроксимация (достаточно грубая) деформирования фибриллы в макроскопическом линейном, не доходящем до разрыва, диапазоне.

Ввиду трудности надежного определения всех параметров модели, важно исследовать чувствительность рассмотренных моделей к выбору параметров; это кратко рассмотрено в следующем разделе. Физический смысл большинства этих параметров, однако, будет оказывать большую помощь в понимании свойств модели.

### 3. Результаты

#### 3.1. Балочная модель Комниноу и Яннаса

На рис. 4 представлены экспериментальные результаты с рис. 1 и зависимость между напряжением и деформацией, полученная расчетным путем (см. уравнения (9) и (10)) для базовых значений параметров задачи, на графике справа представлена в увеличенном масштабе зона вытягивания волокон. Можно заметить, что расчетная кривая дает: (i) недостаточную длину зоны вытяжки волокон; (ii) заниженное значение жесткости зоны вытяжки волокон; (iii) жесткость квазилинейной части кривой является, с другой стороны, завышенной, и, наконец, (iv) квазилинейная часть расчетной кривой имеет выпуклость, противоположную экспериментальной кривой (это благодаря тому, что даже для линейно-упругого материала выбраны мера напряжений в виде второго тензора Пиола–Кирхгоффа и мера деформаций в виде тензора Грина–Лагранжа). Зависимость между напряжениями и деформациями, полученная экспериментально, выраженная в тех же мерах напряжений и деформаций, является практически прямолинейной вплоть до разрыва волокон.

Попытаемся выяснить (оставив в стороне на время последнее наблюдение), является ли плохая корреляция между расчетными и экспериментальными данными результатом выбора несоответствующих параметров модели, т.к. все экспериментальные результаты получены на образцах животного происхождения (свиной периодонт), тогда как все параметры расчетной модели относятся к периодонтальной связке человека. На рис. 5 представлены аналитические зависимости между напряжениями и деформациями для нескольких наборов выбранных параметров; в каждом случае изменялся только один параметр при сохранении неизменными остальных параметров, равными базисным значениям (см. раздел 2.4).

Зона вытягивания волокон практически не изменяется при вариации модуля упругости волокон  $E_f$  (кривые (а)) и модуля упругости материала матрицы  $E_m$  (кривые (б)), а также вариации объемного содержания коллагена  $f$  (кривые (в)).

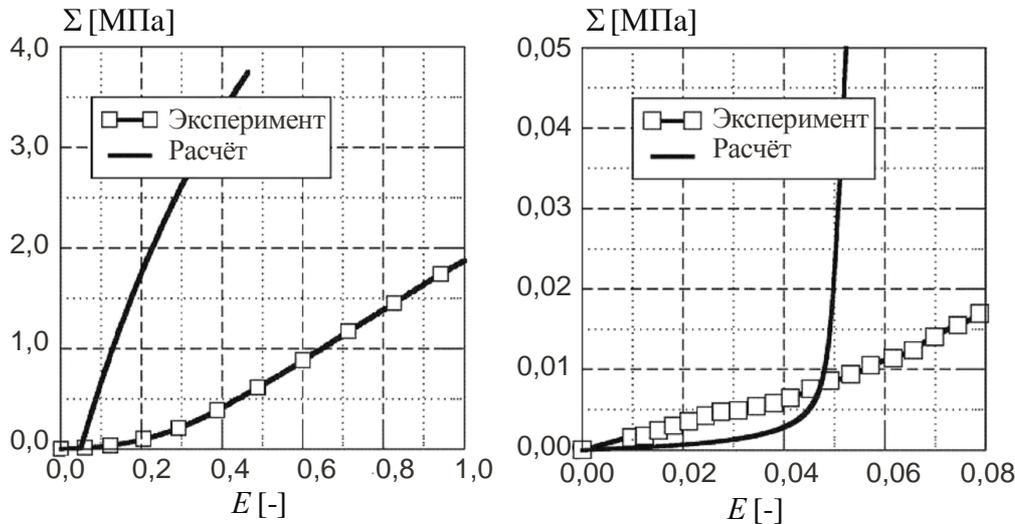


Рис. 4. Аналитические и экспериментальные кривые деформирования при растяжении (модель балки). На графике справа показана в увеличенном масштабе зона выпрямления волокон;  $\Sigma$  и  $E$  – второй тензор напряжений Пиола–Кирхгоффа и деформации Грина–Лагранжа, соответственно

Лучшее соответствие с экспериментом дает значение  $E_f = 10$  МПа, (кривые (а)), а базовый выбор  $E_f = 30$  МПа является приемлемой величиной для волокон коллагена в периодонтальной связке и дает достаточно надежную верхнюю границу для этой величины (в литературе имеется значительный разброс в данных для  $E_f$ ; во многих работах принимаются заметно большие значения).

Вариация модуля упругости матрицы  $E_m$  также практически не влияет на результат расчета (см. рис. 5 (б)), за исключением частных случаев  $E_m \rightarrow E_f$ , или  $f \rightarrow 0$ . Выбор малых значений объемной концентрации коллагена приводит к большему соответствию экспериментальных и расчетных данных (см. кривые (в)), но такой выбор противоречит имеющимся литературным данным.

Зависимости между макроскопическими напряжениями и деформациями при вариации параметров  $r, \lambda$  и  $\varphi_0(0)$  при растяжении приведены на рис. 5 (г), (д) и (е), соответственно. На рисунках показаны только зоны вытягивания волокон, т.к. все аналитические кривые имеют тенденцию к наложению (рис. 5 (г) и (д)) или остаются параллельными при увеличении деформации (рис. 5 (д)). Анализ рис. 5 позволяет исследовать влияние параметров задачи на кривую деформирования периодонтальной связки и установить, что в рассматриваемом диапазоне параметров задачи длина зоны вытягивания волокон, полученная расчетным путем, всегда меньше, чем полученная экспериментально.

### 3.2. Модель нелинейной нити

Макроскопические зависимости между напряжениями и деформациями для балочной модели и модели нелинейной нити при растяжении, полученные в предположении линейно-упругого деформирования фибриллы коллагена для базовых значений параметров моделей (см. раздел 2.4), приведены на рис. 6. На рис. 6 для модели нити представлены результаты для двух значений углов  $\beta_0 = 0^\circ$  (для возможности сравнения с балочной моделью) и  $\beta_0 = 34^\circ$ , которое соответствует

