

NON-LINEAR REGRESSION APPLICATION IN IDENTIFICATION OF HYPERELASTIC CONSTITUTIVE MODELS OF SOFT TISSUES

M. Vajdák*, J. Burša*

Summary: *Choice of a convenient constitutive model for computational modelling of soft tissues is an important assumption of model reliability. The optimal shape of constitutive equations depends not only on the type of material behaviour (isotropic or orthotropic, elastic or viscoelastic, etc.) but on the deformation range to be described as well. For example in blood vessel walls, there are mostly 2D or 3D stress states. If a hyperelastic constitutive model is based (because of a lack of experimental data) on uniaxial tension tests only, the results for biaxial stress states can be quite false, because of transversal strains differing from the test. Methods of regression improving the model behaviour and comparison of predictive capability of models are presented in the paper.*

1. Úvod

Důležitým předpokladem věrohodnosti výsledků výpočtového modelování mechanické odezvy měkkých tkání je výběr vhodného modelu konstitutivního chování. Ten závisí nejen na základním charakteru chování materiálu (izotropní nebo ortotropní, lineárně či nelineárně elastický nebo viskoelastický atd.), ale i např. na typu napjatosti a rozsahu hodnot přetvoření. Vhodně zvolený model konstitutivních vztahů by měl být schopen simulovat s dostatečnou přesností nejen jednoosé materiálové zkoušky, ale i chování při nejrůznějších komplikovanějších typech napjatosti, především rovinné.

Nejrozšířenějším hyperelastickým konstitutivním modelem je model Mooney-Rivlinův [3], popsáný vztahem pro energii napjatosti např. ve tvaru:

$$W = a_1 (i_1 - 3) + a_2 (i_2 - 3) + a_3 (i_1 - 3)^2 + a_4 (i_1 - 3) (i_2 - 3) + a_5 (i_2 - 3)^2 + a_6 (i_1 - 3)^3 + a_7 (i_1 - 3)^2 (i_2 - 3) + a_8 (i_1 - 3) (i_2 - 3)^2 + a_9 (i_2 - 3)^3 \quad (1)$$

kde i_1 a i_2 jsou (první a druhý) invarianty Cauchy-Greenova tenzoru deformace. Jednodušší varianty modelu uvažují pouze lineární (první dva) nebo lineární a kvadratické (prvních pět) členy této rovnice. Tím dostáváme základní tři typy Mooney-Rivlinova modelu (dvou-, pěti- a devítiparametrický), které všechny je možné ještě rozšířit o další člen zohledňující objemovou složku deformace (danou třetím invariantem Cauchy-Greenova tenzoru deformace).

V literatuře je popsána řada dalších konstitutivních vztahů, používaných pro měkké tkáně. Např. lit. [2] používá model Klosner-Segalův, popsáný následující rovnicí pro energii napjatosti:

$$W = C_{11} (i_1 - 3) + C_{21} (i_2 - 3) + C_{22} (i_2 - 3)^2 + C_{23} (i_2 - 3)^3 \quad (2)$$

Častěji jsou používány jiné konstitutivní modely měkkých tkání, jak je přehledně uvedeno např. v [6]. Pokud však při modelování pomocí MKP používáme komerční software, zaměřený na technické aplikace (v našem případě ANSYS), jsme omezeni jeho nabídkou

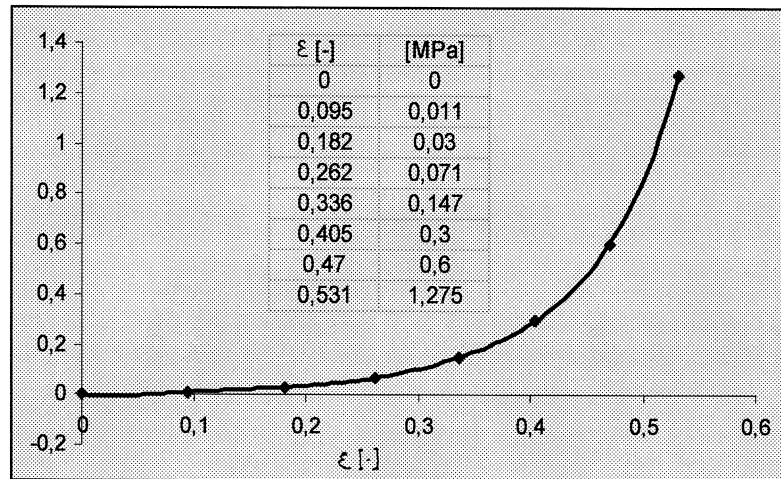
*Institute of Solid Mechanics, FME BUT, Brno, Czech Republic, vajdy@email.cz, bursa@umt.fme.vutbr.cz

