

## Adatlap<sup>1</sup> témahirdetési javaslatához a Csonka Pál Doktori Iskola Tanácsa részére

Témavezető<sup>2</sup> neve: Dr. Károlyi György  
e-mail címe<sup>3</sup>: karolyi@reak.bme.hu

Téma címe (magyar és angol nyelven):

Véletlen rúdhálózatok mechanikai viselkedése  
Mechanics of random filamentary networks

A **téma** rövid leírása<sup>4</sup> (magyar és angol nyelven):

Szálás szerkezetű anyagok gyakran előfordulnak a mérnöki gyakorlatban (szálerősítéssel anyagok) és biológiai rendszerekben (sejtváz vagy porózus csontok szerkezete). Ilyen szerkezetek rugalmas tulajdonságainak vizsgálatára gyakran alkalmaznak hajlékony szálak véletlen hálózatából álló modellt, ahol a szálakat keresztkötések csatolják egymáshoz. A korábban vizsgált modellekben a rudak a keresztkötéseknél egymáshoz képest szabadon elfordulnak, vagy sarokmereven csatlakoznak. A modell vizsgálata során azt tapasztalták, hogy a hálózat sűrűségének függvényében vagy a hajlítási, vagy a normál alakváltozások egyike dominál. Ezt a korábbi modellt szeretnénk tovább vizsgálni, figyelembe véve a keresztkötések elfordulás elleni merevségét, rugalmasságát is. Azt várjuk, hogy az így módosított hálózatban a nyírási alakváltozások szerepe is jelentős lesz. Meg kívánjuk vizsgálni azt is, hogy milyen szerepe van a szálak heterogenitásának, azaz mi történik, ha a szálak mérete és mechanikai tulajdonságai nem azonosak. A modellel szerzett tapasztalatok hasznosak lehetnek a sejtváz viselkedésének megértésében és a szálerősítéssel anyagok vizsgálatában is.

Filamentary networks play an important role both in engineering (fiber reinforced materials) and in biology (cytoskeleton or porous bone material). When investigating the elastic properties of such materials, an often used model consists of a random network of deformable filaments attached to each other by cross-links. Most often, these cross-links form hinges, sometimes they are rigid connections. The investigations revealed that either bending or stretching dominated regimes govern the behaviour, depending on the density of the network or on the bending or stretching stiffness of the rods. We plan to further investigate and extend this model by including moment bearing hinges at the cross-links. We expect that in the extended model the shear strains will play important role. We also intend to shed light on the role of heterogeneity in such models, that is, what happens when the size or mechanical properties of the rods are different. The experience obtained from the model is expected to be useful in the investigation of the cytoskeleton and fiber reinforced materials.

1 Az adatlapot egy példányban *kinyomtatva és aláírva* a Szilárdságtani Tanszék titkárságára, *elektronikus változatban* pedig a Doktori Iskola titkárának (B.Kóródy Anna, korody@eik.bme.hu) kell eljuttatni. A témahirdetés elfogadása esetén az adatlap felkerül a Csonka Pál Doktori Iskola (<http://www.szt.bme.hu/index.php/oktatas/csonka-pal-doktori-iskola>), a témahirdetés rövid leírása pedig az Országos Doktori Tanács (<http://www.doktori.hu/>) honlapjára.

2 A témahirdetés elfogadása automatikusan a témavezető akkreditációját is jelenti az azévi felvételi eljáráshoz.

3 Kérjük, olyan elérhetőséget adjon meg, ahová biztonsággal küldhetünk hivatalos értesítéseket.

4 A téma rövid leírása (szóközökkel) 1000-3000 leütés hosszú. A jelentkező hallgatókat bővebben tájékoztató változatot, (mely a téma fent megadott releváns nemzetközi irodalmára tételesen hivatkozik) kérjük a mellékletben megadni.