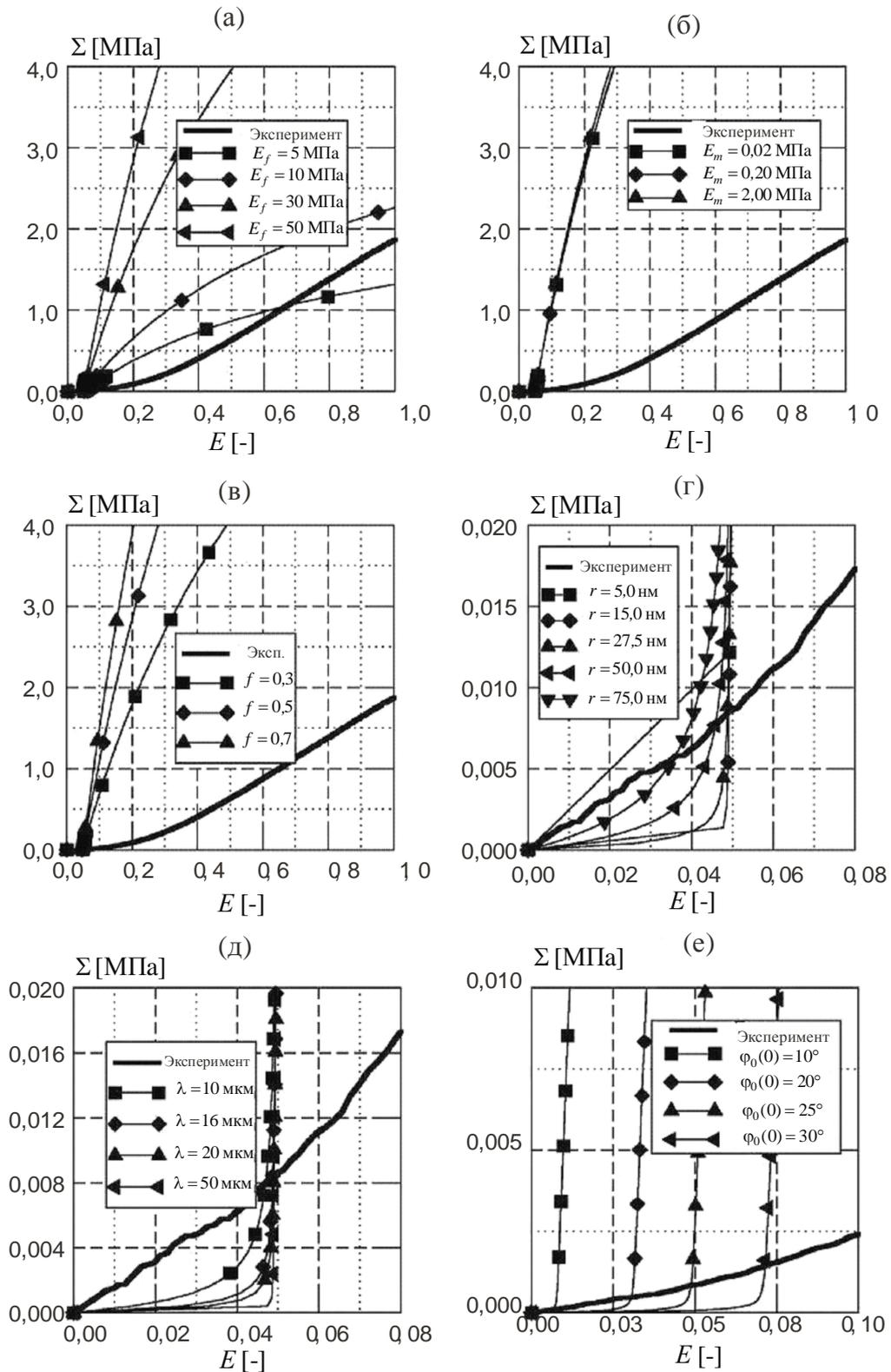


Рис. 5. Расчетные кривые деформирования при растяжении для модели балки с синусоидальной осью при вариации параметров модели: (а) – влияние модуль Юнга фибрилл  $E_f$ ; (б) – влияние модуль Юнга матрицы  $E_m$ ; (в) – влияние объемного содержания волокон коллагена  $f$ ; (г) – влияние радиуса фибрилл  $r$ ; (д) – влияние длины волны фибрилл  $\lambda$ ; (е) – влияние начального угла отклонения фибрилл  $\phi_0(0)$ .  $\Sigma$  и  $E$  – второй тензор напряжений Пиола–Кирхгоффа и деформации Грина–Лагранжа, соответственно

расположению периодонтальной связки в образце (начальная толщина образца  $w_0 = 0,66$  мм), использованном в эксперименте, см. рис. 1. Напомним, что в балочной модели наклон волокон не учитывается.

Из рис. 6 (справа представлена область вытягивания волокон в увеличенном масштабе) следует, что как модель нити при  $\beta_0 = 0^\circ$ , так и балочная модель определяют примерно одинаковые зоны вытягивания волокон и жесткости квазилинейных частей кривых, что свидетельствует о малом влиянии как жесткости материала матрицы, так и изгибной жесткости волокна на начальном этапе деформирования и о полном отсутствии этого влияния после вытягивания волокон. Результаты для модели нити, представленные на рис. 6, при  $\beta_0 = 34^\circ$  свидетельствуют, что (i) длина зоны вытягивания возросла до  $E = 0,078$  (примерно на 45% по сравнению с  $\beta_0 = 0^\circ$ ); и (ii) жесткость квазилинейного участка кривой существенно уменьшается, хотя и недостаточно, чтобы совпадать с экспериментом. Отметим также, что при  $\beta_0 = 34^\circ$  на квазилинейном участке кривая еще более выпукла, чем кривая, полученная на балочной модели, что еще раз подтверждает неправомочность использования линейно-упругого закона деформирования для коллагена. Кривые деформирования при растяжении, полученные на модели нити при использовании нелинейного и линейного законов упругого деформирования фибриллы коллагена на микроуровне, приведены на рис. 7 (помечены черными маркерами; кривые с белыми маркерами относятся к различным значениям параметра  $s$  (уравнение (11)) и будут рассмотрены ниже). Очевидно, что включение в модель деформирования фибриллы коллагена даже простейшего нелинейно-упругого закона позволяет получить достаточно хорошее соответствие с экспериментальными данными для образца конечной толщины. Вне зоны вытягивания волокон незначительная модификация закона деформирования позволит получить полное соответствие экспериментальных и расчетных результатов вплоть до начала разрыва волокон.

Напомним, что только в модели нити имеется возможность описания в замкнутой форме деформирования периодонтальной связки при сдвиге. Расчетные (для угла наклона волокон  $\beta_0 = -7^\circ$ ) и экспериментальные результаты для сдвиговых нагрузок приведены на рис. 8. Отметим, что и в случае сдвиговых нагрузок имеется удовлетворительное соответствие расчетных и экспериментальных результатов.