konstitutivních modelů. Zjišťování a ověřování parametrů zvoleného izotropního hyperelastického modelu konstitutivního chování materiálu je možné různými postupy nelineární regrese s cílem dosažení optimální shody modelu s experimentem v požadovaném rozsahu víceosých stavů přetvoření. Cílem tohoto příspěvku je porovnání výsledků aproximace deformačně-napětových charakteristik měkkých tkání při použití různých materiálových modelů implementovaných v programovém systému ANSYS a různých metod nelineární regrese.

2. Problémy s některými modely

Při výběru vhodného konstitutivního předpisu pro popis hyperelastického chování materiálu je třeba vycházet z napětově deformačních charakteristik při různých typech napjatosti a různých typech materiálových zkoušek (viz.[1]). Jsou-li pro regresi použity pouze zkoušky v jednoosé napjatosti, pak chování modelu při víceosé napjatosti může být nereálné; totéž platí i obráceně. Ale ani jednoosá napjatost nemusí být

v některých případech na základě jednoosých zkoušek modelována správně pro celý rozsah deformace. Typickým příkladem je použití Mooney-Rivlinových materiálových modelů pro měkké tkáně. Tyto modely, popsané obecně rovnicí (1), jsou totiž určeny především pro objemově téměř nestlačitelné izotropní pryže, jejichž deformačně napětová charakteristika je obvykle konkávní (inkrementální modul pružnosti $d\sigma/d\varepsilon$ klesá s velikostí deformace). Použití těchto modelů u měkkých tkání neumožňuje respektovat anizotropii jejich vlastností a je navíc spojeno s problémy při aproximaci deformačně napětových charakteristik, neboť tyto tkáně vykazují obvykle pro jednoosé i dvouosé zkoušky tahem opačný, tj. konvexní tvar charakteristiky (nárůst inkrementálního modulu pružnosti s velikostí deformace). Tento výrazně zpevňující charakter deformačně napětových křivek je typický pro tkáně cévní stěny; u nich např. napětí při 20% maximální deformace dosahují pouze cca 1% maximálně dosažitelného napětí. Tento rozdíl mezi chováním pryže a měkkých tkání je často příčinou nekorektních výsledků při modelování mechanické odezvy měkkých tkání pomocí Mooney-Rivlinova modelu. Při běžných postupech regrese (metoda nejmenších čtverců) bývá aproximace deformačně-napětové závislosti především v oblastech malých deformací velmi



Obr.1. Napětově-deformační charakteristika jednoosé tahové zkoušky břišní aorty a tabulka diskretizovaných hodnot vstupujících do regrese č. 1 a 2. (skutečné hodnoty)

Strain	Stress
ε [-]	[MPa]
0	0
0,01	0,001
0,03	0,0025
0,05	0,0038
0,08	0,006147
0,1	0,012132
0,13	0,019642
0,2	0,036424
0,3	0,103358
0,4	0,282891
0,531	1,275

Tab.1. Upravená tabulka se zvýšenou hustotou diskretizace v oblasti malých hodnot skutečných napětí a logaritmických přetvoření

nepřesná, což může vést k numerické nestabilitě výpočtu MKP nebo fyzikálně nesmyslným výsledkům deformačně-napěťové analýzy; při simulaci tahové zkoušky může dokonce docházet ke zkracování vzorku, což znamená záporný počáteční modul pružnosti v tahu; právě u modelování měkkých tkání k tomu dochází poměrně často.

