

## 요추 추체의 골-재형성에 대한 준분자 동력학적 접근 방법

김영은\* · 최훈희\*\*

단국대학교 기계공학과\*, 단국대학교 대학원\*\*

(2003년 8월 20일 접수, 2003년 10월 16일 채택)

### Analysis of Bone-Remodeling Process Using Quasi-molecular Dynamics

Young Eun Kim\*, Hoon Hee Choi\*\*

Dept. of Mechanical Eng.\*, Graduate School\*\*, Dankook Univ.

(Received August 20, 2003. Accepted October 16, 2003)

**요약**: 준분자 동력학 기법을 적용한 새로운 골-재형성 해석 방법을 제안 하였다. 본 연구에서는 기존의 연구에서 고려하지 못 하였던 해면골 내의 유체 압력이 골-재형성에 미치는 영향까지를 고려한 해석 모델이 제안 되었다. 골-재형성의 대상 모델로 추체 시상면상의 2-D 모델을 개발 하였으며, 약 2kN의 수직 압축력에 해당되는 1.8564mm의 일정 변위 조건에 따른 모델내의 준분자들의 재배치 과정을 해석 하였다. 수렴된 피질골 및 해면골 모델의 준 분자의 형상은 실제 추체의 모양과 일치된 형태를 보이고 있었으며 계산된 수핵 압력 변화도 기존의 in-Vitro 실험 결과와 비교적 일치 하여 본 모델의 타당성을 입증 할 수 있었다.

**Abstract**: A new method for analyzing the bone-remodeling process using quasi-molecular dynamics was proposed in this study. The effect of pressure due to bone marrow, which could not be considered in previous methods, was also considered in this method. Bone-remodeling response of the 2D vertebral body of lumbar spine to a uniaxial compressive displacement of 1.8564mm, corresponding to approximately 2kN of compressive load, was studied. Converged shape change of the cortical shell and rearrangement of cancellous bone structure matched well with a normal shape of the vertebral body. The calculated responses in the spinal elements also shows closed results compared with experimental results.

**Key words**: Bone Remodeling(골-재형성), Quasi-molecular Dynamics(준분자동역학), Lumbar Spine(요추), Vertebral Body(추체)

## 서 론

인체의 뼈는 하중 조건에 따라 최적의 조건을 유지하려고 한다. 따라서 기존의 하중 조건으로부터 변화가 발생되면 뼈는 형상 및 물성치 변화를 통하여 최적의 상태를 유지하도록 변화하고 있다. 이러한 현상을 골-재형성(bone remodeling)이라 하며 Wolff에 의해 제시된 형상가설(trjectory hypothesis)을 시작으로 이에 대한 정량적 해석을 위한 많은 시도가 진행 중에 있으며 Cowin과 Hegedus에 의해 제안된 수학적 모델인 적응탄성학(adaptive elasticity) 이론은 이에 관련된 연구들의 수학적 배경이 되고 있다[1]. 실제 인체의 뼈와 같이 복잡한

형상을 갖는 대상물에 대해서는 이 이론은 적용에 한계를 보여 최근 10여년 간은 유한요소모델을 이용한 해석 방법이 보편적으로 사용되고 있으며 골-재형성을 유발시키는 인자로 여러 종류의 기계적 신호들이 제안되어 해석되고 있다. 그러나 이와 같은 방법은 매우 효율적으로 골-재형성을 계산할 수 있음에도 불구하고 해석 대상 모델을 연속적이고 균일한 물질로 가정하여 골-재형성 현상을 시뮬레이션 하고 있다. 이에 따라 계산상 비연속적인 패치(patchwork)가 발생되어 계산 결과에 따른 신뢰도를 매우 떨어트리게 된다[2]. 최근 들어 유한요소법에다 최적화 기법 또는 제어이론을 결합 시킨 여러 해석 방법들이 제안되고 있다. 그러나 이와 같은 경우에는는 전체적인 형상 변화 보다는 제한된 특정 형태의 해면골 형상만을 대상으로 하여 해석이 시도되고 있다. 골 재형성 모델에서 가해지는 외부 하중도 지금까지는 모델 자체에 집중 또는 분포 하중을 직접적으로 가해지도록 하고 있으나 기존의 연구 결과[3]

이 연구는 2003학년도 단국대학교 대학연구비의 지원으로 연구되었음.

