

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

Thiago André Carniel

**INVESTIGAÇÕES NUMÉRICAS MULTIESCALA DO
COMPORTAMENTO VISCOELÁSTICO DE TECIDOS
TENDINOSOS**

Florianópolis
2017

Thiago André Carniel

**INVESTIGAÇÕES NUMÉRICAS MULTIESCALA DO
COMPORTAMENTO VISCOELÁSTICO DE TECIDOS
TENDINOSOS**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Eduardo Alberto Fancello, D.Sc.

Florianópolis
2017

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Carniel, Thiago André
Investigações numéricas multiescala do
comportamento viscoelástico de tecidos tendinosos /
Thiago André Carniel ; orientador, Eduardo Alberto
Fancello, 2017.
165 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós
Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2017.

Inclui referências.

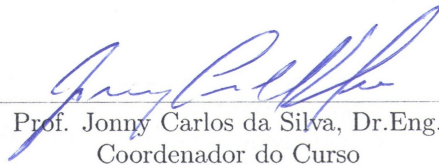
1. Engenharia Mecânica. 2. Modelagem
constitutiva. 3. Multiescala e homogeneização. 4.
Análise de elementos finitos. 5. Tendão. I.
Fancello, Eduardo Alberto. II. Universidade Federal
de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica. III. Título.

Thiago André Carniel

**INVESTIGAÇÕES NUMÉRICAS MULTIESCALA DO
COMPORTAMENTO VISCOELÁSTICO DE TECIDOS
TENDINOSOS**

Esta Tese foi julgada adequada para obtenção do Título de “Doutor em Engenharia Mecânica” e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Florianópolis, 24 de agosto de 2017.



Prof. Jonny Carlos da Silva, Dr.Eng.
Coordenador do Curso

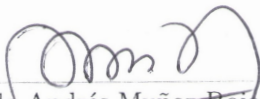
Banca Examinadora:



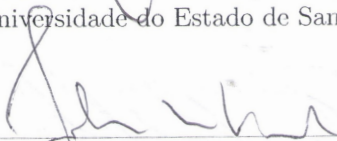
Prof. Eduardo Alberto Fancello, D.Sc.
Presidente - Orientador
Universidade Federal de Santa Catarina



Prof. Pablo Javier Blanco, D.Sc.
Relator
Laboratório Nacional de Computação Científica



Prof. Pablo Andrés Muñoz-Rojas, Dr.Eng.
Universidade do Estado de Santa Catarina



Prof. Jakson Manfredini Vassoler, Ph.D.
Universidade Federal do Rio Grande do Sul



Prof. Paulo de Tarso Rocha de Mendonça, Ph.D.
Universidade Federal de Santa Catarina



Prof. Clovis Sperb de Barcellos, Ph.D.
Universidade Federal de Santa Catarina

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar gostaria de agradecer ao Prof. Eduardo Alberto Fancello por sua orientação e essencial contribuição a minha formação pessoal e profissional. Agradeço, também, aos professores membros da banca examinadora por aceitarem participar da defesa desta tese.

Agradeço aos colegas, professores e funcionários do Departamento de Engenharia Mecânica, do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e do Grupo de Análise e Projeto Mecânico pelo convívio dos últimos anos.

Em especial, agradeço a todos meus familiares, principalmente aos meus pais, Sr.^a Nádia e Sr. Tadeo, ao meu irmão Giovani e a minha esposa Beatriz pelo apoio incondicional durante o período de realização deste trabalho.

Por fim, agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro concedido por meio de bolsa de estudos.

Give yourself to the Dark Side.

Darth Vader

RESUMO

Os tendões são materiais multi-hierárquicos cujos distintos arranjos geométricos dos seus constituintes resultam em uma complexa hierarquia estrutural, conferindo ao tecido comportamentos não lineares, anisotrópicos e multifásicos particulares. Entretanto, pouco se sabe sobre como os esforços mecânicos são transmitidos e quais os principais micromecanismos dissipativos entre as diferentes escalas espaciais e fases materiais do tecido. Motivada por esses fatos, a presente tese emprega uma teoria multiescala baseada em elementos de volume representativo (EVR) e associada ao método dos elementos finitos com o objetivo de investigar o comportamento micromecânico viscoelástico dos fascículos do tendão em regime fisiológico de deformação. Nesse contexto, modelos de viscoelasticidade em deformações finitas foram desenvolvidos para as fibras, fibrilas e células dos tendões, e formulados em um quadro constitutivo variacional. Os conjuntos de parâmetros constitutivos de cada modelo foram estimados com base em experimentos de tração e indentação realizados com auxílio de microscopia de força atômica reportados na literatura. A geometria do EVR foi proposta com base em dados obtidos de análises tridimensionais de microscopia eletrônica obtidos da literatura. Os principais resultados obtidos dos experimentos numéricos multiescala suportam as seguintes hipóteses sobre os tecidos tendinosos: as fibrilas contribuem significativamente não somente com a rigidez dos tendões, mas também com a dissipação energética, principalmente em altas taxas de deformação; as células localizadas entre as fibras de colágeno não afetam consideravelmente a rigidez e dissipação energética macroscópica; a cinemática das fibras explica os grandes valores de deformação transversal e perda de fluídos observados experimentalmente em testes de tração. Além disso, essa cinemática pode caracterizar um importante mecanismo de mecanotransdução celular, impondo às células consideráveis deformações locais compressivas e cisalhantes transversalmente às fibras; devido aos consideráveis níveis de deformação verificados na matriz celular, é plausível que as células possam estar sujeitas a mecanismos de dano mecânico, influenciando diretamente na homeostase do tecido.

Palavras-chave: Tendão, Multiescala, Homogeneização, Viscoelasticidade, Deformações finitas, Atualização constitutiva variacional, Método dos elementos finitos

ABSTRACT

Tendons are multihierarchical biological tissues that present particular nonlinear, anisotropic and multiphasic mechanical behaviors. However, many aspects to the intrinsic way the mechanical efforts are transmitted along this complex material and which, among the different material phases, are the most responsible for dissipative mechanisms are still open issues. Motivated by these facts, a multiscale finite element framework based on representative volume elements (RVE) was set up to investigate the multiscale viscoelastic behavior of tendon fascicles under physiological strain amplitudes. To this end, particular finite strain viscoelastic models were developed for tendon fibers, fibrils and cells in a variational constitutive framework. In addition, the corresponding material parameters were identified with aid of atomic force microscopy experiments. The geometry of the RVE was consistently proposed based on data provided by tridimensional electron microscopy. The numerical findings support the following hypotheses about tendinous tissues: fibrils significantly contribute not only to the stiffness but also to the energetic dissipation under high strain rates; cells located within fascicles do not affect considerably the stiffness and the macroscopic energetic dissipation; the local kinematic of fibers explain the large transverse deformations and loss of fluids observed experimentally under tensile tests; the cellular matrix experience considerable local compressive and shear strains transversely to fibers and may be susceptible to localized mechanical damage mechanisms.

Keywords: Tendon, Multiscale, Homogenization, Viscoelasticity, Finite strain, Variational constitutive updates, Finite element method

LISTA DE FIGURAS

1	Hierarquia estrutural do tendão.	38
2	Ensaio cíclicos realizados em tendões flexor digital profundo de suínos. Gráficos de força versus deslocamento para um ensaio tipo dente de serra sob duas taxas de deslocamento. Dados experimentais reproduzidos de Wilchez (2012)	40
3	Representação dos domínios da macroescala e da microescala.	49
4	Curvas de tração em (a) tendões, (b) fascículos e (c) fibrilas. (d) Gráficos de área para os limites inferiores e superiores das curvas apresentadas em (a), (b) e (c). Vale enfatizar que o gráfico (d) apresenta apenas 3 cores, onde níveis de transparência entre as áreas foram utilizados visando facilitar a visualização.	60
5	(a) Representação de um EVR do fascículo do tendão. (b) Matriz celular. (c) Fibras de colágeno. As fibras laterais do EVR foram omitidas para facilitar a visualização. Os dados experimentais referentes à geometria da hélice da fibra e frações volumétricas das fases materiais foram obtidas de Kalson et al. (2015)	61
6	(a) Representação esquemática do modelo reológico da fibra. (b) Decomposição multiplicativa do gradiente de deformação.	66
7	Elementos de volume representativos da fibra e da fibrila e respectivos modelos constitutivos microestruturais.	68
8	Modelo em elementos finitos empregado para a simulação dos testes de nanoindentação em células de fibroblasto. (a) Vista em perspectiva mostrando o indentador e a amostra numérica em simetria de um quarto. (b) Vista superior da amostra enfatizando o refino de malha na região de indentação.	80
9	Comparação entre os resultados numérico e experimentais obtidos dos ensaios de nanoindentação em células de fibroblasto. Os dados experimentais foram obtidos de Nawaz et al. (2012) . Os parâmetros constitutivos são apresentados na Tabela 5.	81

10	Sensibilidade dos resultados numéricos em relação à resposta compressível do modelo das células. Os parâmetros constitutivos relacionados a essas curvas são apresentados na Tabela 5.	82
11	Campo de deslocamentos (a) e medida de von-Mises da tensão de Cauchy (b) no instante de maior penetração do indentedor para simulação C4.	83
12	(a) Curvas monotônicas experimentais de nanoindentação reproduzidas através do modelo de Hertz. (b-d) Predições do modelo de elementos finitos para três níveis de rigidez e histerese das células. Os parâmetros constitutivos relacionados a essas curvas são apresentados na Tabela 6.	86
13	Ilustração dos ensaios de tração em fibrilas realizados com auxílio de microscopia de força atômica na direção axial às moléculas de colágeno. Mais detalhes em Svensson et al. (2010b).	87
14	Comparação entre as curvas numéricas e experimentais em ensaios uniaxiais de tração em fibrilas ilustrados na Figura 13. Os dados experimentais foram obtidos de Svensson et al. (2010b).	87
15	(a-b) Modelo de elementos finitos do ensaio de nanoindentação transversal às fibras utilizando o indentedor de Berkovich e considerando a amostra em meia simetria. (c) Detalhes do refino de malha realizado na região de indentação.	89
16	Gráficos de força-deslocamento para os ensaios de nanoindentação em fibras na direção transversal às fibrilas. As simulações numéricas consideraram as fibrilas orientadas na direção X e Y segundo o eixo referencial da Figura 15b. A linha tracejada representa a resposta numérica considerando somente o modelo das matrizes da fibra. A curva experimental foi obtida de Aifantis, Shrivastava e Odegard (2011).	90
17	Campo de deslocamentos (a) e medida de von-Mises da tensão de Cauchy (b) para o instante de maior penetração do indentedor.	91
18	Elemento de volume representativo do fascículo discretizado via elementos finitos (EVR 2 da Figura 19).	96
19	Elementos de volume representativo (EVR) propostos para o fascículo do tendão.	99