Nejčastěji jsou nevěrohodně vyhodnoceny velikosti napětí při deformacích do velikosti cca 10%. Je to dáno tím, že standardně používaná metoda nejmenších čtverců minimalizuje absolutní chybu rozdílů mezi danými body experimentální a výpočtové křivky. I malá absolutní chyba však pro malé hodnoty napětí a přetvoření znamená velkou chybu relativní, takže nejhorší je aproximace charakteristiky právě v oblasti malých napětí a přetvoření. Tento vliv se v případě používání Mooney-Rivlinova modelu pro měkké tkáně ještě umocňuje výše uvedeným rozdílným charakterem deformačně-napěťové závislosti ve srovnání s elastomery. Pak může dojít k tomu, že chyba regrese je větší než hodnoty napětí při malých přetvořeních a v jistém rozsahu model dává např. pro kladná přetvoření záporné hodnoty napětí nebo že v rozporu se skutečností u modelu napětí klesá s rostoucí deformací (viz obr. 2).

3. Použité metody řešení

Nejjednodušším opatřením k omezení těchto problémů je volba vhodného, tj. nikoli zbytečně velkého rozsahu přetvoření vzhledem k oblasti použití modelu. V případě měkkých tkání to však vzhledem k charakteru jejich chování nestačí. Při vyhodnocování

Regrese	5 parametrů Mooney-Rivlinova modelu hyperelastického materiálu					
č.	a1	a2	a3	a4	a5	E [MPa]
1	-2,59119	2,750823	6,369125	-18,6152	15,07239	0,957791
2	-1,18932	1,266993	4,163972	-11,6470	8,921800	0,466013
3	-0,270540	0,292907	2,931306	-7,65880	5,286707	0,134204
4	-0,186468	0,203541	2,912967	-7,55562	5,135195	0,102439

Tab.2. Hodnoty zjištěných parametrů a velikostí počátečních modulů pružnosti určených pomocí jednotlivých regresí.

materiálových parametrů pomocí nelineární regrese pak můžeme zpřesnění jejich identifikace provést základními dvěma způsoby. Jeden spočívá ve zvyšování hustoty diskretizace napěťově deformačních charakteristik v oblasti malých deformací, druhý pak v úpravě tvaru chybové funkce při provádění nelineární regrese. Oba tyto způsoby pro zpřesnění identifikace materiálových parametrů konstitutivních modelů lze vhodně kombinovat a dosáhnout tak věrohodnějších hodnot materiálových parametrů. Pokud však konstitutivní model ani po takovýchto úpravách nedokáže správně popisovat požadované vlastnosti, je nutné zvolit jiný dostupný konstitutivní model. Jak ukazuje porovnání rovnic (1) a (2), nemusí to vždy znamenat velkou změnu jeho matematického předpisu. V následující kapitole jsou porovnány výsledky uvedených metod nelineární regrese při vyhodnocování materiálových parametrů Mooney-Rivlinova a Klosner-Segalova modelu materiálového chování břišní aorty z dat jednoosé tahové zkoušky.

4. Analýza výsledků

Snažili jsme se o určení parametrů konstitutivních modelů pro zvolenou deformačně napěťovou charakteristiku aorty (viz. obr.1). Mooney-Rivlinův model hyperelastického materiálu jsme použili ve verzi pro 5 materiálových parametrů (prvních 5 členů z rovnice (1)). Jako zdrojová data pro zjišťování parametrů byly do programového systému [5], používajícího nelineárně regresní algoritmus, použity body deformačně-napěťové charakteristiky pro 8 hodnot logaritmického tenzoru přetvoření, rovnoměrně rozložených

v intervalu 0 – 0.53 (viz. obr.1). Chybová funkce byla formulována jako čtverec rozdílu predikované a zadané hodnoty (metoda nejmenších čtverců) podle následující rovnice:

$$L = (OBS - PRED)^2 \quad (3)$$

kde L je chybová funkce, OBS – skutečná hodnota, PRED – predikovaná hodnota. Tímto postupem určené hodnoty (regrese č.1 v tab.2) byly testovány na MKP modelu jednoosé tahové zkoušky. Pro porovnání byl proveden též analytický výpočet napětí při zadaném přetvoření podle následujícího vztahu:

$$\sigma = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} W \quad (4)$$

Kde W je vztah pro hustotu energie napjatosti Mooney-Rivlinova modelu a ε je přetvoření ve směru pro který zjišťujeme skutečné napětí σ . Křivky modelu zhruba odpovídají zadaným deformačně napěťovým charakteristikám, avšak v oblasti malých deformací (cca. do 10%) je aproximace nepřesná a křivka dokonce není monotónně rostoucí (viz. graf na obr.2). To může způsobit numerickou nestabilitu výpočtu, podobně jako záporný součet prvních dvou Mooney-Rivlinových konstant (je roven jedné šestině počátečního modulu pružnosti). Podle této aproximace je velikost počátečního modulu pružnosti 960 kPa (viz. tab.2). Počáteční modul pružnosti nemůže při progresivním růstu deformačně-napěťové charakteristiky dosahovat vyšší hodnoty než hodnoty sečného modulu pružnosti v prvním zadaném bodě známé deformačně napěťové charakteristiky. Pro naši deformačně napěťovou charakteristiku je první zadaný bod 0.105 přetvoření při napětí 13 kPa (smluvní tahové křivky), z čehož plyne velikost příslušného sečného modulu pružnosti 127 kPa. Podle údajů publikovaných v literatuře se hodnoty počátečního modulu pružnosti lidských aort pohybují nejčastěji v rozmezí 80-140kPa. Vypočítané parametry Mooney-Rivlinova modelu s velikostí počátečního modulu pružnosti mimo tento rozsah tedy neodpovídají realitě. Jak ukazuje detail křivky na obr.2, je absolutní chyba aproximace v tomto úseku sice malá, ovšem relativní chyba je obrovská a pro přetvoření řádu jednotek procent je model naprosto zavádějící. Proto je nutné provést zpřesnění aproximace.

Regrese č. 2 používá rovnici chybové funkce změněnou tak, aby se zvýšil vliv nízkých hodnot napětí a deformací na výsledný tvar aproximované charakteristiky. V našem případě jsme formulovali chybovou funkci pomocí kvadrátu rozdílu odmocnin predikované hodnoty a hodnoty skutečné podle rovnice :

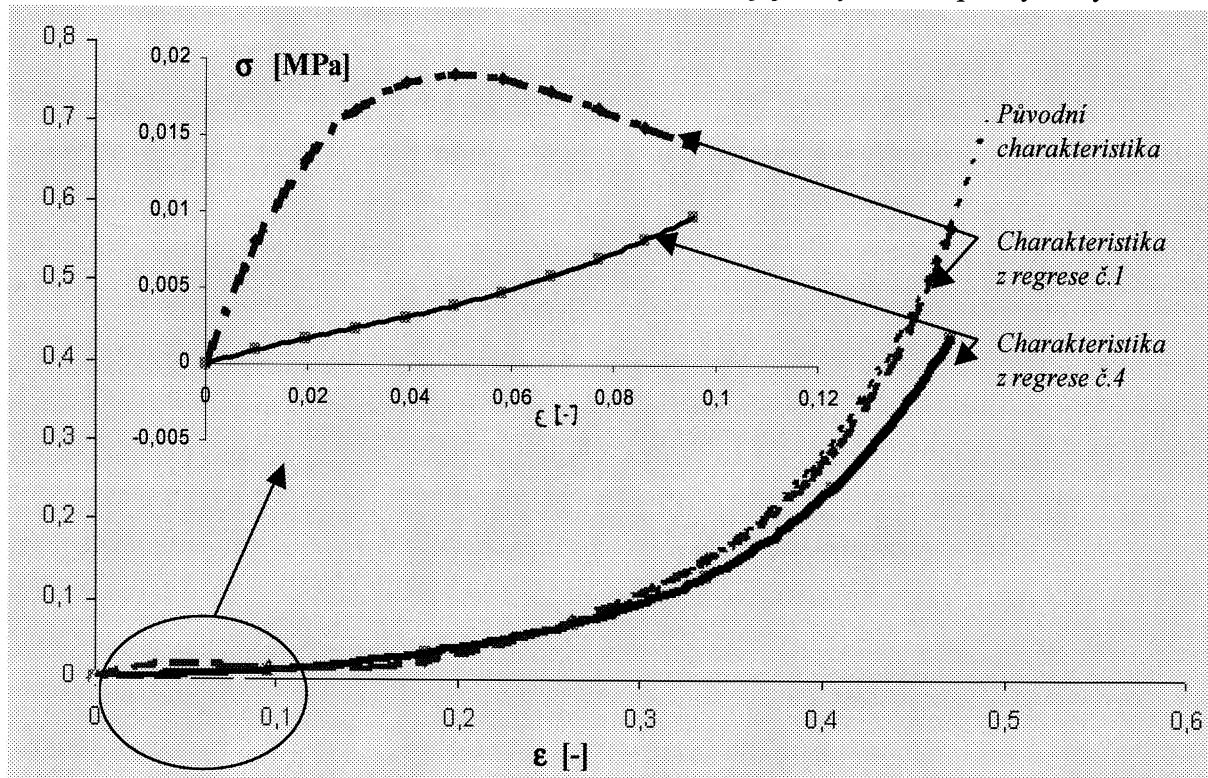
$$L = Weight (\sqrt{OBS} - \sqrt{PRED})^2 \quad (5)$$