Результаты параметрического анализа модели нити с нелинейно-упругим законом деформирования фибриллы коллагена приведены на рис. 9 (результаты параметрического анализа модели нити при линейно-упругом законе деформирования совпадают с результатами, полученными на балочной модели, см. рис. 5). Влияние объемного содержания волокон коллагена  $f$  показано на рис. 9 (а); кривые на рис. 9 (б) отражают влияние параметра  $c_2$ , см. уравнение (22), кривые на рис. 9 (в) показывают влияние величины начального угла наклона волокон  $\beta_0$ , и кривые на рис. 9 (г) показывают влияние параметра вытягивания волокна  $s$  (см. уравнение (11)). Отметим, что все эти результаты достаточно предсказуемы, поскольку уменьшение параметров  $f$  или  $c_2$  (т.е. жесткости фибриллы коллагена), а также увеличение параметров  $\beta_0$  или  $s$  соответствует заметному увеличению длины зоны вытягивания волокон и уменьшению средней жесткости волокон, что и наблюдается в расчетах. Отметим, что кривые (в) при растяжении могут быть получены и для отрицательных значений  $\beta_0$  (при сдвиге это, естественно, невозможно); кривые для отрицательных значений  $\beta_0$

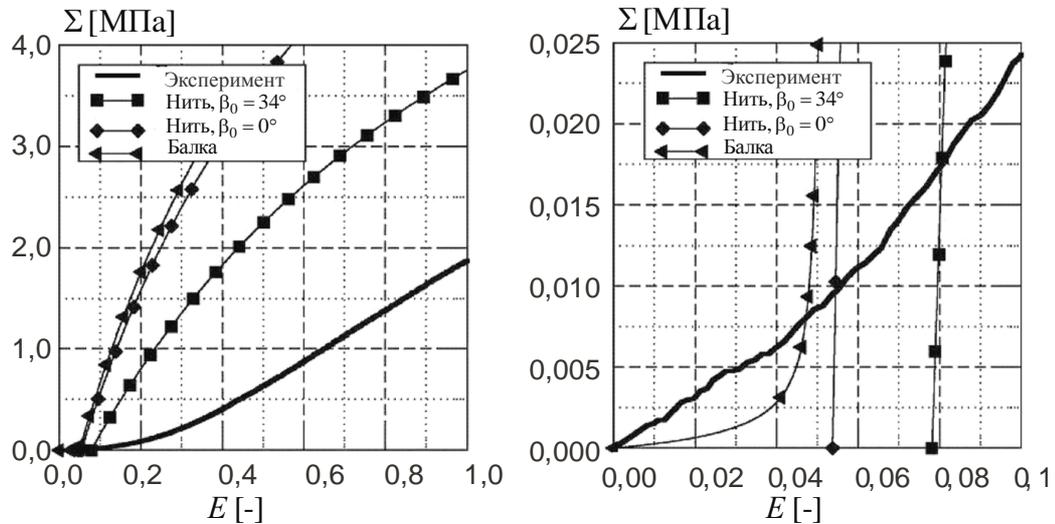


Рис. 6. Кривые деформирования при растяжении. Сопоставление экспериментальных и расчетных кривых (модели балки и нити, линейно-упругое деформирование коллагена). Модель нити представлена для двух различных начальных углов отклонения волокон  $\beta_0$ :  $\beta_0 = 0^\circ$  и  $\beta_0 = 34^\circ$ . Справа – зона выпрямления волокон в увеличенном масштабе.  $\Sigma$  и  $E$  – второй тензор напряжений Пиола–Кирхгоффа и деформации Грина–Лагранжа, соответственно

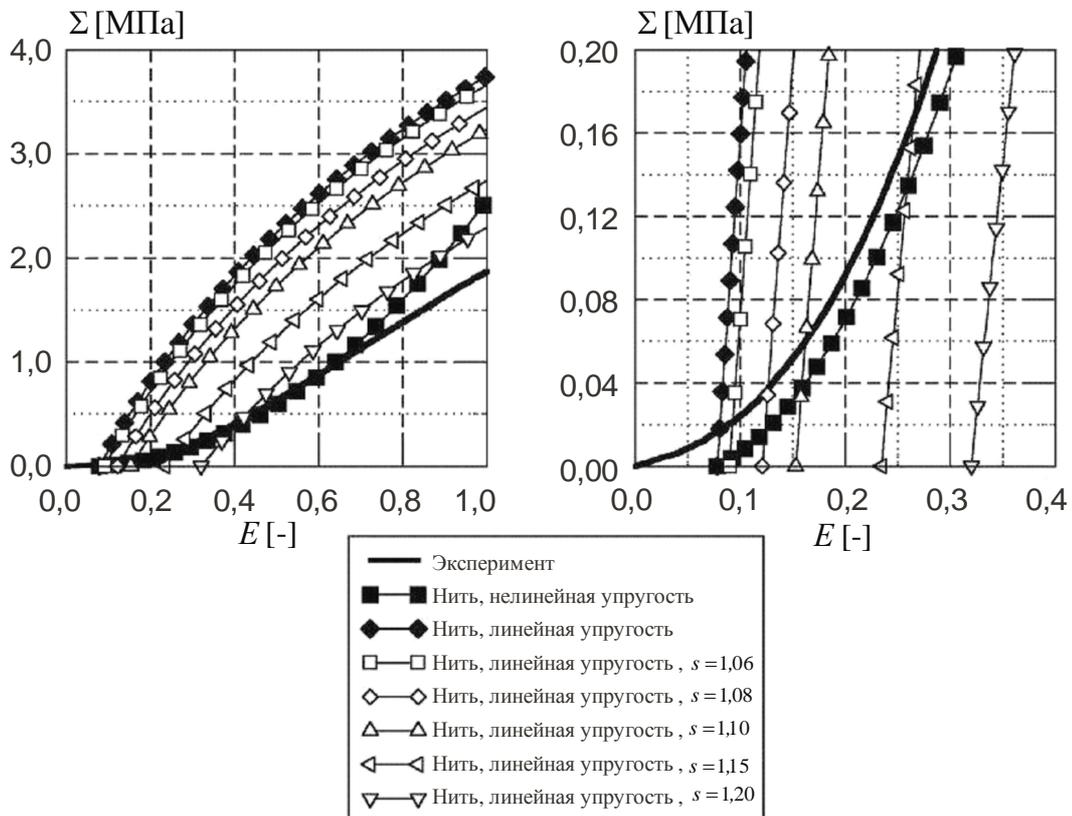


Рис. 7. Кривые деформирования при растяжении. Сопоставление экспериментальных и расчетных кривых (модель нити, линейно-упругое и нелинейно-упругое деформирование фибрилл коллагена); параметр  $s = 1,05232$  (см. уравнение (11)). Кривые, помеченные белыми маркерами, соответствуют различным значениям параметра  $s$ . Справа – зона выпрямления волокон в увеличенном масштабе.  $\Sigma$  и  $E$  – второй тензор напряжений Пиола–Кирхгоффа и деформации Грина–Лагранжа, соответственно