20	Curvas tensão-alongamento homogeneizadas na direção axial às fibras para os três EVRs mostrados na Figura 19. Os dados experimentais 1, 2 e 3 foram obtidos de Legerlotz, Riley e Screen (2010), Haraldsson et al. (2005) e Svensson et al. (2010a), respectivamente.	100
21	Tensões homogeneizadas axial às fibras 11 e transversais 22 e 33 relativas ao EVR 2.	100
22	Influência da matriz celular nas respostas homogeneizadas do fascículo sob ensaios cíclicos uniaxiais em taxas de deformação de engenharia de (a) 10 %/s, (b) 1 %/s e (c) 0,1 %/s. Os parâmetros constitutivos da matriz celular S1, S3, S7 e S9 são listados na Tabela 6.	102
23	Sensibilidade dos resultados homogeneizados do fascículo em relação à fração volumétrica de fibrilas (FVF).	103
24	Curvas tensão-alongamento homogeneizadas considerando dois casos: (a) comportamento viscoelástico de todas as fases materiais; (b) somente a contribuição viscoelástica unidirecional das fibrilas e demais fases elásticas. (c) Comparação do percentual de histerese homogeneizado das curvas de (a) e (b). (d) Contribuição percentual da resposta viscoelástica unidirecional das fibrilas na dissipação total do fascículo.	105
25	Cinemática das fibras em uma seção transversal do EVR em função do nível de alongamento axial macroscópico. Cada segmento de reta, mostrado na seção indeformada, conecta o nó central da fibra do meio com os nós centrais das fibras adjacentes.	108
26	Deformação local de engenharia $\varepsilon_{eng}^{f/f}$ referente aos segmentos de reta mostrados na Figura 25 em função da deformação macroscópica axial às fibras ε_{eng1} . As equações de reta foram ajustadas para as curvas superior e inferior.	108
27	Deformações logarítmicas axial e transversais da fibra central do EVR para $\lambda_1 = 1,04$	109
28	Deformações logarítmicas axial e transversais da matriz celular central do EVR para $\lambda_1 = 1,04$	109
29	Deformação da malha de uma seção da matriz celular localizada no interior da EVR do fascículo.	110
30	Deformação unidirecional das fibrilas. As linhas representam as direções das fibrilas, em cada ponto de integração, no interior da fibra.	111

31	Dissipações viscosas em três instantes de deformação macroscópica.	113
32	Geometrias referenciais (arestas) e deformadas do EVR do fascículo quando submetidas a ensaios de cisalhamento simples com 25% de deformação macroscópica.	116
33	Respostas homogeneizadas para os três planos cisalhantes apresentados na Figura 32.	116
34	Ilustração dos ensaios de compressão semiconfinada conduzidos por Böl et al. (2015).	125
35	Comparação entre os resultados numéricos e experimentais obtidos do procedimento de identificação de parâmetros para os testes de compressão semiconfinada conduzidos por Böl et al. (2015).	137
36	Ensaio uniaxiais de tração em tecidos tendinosos. Os tipos de tendões e técnicas de medição são mostrados na Tabela 2. Os parâmetros constitutivos e relativas curvas experimentais simuladas são listados na Tabela 10.	138

LISTA DE TABELAS

1	Principais escalas estruturais de colágeno dos tendões e suas respectivas fases materiais microestruturais.	59
2	Tipo de tendão e técnica de medição empregada nos ensaios mostrados na Figura 4a.	63
3	Tipo de fascículo e técnica de medição empregada nos ensaios mostrados na Figura 4b.	64
4	Tipo de fibrila e técnica de medição empregada nos ensaios mostrados na Figura 4c.	64
5	Parâmetros constitutivos das células de fibroblasto referentes às curvas numéricas apresentadas nas figuras 9 e 10.	82
6	Parâmetros constitutivos das células de fibroblasto referentes às curvas numéricas apresentadas na Figura 12.	85
7	Parâmetros constitutivos unidirecional da fibrila referentes às curvas do modelo numérico apresentadas na Figura 14.	88
8	Parâmetros constitutivos do modelo das matrizes da fibra referentes às simulações apresentadas na Figura 16.	91
9	Parâmetros constitutivos referentes às curvas numéricas mostradas na Figura 35.	138
10	Parâmetros constitutivos do modelo ψ_f referentes às curvas numéricas mostradas na Figura 36.	139

LISTA DE SÍMBOLOS

Variáveis

α	Conjunto de variáveis internas
σ	Tensor tensão de Cauchy
ε	Deformação logarítmica
x	Ponto espacial da macroescala
y	Ponto espacial da microescala
γ	Multiplicador de Lagrange
λ	Alongamento
C_x	Módulo tangente referencial
\mathbb{I}_{sym}	Tensor identidade de quarta ordem simétrico
\mathbf{A}	Tensor estrutural
\mathbf{C}	Tensor direito de Cauchy-Green
\mathbf{d}	Taxa de deformação
\mathbf{E}	Deformação de Green-Lagrange
\mathbf{F}	Gradiente de deformação
\mathbf{I}	Tensor identidade de segunda ordem
\mathbf{l}	Gradiente de velocidade
\mathbf{m}	Vetor referente à direção das fibrilas
\mathbf{P}	Primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff
\mathbf{S}	Segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff
\mathbf{T}	Força termodinâmica conjugada às variáveis internas
\mathbf{U}	Tensor alongamento direito
\mathbf{u}	Deslocamento
\mathbf{X}	Ponto referencial da macroescala
\mathbf{Y}	Ponto referencial da microescala

\mathcal{D}	Dissipação interna
\mathcal{K}	Espaço dos deslocamentos admissíveis
\mathcal{L}	Funcional Lagrangiano
\mathcal{P}	Potencial em taxas
\mathcal{P}^{red}	Potencial em taxas reduzido
\mathcal{P}_{inc}	Potencial incremental
$\mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{red}}$	Potencial incremental reduzido
\mathcal{V}	Espaço dos deslocamentos virtuais admissíveis
ν_f	Fração volumétrica de fibrilas
Ω	Domínio de um corpo material
$\partial\Omega$	Contorno de um corpo material
ϕ	Potencial de dissipação em função das taxas das variáveis internas
ψ	Energia livre de Helmholtz
φ	Potencial de dissipação em função da taxa de deformação total
ϑ	Parâmetro de integração do método de Euler
Υ	Potencial de dissipação total
A	Área referencial
a	Área espacial
J	Jacobiano volumétrico
t	Tempo
V	Volume referencial
v	Volume espacial

Operadores

∇	Gradiente
Δ	Incremento

$\dot{(\cdot)}$	Derivada temporal (taxa)
$(\cdot)^{-1}$	Inversa
$(\cdot)^T$	Transposta
$\overset{\circ}{(\cdot)}$	Aproximação discreta da derivada temporal
arg	Argumento
det (\cdot)	Determinante
d	Derivada total
inf	Ínfimo
skew (\cdot)	Parte antisimétrica
stat	Estacionário
sym (\cdot)	Parte simétrica
tr (\cdot)	Traço
∂	Derivada parcial

Sobrescritos e Subscritos

$(\cdot)^\infty$	Variável independente do tempo
$(\cdot)^e$	Referente à parte elástica
$(\cdot)^{\text{opt}}$	Ponto de ótimo
$(\cdot)^v$	Referente à parte viscosa
$(\cdot)_\mu$	Referente à microestrutura
$(\cdot)_{n+1}$	Variável no incremento atual
$(\cdot)_n$	Variável no incremento convergido
$(\cdot)_c$ ou $(\cdot)^c$	Referente às células
$(\cdot)_d$	Referente à parte dissipativa
$(\cdot)_f$ ou $(\cdot)^f$	Referente às fibrilas
$(\cdot)_m$ ou $(\cdot)^m$	Referente à matriz da fibra

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	29
1.1	Contexto	29
1.2	Motivação	30
1.3	Objetivos	31
1.4	Contribuições e Ineditismo	31
1.5	Organização do Documento	33
2	MORFOLOGIA E COMPORTAMENTO MECÂNICO DOS TENDÕES	37
2.1	Morfologia e Hierarquia Estrutural	37
2.2	Comportamento Mecânico	39
2.3	Teorias Microestruturais de Transmissão de Esforços e Viscosidade	40
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	43
3.1	Formulação de Modelos Constitutivos segundo uma Abordagem Variacional	43
3.1.1	Formulação Mecânica no Contínuo	44
3.1.2	Formato Incremental	46
3.2	Teoria Multiescala em Deformações Finitas	48
3.2.1	Admissibilidade Cinemática	49
3.2.2	Classes de Modelos Multiescala	52
3.2.3	Princípio de Hill-Mandel da Macro-homogeneidade	53
3.2.4	Implementação do Problema Incremental em Multiescala	56
4	ESCOLHA DA ESCALA ESTRUTURAL PARA AS ANÁLISES EM MULTIESCALA	59
5	MODELAMENTO CONSTITUTIVO VARIACIONAL DAS FASES MICROESTRUTURAIS	65
5.1	Modelo para as Fibras de Colágeno	65
5.1.1	Cinemática	65
5.1.2	Considerações sobre o Modelo Fenomenológico das Fibras	67
5.1.3	Potencial Incremental e Regra de Atualização das Variáveis Internas	70
5.1.4	Algoritmo de Atualização Variacional	72
5.2	Modelo para a Matriz Celular	76

5.3	Escolha de Potenciais Viscoelásticos Específicos	76
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	79
6.1	Identificação dos Parâmetros Constitutivos dos Modelos Microestruturais	79
6.1.1	Resposta da Matriz Celular	79
6.1.2	Resposta Unidirecional da Fibrila	85
6.1.3	Resposta da Fibra Transversal às Fibrilas	88
6.2	Experimentos Numéricos Multiescala	92
6.2.1	Protocolo dos Ensaios em Multiescala	93
6.2.2	Geometria e Discretização do EVR	94
6.2.3	Condições de Contorno Multiescala e Representa- tividade do EVR	97
6.2.4	Influência da Matriz Celular na Resposta do Fas- cículo	101
6.2.5	Influência da Fração Volumétrica de Fibrilas na Resposta do Fascículo	102
6.2.6	Contribuição da Resposta Unidirecional das Fi- brilas na Dissipação do Fascículo	103
6.2.7	Análises Micromecânicas no EVR do Fascículo	106
6.2.8	Comportamento Anisotrópico em Cisalhamento Simples	114
7	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	119
7.1	Conclusões	119
7.2	Trabalhos Futuros	121
8	DIGRESSÃO: UM MODELO HIPERELÁSTICO OR- TOTRÓPICO ACOPLADO APLICADO AO COM- PORTAMENTO MECÂNICO DE TENDÕES	123
8.1	Introdução	123
8.2	Comportamento Mecânico Experimental	125
8.2.1	Ensaios de Cisalhamento	125
8.2.2	Ensaios de Compressão Semiconfinada	125
8.2.3	Ensaios de Tração	127
8.3	Modelamento Fenomenológico	127
8.3.1	Modelo Ortotrópico Acoplado	128
8.3.2	Modelo Unidirecional	131
8.4	Tensão e Módulo Tangente Material	131
8.5	Identificação dos Parâmetros Constitutivos	134
8.5.1	Ensaios Numéricos	134
8.5.2	Estratégia de Otimização	134

8.6	Resultados	136
8.7	Discussões e Considerações Finais	139
REFERÊNCIAS		141
APÊNDICES		155
A	ALGORITMO CONSTITUTIVO VARIACIONAL	155
A.1	Solução do Problema Constitutivo Variacional Referente à Matriz	155
A.1.1	Condição de Estacionaridade	155
A.1.2	Solução via Newton-Raphson	156
A.2	Solução do Problema Constitutivo Variacional Referente às Fibrilas	158
A.2.1	Estratégia de Solução	158
A.2.2	Condição de Estacionaridade	159
A.2.3	Solução via Newton-Raphson	159
B	MÓDULO TANGENTE MATERIAL	161
B.1	Contribuição da Matriz	161
B.2	Contribuição das Fibrilas	163

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contexto

Os tendões são materiais biológicos especializados em transmissão de esforços mecânicos. Esses tecidos apresentam uma composição interna multifásica (diferentes fases materiais) cuja distribuição é estruturada ao longo de diversas escalas espaciais. Os distintos arranjos geométricos e frações volumétricas dos seus constituintes resultam em uma complexa hierarquia estrutural. Essa, por sua vez, segue um padrão de adaptação às solicitações mecânicas macroscópicas, conferindo ao tecido comportamentos mecânicos particulares.