kde Weight znamená váhovou funkci, jejíž hodnotu jsme zvolili rovnu 0,01. Tímto způsobem jsme určili parametry označené v tab.2 jako regrese č.2. Těmto koeficientům odpovídá hodnota počátečního modulu pružnosti 466 kPa, což je sice nižší hodnota, než u původní regrese č.1, avšak stále přesahující 127 kPa.

Regrese č.3 používá chybovou funkci danou rovnicí (3) a zpřesnění aproximace v oblasti malých deformací je dosaženo zvýšením hustoty diskretizace deformačně napěťové charakteristiky v této oblasti. To bylo provedeno přidáním 5 bodů do dat pro vyhodnocení regresí (viz. tab.1). Jak ukazuje tab.2, vyhodnoceným parametrům odpovídá hodnota počátečního modulu pružnosti 134 kPa, která již téměř vyhovuje našemu požadavku. Bylo by samozřejmě možné chybovou funkci regrese opět modifikovat např. dalším snížením váhového koeficientu nebo dále zvyšovat hustotu diskretizace.

Regrese č. 4 (viz. tab.2) kombinuje oba postupy, tedy používá chybovou funkci danou rovnicí (5) a vyšší hustotu zadaných bodů podle tab.1. Tato regrese dává hodnoty parametrů Mooney-Rivlinova modelu odpovídající počátečnímu modulu pružnosti o velikosti 102 kPa. Tyto hodnoty byly ověřeny pomocí MKP simulace tahové zkoušky a vypočítaná charakteristika je uvedena v grafu na obr. 2 jako regrese č.4. Je vidět, že průběh deformačně napěťové charakteristiky má konvexní monotónně rostoucí charakter bez inflexí v celém svém rozsahu a odpovídá tak charakteru křivky vstupující do regrese (viz. obr.1). Tím je odstraněna možná příčina numerické nestability a výrazně zpřesněna aproximace v oblasti deformací řádu jednotek procent. Je však možno konstatovat, že nevyhnutelnou daní za toto zpřesnění je horší aproximace křivky v oblasti velkých deformací. Ověřili jsme proto tento případ analyticky a zjistili jsme, že analyticky spočtená charakteristika pro jednoosou tahovou zkoušku v grafu na obr.2 přesně kopíruje zadanou charakteristiku. Chyba křivky modelované MKP je tedy důsledkem nepřesnosti použitého hyperelastického modelu a samotné metody. Zmenšení této chyby by bylo možné jedině použitím zcela jiného vztahu pro energii napjatosti.