A **téma** meghatározó irodalma<sup>5</sup>:

- D.A. Head, A.J. Levine, F.C. MacKintosh: Distinct regimes of elastic response and deformation modes of cross-linked cytoskeletal and semiflexible polymer networks. *Physical Review E* 68 (2003) 061907.
- D.A. Head, A.J. Levine, F.C. MacKintosh: Deformation of Cross-Linked Semiflexible Polymer Networks. *Physical Review Letters* 91 (2003) 108102.
- J. Wilhelm, E. Frey: Elasticity of Stiff Polymer Networks. *Physical Review Letters* 91 (2003) 108103.
- P.A. Janmey, U. Euteneuer, P. Traub, M. Schliwa: Viscoelastic properties of vimentin compared with other filamentous biopolymer networks. *The Journal of Cell Biology* 113 (1991) 155-160.
- M. Das, F.C. MacKintosh, A.J. Levine: Effective Medium Theory of Semiflexible Filamentous Networks. *Physical Review Letters* 99 (2007) 038101.
- Roy, H.J. Qi: Micromechanical model for elasticity of the cell cytoskeleton. *Physical Review E* 77 (2009) 061916.
- D. Stamenovic, N. Wang: Stress transmission within the cell. *Comprehensive Physiology* 1 (2011) 499-524.
- M. Sheinman, C.P. Broedersz, F.C. MacKintosh: Nonlinear effective-medium theory of disordered spring networks. *Physical Review E* 85 (2012) 021801.
- D.A. Fletcher, R.D. Mullins: Cell mechanics and the cytoskeleton. *Nature* 463 (2010) 485-492.
- A.J. Licup, S. Münster, A. Shharma, M. Sheinman, L.M. Jawerth, B. Fabry, D.A. Weitz, F.C. MacKintosh: Stress controls the mechanics of collagen networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA* 112 (2015) 9573-9578.

A **téma** hazai és nemzetközi folyóiratai<sup>6</sup>:

- Nature
- Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA
- Soft Matter
- Physical Review Letters
- Physical Review E
- International Journal of Solids and Structures

A **témavezető** fenti folyóiratokban megjelent 5 közleménye:

- Z. Toroczkai, G. Károlyi, Á. Péntek, T. Tél, C. Grebogi: Advection of active particles in open chaotic flows. *Physical Review Letters* 80 (1998) 500-503.
- G. Károlyi: Fractal scaling of microbial colonies affects growth. *Physical Review E* 71 (2005) 031915.
- G. Károlyi, T. Tél: Chemical transients in closed chaotic flows: The role of effective dimensions. *Physical Review Letters* 95 (2005) 264501.
- A.E. Motter, M. Gruiz, Gy. Károlyi, T. Tél: Doubly transient chaos: Generic form of chaos in autonomous dissipative systems. *Physical Review Letters* 111 (2013) 194101.

---

5 Minimum 5, maximum 10 cikket vagy monográfiát kérünk felsorolni, amik között feltétlenül szerepelnie kell a legfrissebb, legismertebb eredményeknek.

6 Minimum 5, maximum 10 folyóirat megadását kérjük, melyek között feltétlenül szerepelnie kell a PhD fokozatszerzés szempontjából elengedhetetlen (Scopus és/vagy Sci illetve Iconda) minősítésű idegen nyelvű folyóiratoknak is. Kérjük, ezeket a periodikákat a felsorolásban jelöljék meg.

- G. Károlyi, Á. Péntek, I. Scheuring, T. Tél, Z. Toroczkai: Chaotic flow: the physics of species coexistence. Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA 97 (2000) 13661-13665.

A **témavezető** utóbbi tíz évben megjelent 5 legfontosabb publikációja:

- A.B. Schelin, Gy. Károlyi, A.P.S. De Moura, N.A. Booth, C. Grebogi: Fractal structures in stenoses and aneurysms in blood vessels. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A 368 (2010) 5605-5617.
- A. Kocsis, R.K. Németh, Gy. Károlyi: Spatially chaotic bifurcations of an elastic web of links. International Journal of Bifurcation and Chaos 20 (2010) 4011-4028.
- A.E. Motter, M. Gruiz, Gy. Károlyi, T. Tél: Doubly transient chaos: Generic form of chaos in autonomous dissipative systems. Physical Review Letters 111 (2013) 194101/1-5.
- A. Kocsis, N. Challamel, Gy. Károlyi: Discrete and nonlocal models of Engesser and Haringx elastica. International Journal of Mechanical Sciences 130 (2017) 571-585.
- A. Bibó, Gy. Károlyi, M. Kovács: Unrevealed part of myosin's powerstroke accounts for high efficiency of muscle contraction. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects 1861 (2017) 2325-2333.