No campo de pesquisa de tecidos tendinosos, muitas questões clínicas motivam o desenvolvimento de novas técnicas numéricas e experimentais no estudo da biomecânica dos tendões. Um exemplo disso é o crescente número de pesquisas relacionadas à engenharia de tecidos tendinosos, uma vez que mais de 800.000 pessoas por ano necessitam de assistência médica devido à rupturas ou patologias de tendões e ligamentos (Lim e Temenoff, 2009).

A engenharia de tecidos é uma área interdisciplinar que tem por objetivo aplicar princípios e métodos da engenharia, química e biologia visando o desenvolvimento de tecidos biológicos funcionais (Langer e Vacanti, 1993). Nesse campo de pesquisa verificam-se diversas abordagens para o projeto laboratorial de tecidos. Como exemplos, citam-se o emprego de *scaffolds* e biorreatores. Os *scaffolds* são estruturas que servem de substrato à cultura de células e juntamente com os biorreatores, têm por objetivo emular *in vitro* o ambiente fisiológico (bioquímico e biomecânico) encontrado pelas células *in vivo*.

Nesse contexto introduz-se o conceito de mecanotransdução celular, o qual será referenciado com frequência durante o manuscrito. Sucintamente, a mecanotransdução é um ramo da mecanobiologia que estuda os mecanismos celulares que convertem os esforços mecânicos em sinais bioquímicos. Tais processos de sinalização induzem as células a produzirem componentes específicos da matriz extracelular, os quais levam à adaptação do tecido às solicitações mecânicas (Wang, 2006; Lavagnino et al., 2015). Portanto, o conhecimento dos campos cinemáticos e cinéticos impostos às células em seu ambiente biomecânico, torna-se uma informação relevante à mecanotransdução celular e, conseqüentemente, à engenharia de tecidos tendinosos.

Especificamente em um contexto multiescala, percebe-se que estudos sobre os comportamentos mecânicos dos constituintes microestruturais dos tendões e suas interações ainda é limitado. Embora muitos avanços tecnológicos mostram-se presentes nessa área, pouco sabe-se sobre como os esforços mecânicos são transmitidos e quais os principais micromecanismos dissipativos entre as diferentes escalas espaciais e fases materiais do tecido. Em vista disso, é notório que muitas questões ainda não estão claras nessa área da biomecânica, tornando-a um campo aberto à pesquisas, sejam essas experimentais ou numéricas.

1.2 Motivação

Com base no levantamento bibliográfico realizado na presente tese, percebeu-se que não há consenso na literatura sobre quais são os principais micromecanismos dissipativos, de transmissão de esforços e a contribuição das fases microestruturais nas respostas mecânicas macroscópicas dos tendões. Essas evidências refletem as limitações tecnológicas em avaliar experimentalmente as respostas mecânicas das fases materiais microestruturais (e suas interações) ao longo da hierarquia do tecido, pois muitas encontram-se em escalas micro ou nanométricas.

Em vista desses fatos, as teorias de multiescala associadas ao método dos elementos finitos fornecem um quadro teórico-numérico adequado à análise dos comportamentos mecânicos dos tendões. Essas investigações numéricas visam auxiliar a compreensão e verificação de micromecanismos complexos, complementando as observações laboratoriais e motivando o desenvolvimento de novas tecnologias experimentais.

É importante enfatizar que o emprego de experimentos numéricos multiescala no estudo de tecidos tendinosos é escasso na literatura. Essa questão é reportada no recente artigo de revisão realizado por [Fang e Lake \(2016\)](#) sobre abordagens de modelamento em tecidos tendinosos. Nesse estudo, os autores citam apenas dois trabalhos relativos à investigações numéricas em escalas microestruturais. Enquanto o primeiro trabalho restringe-se ao uso de modelos constitutivos elásticos e geometrias bidimensionais ([Herchenhan et al., 2012](#)), o segundo apresenta um estudo fora do escopo da presente tese ([Sander, 2013](#)). Porém, ambos não utilizam teorias com base em homogeneização. Desse modo, a falta de desenvolvimentos nessa área também é um fator que motiva a presente proposta de pesquisa.

1.3 Objetivos

Estudos experimentais revelam que em regime fisiológico (de 2% a 4% de deformação na direção axial às fibras de colágeno), os tendões se comportam de forma viscoelástica, não havendo evidências macroscópicas de plasticidade e dano mecânico (ver seção 2). Portanto, para esses níveis de deformação, a compreensão de como as fases microestruturais afetam as respostas viscoelásticas do tecido e quais são os micromecanismos que contribuem com a elasticidade e viscosidade, ainda são questões abertas à discussão científica.

Nesse contexto, o objetivo principal da tese consiste em realizar simulações numéricas tridimensionais em multiescala a fim de quantificar, de modo homogêneo, a relevância das fases microestruturais nas respostas viscoelásticas macroscópicas em uma escala particular dos tendões. Além disso, através dos resultados obtidos das análises de elementos finitos, pretende-se estudar os campos locais da microestrutura, elucidando a compreensão de micromecanismos cinemáticos, cinéticos e dissipativos possivelmente presentes nos tendões.

1.4 Contribuições e Ineditismo

Todos os esforços empregados durante o desenvolvimento desta tese visam uma finalidade principal: compreender a biomecânica multiescala dos tendões e assim contribuir com futuras aplicações clínicas.

Nesse quadro, a maior contribuição do trabalho está relacionada a seus resultados. Uma vez que alguns dos resultados apresentam concordância com dados laboratoriais, tem-se suporte para levantar hipóteses sobre a micromecânica dos tendões, principalmente nos casos em que dificuldades tecnológicas limitam a avaliação experimental. Assim, as verificações e hipóteses realizadas com base nesses resultados numéricos podem fornecer subsídios e estimular futuras pesquisas relacionadas às áreas de engenharia de tecidos tendinosos e ramos da mecanobiologia, como no caso da mecanotransdução celular e no projetos de *scaffolds* e biorreatores.

Por outro lado, para alcançar tais resultados, o escopo e formalismo teórico e numérico empregados nos desenvolvimentos realizados nesta tese, por seu mérito, representam contribuições e inovações na área da modelagem constitutiva. Por exemplo, em um quadro constitutivo variacional, desenvolveram-se modelos materiais de viscoelasticidade

dade específicos para as fases microestruturais com base na morfologia do tecido e dados experimentais disponíveis na literatura. Embora algumas escolhas técnicas realizadas durante a formulação dos modelos sejam bem conhecidas na área da mecânica computacional, o conjunto dessas dentro de um quadro constitutivo variacional é inédito na literatura. Como exemplos, citam-se algumas abordagens empregadas:

- discretização das variáveis internas através de uma regra implícita de Euler, alternativamente ao mapeamento exponencial;
- consideração de escoamento viscoso incompressível junto ao problema constitutivo variacional por meio de um funcional Lagrangiano;
- formulação do modelo constitutivo em um formato totalmente tensorial, sem necessidade de decomposições espectrais. Assim, a formulação proposta é hábil para lidar com funções anisotrópicas acopladas, isto é, potenciais que não são funções isotrópicas das deformações;
- solução dos problemas não lineares materiais locais via algoritmo de Newton-Raphson;
- escolha de potenciais termodinâmicos (energias livre de Helmholtz e potenciais de dissipação) e modelos reológicos particulares para o modelamento das fases materiais em vista dos dados experimentais disponíveis na literatura;
- desenvolvimento de uma forma fechada para o módulo tangente consistente, tornando os modelos propícios à implementação em rotinas materiais de usuário de códigos de elementos finitos não lineares implícitos.

Portanto, os algoritmos de atualização constitutivos variacionais desenvolvidos nesta tese fornecem uma alternativa a outras abordagens de modelamento previamente propostas na literatura.

Em relação à teoria multiescala, escolheu-se uma abordagem em deformações finitas baseada em elementos de volume representativos (EVR) e formulada através de dois conceitos importantes da homogeneização: o de admissibilidade cinemática e o princípio de Hill-Mandel da macro-homogeneidade. O método dos elementos finitos em seu formato clássico, não linear e implícito foi empregado na discretização do contínuo e solução das equações de equilíbrio. Assim, ambas as metodologias citadas foram utilizadas na presente tese como ferramentas para chegar aos fins propostos.

Por fim, este trabalho contribuiu com o desenvolvimento de um

código laboratorial de elementos finitos não linear e multiescala em linguagem FORTRAN. Esse código vem sendo utilizado para pesquisas nas áreas de modelagem computacional por alunos da pós-graduação em Engenharia Mecânica do Grupo de Análise e Projeto Mecânico (GRANTE) da Universidade Federal de Santa Catarina. O código foi desenvolvido em parceria com os colegas Jan-Michel Colombo Farias e Paulo Bastos de Castro e com a supervisão do professor Eduardo Alberto Fancello.

1.5 Organização do Documento

Revisão Bibliográfica. Visando uma estrutura conveniente de apresentação do manuscrito, a revisão bibliográfica contempla, separadamente, as seções 2 e 3. Na Seção 2 é apresentado o estudo bibliográfico referente à morfologia, hierarquia estrutural e comportamento viscoelástico dos tendões. Ademais, teorias microestruturais relacionadas a transmissão dos esforços mecânico e viscosidade são abordadas nessa seção. Referente à Seção 3, são introduzidas as bases teóricas para a formulação de uma classe de modelos materiais dissipativos segundo uma abordagem constitutiva variacional. Também compete a essa seção apresentar os conceitos principais de uma teoria multiescala formulada em deformações finitas.

Escolha da Escala Microestrutural do Tendão. Sabendo que os tendões são materiais que apresentam diversas escalas microestruturais, na Seção 4 é apresentado o procedimento de escolha da escala do tendão para o posterior modelamento das fases materiais e análises multiescala. Sucintamente, essa escolha foi baseada em um detalhado levantamento bibliográfico sobre o comportamento mecânico das estruturas de colágeno (tendões, fascículos e fibrilas) sujeitas a ensaios monotônicos de tração. Com base nessa pesquisa, adianta-se aqui que a escala associada aos fascículos dos tendões foi a escolhida para as investigações multiescala.

Modelamento Viscoelástico das Fases Materiais Microestruturais. A microestrutura do fascículo é composta essencialmente por duas fases materiais: as fibras de colágeno e uma matriz celular. Em vista disso, na Seção 5 são desenvolvidos modelos viscoelásticos específicos para ambas as fases materiais microestruturais do fascículo. Esses modelos foram formulados em um escopo constitutivos variacional e com base na

morfologia de cada fase material. Além disso, algumas simplificações e proposições consideradas durante o modelamento basearam-se na disponibilidade de ensaios experimentais micromecânicos reportados na literatura e utilizados posteriormente na identificação dos parâmetros constitutivos.