Literatura uvádí více možností konstitutivních modelů vhodných pro popis chování měkkých tkání. Pro uživatele komerčních programových systémů MKP, které nemají implementovány tyto speciální vztahy, popisující energii napjatosti biologických tkání, však nejsou tyto modely většinou použitelné. Výjimku tvoří již zmíněný model Klosner-Segalův, popsáný rovnicí (2). Z porovnání jeho matematického předpisu s devítiparametrickým Mooney-Rivlinovým modelem (rovnice (1)) je zřejmé, že Klosner-Segalův model je zvláštním případem modelu Mooney-Rivlinova; používá pouze některé jeho členy, a to zcela jiné, než jednodušší (tj. dvouparametrický a pětuparametrický) Mooney-Rivlinovy modely. Klosner – Segalův model totiž vůbec nepoužívá členy obsahující první invariant tenzoru deformace, s výjimkou jediného, a to lineárního. Lze jej tedy získat pouhým vynecháním



Obr.2. Porovnání vyhodnocených charakteristik z regrese č.1 a 4 (skutečné hodnoty)

příslušných parametrů z devítiparametrického Mooney-Rivlinova modelu. Tím je umožněno využití tohoto materiálového modelu u všech systémů MKP, které mají implementován obecný Mooney-Rivlinův model. Samozřejmě ovšem nelze využívat podprogramů pro určování materiálových konstant, ty je třeba určit nelineární regresí a do programového systému je přímo zadat.

Uvedený postup vyhodnocování parametrů modelů konstitutivních vztahů je potřebný nejen pro zajištění věrohodnosti spočtených výsledků, ale je často základním předpokladem pro dosažení konvergence výpočtů. Pro úlohy se silovým zatížením (např. tepna, zatížená vnitřním tlakem) je za použití modelu deformačně-napěťové charakteristiky, vykazujícího lokální minimum, deformace pro jistý rozsah zatížení nejednoznačná a problémy s konvergencí výpočtu jsou podobné, jako při ztrátě tvarové stability. Srovnáním parametrů zjištěných pomocí uvedených postupů nelineární regrese s parametry vyhodnocenými podprogramem systému ANSYS ze stejných vstupních dat jsme si ověřili, že systém ANSYS vyhodnotil parametry téměř stejně jako nelineární regrese používající metodu nejmenších čtverců. ANSYS přitom neumožňuje modifikaci matematického postupu pro vyhodnocování parametrů hyperelastického modelu; existuje v něm tedy jediná možnost pro zpřesňování vyhodnocovaných parametrů a tou je zvyšování hustoty diskretizace vstupních dat.

5. Zhodnocení použitelnosti modelů

Dosud byly uvedené modely ověřovány pouze simulací jednoosé tahové zkoušky. Pro jejich použitelnost je však rozhodující, jak jsou schopny modelovat víceosé stavy napjatosti a deformace. Protože pro modelovaný materiál nebyla k dispozici jiná vstupní data než z jednoosé tahové zkoušky, provedli jsme aspoň elementární ověření výsledků pro rovnoměrnou dvouosou napjatost. Z rešeršních studií víme, že poměr tuhosti při equibiaxiální napjatosti a při jednoosé napjatosti se u cévní tkáně pohybuje při 20% přetvoření v rozmezí 2 až 5. Za použití 5 parametrického Mooney-Rivlinova modelu vykazují výsledky simulace equibiaxiální zkoušky pro 20 % přetvoření tuhosti řádově vyšší než při jednoosé napjatosti. Tatáž simulace při použití Klosner – Segalova modelu vykazuje tuhosti cca 9 násobně vyšší oproti jednoosé zkoušce. Z toho je zřejmé, že především model Mooney-Rivlinův, ale i model Klosner-Segalův, nesprávně aproximují některé typy napjatosti, pro něž jim nebyla zadána materiálová charakteristika. Tento nedostatek může být v daném případě rozhodující, protože napjatost stěny cévy je přibližně dvouosá.