A **témavezető** eddigi doktoranduszai<sup>7</sup>:

(név/felvétel éve/abszolutórium megszerzésének éve/PhD fokozat éve)

- Dr. Kocsis Attila, felvétel: 2004., PhD: 2009.
- Dr. Bibó András, felvétel: 2008., PhD: 2013.
- Dr. Laczák Lili Eszter, felvétel: 2013., PhD: 2017.

Melléklet: a téma bővebb leírása (magyar és angol<sup>8</sup> nyelven)

Budapest, 2018. február 16.



Témavezető aláírása

<sup>7</sup> Kérjük, a témavezetési tevékenységre vonatkozó adatokat abban az esetben is adja meg, ha témavezetőként a DI már korábban akkreditálta.

<sup>8</sup> A téma bővebb leírása angol nyelven csak akkor szükséges, ha a témavezető vállalja külföldi hallgató fogadását.

## Munkaterv

Szálás szerkezetű anyagok [1] előfordulnak a mérnöki gyakorlatban (szálerősítéssel anyagok) és biológiai rendszerekben (sejtváz vagy porózus csontok szerkezete). Ilyen szerkezetek rugalmas tulajdonságainak vizsgálatára gyakran alkalmaznak olyan modellt, amely hajlékony szálak véletlen hálózatából áll, ahol a szálakat keresztkötések csatolják egymáshoz. Amikor a modellben a keresztkötések csuklósak, azt tapasztalták, hogy a hálózat sűrűségének függvényében vagy a hajlítási, vagy a normál alakváltozások dominálnak [2-6]. Ezt a modellt szeretnénk tovább vizsgálni, figyelembe véve a keresztkötések elfordulás elleni merevségét is. Azt várjuk, hogy az így módosított hálózatban a nyírási alakváltozások szerepe is jelentős lesz. Meg kívánjuk vizsgálni azt is, hogy milyen szerepe van a szálak heterogenitásának, azaz mi történik, ha a szálak mérete és mechanikai tulajdonságai nem azonosak. Ezt a vizsgálatot a sejtváz viselkedésének megértése motiválja: a sejtváz a sejtek mechanikai hatások elleni merevségét biztosító része. A sejtváz eltérő méretű és anyagi tulajdonságú polimerek komplex hálózata. Lényegében három különböző szál építi fel a sejtváz szerkezetét [7,8]: az aktinszálak, a mikrotubulusok és az intermedier filamentumok. Ezeknek eltérő a mérete, anyaga és szerepe. Az aktin mikroszálak mechanikai szerepe kiemelkedik a sejtvázban, a három típus közül ennek van a legnagyobb rugalmassági modulusa. A másik két szál szerepe egyrészt a magasabb teher esetén kialakuló ellenállás során, illetve a belső megtámasztásban van. Annak érdekében, hogy megértsük az egyes komponensek szerepét a mechanikai terhek viselésében, meg kívánjuk vizsgálni, hogy milyen kölcsönhatások és együttműködés van az eltérő szálak között. A modellel szerzett tapasztalatok hasznosak lehetnek a sejtváz viselkedésének megértésében és a szálerősítéssel anyagok vizsgálatában is.