Resultados e Discussões. Na Seção 6 são apresentados os resultados e discussões obtidos durante o desenvolvimento desta tese, a qual divide-se em duas subseções principais. Na Subseção 6.1, são detalhadas as abordagens e estratégias empregadas para a identificação dos parâmetros constitutivos dos modelos viscoelásticos propostos para cada uma das fases materiais do EVR do fascículo, isto é, para as fibras e matriz celular. Por exemplo, ensaios experimentais cíclicos de nanoindentação, realizados com auxílio de microscopia de força atômica, foram utilizados para estimar os parâmetros materiais das células do tendão e da resposta da fibra transversal às fibrilas. Entretanto, testes cíclicos de tração na direção axial às moléculas de colágeno foram empregados para identificar os parâmetros constitutivos do modelo unidirecional proposto para a fibrila (mais detalhes sobre cada modelo serão abordados na Seção 5). Com uma estimativa dos parâmetros constitutivos em mãos, na Subseção 6.2 é apresentado um conjunto de simulações numéricas multiescala visando investigar e discutir as seguintes questões:

- influência da variação da rigidez e dissipação local da matriz celular na rigidez e dissipação macroscópica (homogeneizada) do fascículo;
- influência da fração volumétrica de fibrilas na resposta viscoelástica do fascículo;
- contribuição da resposta unidirecional das fibrilas (na direção das moléculas de colágeno) na dissipação do fascículo;
- investigação das respostas anisotrópicas do fascículo sob ensaios de cisalhamento simples;
- análises locais do EVR visando investigar possíveis micromecanismos relacionados aos seguintes comportamentos:
 - significativa redução volumétrica e escoamento de fluídos verificados macroscopicamente em ensaios de tração em tecidos tendinosos;
 - quantificação dos níveis de deformação e dissipação locais de cada fase material do EVR, sob estados macroscópicos uniaxiais;

- proposição de hipóteses relacionadas a mecanobiologia dos tendões e processos patológicos.

Conclusões e Trabalhos Futuros. Um resumo dos principais resultados obtidos no desenvolvimento do trabalho de tese assim como sugestões para trabalhos futuros são apresentados na Seção 7.

Digressão: Um Modelo Hiperelástico Ortotrópico Acoplado Aplicado ao Comportamento Mecânico de Tendões. Na Seção 8 é apresentada a formulação de um modelo ortotrópico acoplado aplicado ao comportamento conservativo (hiperelástico) de tendões. O desenvolvimento desse modelo foi motivado por um trabalho experimental que reporta que os tendões respondem de forma anisotrópica e acoplada sob ensaios semiconfinados de compressão. Embora os estudos apresentados nessa seção representem uma digressão à presente tese, seus resultados motivam trabalhos futuros referentes à biomecânica multi-escala dos tecidos tendinosos.

Apêndices. No Apêndice A são detalhadas as etapas operacionais referentes aos algoritmos resultantes das soluções dos problemas constitutivos variacionais incrementais. Em vista das aproximações empregadas na discretização temporal dos modelos constitutivos, uma forma fechada e consistente para o módulo tangente material é desenvolvida no Apêndice B.

2 MORFOLOGIA E COMPORTAMENTO MECÂNICO DOS TENDÕES

2.1 Morfologia e Hierarquia Estrutural

Nos animais, os tendões são classificados como tecidos conectivos densos regulares, os quais conectam músculos a ossos, estabilizando as articulações e tornando o movimento possível (Kannus, 2000; Franchi et al., 2007; Aro, de Campos Vidal e Pimentel, 2012; Kierszenbaum e Tres, 2012). Variam consideravelmente de forma e tamanho, podendo ser achatados, cilíndricos, em forma de leque ou fita (Franchi et al., 2007). São tecidos especializados, extremamente rígidos e frequentemente submetidos a elevados esforços de tração. Suas principais funções mecânicas são de transmissão de força entre músculos e ossos, armazenamento de energia para a realização dos movimentos e amortecimento (Screen, 2009; Böl et al., 2015).

Sendo um tecido conectivo, os tendões são constituídos basicamente por água, células e matriz extracelular. Em seu estado natural, são compostos de 55-70% de água (Aro, de Campos Vidal e Pimentel, 2012; Connizzo, Yannascoli e Soslowsky, 2013). Os fibroblastos (tenócitos) compreendem 90-95% das células dos tendões (Kannus, 2000; Franchi et al., 2007; Magnusson, Langberg e Kjaer, 2010).

A matriz extracelular dos tendões é predominantemente composta de colágeno tipo I, representando 65-80% de sua massa seca (Kannus, 2000). Dentre os componentes não colagenosos da matriz extracelular, as fibras de elastina e as proteoglicanas apresentam-se em maior quantidade, correspondendo de 1-2% da massa seca do tecido (Kannus, 2000; Franchi et al., 2007; Aro, de Campos Vidal e Pimentel, 2012; Thorpe et al., 2013).

Na Figura 1 são ilustradas as principais escalas estruturais dos tendões com base nas estruturas de colágeno. Seguindo um abordagem estrutural macro-micro, os tendões são envolvidos por um tecido conectivo frouxo chamado de paratendão. O paratendão permite o deslizamento entre o tendão e outros tecidos próximos, além de suportar vasos sanguíneos que vascularizarão o tecido tendinoso (Franchi et al., 2007). Abaixo desse, encontra-se uma fina camada de tecido conectivo nomeada de epitendão. O epitendão conecta os fascículos formando a estrutura macroscópica do tendão. Ainda nessa escala encontra-se o peritendão, o qual tem função de alimentar o interior do tendão com

vasos sanguíneos, linfáticos e nervos. O peritendão assim como os outros componentes não colagenosos encontrados entre os fascículos são formados pelo chamado endotendão. O endotendão é um tecido conectivo cujos constituintes definem uma matriz interfascicular (Thorpe et al., 2012). Essa matriz recobre e conecta os fascículos entre si, onde vasos de menor calibre, capilares e células podem ser encontrados (Aro, de Campos Vidal e Pimentel, 2012).

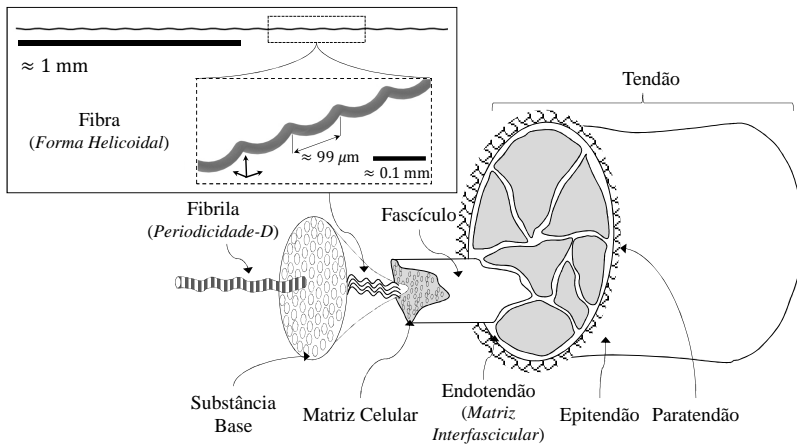


Figura 1: Hierarquia estrutural do tendão.

Em imagens micrográficas da seção longitudinal aos fascículos, obtidas através de microscopia óptica ou em técnicas micrográficas de luz polarizada, verifica-se que as fibras colágenas apresentam uma configuração ondulada na direção longitudinal (Silver, Freeman e Sehra, 2003; Franchi et al., 2007; Thorpe et al., 2013). Essa característica provém da natureza helicoidal das fibras em meio a uma matriz predominantemente de células, a qual foi verificada via imagens por Starborg et al. (2013) e mais recentemente em Kalson et al. (2015). Ambos os trabalhos utilizaram uma técnica chamada de *Serial Block Face-Scanning Electron Microscopy* (SBF-SEM), a qual permite a reconstrução tridimensional de um pequeno volume de tecido. Ademais, Kalson et al. (2015) fornecem dados médios referentes à geometria das fibras, tornando possível a representação espacial dessas, assim como ilustrado na Figura 1.

As fibras de colágeno são formadas por uma estrutura complexa

de fibrilas imersas em uma matriz hidratada rica em proteoglicanas, geralmente denominada de substância base. As fibrilas orientam-se preferencialmente na direção axial à fibra. Porém, algumas podem orientar-se horizontalmente e transversalmente, cruzando umas as outras e formando espirais (Kannus, 2000, Provenzano e Vanderby, 2006).

Em relação às proteoglicanas, sabe-se que essas promovem a hidratação do tecido devido à propriedade hidrofílica da sua principal molécula formadora, a glicosaminoglicana (Yanagishita, 1993; Mouw, Ou e Weaver, 2014). Na substância base, as proteoglicanas são predominantemente ortogonais às fibrilas, com uma separação periódica de aproximadamente 60 nm. Além disso, não possuem interações intrafibrilares (Scott, 1988; Scott, 1991; Franchi et al., 2007; Connizzo, Yannascoli e Soslowsky, 2013).

As fibrilas podem ser consideradas as unidades estruturais básicas dos tendões, as quais se arranjam tridimensionalmente, formando as fibras (Kannus, 2000). Em sua escala encontram-se basicamente as moléculas de colágeno e água. A molécula de colágeno são macromoléculas cuja a razão entre o comprimento e o diâmetro é de aproximadamente 200. Essas possuem formato em tripla hélice, conectando-se entre si através de ligações covalentes cruzadas e ligações de hidrogênio, formando assim as fibrilas (Buehler, 2006; Svensson et al., 2013; Blanco, Polindara e Goicolea, 2015).

Em imagens de difração de raio-X, microscopia de força atômica (AFM) ou microscopia eletrônica, verificam-se que as fibrilas são formadas por uma estrutura organizada e periódica de moléculas de colágeno. Esse padrão de repetição entre as moléculas é chamado de periodicidade D, variando de 64 a 67 nm (Franchi et al., 2007; Fratzl, 2008; Svensson et al., 2012; Silver, Freeman e Seehra, 2003).

2.2 Comportamento Mecânico

Quando submetidos a ensaios cíclicos de tração, os tendões apresentam um comportamento fenomenológico como os mostrados na Figura 2. Através dos laços de histerese, nota-se claramente que são materiais que dissipam energia. Esse comportamento dissipativo geralmente é associado às características viscoelásticas do tecido (Johnson et al., 1994; Silver, Freeman e Seehra, 2003; Provenzano e Vanderby, 2006; Franchi et al., 2007; Screen, 2009; Duenwald, Vanderby e Lakes, 2009; Duenwald, Vanderby e Lakes, 2010; Wilchez, 2012). Porém, alguns autores, relacionam tais processos dissipativos com plasticidade e dano

ou também, a características semelhantes ao efeito Mullins (Marino e Vairo, 2014, Pinto, 2014). Além disso, os tendões são sensíveis à taxa de deformação, como pode-se visualizar na Figura 2b, sendo esse fato também relatado em Kösters et al. (2014).

Em vista da complexa morfologia hierárquica dos tendões, previamente exposta na seção anterior, fica claro que as respostas mecânicas macroscópicas estão fortemente relacionadas ao arranjo estrutural e interações entre suas diversas fases materiais microscópicas. Porém, a compreensão de como as microestruturas influenciam na resposta viscoelástica macroscópica ainda é uma questão aberta à discussão científica. Nesse caso, a literatura enfatiza algumas teorias microestruturais sobre a transmissão de esforços e a característica viscosa dos tendões, as quais são abordadas na sequência.

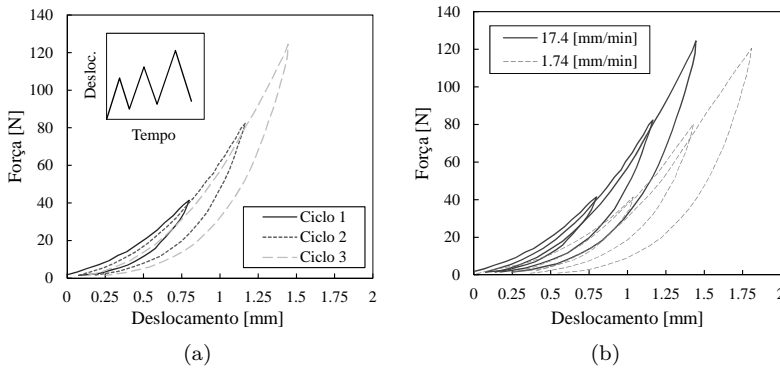


Figura 2: Ensaio cíclicos realizados em tendões flexor digital profundo de suínos. Gráficos de força versus deslocamento para um ensaio tipo dente de serra sob duas taxas de deslocamento. Dados experimentais reproduzidos de Wilchez (2012).