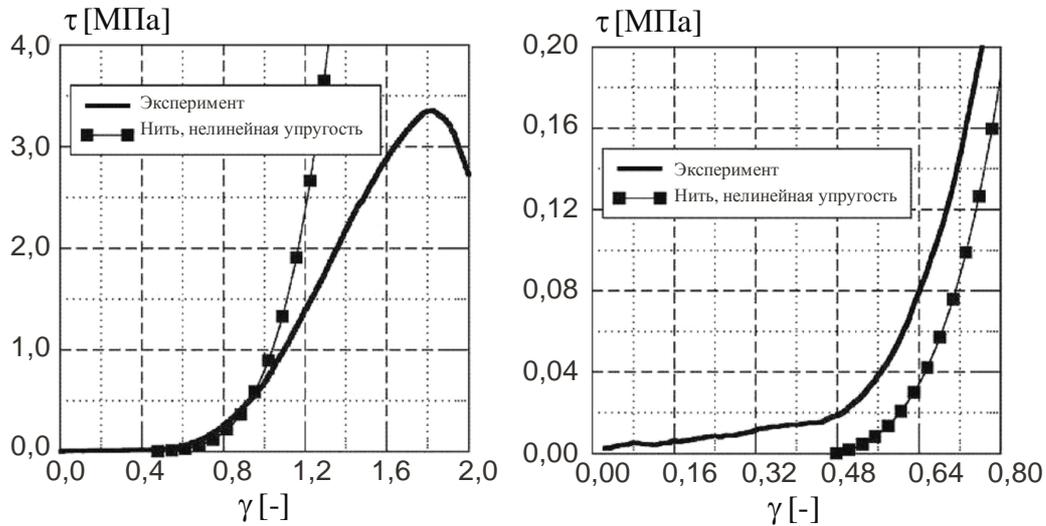


Рис. 8. Кривые деформирования при сдвиге. Сопоставление экспериментальных и расчетных кривых (модель нити, нелинейно-упругое деформирование фибрилл коллагена), значения параметров совпадают с рис. 7. Справа – зона выпрямления волокон в увеличенном масштабе.  $\tau$  и  $\gamma$  – сдвиговые напряжения и сдвиговые деформации, соответственно

идентичны кривым с соответствующим положительным значением  $\beta_0$ , равным по модулю. Отметим также, что только параметр  $\beta_0$  оказывает заметное влияние на деформирование выпрямленных волокон, тогда как влияние трех остальных параметров ограничивается, в основном, зоной выпрямления волокон. Наилучшее соответствие с экспериментом дает базовый набор параметров, см. раздел 2.4.

#### 4. Обсуждение результатов

Рассмотрим обоснованность допущений, сделанных при получении замкнутых решений для балочной модели, часть которых приведена в разделе 2.2. Толщина  $w_0$  периодонтальной связки человека, по данным литературы, изменяется от 0,1 до 0,3 мм, тогда как для свиного периодонта соответствующая величина составляет около 0,45 мм, что дает число длин волн  $n$  в диапазоне от 15 до 30, которое можно рассматривать как достаточно «большое». Далее, для выбранных базовых значений параметров, начальная амплитуда синусоиды равна  $A = 1,187$  мкм, тогда в уравнении (7) коэффициент  $\rho^2 \approx 0,05$ , что можно принять как малую величину. Максимальное значение начального угла наклона балки  $\varphi_0(0) = 25^\circ \approx \pi/7$ , эта величина постепенно уменьшается с нарастанием деформации балки, таким образом, допущение 5 (см. раздел 2.2) является достаточным. При объемном содержании коллагена  $f = 0,5$  внешний радиус композитной балки  $R$  составляет примерно 39 нм, что, очевидно, соответствует тонкой балке. В итоге, принимая во внимание базовые параметры, указанные в разделе 2.4, все допущения, сделанные в процессе получения уравнений (9–11), являются приемлемыми.

Несмотря на это, использование модели Комниноу и Яннаса [6], для описания механического поведения волокон коллагена, содержащихся в периодонтальной связке, не дает ожидаемых результатов. Основные причины, по которым использование этой

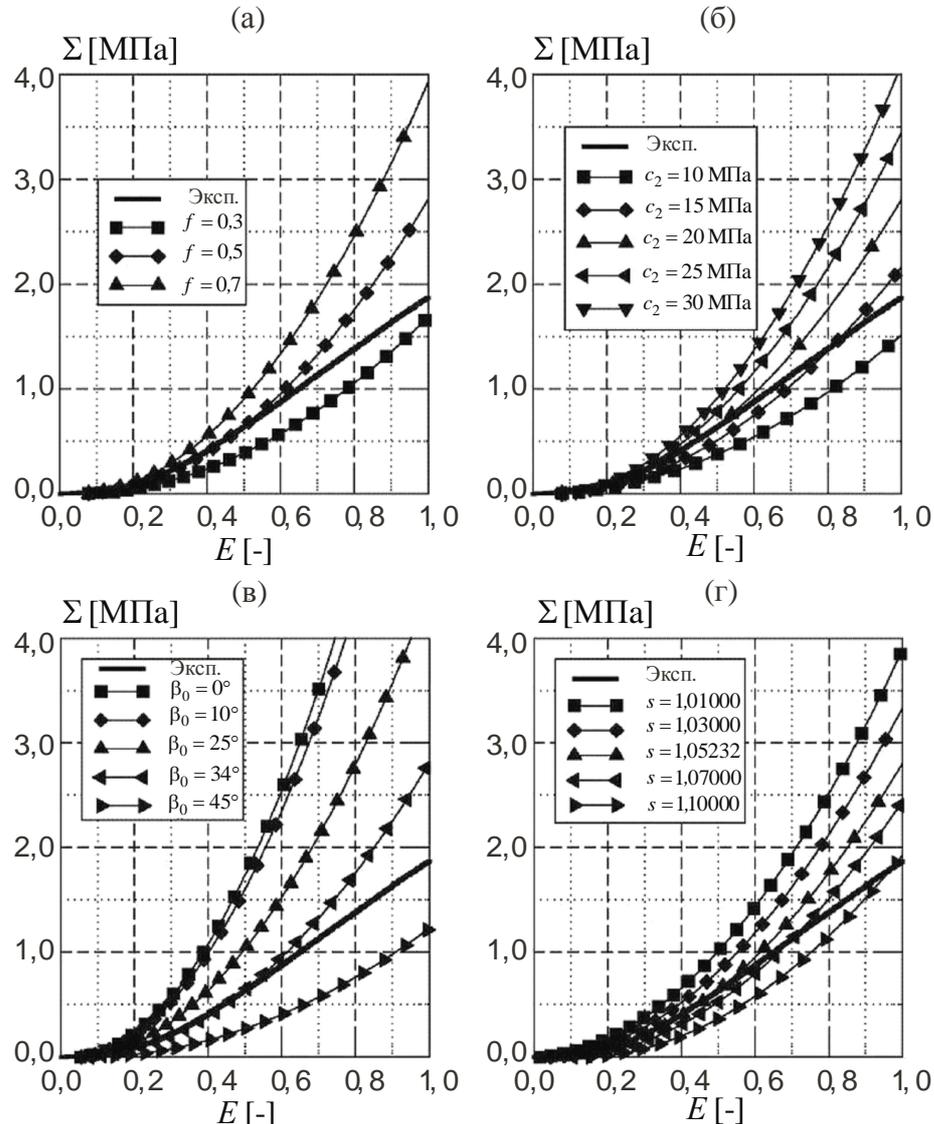


Рис. 9. Зависимости экспериментальных и расчетных (модель нити) кривых деформирования от параметров материала при нелинейном законе деформирования фибрилл коллагена: (а) – влияние объемного содержания  $f$ ; (б) – вариация параметра  $c_2$  из уравнения (22); (в) – влияние среднего начального угла отклонения волокон  $\beta_0$ ; (г) – вариация параметра  $s$  уравнения (11).  $\Sigma$  и  $E$  – второй тензор напряжений Пиола–Кирхгоффа и деформации Грина–Лагранжа, соответственно

модели не дает удовлетворительного описания макроскопического механического поведения периодонтальной связки и не позволяет получить закон деформирования периодонта, пригодный для использования в методе конечных элементов, таковы:

- балочная модель не позволяет получить явную зависимость между напряжениями и перемещениями, как это требуется при использовании метода конечных элементов в стандартной формулировке;
- жесткость зоны вытягивания волокон, получаемая на основе этой модели, согласуется с экспериментальными данными, но размер этой зоны является всегда завышенным; жесткость в зоне деформирования волокон, получаемая на основе этой модели, является заниженной;
- указанные недостатки связаны, в первую очередь, с отсутствием в балочной модели учета различной ориентации волокон вдоль корня зуба: такое усложнение модели привело бы к невозможности получения замкнутого решения;

- модель не учитывает нелинейность механического поведения волокон коллагена ввиду невозможности получения аналитического решения в таком случае.