통신저자: 김영은, (140-714) 서울 용산구 한남동 산 8

단국대학교 기계공학과

Tel. 709-2561

E-mail. yekim@dankook.ac.kr

에 따르면 해면골 내의 골수 압력에 의한 영향도 무시 할 수가 없다. 그러나 기존의 모델로는 이와 같은 현상을 해석 시 고려한 연구 결과가 제시되어 있지 못한 상태다.

본 연구에서는 이와 같은 기존의 문제점들을 고려하여 골-재형성 과정에 대한 새로운 수학적 접근 방법인 준분자 동역학(quasi-molecular dynamics)[3-5]을 이용한 해석 방법을 제시 하고자 한다. 분자 동역학은 분자들의 포텐셜 에너지로 나타내는 분자들 간의 상호 작용력으로서, 유한요소법과 같은 거시적인 방법에 비해 실제 분자들의 미시적 움직임을 수치 해석적 방법으로 각각의 분자들의 거동을 사물레이션 하는 방법이다. 하지만 실제 크기의 재료에 분자 동역학적 해석 방법을 적용시키는 높은 처리 속도와 기억 용량으로도 아직은 미흡한 상태이다. 따라서 실제 분자들의 움직임을 나타내는 분자간의 포텐셜 에너지와 상호 작용력을 적용시키고 여러 분자들을 하나의 단위 분자처럼 묶어 준분자로 취급하여 실제 분자들의 움직임과 같은 결과를 얻을 수 있는 방법인 동시에, 분자 동역학에서의 문제점인 계산시간을 줄일 수 있는 방법으로 준분자 동역학(quasimolecular dynamics)을 채택하였다.

해석 대상으로는 요추(lumbar spine)의 추체(vertebral body)를 선택하였다.

## 모델링 방법

### 1. 준분자 동역학을 이용한 추체 및 추간판 모델링

추체는 축대칭 형태로 가정 하여 시상면(sagittal plane) 상의 추체의 중심 면에 대한 2차원 모델로 설정 하여 초기 추체의 모양을 가로 25.6mm, 세로 34.3mm 의 직사각형 형태로 선정 하였으며 해면골의 초기 형태는 다이아몬드 형태로 배치 시켰다. 추간판은 척추의 각 운동 분절의 연결을 고려하여 8.4mm의 두께를 갖도록 하였으며 윤상인대는 앞, 뒤 부분의 두께를 각각 6.9mm와 5.4mm로 하였다. 본 연구에서 사용된 준분자의 수는 피질골에 616개 해면골에 1046개 골수에 1886개가 사용되었으며 뼈의 주성분인 칼슘 분자에 대한 준분자 모델링 기법을 적용하였다. 추간판은 윤상인대와 물분자로 모델링된 수핵의 두 부분으로 나누어 각각 432개와 729개의 준분자로 모델링 하였다. 윤상인대에 대해서는 적절한 모델이 없는 관계로 물분자와 칼슘분자의 중간 값에 해당하는 최소 포텐셜 에너지 값이 적용되었다. 시물레이션 과정 중의 계산의 안정성을 고려하여 대상 모델의 위, 아래 부분에 각각 338개의 준분자 모델을 사용한 압축판 모델을 추가하였다. 따라서 모델에는 총 6546개의 준분자가 사용되었다. 그림 1은 골-재형성이 발생되기 이전의 초기 모델 형태를 보여 주고 있다.

### 2. 힘과 에너지 함수

실제 분자들이 준 분자로 대체되었기 때문에 준분자간의 작용되는 포텐셜 에너지 식은 수정된 Lennard-Jones 포텐셜 에너지 관계식이 사용되었다.