2.3 Teorias Microestruturais de Transmissão de Esforços e Viscosidade

Através do estudo bibliográfico realizado, duas teorias principais emergem com o objetivo de explicar como as forças são transmitidas através dos tendões. A primeira sugere que as fibrilas são extremamente longas, podendo ser consideradas contínuas através do compri-

mento do tendão (Provenzano e Vanderby, 2006; Screen, 2009; Svensson et al., 2012, Svensson et al., 2017). Nessa hipótese, as fibrilas são as principais componentes estruturais dos tendões. Já a segunda teoria propõe que as fibrilas são descontínuas e a transmissão dos esforços está relacionada com interações entre os outros componentes da matriz extracelular, principalmente com as proteoglicanas (Kannus, 2000; Silver, Freeman e Seehra, 2003; Franchi et al., 2007; Magnusson, Langberg e Kjaer, 2010; Thorpe et al., 2013). Dentre as duas teorias, Provenzano e Vanderby (2006) e Svensson et al. (2017) apresentam fortes evidências experimentais que suportam a hipótese das fibrilas contínuas. Além disso, esses autores apresentam fatos da literatura que desacreditam a teoria de transmissão de esforços através das proteoglicanas.

Independente dessas duas teorias sobre as fibrilas, o comportamento não linear observado sob a aplicação de baixas cargas, geralmente é creditado ao padrão ondulado (helicoidal) dos feixes de fibras de colágeno (Hansen, Weiss e Barton, 2002; Franchi et al., 2007; Duenwald, Vanderby e Lakes, 2009; Connizzo, Yannascoli e Soslowsky, 2013). No estudo de tendões da cauda de ratos, Hansen, Weiss e Barton (2002) concluem que entre 2% a 3% de deformação as ondulações desaparecem. Tal fato também é enfatizado por Franchi et al. (2007), para um alongamento máximo de 4%. Sabendo que a amplitude fisiológica de muitos tendões, *in vivo*, é de $\sim 2\text{-}4\%$ de deformação (Hansen, Weiss e Barton, 2002; Franchi et al., 2007; Duenwald, Vanderby e Lakes, 2009), nota-se que o regime fisiológico de deformações compreende a região onde encontram-se as ondulações dos feixes de fibras de colágeno.

Levando em consideração o caráter viscoso dos tendões, esse geralmente é creditado às interações entre as estruturas de colágeno e os outros componentes não colagenosos da matriz extracelular e da matriz celular (Provenzano e Vanderby, 2006; Shen et al., 2011; Connizzo, Yannascoli e Soslowsky, 2013; Kösters et al., 2014). Sabe-se, também, que a viscosidade reduz significativamente da molécula de colágeno para a fibrila e consecutivamente para o tecido (Shen et al., 2011; Connizzo, Yannascoli e Soslowsky, 2013). Porém, a contribuição específica de cada fase material na dissipação viscosa total do tecido ainda é uma questão a ser investigada.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Esta seção tem por objetivo apresentar a base teórica para a formulação de uma classe de modelos materiais dissipativos segundo uma abordagem constitutiva variacional. Serão também apresentados os conceitos principais de uma teoria multiescala baseada em elementos de volume representativos (EVR) formulada em deformações finitas.

No contexto do presente trabalho, a abordagem constitutiva variacional será empregada na formulação de modelos viscoelásticos para as fases materiais de um EVR particular do tendão. Obtida a distribuição de tensões na microestrutura (consistente com a teoria multiescala), essa é homogeneizada a fim de estimar a resposta macroscópica do tecido. Consequentemente, pode-se estudar a contribuição de cada fase material microscópica no comportamento viscoelástico homogeneizado e suas interações locais resultantes da solução das equações de equilíbrio microestruturais.

É importante enfatizar que os conceitos clássicos da mecânica e termodinâmica do contínuo assim como do cálculo tensorial e variacional são amplamente empregados na sequência deste trabalho. Em função desses conceitos estarem bem estabelecidos na literatura, não serão aqui apresentados, mas utilizados e referenciados para atingir os propósitos principais propostos. Portanto, citam-se os trabalhos de [Holzapfel \(2000\)](#), [Jog \(2007\)](#), [Bonet e Wood \(2008\)](#), de [Souza Neto, Peric e Owen \(2009\)](#), [Berdichevsky \(2009\)](#) e [Gurtin, Fried e Anand \(2010\)](#) como referências nesses tópicos.

3.1 Formulação de Modelos Constitutivos segundo uma Abordagem Variacional

O modelamento de materiais dissipativos apresentado nesta seção segue o formalismo constitutivo variacional apresentado em [Ortiz e Stainier \(1999\)](#), [Fancello, Ponthot e Stainier \(2006\)](#), [Mosler \(2010\)](#) e [Vassoler, Reips e Fancello \(2012\)](#), o qual é fortemente embasado em um escopo termodinâmico.

Visando a implementação numérica dos modelos em um código convencional de elementos finitos não linear, a forma discreta dessa formulação variacional resulta em um problema de otimização local, isto é, ao nível dos pontos de integração. Esse algoritmo é denominado de atualização constitutiva variacional ([Mosler e Bruhns, 2010](#)), repre-

sentando o algoritmo de atualização do modelo material, de maneira análoga ao sistema de equações obtido através dos clássicos algoritmos de atualização¹.

Dentre as propriedades apontadas por [Ortiz e Stainier \(1999\)](#) para esta abordagem, destacam-se a simetria do modulo tangente consistente, assim como uma estrutura matemática para o estudo de existência e unicidade de solução e estimativa de erro em aproximações por elementos finitos.

Como exemplos de desenvolvimentos nessa área de pesquisa, citam-se os seguintes trabalhos: [Fanello, Ponthot e Stainier \(2006\)](#) e [Fanello, Ponthot e Stainier \(2008\)](#) apresentam uma formulação para viscoelasticidade finita; [Yang, Stainier e Ortiz \(2006\)](#) incorporaram o acoplamento termomecânico em sólidos dissipativos; [Fanello, Vassoler e Stainier \(2008\)](#) propõem modelos isotrópicos viscoelásticos considerando deformações finitas; [Mosler \(2010\)](#) considera plasticidade finita juntamente com encruamento cinemático não linear; [Kintzel, Khan e Mosler \(2010\)](#) e [Kintzel e Mosler \(2011\)](#) introduzem a variável interna de dano considerando plasticidade infinitesimal; [Stainier \(2011\)](#) relata erros de aproximação durante a integração numérica do potencial de dissipação e propõe aproximações consistentes; [El Sayed et al. \(2008\)](#) e [Vassoler, Reips e Fanello \(2012\)](#) aplicam esse escopo variacional no modelamento de tecidos biológicos; [Vassoler, Stainier e Fanello \(2016\)](#) apresentam uma abordagem variacional para materiais viscoelásticos reforçados por fibras e sujeitos ao dano.

3.1.1 Formulação Mecânica no Contínuo

O modelamento constitutivo de materiais dissipativos em um quadro termodinamicamente consistente resulta que as equações constitutivas ficam totalmente determinadas pela energia livre de Helmholtz $\psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$ e pelo chamado potencial de dissipação $\mathcal{Y}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}; \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$ ([Jirásek e Bazant, 2002](#); [de Souza Neto, Peric e Owen, 2009](#)). Nos argumentos do potencial de dissipação \mathcal{Y} o ponto e vírgula limita as variáveis de estado que aparecem como parâmetros, nesse caso o gradiente de deformação \mathbf{F} e um conjunto de variáveis internas $\boldsymbol{\alpha}$, os quais serão omitidos na sequência. Ademais, pode-se notar que enquanto a energia livre é dependente do estado, o potencial de dissipação é função das taxas temporais desse estado. Se os potenciais ψ e \mathcal{Y} forem propos-

¹Em modelos materiais elastoplásticos, os algoritmos de atualização são comumente denominados de algoritmos de retorno ([Simo e Hughes \(1998\)](#)).

tos de forma consistente (mais detalhes em [Jirásek e Bazant \(2002\)](#)), garante-se, a priori, a não negatividade da inequação de energia livre ([Gurtin, Fried e Anand, 2010](#)) (desigualdade de Clausius-Duhem):

$$\mathcal{D} \stackrel{\text{def}}{=} \underbrace{[\mathbf{P}_c(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) - \mathbf{P}(\dot{\mathbf{F}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})]}_{\mathbf{P}_d(\dot{\mathbf{F}})} : \dot{\mathbf{F}} - \mathbf{T}(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) \bullet \dot{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) \geq 0, \quad (3.1)$$

onde \mathcal{D} é chamada de dissipação interna (ou intrínseca),

$$\mathbf{P}_c(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{F}}, \quad \mathbf{P}_d(\dot{\mathbf{F}}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \mathcal{Y}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}})}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \quad (3.2)$$

representam as partes conservativa e dissipativa do primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff $\mathbf{P}(\dot{\mathbf{F}}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$, respectivamente, e

$$\mathbf{T}(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = - \frac{\partial \mathcal{Y}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}})}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} \quad (3.3)$$

são as forças termodinâmicas conjugadas ao conjunto de variáveis internas $\boldsymbol{\alpha}$. Em (3.1) o símbolo \bullet representa o produto escalar (contração) adequado com a natureza das variáveis internas.

Os desenvolvimentos seguintes consideram a hipótese de que $\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \dot{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})$. Portanto, considera-se que o potencial de dissipação \mathcal{Y} é desacoplado em relação às taxas $\dot{\mathbf{F}}$ e $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$, resultando em

$$\mathcal{Y}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \stackrel{\text{def}}{=} \varphi(\dot{\mathbf{F}}) + \phi(\dot{\boldsymbol{\alpha}}). \quad (3.4)$$

Através dessas considerações e em vista de (3.3) as equações constitutivas devem respeitar

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} + \frac{\partial \phi(\dot{\boldsymbol{\alpha}})}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} = \mathbf{0}, \quad (3.5)$$

as quais representam restrições que devem ser satisfeitas pelas taxas das variáveis internas. Levando em consideração (3.2) e (3.4), a relação constitutiva da tensão resulta em

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{F}} + \frac{\partial \varphi(\dot{\mathbf{F}})}{\partial \dot{\mathbf{F}}}. \quad (3.6)$$

Em vista dos potenciais ψ e \mathcal{Y} , é mostrado em [Ortiz e Stainier](#)

(1999) que pode ser definido um potencial em taxas \mathcal{P} no formato

$$\mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \stackrel{\text{def}}{=} \psi(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}) + \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}), \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial \dot{\mathbf{F}}} : \dot{\mathbf{F}} + \frac{\partial \psi}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \quad (3.7)$$

de maneira que a condição de estacionaridade do princípio variacional

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \arg \inf_{\dot{\boldsymbol{\alpha}}} \mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}), \quad (3.8)$$

retoma as equações constitutivas (3.5). Observa-se, também, que a derivada parcial de \mathcal{P} em relação a $\dot{\mathbf{F}}$ resulta na equação constitutiva para o primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff (3.6), isto é,

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}})}{\partial \dot{\mathbf{F}}}. \quad (3.9)$$

Finalmente, avaliando o potencial \mathcal{P} no argumento minimizante de (3.8), define-se um potencial reduzido \mathcal{P}^{red} dependente apenas da variável $\dot{\mathbf{F}}$, cuja derivada em relação a esse argumento resulta na equação constitutiva para o primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff,

$$\mathbf{P} = \frac{d\mathcal{P}^{\text{red}}}{d\dot{\mathbf{F}}}, \quad \text{onde } \mathcal{P}^{\text{red}}(\dot{\mathbf{F}}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\dot{\boldsymbol{\alpha}}} \mathcal{P}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}). \quad (3.10)$$

A Equação (3.10) tem um importante papel nessa abordagem variacional. Sua contraparte incremental confere aspectos particulares do ponto de vista numérico, os quais serão comentados na sequência.