Последние два пункта, в частности, делают невозможными все попытки улучшения балочной модели [6] для более адекватного описания особенностей механического поведения периодонтальной связки и являются фактически главной причиной развития новой и заметно более простой модели нити, позволяющей описывать особенности макроскопического механического поведения периодонтальной связки.

Наличие закона деформирования периодонтальной связки, основанного на простой микроструктурной модели, является исходным этапом как при разработке более сложных механических моделей (например, при использовании статистических методов для описания жесткости в зоне вытягивания волокон и описания разрыва волокон, при исследовании временных зависимостей механических свойств периодонтальной связки), так и при разработке алгоритмов метода конечных элементов, учитывающих закон деформирования периодонтальной связки [12]. Работы по указанным направлениям находятся в стадии развития.

Результаты, полученные на модели нити с учетом линейно-упругого поведения фибрилл коллагена, незначительно отличаются от результатов, получаемых при использовании балочной модели (даже при учете в модели нити угла наклона фибрилл, см. рис. 6). Этот факт связан, по-видимому, с использованием закона линейной упругости для фибрилл коллагена в модели нити, что подтверждается также хорошим соответствием с экспериментом при использовании нелинейного закона деформирования фибрилл коллагена. Как известно [14], волокна коллагена имеют иерархическое строение, каждый уровень микроструктуры состоит из волнистых фибрилл коллагена, деформирование которых определяется законом нелинейной упругости. Таким образом, допущение о линейно-упругом поведении волокон коллагена неприемлемо в общем случае и может быть использовано только в некоторых частных случаях, например при однородных напряжениях и деформациях и постоянной нагрузке. Отметим, не вдаваясь в детальное описание модели деформирования фибрилл коллагена на микроуровне, что основной задачей здесь было продемонстрировать, что выбор даже простейшего нелинейного соотношения на микроуровне (см. уравнение (22)) дает возможность получить закон макроскопического поведения периодонтальной связки, значительно более близкий к эксперименту, чем тот, который можно получить в рамках линейной упругости.

Механическая модель, определяемая уравнением (22), является, очевидно, неадекватной по ряду причин, главная из которых состоит в невозможности описания разрыва волокон коллагена (линейная часть макроскопической кривой напряжение – деформация очень быстро достигает зоны критических нагрузок). Однако, в контексте данной работы, это не является ограничением. Нашей целью являлось, фактически, не развитие макроскопической модели разрыва периодонтальной связки; цель работы главным образом методологическая, состояла в исследовании основных особенностей микромеханической модели периодонтальной связки, и в этом смысле представленные результаты с достаточной степенью достоверности подтверждают (без необходимости разработки полной механической модели), что фибриллы коллагена должны рассматриваться как нелинейный материал.

Очевидно, что для практического использования модели нити, предложенной в данной работе, необходима физически обоснованная нелинейная механическая модель деформирования фибриллы коллагена, разработка которой находится вне рамок данной работы. Отметим, что наличие чрезвычайно простой модели механического поведения волнистых фибрилл коллагена, погруженных в мягкую матрицу (модель нити),

является отправной точкой для развития реалистичной, нелинейной механической модели деформирования фибриллы коллагена, основанной на автотомельном поведении компонент фибрилл коллагена на различных иерархических уровнях.

Следует отметить также важный вклад, вносимый нелинейной упругостью, в описание формы области перехода от зоны выпрямления волокон к последующей зоне растяжения макроскопического закона деформирования. Ограничения, накладываемые линейной упругостью фибрилл коллагена, не позволяют правильно описывать эту переходную область даже с привлечением статистических подходов, основанных на рассмотрении многих волокон с различными геометрическими характеристиками. Фактически, как было указано в разделах 3.1 и 3.2 при обсуждении результатов, полученных при линейно-упругом законе деформирования фибрилл коллагена, изменение длины фибрилл приводит лишь к незначительному изменению зоны вытягивания волокон, размер которой (при выборе физически обоснованных параметров в рамках линейной упругости), является недостаточным, даже при учете угла начальной ориентации фибрилл  $\beta_0$ .

Кривые на рис. 7, отмеченные белыми маркерами, иллюстрируют это утверждение. Эти кривые получены на модели нити ( $\beta_0 = 34^\circ$  для всех случаев) в предположении линейно-упругого закона деформирования для фибрилл коллагена; каждой кривой соответствует значение параметра  $s$  из уравнения (11). Отметим, во-первых, что при линейно-упругом законе деформирования фибрилл на линейной части кривой деформирования не удастся получить результаты, близкие к экспериментальным. Во-вторых, отметим, что в рамках линейной упругости фибрилл коллагена величину зоны выпрямления волокон, согласующуюся с экспериментом, возможно получить только в предположении статистического распределения длин фибрилл коллагена.

Из рис. 7 видно, что только при больших значениях длин выпрямленных фибрилл коллагена возможно получить размер зоны выпрямления волокон, близкий к наблюдаемому в эксперименте. Отметим, что значение  $s = 1,2$  соответствует величине угла  $\varphi_0(0) \approx 45^\circ$ , который находится далеко вне диапазона значений, физиологически соответствующих фибриллам коллагена в периодонтальной связке [11]. Таким образом, рассмотрение нелинейного закона деформирования фибрилл коллагена является единственным подходом, позволяющим получить достоверное описание зоны выпрямления волокон и последующей линейной части кривой деформирования. Все имеющиеся экспериментальные данные для механического поведения фибрилл коллагена подтверждают факт их нелинейного деформирования [14].

Отметим, что влияние гелеобразной матрицы и изгибной жесткости фибрилл коллагена, не учитываемые в модели нити, существенно на этапе выпрямления волокон и практически не отражается на остальной части кривой деформирования. В рассмотренной выше модели нити влиянием этих факторов мы пренебрегаем при ортодонтическом нагружении; однако, при исследовании поведения периодонтальной связки при физиологической нагрузке является целесообразным включение этих факторов в рассмотрение. Такая модификация не должна вызывать значительные концептуальные или практические трудности, так как зона выпрямления волокон соответствует относительно малым деформациям, что предполагает возможность использования для ее описания линеаризованной кривой.