준분자간에 상호 작용되는 힘은 다음과 같이 주어진다.

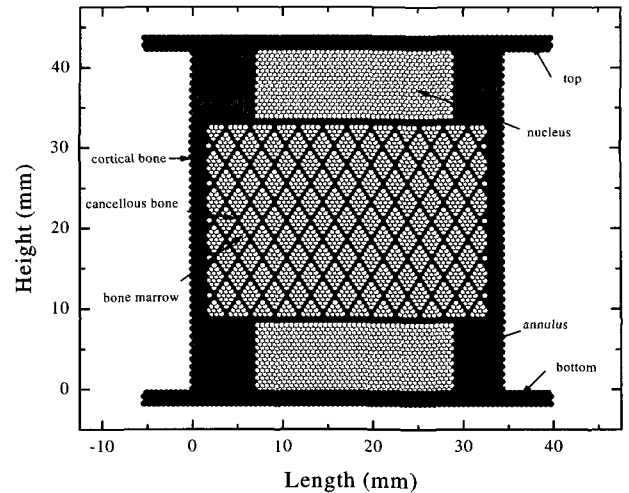


그림 1. 골-재형성이 발생하기 이전의 추체 및 추간판의 초기 준분자 모델  
Fig. 1. Initial quasi-molecular configuration of the vertebral body and disc before remodeling process

$$\vec{F} = -\nabla V_{qlf}(R) \quad (1)$$

윗 식에서 R은 두개의 준분자 사이의 거리를 의미하고 있다. 준 분자에 대한 뉴우턴 방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\vec{F}_{i,k} = m_i \frac{d^2 \vec{R}_{i,k}}{dt^2} \quad (2)$$

$m_i$ 는 준분자의 질량을 나타내고 있으며, 하첨자 k는 k번째의 시간구간(time step)을 의미하고 있다.

이에 따라 수정된 Lennard-Jones 포텐셜 에너지와 준분자간의 관계식은

$$\vec{F}_{ij,k} = \left( -\frac{G}{(R_{ij,k})^p} + \frac{H}{(R_{ij,k})^q} \right) \frac{\vec{R}_{ij,k}}{R_{ij,k}} \quad (3)$$

로 주어지며 상수 G, H 값들은 에너지 보존의 법칙으로부터 구해지게 된다.

한편,  $t_k$  시간에서 i 번째 준분자에 가해지는 총 힘의 합은

$$\vec{F}_{i,k} = \sum_{j=1, j \neq i}^n \vec{F}_{ij,k} \quad (4)$$

로 주어지게 된다.

다른 재료들이 섞여있는 혼합 재료에 대한 분자 동역학적 해석이 미비한 상태이다. 따라서 시스템의 물리적 안정성을 고려한 G와 H의 값을 구하기 위해서 피질골과 해면골에는 실

표 1. 힘 함수의 각 지수 값

Table 1. Exponent values for each force equation

	G	H	mass	$\alpha$
Cortical bone	0.377789756	8.94838922E-3	1.15737233E-10	4.95536360E-10
Cancellous bone	0.377789756	8.94838922E-3	0.631753458E-10	4.95536360E-10
Bone marrow	0.418939869	0.992307745E-3	0.631753458E-10	2.43920635E-9
Annulus	0.227692826	5.39316988E-3	0.758104150E-10	5.38557488E-10
Nucleus	0.0418939869	9.92307745E-4	8.33914564E-11	3.21975238E-9