3.1.2 Formato Incremental

Dado um incremento de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$, uma escolha possível para a integração do potencial (3.7) resulta no potencial incremental,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}; \mathbf{F}_n, \boldsymbol{\alpha}_n) &\stackrel{\text{def}}{=} \psi(\mathbf{F}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}) - \psi(\mathbf{F}_n, \boldsymbol{\alpha}_n) + \\ &\Delta t \left[\Upsilon\left(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}; \mathbf{F}_n, \boldsymbol{\alpha}_n\right) \right] \Big|_{t_{n+\vartheta}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Na Equação (3.11) as variáveis $\dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{F}}(\mathbf{F}_{n+1})$ e $\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \dot{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha}_{n+1})$ são aproximações discretas das taxas $\dot{\mathbf{F}}$ e $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$, e as variáveis \mathbf{F}_n e $\boldsymbol{\alpha}_n$

atuam como parâmetros fixos no incremento, sendo omitidas de agora em diante.

Percebe-se, também, que os potenciais de dissipação devem ser avaliados em algum instante $t_{n+\vartheta}$ dentro do incremento de tempo, sendo que o parâmetro $\vartheta \in [0, 1]$ está intrinsecamente relacionado com a regra de discretização escolhida em $\dot{\mathbf{F}}$ e $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$. Desse modo, a consistência da forma incremental (3.11) é verificada se $\Delta t \rightarrow 0 \Rightarrow \mathcal{P}_{\text{inc}} = \mathcal{P}$ (Fancello, Ponthot e Stainier, 2006).

Em vista do potencial incremental, o algoritmo de atualização variacional consiste nas seguinte etapas:

- Cálculo da taxa discreta das variáveis internas solução do problema variacional

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}}^{\text{opt}} = \arg \inf_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{P}_{\text{inc}} \Big|_{\mathbf{F}_{n+1}=\text{cte}}. \quad (3.12)$$

- Avaliação da expressão da tensão incremental no argumento minimizante de (3.12), segundo a expressão

$$\mathbf{P}_{n+1} = \left. \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} \right|_{\dot{\boldsymbol{\alpha}}=\dot{\boldsymbol{\alpha}}^{\text{opt}}}, \quad (3.13)$$

ou equivalentemente,

$$\mathbf{P}_{n+1} = \frac{d\mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{red}}}{d\mathbf{F}_{n+1}}, \quad (3.14)$$

onde,

$$\mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{red}}(\mathbf{F}_{n+1}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{P}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}). \quad (3.15)$$

A Equação (3.14) atribui ao algoritmo constitutivo um caráter análogo ao de um material hiperelástico, uma vez que o potencial $\mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{red}}$ só é função de \mathbf{F}_{n+1} . Essa propriedade resulta em algumas características convenientes do ponto de vista numérico. Por exemplo, o módulo tangente material consistente com a discretização temporal escolhida (Simo e Taylor, 1985) apresentará simetria maior, isto é,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} 4 \frac{d^2 \mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{red}}}{d\mathbf{C}_{n+1} d\mathbf{C}_{n+1}} \Rightarrow \left(\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}} \right)_{ijkl} = \left(\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}} \right)_{klij}. \quad (3.16)$$

Sendo (3.12) um problema de otimização, diversos algoritmos

numéricos podem ser empregados em sua solução. Ademais, possíveis restrições nas variáveis internas podem ser contabilizadas, numericamente, com bases em diversas abordagens (Arora, 2004). Portanto, essa teoria constitutiva variacional torna-se uma ferramenta matematicamente elegante e numericamente robusta de formular e solucionar as equações constitutivas.

Como comentado anteriormente, essa abordagem constitutiva será empregada para a formulação de modelos de viscoelasticidade para as fases materiais em uma dada escala do tendão, consistente com a teoria multiescala apresentada na próxima seção.

3.2 Teoria Multiescala em Deformações Finitas

Dentre as diversas teorias multiescala presentes na literatura, muitas são baseadas na homogeneização de grandezas definidas em domínios conhecidos como elementos de volume representativo (EVR) do material (Efendiev e Hou, 2009). Nesse caso, esta seção tem por objetivo descrever brevemente uma em particular, caracterizada por empregar conceitos variacionais e de homogeneização em cinemática finita (de Souza Neto e Feijóo, 2006; Perić et al., 2011; Blanco et al. (2014); de Souza Neto et al., 2015).

O conceito de EVR pressupõe a existência de duas escalas denotadas macroscópica e microscópica. O EVR ocupa um domínio finito na escala microscópica que se diz ser representativo ou associado a um ponto material na escala macroscópica. Nessa abstração, a escolha do tamanho do EVR é fortemente vinculada à relação existente entre essas duas escalas. Tipicamente, o EVR deve ser suficientemente grande e detalhado para que sua homogeneização seja representativa do meio contínuo e ao mesmo tempo suficientemente pequeno para representar um ponto na macroescala. Desse modo, os preceitos da mecânica e termodinâmica do contínuo são integralmente aplicáveis à microescala.

Analisando a Figura 3, considera-se que um EVR do material possui um domínio referencial $\Omega_{\mathbf{y}}$ e espacial $\Omega_{\mathbf{y}}$. Tais domínios representam as microescalas² referencial e deformada, relativas aos pontos referencial \mathbf{X} e espacial \mathbf{x} da macroescala, respectivamente.

A presente teoria multiescala baseia-se essencialmente em dois conceitos fundamentais: o de admissibilidade cinemática, do qual resul-

²Entende-se por microescala o domínio de um elemento de volume representativo de um ponto macroscópico. Desse modo, o EVR não necessariamente deve ter dimensões micrométricas.

tam as classes de modelos multiescala e no princípio de Hill-Mandel da macro-homogeneidade, definindo a relação entre as tensões macroscópicas e microscópicas e a equação de equilíbrio microscópica.

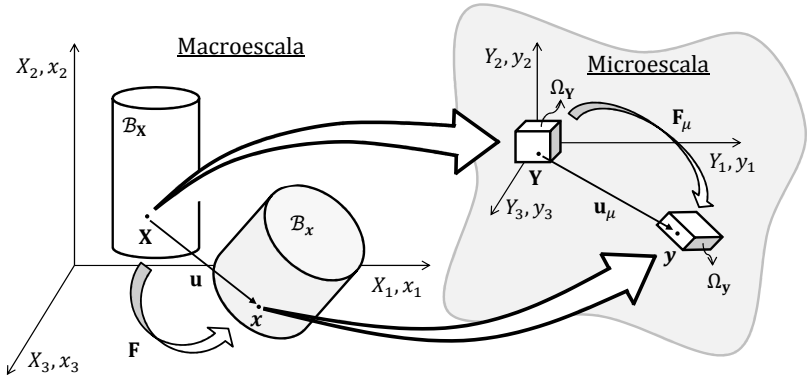


Figura 3: Representação dos domínios da macroescala e da microescala.

3.2.1 Admissibilidade Cinemática

Nessa teoria multiescala, considera-se que o campo de deslocamentos macroscópico $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ e o gradiente de deformação macroscópico $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t)$ relacionam-se com a microescala através da média volumétrica de seus respectivos campos microscópicos $\mathbf{u}_\mu(\mathbf{Y}, t)$ e $\mathbf{F}_\mu(\mathbf{Y}, t)$, através de

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_Y} \mathbf{u}_\mu(\mathbf{Y}, t) dV_\mu \quad (3.17)$$

e

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_Y} \mathbf{F}_\mu(\mathbf{Y}, t) dV_\mu, \quad (3.18)$$

onde V_μ representa o volume referencial³ do EVR. Os mapeamentos apresentados em (3.17) e (3.18) são denominados operações de homogeneização. Assim, as grandezas macroscópicas obtidas por mapeamentos análogos a esses também poderão ser denominadas de homogeneizadas.

Outra proposição fundamental é a seguinte expansão do campo de deslocamentos microscópicos,

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{Y}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) + [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)] \mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t), \quad (3.19)$$

onde $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ representa uma parcela constante, $[\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)] \mathbf{Y}$ uma contribuição linear e $\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t)$ é denominado de deslocamento microscópico flutuante, representando um termo de ordem superior.

Analogamente ao gradiente de deformação macroscópico, o gradiente de deformação da microescala é definido como,

$$\mathbf{F}_\mu(\mathbf{Y}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}_\mu(\mathbf{Y}, t). \quad (3.20)$$

Calculando o gradiente de (3.19) em relação à \mathbf{Y} , a Equação (3.20) pode ser escrita como,

$$\mathbf{F}_\mu(\mathbf{Y}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) + \nabla_{\mathbf{y}} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t). \quad (3.21)$$

Percebe-se na Equação (3.21) que \mathbf{F}_μ é função explícita do gradiente de deformação macroscópico e do gradiente do deslocamento microscópico flutuante.

Levando em consideração (3.19), a Equação (3.17) fica

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = & \underbrace{\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) dV_\mu}_{\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)} + \underbrace{\frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)] \mathbf{Y} dV_\mu}_{\frac{\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{Y} dV_\mu} + \\ & \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t) dV_\mu. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Neste ponto considera-se que a origem da tríade \mathbf{Y} está localizada no centroide de $\Omega_{\mathbf{Y}}$, isto é,

³As variáveis e operadores com letras maiúsculas e subscrito $(\cdot)_\mu$ ou $(\cdot)_{\mathbf{Y}}$ são referentes à configuração referencial da microestrutura. Já as notações $(\cdot)_{\mathbf{y}}$ ou letras minúsculas com subscrito $(\cdot)_\mu$ referem-se à configuração espacial microscópica.

$$\int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{Y} dV_{\mu} = \mathbf{0}, \quad (3.23)$$

e a Equação (3.22) resume-se a

$$\int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \tilde{\mathbf{u}}_{\mu}(\mathbf{Y}, t) dV_{\mu} = \mathbf{0}. \quad (3.24)$$

A Equação (3.24) representa uma restrição ao campo de deslocamentos microscópicos flutuantes, impedindo movimentos translacionais de corpo rígido do EVR. Por outro lado, os movimentos rotacionais de corpo rígido da microestrutura são tratados através da Equação (3.18). Substituindo (3.21) em (3.18) tem-se,

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{V_{\mu}} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) dV_{\mu} + \frac{1}{V_{\mu}} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \nabla_{\mathbf{Y}} \tilde{\mathbf{u}}_{\mu}(\mathbf{Y}, t) dV_{\mu}, \quad (3.25)$$

resultando em,

$$\int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \nabla_{\mathbf{Y}} \tilde{\mathbf{u}}_{\mu}(\mathbf{Y}, t) dV_{\mu} = \mathbf{0}. \quad (3.26)$$

Integrando a Equação (3.26) por partes⁴ chega-se em

$$\int_{\partial\Omega_{\mathbf{Y}}} \tilde{\mathbf{u}}_{\mu}(\mathbf{Y}, t) \otimes \mathbf{n}_{\mathbf{Y}} dA_{\mu} = \mathbf{0}, \quad (3.27)$$

onde $\mathbf{n}_{\mathbf{Y}}$ é a normal unitária à superfície referencial $\partial\Omega_{\mathbf{Y}}$. Portanto, somente os deslocamentos microscópicos flutuantes $\tilde{\mathbf{u}}_{\mu}(\mathbf{Y}, t)$ que satisfizerem as restrições (3.24) e (3.27) são cinematicamente admissíveis, isto é, respeitam os postulados (3.17) e (3.18).