Отметим также, что кривые деформирования, получаемые на модели нити, учитывают изменение знака угла  $\beta_0$  (или, что эквивалентно,  $\delta_i$ ) при действии сдвиговой нагрузки, тогда как балочная модель не позволяет учесть влияние угла  $\beta_0$ . Модель нити позволяет также описать различие в размере зоны выпрямления волокон,

возникающее при выполнении сдвигового нагружения образца периодонтальной связки таким образом, что сначала прикладывается нормальная жевательная нагрузка (вдавливание зуба в лунку), и затем прикладывается выдергивающая нагрузка; результаты экспериментов при сдвиге (полученные при выдергивающей нагрузке, т.е. отрицательных углах  $\beta_0$ ) показаны на рис. 8.

Расчетная кривая на рис. 8 хорошо согласуется с экспериментальными данными на начальном этапе выпрямления волокон и на примыкающей к ней начальной части зоны деформирования периодонта; при более высоких значениях деформаций жесткость, соответствующая расчетной кривой, является заметно завышенной. Это может быть вызвано различными причинами: неадекватностью структурной модели, недостатками микроскопического закона деформирования коллагена, недостаточной информацией о геометрии фибрилл коллагена. Таким образом, очевидно, что нелинейное уравнение (22) не позволяет полностью описать закон деформирования фибрилл коллагена; развитие этого подхода является целью последующей работы.

Отметим также, что толщина образца, измеренная в эксперименте [13], составляет  $w_0 = 0,33$  мм, что достаточно мало для свиной периодонтальной связки, возможно, измерение выполнено неточно. Рис. 10 аналогичен рис. 8, за исключением толщины образца –  $w_0 = 0,45$  мм (среднее значение, полученное в [13] для свиной периодонтальной связки),  $\beta_0 = -1,2^\circ$  (для сохранения неизменным размера зоны выпрямления волокон следует при изменении толщины образца  $w_0$  изменить также и угол начальной ориентации), и  $c_1 = 8$  МПа,  $c_2 = 12$  МПа. В этом случае соответствие расчетных и экспериментальных результатов существенно лучше и наблюдается в более широком диапазоне; что свидетельствует, что (i) необходима достоверная информация о геометрии и свойствах материала; (ii) модель нити позволяет, по крайней мере, качественно описывать существенные особенности исследованной биомеханической задачи.

Заметим, что для получения хорошего соответствия экспериментальных и теоретических результатов (см. рис. 7, 8 и 10) выполнялась только минимальная калибровка параметров модели (коэффициентов  $c_1$  и  $c_2$  из уравнения (22)). Такое хорошее соответствие с экспериментом получено при фиксированных значениях параметров и выборе базовых значений геометрических и материальных параметров, соответствующих периодонтальной связке человека. Все параметры, необходимые для модели нити, имеют определенный физический смысл и могут быть определены, по крайней мере, в принципе, с помощью измерений микроскопических свойств периодонтальной связки. Выбор параметров  $c_1$  и  $c_2$  в уравнении (22) осуществлялся таким образом, чтобы средняя жесткость кривой деформирования была сопоставима с модулем упругости при линейно-упругом деформировании. Ввиду этого, можно полагать, что наличие физически обоснованных параметров микромеханической модели и возможность их мотивированного выбора непосредственно определяет качество результатов и является, как уже было отмечено, одним из главных преимуществ микроструктурного подхода. С другой стороны, при идентификации параметров феноменологических моделей (особенно неизотропных) возникает много сложностей, вызванных именно отсутствием физического содержания у параметров модели.

Рассмотренная в работе модель нити содержит в себе возможность взаимодействия между растяжением и сдвигом, аналогичного тому, которое имеет место в объекте исследования, причем взаимодействие между растяжением и сдвигом требует также специального экспериментального исследования.

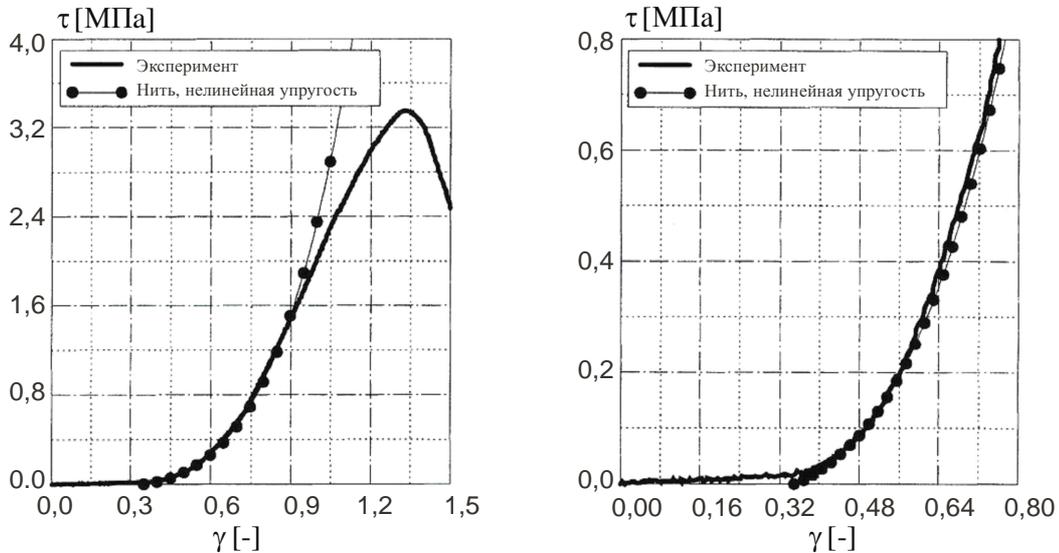


Рис. 10 Кривые деформирования при сдвиге. Сопоставление экспериментальной и расчетной кривых (модель нити, нелинейно-упругое деформирование фибрилл коллагена), значения параметров указаны в тексте. Справа – зона выпрямления волокон в увеличенном масштабе.  $\tau$  и  $\gamma$  – сдвиговые напряжения и сдвиговые деформации, соответственно

Предыдущие работы, выполненные для хрящей и связок, (см., например, [15] и [33]), основывались на гиперупругой феноменологической модели, которая допускает такое взаимодействие, однако рассматривает его чисто математически, с параметрами, не имеющими физического обоснования и требующими специальной экспериментальной калибровки; тогда как модель нити позволяет рассматривать такое взаимодействие в рамках механической модели. Кроме того, проблемы, связанные с рассмотрением периодонтальной связки как неизотропного материала, могут быть легко преодолены даже при использовании простой микроструктурной модели нити, позволяющей учесть влияние угла начальной ориентации  $\beta_0$  на общую анизотропию.

В данной работе не рассмотрено поведение периодонтальной связки при сжатии. Такой вид нагружения может быть описан существенно проще, чем растяжение и сдвиг, но при этом следует учитывать, что модели, основанные на выпрямлении и вытягивании волокон, здесь уже неприменимы. Интерполяция экспериментальных данных (см. [12]) или некоторые другие простые аналитические методы (не рассматриваемые здесь для краткости) могут быть использованы для получения удовлетворительного описания механического поведения периодонтальной связки при сжатии, которое, как подтверждается экспериментально, имеет значительно меньший разброс и значительно менее чувствительно к отклонениям геометрических параметров материала, чем при растяжении и сдвиге [13].