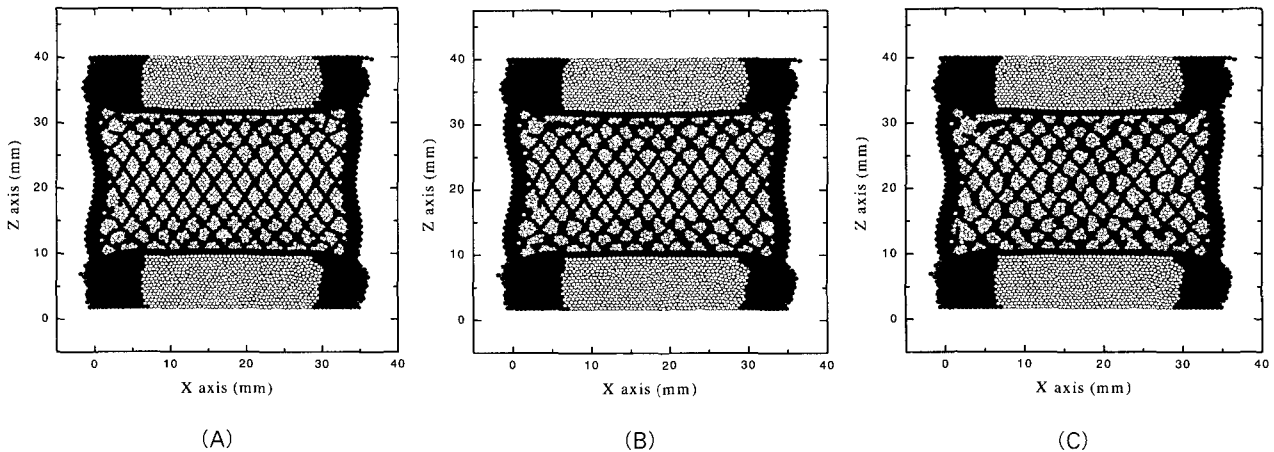


그림 2. Case 3에서 relaxation step에 따른 준분자 모델의 형태(A) 100 번째 스텝 후의 형태 (B) 300 번째 스텝 후의 형태 (C) 700 번째 스텝 후의 형태

Fig. 2. Configuration of the quasi-molecules according to relaxation step for case 3 (A) After 100th relaxation step (B) After 300th relaxation step (C) After 700th relaxation step

제 분자에 적용되는 값인  $p=7, q=13$ 의 값을 택하였으며, 각 요소에 대한 값은 표 1과 같이 선택하였다. 이와 더불어 다른 재료와의 관계에서는 Lorentz-Berthelot 혼합 법칙[5]을 적용하였다. 서로 다른 분자간의 포텐셜 에너지 함수 선택에 있어서 높은 에너지 함수를 사용하게 되면 물리적 현상과도 맞지 않을 뿐만 아니라 전체 시스템에 나쁜 영향을 미치기 때문에 본 연구에서는 작은 포텐셜 에너지 함수를 택하였다.

이렇게 구해진 준분자들 사이의 작용하는 힘은 준분자 각각에 미치는 중력에 비하여 비현실적으로 크기 때문에 표준화 상수(normalization constant),  $\alpha$ 를 도입 하였다. 이 값은 준분자 사이의 평형 거리의 두 배에 해당하는 거리에서의 힘의 값이 준분자에 작용하는 중력의 1/1000(0.1%) 미만인 값 중에 적절한 값으로 택하게 된다.

이에 따라 최종적인 준 분자 운동 방정식은 다음과 같이 주어지게 된다.

$$m_i \frac{d^2 \vec{R}_{i,k}}{dt^2} = \alpha \times \sum_{j=1}^n \left( -\frac{G}{(R_{j,k})^p} + \frac{H}{(R_{j,k})^q} \right) \frac{\vec{R}_{j,k}}{R_{j,k}} \quad (6)$$

위의 식과 같이 주어지는 뉴우턴 방정식은 leap-frog 알고리즘[3]을 적용하여 해를 구하였다.

### 3. 시뮬레이션 조건

본 연구에서는 추체에 가해지는 힘의 크기를 2000N으로 설정 하였으며, 계산상의 안정을 위해 실제 운동 분절에서 발생 되는 변위량 1.8564 mm의 일정 변위 조건으로 대치하여 하중 조건을 설정 하였다. time step  $\Delta t$ 는  $10^{-3}$  sec로 하였으며, 경계 조건에서 압축 변위를 주는 비율은 준분자 간의 높이에 대하여 전체 시스템이 안정적인 0.4% 이하의 일정 변위를 가하였다.