Programový systém ANSYS nabízí však jinou možnost pro popis nelineárně elastického chování a to tzv. multilineárně elastický model (MELAS - viz [3]). Model používá pouze data z jednoosé tahové zkoušky a Poissonův poměr. Jednoosou napěťově-deformační charakteristiku známe a vzhledem k použitému předpokladu izotropie a nestlačitelnosti měkkých tkání se Poissonův poměr blíží 0,5. Pomocí tohoto modelu jsme rovněž provedli simulaci materiálových zkoušek pro různé stavy napjatosti. Charakteristiku jednosé tahové zkoušky tento model aproximuje lineárními úseky mezi zadanými body, což pro dostatečnou hustotu těchto bodů zaručuje požadovanou přesnost. Z výsledků simulace equibiaxiální napjatosti jsme zjistili, že při 20 % přetvoření vykazuje tento model cca 6 násobek tuhosti oproti jednoosé napjatosti. Pokud tedy nemáme k dispozici více materiálových údajů pro různé stavy napjatosti (uniaxiální, biaxiální, equibiaxiální,...), je vhodnější používat pro simulace chování cévní tkáně v systému ANSYS tento materiálový model. Navíc v systému ANSYS lze kombinovat tyto prvky s prvky teplotními a zahrnout tak do výpočtu zbytkovou napjatost tepny pomocí fiktivní teplotní napjatosti podle [4], což u hyperelastických prvků ANSYS neumožňuje.

6. Závěr

V příspěvku bylo ukázáno, že přesnost aproximace zadané napěťově deformační charakteristiky kterýmkoliv konstitutivním modelem je možné zvýšit vhodným postupem nelineární regrese. Známe-li konstitutivní charakteristiky pro různé typy napjatosti, lze tento postup použít pro zpřesnění aproximace všech těchto charakteristik. Pokud však, tak jako v našem příspěvku, vycházíme pouze z jednoosé tahové zkoušky, není samotné zpřesnění této aproximace ještě zárukou věrohodných výsledků pro jiné typy napjatostí. Jakýkoli konstitutivní model pro konečné deformace by proto měl být testován i pro jiné typy napjatostí, než na základě kterých byly určeny jeho parametry. Z tohoto pohledu nemusí být zpřesnění nelineární regrese rozhodující, neboť nezaručuje lepší aproximaci jiných napěťových stavů. I pro velmi přesnou aproximaci jednoosé tahové křivky modely Mooney-Rivlinovým nebo Klosner-Segalovým, provedenou v příspěvku, je popis equibiaxiální napjatosti velmi nepřesný až zcela chybný. Multilineárně elastický model, který je formulován pouze na základě jednoosé tahové charakteristiky, vykazuje v tomto směru podstatně lepší chování. Lze jej tedy rozhodně doporučit v případech, kdy nemáme k dispozici jiné materiálové charakteristiky.

Literatura

- [1] Michal Vajdák, Jiří Burša: Experiment planning in evaluation of soft tissue mechanical characteristics, Proceedings of the *International conference on Biomechanics of man 2002*, Čejkovice, 12th – 15th November 2002, pp.286-288
- [2] Kozaburo Hayashi, Yosuke Imai: Tensile property of atheromatous plaque and an analysis of stress in atherosclerotic wall, *J. Biomechanics*, Vol. 30, No. 6, pp. 573-579, 1997
- [3] Capture 4.5 Hyperelasticity of user guide Ansys 7.1. (Keynote: Mooney-Rivlin, MELAS)
- [4] Jiří Burša, Michal Vajdák: Mechanical Optimization of Geometry of the System "Artery-Vascular Graft" Proceedings of the *3rd International Conference Mechatronics, Robotics and Biomechanics 2001*, Třešť, September 2001, pp. 45-50
- [5] StatSoft, Inc. (2001). STATISTICA (data analysis software system), version 6. www.statsoft.com.
- [6] Burša J: Possibilities of using strain energy density functions to solve stress state in arteries. Sborník VIII. *konference České národní společnosti pro biomechaniku s mezinárodní účastí*, Olomouc, listopad 2000, pp. 141-145.

Tato práce byla provedena v rámci Výzkumného záměru MŠMT č. CEZ:322/98:262100001