В данной работе также не рассмотрен процесс разрыва периодонтальной связки. Для рассмотрения разрыва волокон периодонтальной связки необходимо усовершенствование закона деформирования волокон коллагена (22), а также более детальная микромеханическая модель фибриллы коллагена, что находится вне рамок этой работы.

## 5. Выводы

Предложенная в работе модель нити является удобным инструментом для понимания и корректного описания важных особенностей механического поведения периодонтальной связки, а также может быть использована при разработке

специального соединительного конечного элемента, позволяющего моделировать макроскопические сдвиговые и растягивающие нагрузки на основе микромеханического закона деформирования периодонтальной связки, рассматривающего выпрямление, вытягивание и разрыв волокон коллагена. Процедура разработки специального конечного элемента на основе макроскопического закона деформирования описана, например, в [12], где также рассмотрены возможности моделирования сжатия и разрыва периодонтальной связки.

Усовершенствование модели нити для учета жесткости волокон на этапе их выпрямления и рассмотрение разрыва волокон возможно с применением статистических методов (см. например, [20]), используя, вместо гомогенизации, некоторую функцию плотности вероятности для какого-либо микроскопического параметра, определяющего начальную длину волокна  $L$ , и выполняя интегрирование по большому числу волокон. Работы в этом направлении находятся в стадии развития.

Ввиду чрезвычайной простоты рассмотренной модели, а также благодаря отсутствию упрощающих предположений (кроме предположений об отсутствии изгибной жесткости и жесткости матрицы), в рамках этого подхода могут быть описаны в аналитической форме и другие аспекты механического поведения периодонтальной связки, например, временные зависимости напряжений и деформаций, взаимодействие между волокнами или между волокнами и матрицей.

В заключение отметим, что нелинейная модель волокон коллагена, опирающаяся на обоснованные физические параметры (полагая, что значения этих параметров возможно получить экспериментальным путем), является многомасштабной и фрактальной. На нижнем уровне такой модели приемлемо предположение о линейно-упругих деформациях, кроме того, на всех масштабных уровнях необходим учет волнистой структуры фибрилл при сохранении простоты модели нити, рассмотренной в разделе 2.3. Согласно [11], существует четыре уровня иерархии волокон коллагена, и на самом нижнем уровне иерархии модель, основанная на механике сплошного тела, приемлема, причем в диапазоне линейно-упругих деформаций. В настоящее время ведется работа по созданию новой микромеханической модели периодонтальной связки, в которой учет нелинейности основан на рассмотрении структурного поведения, иллюстрированного на рис. 3.

### Благодарности

Работа, выполненная в рамках данного исследования, финансировалась Министерством высшего образования и науки Италии. Второй автор был поддержан грантами Центра Ландау-Вольта (Комо, Италия), фонда КАРИПЛО (Милан, Италия) и Университета Брешиа, Италия.

### Список литературы

1. *Bischoff, J.E.* Finite element modelling of human skin using an isotropic, nonlinear elastic constitutive model / J.E. Bischoff, E.M. Arruda, K. Grosh // *Journal of Biomechanics*. – 2000. – Vol. 33. – P. 645–652.
2. *Bischoff, J.E.* A microstructurally based orthotropic hyperelastic constitutive law / J.E. Bischoff, E.M. Arruda, K. Grosh // *ASME Journal of Applied Mechanics*. – 2002. – Vol. 69. – P. 570–579.
3. *Bolotin, V.V.* Layered elastic and viscoelastic media with small initial irregularities / V.V. Bolotin // *Mechanics of Solids*. – 1966. – Vol. 1, No. 3. – P. 40–44.
4. *Buckley, C.P.* On the deformation of slender filaments with planar crimp: theory, numerical solution and applications to tendon collagen and textile materials / C.P. Buckley, D.W. Lloyd, M. Konopasek // *Proc. R. Soc. Lond.* – 1980. – Vol. A. 372. – P. 33–64.
5. *Butler, D.L.* Biomechanics of ligaments and tendons / D.L. Butler, F.R. Grood, F.R. Noyes, R.F. Zernicke // *Exerc. Sports Sci. Rev.* – 1978. – Vol. 6. – P. 125–181.