골-재형성 과정은 다음의 세 가지 경우로 나누어 각기 해석 하였다.

#### Case 1

전체 변위를 가하는 동안 매 스텝마다 relaxation(각 준분자 사이의 에너지가 평형 상태로 도달 할 때까지 반복 계산되는 과정)을 주는 방법으로서 홀수 스텝에서만 변위를 가하였다. 따라서 전체 변위를 1.8564mm가 되게 하였고, 전체 스텝 수를 103 스텝으로 하였다.

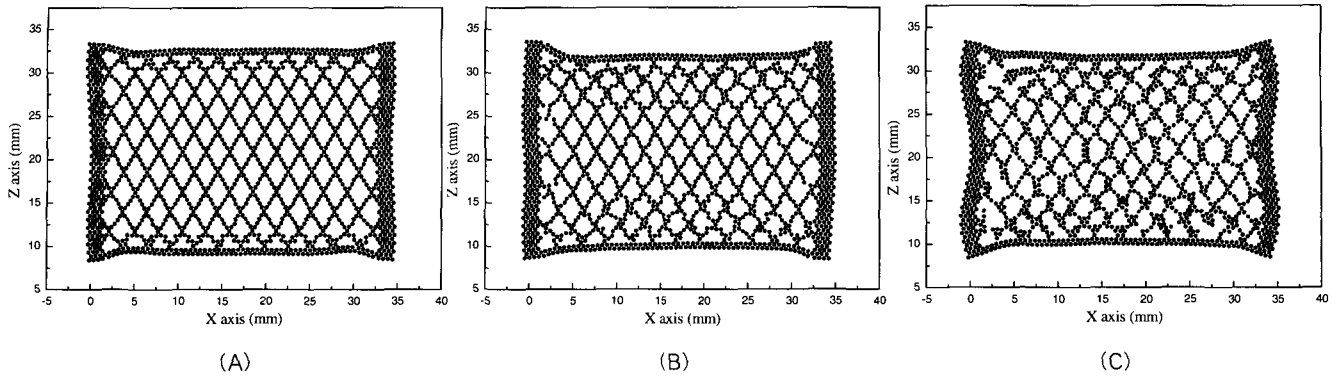


그림 3. 추체의 최종 형태 (A) 1번째 경우 (B) 2번째 경우 (C)3번째 경우

Fig. 3. Final shape of the vertebral body (A) case 1 (B) case 2 (C) case 3

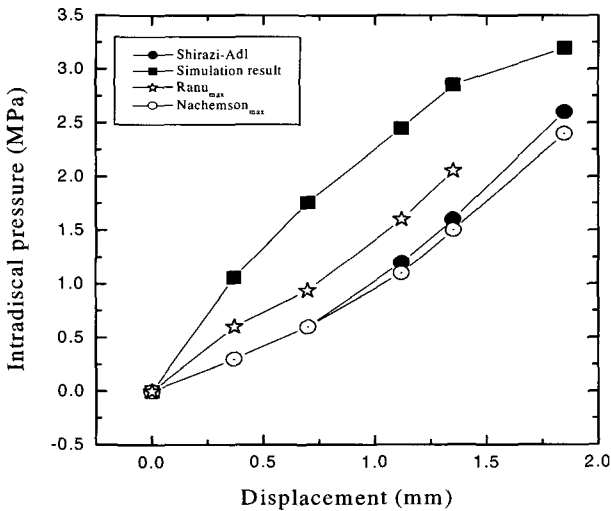


그림 4. 수핵 내의 압력 변화

Fig. 4. Intradiscal pressure variation

**Csae 2**

$2 \times 10^2$ 스텝씩 나누어 일정 변위를 주는 경우이다. 즉,  $2 \times 10^2$ 스텝 동안 일정 변위를 가한 뒤에 피질골의 형상을 고정시키고 해면골과 골수를 102스텝동안 relaxation 시킨 후 다시 전체 준분자에 일정 변위인  $2 \times 10^2$ 스텝 동안 주는 경우를 같은 방법으로 5회 반복토록 하였다.