A véletlen rúdhálózat egyensúlyi helyzetei a szerkezet potenciális energiájának segítségével kereshetők. Számítógépes szimulációk segítségével megkeressük az átmenetet a hajlítás, illetve a nyújtás által dominált tartományok között, hogy reprodukáljuk az irodalomból ismert eredményeket [2-6]. Ennek érdekében először egy véletlen hálózatot generáló kódot írunk. Ezután a potenciális energia kiszámítása és minimalizálása segítségével megkeressük az egyensúlyi helyzeteket. Összehasonlítjuk a hajlításban, illetve nyúlásban tárolt energia arányát, és ennek mennyiségében keresünk gyors átmenetet a hálózat sűrűségének függvényében.

A következő lépés során a keresztkötéseket nyomatékbíróvá tesszük, és megvizsgáljuk, hogyan változik a potenciális energia és az egyensúlyi helyzet. Széleskörű numerikus számításokat végzünk kiterjedt paramétertartományban, hogy megtaláljuk a nyírási, hajlítás, illetve nyúlás által dominált paramétertartományokat. Azt várjuk, hogy a keresztkötések rugalmas elfordulásában tárolt energia nyírási által dominált állapotokhoz vezet a paraméterek egy széles tartományán. Ezt numerikusan, illetve ha lehetséges, analitikusan is megvizsgáljuk.

A harmadik lépés az eredmények alkalmazása még összetettebb hálózatokra, ahol a szálak eltérő mérettel és anyagi tulajdonságokkal rendelkeznek. Ilyen komplex rúdhálózatok például a sejtvázban fordulnak elő, ahogy azt fentebb tárgyaltuk.

A doktori munka során a következő lépéseket tesszük meg.

1. év:

Irodalomkutatás.

A legegyszerűbb eset potenciális energiájának számítása.

Az irodalomból ismert eredmények reprodukálása.

2. év:

A modell kiterjesztése rugalmas keresztkötések esetére.

Széleskörű parametrikus vizsgálatok.

3. év:

A rugalmas keresztkötések hatásával kapcsolatos eredmények publikálása.

A sejtváz mechanikai viselkedésének vizsgálata.

A sejtváz három eltérő típusú szálait tartalmazó numerikus modell építése.

4. év:

A három eltérő száltípust tartalmazó komplex hálózati modellből nyert eredmények publikálása.

Az eredmények kiterjesztése további, például véletlen tulajdonságokkal rendelkező rúdhálózatokra.

#### **Hivatkozások:**

[1] M. Sheinman, C.P. Broedersz, F.C. MacKintosh: Nonlinear effective-medium theory of disordered spring networks. *Physical Review E* 85 (2012) 021801.

[2] M. Das, F.C. MacKintosh, A.J. Levine: Effective Medium Theory of Semiflexible Filamentous Networks. *Physical Review Letters* 99 (2007) 038101.

[3] D.A. Head, A.J. Levine, F.C. MacKintosh: Distinct regimes of elastic response and deformation modes of cross-linked cytoskeletal and semiflexible polymer networks. *Physical Review E* 68 (2003) 061907.

[4] D.A. Head, A.J. Levine, F.C. MacKintosh: Deformation of Cross-Linked Semiflexible Polymer Networks. *Physical Review Letters* 91 (2003) 108102.

[5] J. Wilhelm, E. Frey: Elasticity of Stiff Polymer Networks. *Physical Review Letters* 91 (2003) 108103.

[6] S. Roy, H.J. Qi: Micromechanical model for elasticity of the cell cytoskeleton. *Physical Review E* 77 (2009) 061916.

[7] D. Stamenovic, N. Wang: Stress transmission within the cell. *Comprehensive Physiology* 1 (2011) 499-524.

[8] P.A. Janmey, U. Euteneuer, P. Traub, M. Schliwa: Viscoelastic properties of vimentin compared with other filamentous biopolymer networks. *The Journal of Cell Biology* 113 (1991) 155-160.