6. *Comninou, M.* Dependence of stress–strain nonlinearity of connective tissues on the geometry of collagen fibers / M. Comninou, I.V. Yannas // *Journal of Biomechanics*. – 1976. – Vol. 9. – P. 427–433.
7. *Decraemer, W.F.* An elastic stress–strain relation for soft biological tissues based on a structural model / W.F. Decraemer, M.A. Maes, V.J. Vanhuysse // *Journal of Biomechanics*. – 1980. – Vol. 13. – P. 463–468.
8. *Diamant, J.* Collagen: ultrastructure and its relation to mechanical properties as function of ageing / J. Diamant, A. Keller, E. Baer, M. Litt, R.G.C. Arridge // *Proc. R. Soc. Lond.* – 1972. – Vol. B. 180. – P. 293–315.
9. *Dorow, C.* Experiments to determine the material properties of the periodontal ligament / C. Dorow, N. Krstin, F.–G. Sander // *Journal of Orofacial Orthopedics*. – 2002. – Vol. 63. – P. 94–104.
10. *Garnich, M.R.* Finite Element Micromechanics for Stiffness and Strength of Wavy Fiber Composites / M.R. Garnich, G. Karami // *J. Composite Materials*. – 2004. – Vol. 38, No. 4. – P. 273–292.
11. *Gathercole, L.J.* Biophysical aspects of the fibers of the periodontal ligament / L.J. Gathercole, A. Keller // *The periodontal ligament in health and disease*, edited by B.K.B. Berkovitz, B.J. Moxham, H.W. Newman. – Oxford, UK: Pergamon Press, 1982.
12. *Gei, M.* An interface model for the periodontal ligament / M. Gei, F. Genna, D. Bigoni // *ASME Journal of Biomechanical Engineering*. – 2002. – Vol. 124, No. 5. – P. 538–546.
13. *Genna, F.* On the experimental determination of some mechanical properties of porcine periodontal ligament / F. Genna, L. Annovazzi, C. Bonesi, P. Fogazzi, C. Paganelli // *J. Meccanica*. – 2007 (in print).
14. *Gentleman, E.* Mechanical characterization of collagen fibers and scaffolds for tissue engineering / E. Gentleman, A.N. Lay, D.A. Dickerson, E.A. Nauman, G.A. Livesay, K.C. Dee // *J. Biomaterials*. – 2003. – Vol. 24. – P. 3805–3813.
15. *Guerin, H.L.* The Role of Fiber-Matrix Interactions in a Nonlinear Fiber-Reinforced Strain Energy Model of Tendon / H.L. Guerin, D.M. Elliott // *ASME Journal of Biomechanical Engineering*. – 2005. – Vol. 127, No. 2. – P. 345–350.
16. *Kastelic, J.* A structural mechanical model for tendon crimping / J. Kastelic, I. Palley, E. Baer // *Journal of Biomechanics*. – 1980. – Vol. 13. – P. 887–893.
17. *Katona, T.R.* A mechanism of noncontinuous supraosseous tooth eruption / T.R. Katona, H. Qian // *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*. – 2001. – Vol. 120, No. 3. – P. 263–271.
18. *Kwan, M.K.* A structural model to describe the nonlinear stress–strain behavior for parallel-fibered collagenous tissues / M.K. Kwan, S.L.–Y. Woo // *Journal of Biomechanical Engineering*. – 1989. – Vol. 111. – P. 361–363.
19. *Lanir, Y.* Constitutive equations for fibrous connective tissues / Y. Lanir // *Journal of Biomechanics*. – 1983. – Vol. 16, No. 1. – P. 1–12.
20. *Liao, H.* A failure model for ligaments / H. Liao, S.M. Belkoff // *Journal of Biomechanics*. – 1999. – Vol. 32. – P. 183–188.
21. *Limbert, G.* A transversely isotropic hyperelastic constitutive model of the PDL. Analytical and computational aspects / G. Limbert, J. Middleton, J. Laizans, M. Dobelis, I. Knets // *J. Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. – 2003. – Vol. 6, No. 5–6. – P. 337–345.
22. *Ling, S.C.* The mechanics of corrugated collagen fibrils in arteries / S.C. Ling, C.H. Chow // *Journal of Biomechanics*. – 1977. – Vol. 10. – P. 71–77.
23. *Manschot, J.F.M.* The measurement and modelling of the mechanical properties of human skin *in vivo* – II. The model / J.F.M. Manschot, J.M. Brakkee // *Journal of Biomechanics*. – 1986. – Vol. 19, No. 7. – P. 517–521.
24. *Middleton, J.* The role of the periodontal ligament in bone modelling: the initial development of a time-dependent finite element model / J. Middleton, M. Jones, A. Wilson // *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*. – 1996. – Vol. 109, No. 2. – P. 155–162.
25. *Natali, A.N.* A multi-phase media formulation for biomechanical analysis of the periodontal ligament / A.N. Natali, P.G. Pavan, B. Schrefler, S. Secchi // *J. Meccanica*. – 2002. – Vol. 37. – P. 407–418.
26. *Natali, A.N.* A transversally isotropic elasto-damage constitutive model for the periodontal ligament / A.N. Natali, P.G. Pavan, E.L. Carniel, C. Dorow // *J. Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. – 2003. – Vol. 6, No. 5–6. – P. 329–336.
27. *Norton, I.T.* A molecular model for the formation and properties of fluid gels / I.T. Norton, D.A. Jarvis, T.J. Foster // *International Journal of Biological Macromolecules*. – 1999. – Vol. 26. – P. 255–261.
28. *Nyashin, M.Y.* Unconfined compression of the periodontal ligament, intervertebral disc, articular cartilage and other permeable deformable tissues: a poroelastic analysis / M.Y. Nyashin // *Russian Journal of Biomechanics*. – 1999. – Vol. 3, No. 3. – P. 23–31.
29. *Perelmuter, M.N.* Micromechanical model of the periodontal ligament / M.N. Perelmuter. – Preprint No. 756, Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, 2004.
30. *Pini, M.* Tensile and compressive behaviour of the bovine periodontal ligament / M. Pini, Ph. Zysset, J. Botsis, R. Contro // *Journal of Biomechanics*. – 2004. – Vol. 37. – P. 111–119.

31. *Poppe, M.* Determination of the elasticity parameters of the human periodontal ligament and the location of the center of resistance of single-rooted teeth / M. Poppe, C. Bourauel, A. Jager // *Journal of Orofacial Orthopedics*. – 2002. – Vol. 63. – P. 358–370.
32. *Qian, H.* The influence of PDL principal fibers in a 3–dimensional analysis of orthodontic tooth movement / H. Qian, J. Chen, T.R. Katona // *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*. – 2001. – Vol. 120, No. 3. – P. 272–279.
33. *Quapp, K.M.* Material characterization of human medial collateral ligament / K.M. Quapp, J.A. Weiss // *ASME Journal of Biomechanical Engineering*. – 1998. – Vol. 120. – P. 757–763.
34. *Sasaki, N.* Elongation mechanism of collagen fibrils and force–strain relations of tendon at each level of structural hierarchy / N. Sasaki, S. Odajima // *Journal of Biomechanics*. – 1996. – Vol. 29, No. 9. – P. 1131–1136.
35. *Sloan, P.* Structural organization of the fibers of the periodontal ligament / P. Sloan // *The periodontal ligament in health and disease*, edited by B.K.B. Berkovitz, B.J. Moxham, H.W. Newman. – Oxford, UK: Pergamon Press, 1982.
36. *Suquet, P.* *Continuum Micromechanics* / P. Suquet. – Springer Verlag, 1997.
37. *Ten Cate, A.R.* *Oral histology. Development, structure, and function* / A.R. Ten Cate. – St. Louis, Baltimore, Toronto: The C.V. Mosby Company, 1989.
38. *Toms, S.R.* A nonlinear finite element analysis of the periodontal ligament under orthodontic tooth loading / S.R. Toms, A.W. Eberhardt // *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*. – 2003. – Vol. 122, No. 6. – P. 657–665.
39. *Van Driel, W.D.* Orthodontic treatment: introducing finite element analysis / W.D. van Driel, E.J. van Leeuwen // *J. Diana World*. – 1998. – Vol. 2. – P. 5–7.

## **MICROMECHANICAL MODELLING OF THE PERIODONTAL LIGAMENT IN TENSION AND SHEAR: CLOSED-FORM NONLINEAR STRESS–STRAIN RELATIONSHIPS**

**F. Genna (Brescia, Italy), M.N. Perelmuter (Moscow, Russia)**

Two different models for the mechanical behavior in tension and shear of a sample of the periodontal ligament (composed of a sufficiently high number of fibers) are examined. They define macroscopic (average), closed-form, nonlinear stress–strain relationships, derived from structural analyses of the periodontal ligament microstructure. The first model, taken from the literature, had been originally developed for different tissues. When applied to the specific case of the periodontal ligament, whose collagen fiber arrangement exhibits specific features, differing from those of tendons, arteries, cartilage, and skin, it proves to be unable to correctly reproduce stress–strain curves determined experimentally for the periodontal ligament. A new model is therefore proposed and studied. It is analytically simpler than the previous one, but able to take into account in closed-form both geometrical (fiber inclination) and mechanical (collagen fibers nonlinearity) features that are proved to be essential for a correct modelling of the macroscopic behavior, and that could not be accounted for, in closed-form, previously. Comparisons with experimental results, obtained for porcine tissue, demonstrate the good potentiality of this model, both as a tool to understand the details of the mechanical behavior of the periodontal ligament, together with its possible influence on the biological aspects, and as a basis for the implementation in terms of finite element interface, for the understanding of the role played by the periodontal ligament in the global functioning of the bone / teeth system.

**Key words:** periodontal ligament, micromechanics, nonlinear constitutive models, mechanical behavior.

*Получено 12 апреля 2007*