**Case 3**

피질골에 외력이 가해진 상태에서 골-재형성이 발생되도록 한 후 피질골의 형상을 고정하고, 해면골과 골수에서만 relaxation이 발생 되도록 하였다.

**결과 및 토의**

그림 2는 case 3의 경우에 대하여 골-재형성이 이루어져 가는 과정을 차례로 보여주고 있다. 먼저 피질골에서 형태 변화가 발생 되도록 한 후 피질골의 모양을 고정 한 후 해면골 내

표 2. 파라메타 G, H, 질량 및  $\alpha$ 의 값

Table 2. G, H, mass and  $\alpha$  parameter values

	G	H
Cortical & Marrow	0.125805879	2.97985837E-3
Cortical & Annulus	0.293291715	6.94695496E-3
Cortical & Nucleus	0.125805880	2.97985837E-3
Marrow & Annulus	0.0976676081	2.31337075E-3
Marrow & Nucleus	0.0418939869	9.92307745E-4
Annulus & Nucleus	0.0976676081	2.31337075E-3

에서만 relaxation을 반복 시켜 해면골과 골수의 준분자들 사이의 평형 상태를 이루도록 하였다. 이와 같이 평형 상태를 이룬 준 분자의 배치 모양을 골-재형성이 완료된 상태로 설정하였다. 한편 case 1, 2의 경우에는 해석 결과 그림 3의 (A),(B)에서 볼 수 있듯이 계산이 반복됨에 따라 원래의 형상으로 돌아가려고 하는 경향을 보이고 있어 이와 같은 설정으로는 골-재형성 현상을 해석 할 수 없음을 알 수 있었다.

따라서 기존의 골-재형성 가설에 따라 준분자 동역학을 적용할 경우 에서는 먼저 형상 재형상(surface remodeling)을 설정하고 밀도-재형성(internal remodeling)을 수행 하는 방법이 적절함을 보이고 있다. 준분자 동역학 방법을 적용하여 계산된 피질골의 형상은 직사각형 형태에서 실제 추체의 형상과 유사한 장구 형태로 모양이 바뀐 형상을 보여 주고 있다. 한편 해면골의 형태는 그림 3의 (C)에서 볼 수 있듯이 종판(end-plate)의 바로 위, 아래 부분은 초기 다이아몬드 형태로 배열된 형태로부터 수직 형태로 바뀌게 되고 추체의 중앙 부분에서도 원래 배치된 형태로부터 다소간 수직 형태로 모양을 바꾸고 있다. 추체 중간 부분의 양 옆 부분은 원래 모양과 유사한 모양을 유지하고 있었다. 추체 해면골의 경우 수핵의 바로 윗부분에 가장 큰 수직 응력이 발생되기 때문에 이와 같은 해면골의 배치는 수직 압축력을 가장 효과적으로 견딜 수 있게 된다. 반면에 추체의 양 끝부분에서는 연결이 다소 느슨해진 형태를 보이고 있어 이곳의 상대적 압축 강도는 매우 떨어질 것으로 예측된다. 이와 같은 해면골 강도의 불균일성은 기존의 여러

표 3. 두 물질의 경계에서의 G, H 의 값  
Table 3. G, H parameter values at interface

	cortical	cancellous	marrow	annulus	nucleus
cortical	$\rho=7, \alpha=13$	$\rho=3, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$	$\rho=5, \alpha=9$	$G=0, \alpha=7$
cancellous	$\rho=3, \alpha=5$	$\rho=3, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$	$\rho=3, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$
marrow	$G=0, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$	$\rho=3, \alpha=5$
annulus	$\rho=5, \alpha=9$	$\rho=3, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$	$\rho=5, \alpha=9$	$G=0, \alpha=5$
nucleus	$G=0, \alpha=7$	$G=0, \alpha=5$	$\rho=3, \alpha=5$	$G=0, \alpha=5$	$G=0, \alpha=7$