## Workplan

Filamentary networks [1] play an important role in engineering (e.g. fiber reinforced materials) and in biology (e.g. cytoskeleton or porous bones). To investigate the elastic properties of such systems, a possible approach is to consider a random network of flexible filaments connected by hinges at their intersections [1-6]. When the filaments freely rotate at their intersections, a transition between two regimes was found under loading: depending on the density of the network, either the bending or the normal strains dominate [2-6]. The idea is to investigate such networks but with elastic connections at the intersections. We expect that in the modified network model shear strains also play an important role. We also intend to investigate filamentous networks constituting of various types of filaments. The motivation comes from studies on the cytoskeleton, which is the part of cells that gives its resistance against external mechanical effects. The cytoskeleton is a complex network of filaments with different material properties (size and elastic properties). Three different types of filaments build up the main structure [7,8]: the microfilaments, the microtubules and the intermediate filaments. They differ in size, material and role. The actin-based microfilaments have the most relevant mechanical role in the cytoskeleton, from the three types they have the largest Young's modulus. The other two types are responsible for the resistance against large load and for the maintenance of the internal organisation. We intend to shed light on the interplay between these different filaments in order to discover their mechanical role in the behaviour of the cytoskeleton under external mechanical load. The results may contribute to the understanding of the mechanical properties of the cytoskeleton and fiber reinforced materials.

The governing equilibrium equations for the random network of filaments can be derived from the potential energy of the structure. Then computer simulations will be carried out to find the transition between bending and normal strain dominated regimes in order to recover the results already known from the literature [2-6]. To achieve this, first a randomized network generator code has to be constructed that builds up the network from a random set of filaments. Then the energy of the configurations has to be computed and minimized to find the equilibrium configuration. In this configuration, the portion of energy stored in the bending and normal strains has to be compared to find the transition between the two regimes as a function of e.g. the density of the network.

The next step is to add elasticity to the intersections of the filaments, and verify how the potential energy and the equilibrium equations change. A wide-scale numerical investigation, including parametric studies, are then carried out to find the possible transitions between shear, bending or normal strain dominated regimes. We expect that the addition of elastic rotational energy at the hinges will lead to a shear-like elastic mode for a range of the parameters. We intend to find it numerically, and, if possible, confirm it analytically.

The third step is an application of the results for more complex networks where the filaments have different material properties (size and elastic properties). Such complex filamentary networks occur e.g. in the cytoskeleton, as discussed above.

During the doctoral work, the following steps will be followed.

1st year:

Literature review.

Governing equations of the simplest case.

Computer code to reconstruct literature results.

2nd year:

Extension of the model to elastic connections.

Wide range parametric studies.

3rd year:

Publication of the results on the effects of the elastic connections.

Study of the mechanics of the cytoskeleton.

Model building for the cytoskeleton with three types of filaments.

4th year:

Publication of the results on the complex networks containing three filament types.

Extension of the results for more, possibly random filament types.

#### **References:**

[1] M. Sheinman, C.P. Broedersz, F.C. MacKintosh: Nonlinear effective-medium theory of disordered spring networks. *Physical Review E* 85 (2012) 021801.

[2] M. Das, F.C. MacKintosh, A.J. Levine: Effective Medium Theory of Semiflexible Filamentous Networks. *Physical Review Letters* 99 (2007) 038101.

[3] D.A. Head, A.J. Levine, F.C. MacKintosh: Distinct regimes of elastic response and deformation modes of cross-linked cytoskeletal and semiflexible polymer networks. *Physical Review E* 68 (2003) 061907.

[4] D.A. Head, A.J. Levine, F.C. MacKintosh: Deformation of Cross-Linked Semiflexible Polymer Networks. *Physical Review Letters* 91 (2003) 108102.

[5] J. Wilhelm, E. Frey: Elasticity of Stiff Polymer Networks. *Physical Review Letters* 91 (2003) 108103.

[6] S. Roy, H.J. Qi: Micromechanical model for elasticity of the cell cytoskeleton. *Physical Review E* 77 (2009) 061916.

[7] D. Stamenovic, N. Wang: Stress transmission within the cell. *Comprehensive Physiology* 1 (2011) 499-524.

[8] P.A. Janmey, U. Euteneuer, P. Traub, M. Schliwa: Viscoelastic properties of vimentin compared with other filamentous biopolymer networks. *The Journal of Cell Biology* 113 (1991) 155-160.