연구결과에서 보고 되고 있다. Cody 등[6]에 의하면 추체 해면골 중 가장 밀도가 높은 부분은 추체의 가장 아래 부분 중 약간 뒷쪽에 위치한 부분이라 하였다. Keller 등[7]도 역시 추체의 수직 압축강도가 추체 내의 위치에 따라 달라짐을 보고하고 있다. 이들의 연구 결과에 의하면 추체 중심에서 약간 뒤쪽 부분의 압축강도가 추체의 구석 부분에 비해 두드러지게 차이가 나고 있음을 보여 주고 있다. Goel 등[8]에 의한 유한 요소 모델에 의한 연구 결과에서도 이와 유사한 결과를 보이고 있으나 인접한 요소들 간의 탄성 계수 차이가 너무 커서 계산 결과에 대한 신뢰도가 매우 떨어지고 있다. 이와 같은 결과는 기존의 유한요소 모델을 이용한 해석 결과에서 공통적으로 발생되고 있는 문제이기도 하다.

한편 본 연구에서 가한 수직 압축력에 대한 추간판 내의 변화를 기존의 in-Vitro 실험 결과와 비교 하여 본 연구 결과에 대한 타당성을 다시 한번 확인 하였다. 수직 방향으로의 변위를 가했을 경우 발생하는 수핵 내의 압력 변화를 그림 4에서 보여주고 있다. 기존의 실험 결과에 비교하여 약간 큰 값이 발생 하였으나 전체적으로 유사한 경향을 보이고 있었다.

### 결 론

준분자 동력학을 이용한 골-재형성을 추체 모델에 적용시켜 해석 한 결과 만족 할만한 결과를 얻을 수 있었다. 모델은 시상면상의 2차원 형상을 대상으로 하였으며 직사각형 형태의 초기 형상으로부터 최적화된 최후의 형상으로 변화 하였으며 해면골의 현상 변화도 실제 추체 해면골의 분포 형태와 유사한 형태로 재배치하고 있었다. 준 분자 동력학을 이용한 골 재형성 해석 시 먼저 피질골의 형상 재형성을 발생 시킨 후 relaxation 방법에 의한 해면골준분자의 위치 재배치를 이루는 방법이 가장 효과적임을 알 수 있었다.

본 연구에서 최초로 제안한 준분자 동력학을 이용한 골-재형성 해석 방법은 기존의 방법에서 고려하지 못했던 해면골 내의 유체 성분(bone marrow)에 의한 영향까지도 고려 할 수 있었다.

### 참 고 문 헌

1. K. Firoozbakhsh, and S.C. Cowin, "Devolution of inhomogeneities in bone structure-predictions of adaptive elasticity theory", J. of Biomechanics, Vol. 102, pp.287-293, 1980
2. M.G. Mullender, R. Huiskes, and H. Weinans, "A physiological approach to the simulation of bone remodeling as a self-organization control process", J. of Biomechanics, Vol. 27, pp.1389-1394, 1994
3. D. Greenspan, Quasimolecular modeling, World Scientific, Singapore, 1991
4. M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer simulation of liquids, Oxford University Press, 1989
5. D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, Cambridge University Press, 1995
6. D.D. Cody, E.B. Brown, and M.J. Flynn, "Regional bone density distribution in female spines(T6-L4)", 38th Annual Meeting, Orthopedic Research Society, Feb. 17-20, p.449, 1992
7. T.S. Keller, T.H. Hannson, A.C. Abram, D.M. Spengler, and M.M. Panjabi, "Regional variation in the compressive properties of lumbar vertebral trabeculae: Effect of disc degeneration", Spine, Vol. 14, pp.1012-1019, 1989
8. V.J. Goel, S.A. Ramirez, W. Gong, and L.G. Gilberton, "Cancellous bone Young's modulus variation within the vertebral body of a ligamentous lumbar spine-Application of bone adaptive remodeling concepts", J. of Biomechanical Engineering, Vol. 117, pp.266-271, 1995