Nesse contexto, tais restrições motivam a definição de um espaço mínimo de deslocamentos microscópicos flutuantes cinematicamente admissíveis. Esse espaço é formalmente definido por,

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_{\mu}}^{\min} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \tilde{\mathbf{w}} \mid \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \tilde{\mathbf{w}} dV_{\mu} = \mathbf{0}; \int_{\partial\Omega_{\mathbf{Y}}} \tilde{\mathbf{w}} \otimes \mathbf{n}_{\mathbf{Y}} dA_{\mu} = \mathbf{0} \right\}. \quad (3.28)$$

⁴A integração por partes é realizada através da identidade tensorial, $\int_{\Omega} \mathbf{S}(\nabla \mathbf{w})^T dV = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{S}\mathbf{n}) \otimes \mathbf{w} dA + \int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{S}) \otimes \mathbf{w} dV$, onde \mathbf{S} é um tensor de segunda ordem, \mathbf{w} é um vetor e \mathbf{n} é a normal unitária à superfície $\partial\Omega$.

Em termos do campo de deslocamentos \mathbf{u}_μ , o mínimo espaço cinematicamente admissível é definido como,

$$\mathcal{K}_{\mathbf{u}_\mu}^{\min} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \mathbf{w} = \mathbf{u} + (\mathbf{F} - \mathbf{I}) \mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{w}} \mid \tilde{\mathbf{w}} \in \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} \right\}. \quad (3.29)$$

3.2.2 Classes de Modelos Multiescala

Assim como definido em (3.28), $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$ é o mínimo espaço cinematicamente admissível para o campo de deslocamentos $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$. Porém, é possível definir subespaços de $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$, isto é, subespaços admissíveis que satisfazem as condições (3.24) e (3.27). Formalmente, define-se o subespaço $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu} \subset \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$ que adiciona às restrições de admissibilidade já descritas, outras geralmente relacionadas a condições de contorno sobre o EVR. Dentre os possíveis espaços $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$, os mais citados na literatura são resumidos na sequência.

Modelo de Taylor. Também conhecido como modelo de deformação uniforme ou regra das misturas, o modelo de Taylor admite que os deslocamentos microscópicos flutuantes são nulos em todo o domínio microscópico. Portanto, o espaço $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$ é definido por,

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{taylor}} \stackrel{\text{def}}{=} \{ \mathbf{0} \}. \quad (3.30)$$

□

Modelo de Deslocamentos Lineares nos Contornos. Como seu nome indica, deslocamentos lineares nas fronteiras representam deformações constantes e deslocamentos microscópicos flutuantes nulos nas mesmas, resultando assim na seguinte definição para o subespaço $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$:

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{lin}} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \mathbf{w} \in \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} \mid \mathbf{w} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{Y} \in \partial\Omega_{\mathbf{Y}} \right\}. \quad (3.31)$$

□

Modelo de Deslocamentos Periódicos nos Contornos. Considerando pares de pontos $(\mathbf{Y}^+, \mathbf{Y}^-) \in \partial\Omega_{\mathbf{Y}}$ com correspondência um-para-um, a restrição de periodicidade requer que os deslocamentos flutuantes nesses pares sejam idênticos, levando ao espaço,

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{per}} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \mathbf{w} \in \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} \mid \mathbf{w}(\mathbf{Y}^+) = \mathbf{w}(\mathbf{Y}^-), \quad \forall (\mathbf{Y}^+, \mathbf{Y}^-) \in \partial\Omega_{\mathbf{Y}} \right\}. \quad (3.32)$$

□

Modelo de Tração Uniforme nos Contornos. Se nenhuma restrição adicional for imposta, tem-se,

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu} = \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}. \quad (3.33)$$

Esse modelo representa uma tração uniforme nos contornos do EVR. No caso do primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff microscópico \mathbf{P}_μ , essa restrição é escrita por,

$$\mathbf{P}_\mu(\mathbf{Y}) \mathbf{n}_Y(\mathbf{Y}) = \mathbf{P} \mathbf{n}_Y(\mathbf{Y}), \quad \forall \mathbf{Y} \in \partial\Omega_Y. \quad (3.34)$$

□

Vale enfatizar que dentre os modelos apresentados, verifica-se a seguinte hierarquia:

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{taylor}} \subset \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{lin}} \subset \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{per}} \subset \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}. \quad (3.35)$$

Percebe-se, então, que o modelo de Taylor impõe uma maior restrição à análise, definindo um limite inferior energético. Já o espaço $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$ é o menos restrito, representando um limite superior.

Em vista da implementação dessa abordagem multiescala em um código de elementos finitos, as classes de modelos multiescala previamente apresentadas representarão condições de contorno específicas que devem ser impostas os EVR.

3.2.3 Princípio de Hill-Mandel da Macro-homogeneidade

O princípio de Hill-Mandel da macro-homogeneidade estabelece a consistência energética entre a escala macroscópica e microscópica (Hill, 1972; Mandel, 1971). Esse princípio postula que a potência da macroskala deve ser igual a média volumétrica da potência na micro-escala. De forma similar, de Souza Neto et al. (2015) redefinem esse princípio apresentando-o em uma forma variacional. Assim, a potência (ou trabalho) virtual das tensões macroscópicas deve coincidir com a média volumétrica da correspondente potência (ou trabalho) virtual realizada pelas tensões microscópicas.

Nesse contexto, define-se a priori, o espaço dos deslocamentos

virtuais flutuantes cinematicamente admissíveis, por,

$$\mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \mathbf{w} = \mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2 \mid \mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2 \in \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} \right\}. \quad (3.36)$$

Nota-se que o espaço $\mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$ coincide com $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$ e conseqüentemente $\mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} = \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} = \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$. Assim, a definição do espaço $\mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$ decorre da escolha específica do espaço $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$, isto é, do modelo cinemático multi-escala.

Utilizando os pares conjugados $(\mathbf{P}, \delta\mathbf{F})$, postula-se que,

$$\mathbf{P} : \delta\mathbf{F} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{P}_\mu : \delta\mathbf{F}_\mu \, dV_\mu, \quad \forall \delta\mathbf{F}; \forall \delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}, \quad (3.37)$$

o qual representa o princípio de Hill-Mandel da macro-homogeneidade, reformulado por [de Souza Neto et al. \(2015\)](#). Percebe-se que $\delta\mathbf{F}_\mu = \delta\mathbf{F}_\mu(\delta\mathbf{F}, \delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu)$ através da Equação (3.21). Sendo assim, o princípio (3.37) pode ser reescrito, convenientemente, como,

$$\mathbf{P} : \delta\mathbf{F} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{P}_\mu : (\delta\mathbf{F} + \nabla_{\mathbf{Y}} \delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu) \, dV_\mu, \quad \forall \delta\mathbf{F}; \forall \delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}. \quad (3.38)$$

Da Equação (3.38) obtêm-se duas consequências importantes em vista dessa teoria multiescala: a homogeneização das tensões e a equação de equilíbrio da microescala.

Homogeneização das Tensões. Fazendo $\delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu = \mathbf{0}$, já que $\delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu = \mathbf{0} \in \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$, e permitindo variações macroscópicas arbitrárias $\delta\mathbf{F}$ em (3.38), chega-se em,

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{P}_\mu \, dV_\mu. \quad (3.39)$$

Portanto, a tensão macroscópica é obtida através da média volumétrica do campo de tensões microscópico, podendo ser denominada de tensão homogeneizada. Geralmente, é de interesse obter a tensão homogeneizada de Cauchy utilizando o conceito de *push-forward* ([Bonet e Wood, 2008](#)). Nesse caso, [de Souza Neto e Feijóo \(2008\)](#) demonstram que,

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{v_\mu} \int_{\Omega_{\mathbf{y}}} \boldsymbol{\sigma}_\mu \, dv_\mu = \frac{1}{J} \mathbf{P} \mathbf{F}^T, \quad \text{sse} \quad \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu} \subset \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{per}}. \quad (3.40)$$

□

Equação de Equilíbrio da Microescala. Fixando $\delta \mathbf{F}$ e para todo $\delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu$ admissível, a Equação (3.38) resulta em,

$$\int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{P}_\mu : (\nabla_{\mathbf{Y}} \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \, dV_\mu = 0, \quad \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}, \quad (3.41)$$

ou alternativamente na versão microscópica espacial,

$$\int_{\Omega_{\mathbf{y}}} \boldsymbol{\sigma}_\mu : \text{sym} (\nabla_{\mathbf{y}} \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \, dv_\mu = 0, \quad \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{U}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}. \quad (3.42)$$

onde $\mathcal{U}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$ é o espaço dos deslocamentos virtuais flutuantes cinematicamente admissíveis definido na configuração espacial.

□

Levando em consideração a formulação multiescala apresentada até o momento, é conveniente listar algumas particularidades dessa teoria.

- Os movimentos translacionais de corpo rígido da microescala são tratados através da Equação (3.24), a qual faz parte da definição do espaço $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$ em (3.28). Porém, se o modelo de deslocamentos periódicos (3.32) ou tração uniforme nos contornos (3.33) for empregado na análise, os movimentos translacionais de corpo rígido podem ser eliminados fixando um ponto do EVR.
- Caso as contribuições das forças inerciais ou de corpo forem relevantes na microescala, essas devem ser consideradas na análise. Assim, [de Souza Neto et al. \(2015\)](#) apresentam uma forma consistente de levar em consideração esses termos nessa teoria multiescala, através da extensão do princípio de Hill-Mandel.
- Nessa teoria, a microescala é considerada um meio contínuo. Desse modo, os conceitos da mecânica e termodinâmica do contínuo são válidos no modelamento das fases materiais da microestrutura.
- O objetivo deste trabalho não é resolver um problema macro-micro completo, isto é, onde o comportamento material em cada ponto de integração da geometria macroscópica é obtido através de uma análise não linear da microestrutura. Nesse caso, não é de interesse apresentar o desenvolvimento do módulo tangente homogeneizado, o qual pode ser encontrado em [de Souza Neto e Feijóo \(2006\)](#).

Com base nas formulações teóricas apresentada até o momento, na próxima seção são apresentados os procedimentos empregados para a solução numérica do problema incremental multiescala visando a implementação em um código de elementos finitos não linear.

3.2.4 Implementação do Problema Incremental em Multiescala

Na literatura a expressão “*multilevel finite element* (FE²)” é usada para denotar os casos nos quais a solução do problema da escala inferior é utilizada como informação local para a solução da escala superior. Essa proposta, entretanto, possui como principal limitação o custo computacional, podendo inviabilizar a análise (Efendiev e Hou, 2009).

Um outro uso possível dos estudos multiescala consiste em avaliar os fenômenos que ocorrem na escala inferior e sua vinculação com a escala superior, frequentemente associada a observações experimentais. Essa última abordagem é a empregada no presente trabalho. Nesse caso, a solução do problema incremental multiescala contempla as seguintes etapas:

1. Definição do EVR.
2. Escolha dos potenciais microscópicos de energia livre $\psi_{\mathbf{y}}$ e de dissipação $\varphi_{\mathbf{y}}$ e $\phi_{\mathbf{y}}$ para o modelamento das fases microestruturais do EVR (ver Seção 3.1).
3. Escolha do espaço cinematicamente admissível $\mathcal{K}_{\bar{\mathbf{u}}_{\mu}}$ para a microestrutura (condições de contorno multiescala apresentadas na Seção 3.2.2).
4. Dado um gradiente de deformação \mathbf{F}_{n+1} em um ponto macroscópico, resolver o problema incremental definido no EVR.
 - a) Solucionar, para cada ponto de integração do EVR, o problema constitutivo local:
 - i. Propor um potencial incremental microscópico $\mathcal{P}_{\text{inc}_{\mathbf{y}}}$ através da Equação (3.11).
 - ii. Solucionar o princípio variacional,

$$\hat{\alpha}_{\mu}^{\text{opt}} = \arg \inf_{\hat{\alpha}_{\mu}} \mathcal{P}_{\text{inc}_{\mathbf{y}}} \Big|_{\mathbf{F}_{\mu_{n+1}} = \text{cte}} .$$

- iii. Calcular o campo de tensões microscópico incremental.

- Primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff,

$$\mathbf{P}^{\mu_{n+1}} = \left. \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}_{\mathbf{Y}}}}{\partial \mathbf{F}^{\mu_{n+1}}} \right|_{\hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\mu} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}_{\mu}^{\text{opt}}}.$$

- Tensor tensão de Cauchy,

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mu_{n+1}} = \frac{1}{J_{\mu_{n+1}}} \mathbf{P}^{\mu_{n+1}} \mathbf{F}^{\mu_{n+1}\text{T}}.$$

b) Resolver o problema de equilíbrio (balanço mecânico) do EVR:

- No formato referencial,

$$\int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{P}^{\mu_{n+1}} : \left(\nabla_{\mathbf{Y}} \delta \tilde{\mathbf{u}}^{\mu_{n+1}} \right) dV_{\mu} = 0, \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}^{\mu_{n+1}} \in \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_{\mu}}.$$

- Ou na versão espacial,

$$\int_{\Omega_{\mathbf{y}}} \boldsymbol{\sigma}^{\mu_{n+1}} : \text{sym} \left(\nabla_{\mathbf{y}} \delta \tilde{\mathbf{u}}^{\mu_{n+1}} \right) dv_{\mu} = 0, \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}^{\mu_{n+1}} \in \mathcal{U}_{\tilde{\mathbf{u}}_{\mu}}.$$

5. Calcular a tensão macroscópica (homogeneizada) incremental.

- Primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff,

$$\mathbf{P}_{n+1} = \frac{1}{V_{\mu}} \int_{\Omega_{\mathbf{Y}}} \mathbf{P}^{\mu_{n+1}} dV_{\mu}.$$

- Tensor tensão de Cauchy,

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \frac{1}{v_{\mu}} \int_{\Omega_{\mathbf{y}}} \boldsymbol{\sigma}^{\mu_{n+1}} dv_{\mu}, \text{ sse } \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_{\mu}} \subset \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_{\mu}}^{\text{per}}.$$

O formato espacial⁵ da formulação numérica multiescala apresentada aqui, encontra-se implementado em um código laboratorial não linear de elementos finitos tridimensional. Esse código foi desenvolvido em linguagem FORTRAN em colaboração com os colegas de doutorado

⁵O equilíbrio mecânico, em sua forma fraca, quando apresentado na versão espacial, geralmente é denominado de formulação Lagrangiana atualizada (Belytschko, Liu e Moran, 2000; Bathe, 2006).

Jan-Michel Colombo Farias e Paulo Bastos de Castro, com a supervisão do professor Eduardo Alberto Fancello. O código foi validado através de comparações com resultados obtidos de programas comerciais de elementos finitos e exemplos da literatura.

4 ESCOLHA DA ESCALA ESTRUTURAL PARA AS ANÁLISES EM MULTIESCALA

Esta seção tem o objetivo de apresentar o raciocínio que guiou a escolha da escala estrutural do tendão que faz parte do presente estudo. Esta escolha foi baseada na disponibilidade das seguintes informações básicas:

1. Informação, via imagem, da geometria das fases microestruturais. Esse item é fundamental para a devida proposição de geometrias para o EVR.
2. Dados experimentais sobre o comportamento micromecânico de cada fase (ou subfase) que compõe o EVR. Escolhidos e formulados os modelos constitutivos para cada fase, seus respectivos parâmetros devem ser estimados com base nesses dados experimentais.

A revisão bibliográfica da Seção 2.1 evidencia a complexa hierarquia estrutural dos tendões. Em vista disso, a Tabela 1 resume uma classificação possível de escalas estruturais, que destaca as principais fases materiais que cada uma comporta.

Tabela 1: Principais escalas estruturais de colágeno dos tendões e suas respectivas fases materiais microestruturais.

Estrutura Macroscópica	Fases Materiais Microscópicas	
	Estrutura de Colágeno	Matriz
Tendão	Fascículos	Matriz Interfascicular
Fascículo	Fibras	Células
Fibra	Fibrilas	Substância Base
Fibrila	Molécula de Colágeno	Água e Ligações Químicas

Uma pesquisa na literatura sobre o comportamento mecânico dos

tendões, fascículos e fibrilas sujeitos a ensaios monotônicos de tração⁶ traz resultados cujo resumo é exposto nos gráficos da Figura 4 e nas tabelas 2, 3 e 4.

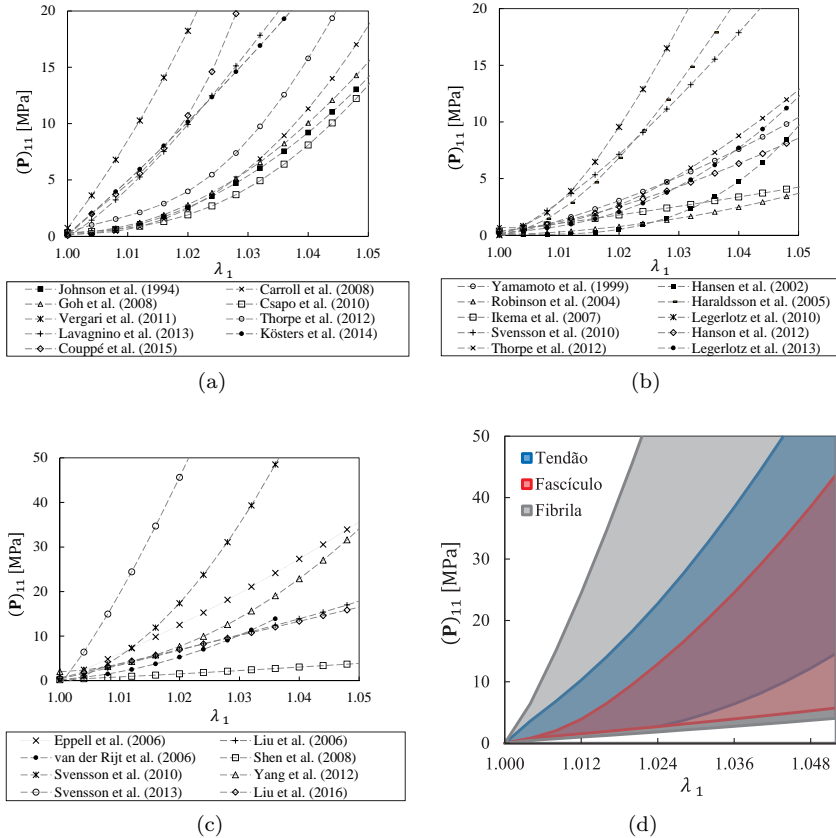


Figura 4: Curvas de tração em (a) tendões, (b) fascículos e (c) fibrilas. (d) Gráficos de área para os limites inferiores e superiores das curvas apresentadas em (a), (b) e (c). Vale enfatizar que o gráfico (d) apresenta apenas 3 cores, onde níveis de transparência entre as áreas foram utilizados visando facilitar a visualização.

⁶Não foram encontrados ensaios referentes às fibras, uma vez que as fibras são compostas por feixes de fibrilas em formato helicoidal.

Nessas são apresentadas as referências, tipos de estruturas de colágeno e as técnicas de medição empregadas para obter as curvas das figuras 4a, 4b e 4c, respectivamente. Os eixos desses gráficos indicam o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff e alongamento axial.

Na Figura 4d, plotam-se os gráficos de área referentes aos limites inferiores e superiores das curvas dos tendões, fascículos e fibrilas. Comparando as curvas dos tendões com a dos fascículos, percebe-se uma tendência média dos tendões se comportarem de forma mais rígida que os fascículos, em concordância com as evidências experimentais de Thorpe et al. (2012), que enfatizam que tal comportamento foi também observado por outros autores. Já as fibrilas trazem um amplo espectro de resultados experimentais que, se comparados com aqueles dos fascículos, apresentam um comportamento médio mais rígido. Esse fato também foi verificado experimentalmente em fascículos e fibrilas de um mesmo tipo de tendão (Svensson et al., 2010a). Portanto, em função dessas observações, que apontam um comportamento controverso entre tendão e fascículo e em função da maior disponibilidade de dados experimentais associados às fases materiais desse último, foi decidido realizar o presente estudo na escala do fascículo. Vale enfatizar que mesmo a variação da taxa de deformação sendo relevante no comportamento mecânico dessas estruturas em ensaios de tração, essa não afetará a análise qualitativa realizada acima.

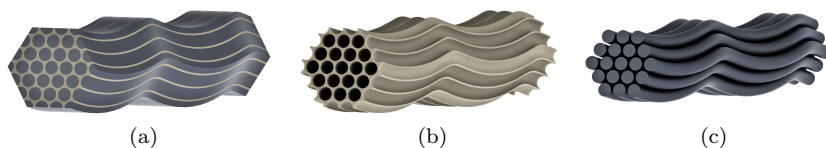


Figura 5: (a) Representação de um EVR do fascículo do tendão. (b) Matriz celular. (c) Fibras de colágeno. As fibras laterais do EVR foram omitidas para facilitar a visualização. Os dados experimentais referentes à geometria da hélice da fibra e frações volumétricas das fases materiais foram obtidas de Kalson et al. (2015).

Assim como apresentado na Tabela 1 e detalhado na Seção 2.1, um possível EVR do fascículo deve conter, necessariamente, a discriminação estrutural das fibras helicoidais de colágeno e da matriz celular. Esse arranjo microestrutural foi verificado via imagens por Starborg

et al. (2013) e mais recentemente em Kalson et al. (2015). Ademais, Kalson et al. (2015) fornecem dados médios referentes à geometria das fibras, tornando possível a representação espacial dessas. Com base nesses dados, na Figura 5 é ilustrada uma geometria de um EVR do fascículo, satisfazendo assim os requisitos do item 1.

Referente aos dados experimentais das fases microestruturais do fascículo (item 2), são utilizados neste trabalho os seguintes ensaios micromecânicos para o ajuste dos parâmetros constitutivos dos modelos materiais.

- *Comportamento viscoelástico da matriz celular*: ensaios cíclicos de nanoindentação na superfície de células de fibroblasto realizados com auxílio de microscopia de força atômica.
- *Comportamento viscoelástico das fibrilas na direção axial às moléculas de colágeno*: ensaios cíclicos de tração uniaxial em diferentes taxas de deformação realizados com auxílio de microscopia de força atômica.
- *Comportamento viscoelástico da substância base, transversal às fibrilas e de interações entre essas fases*: ensaios de nanoindentação cíclicos na superfície de fibras na direção transversal às fibrilas realizados com auxílio de microscopia de força atômica.

Mais detalhes sobre o emprego desses ensaios experimentais na identificação dos parâmetros constitutivos são abordados na Seção 6.1.

Tabela 2: Tipo de tendão e técnica de medição empregada nos ensaios mostrados na Figura 4a.

Referência	Tendão	Medição
Johnson et al. (1994)	Patelar humano	DIC
Carroll et al. (2008)	Patelar humano	US
Goh et al. (2008)	Cauda de rato	LVDT
Csapo et al. (2010)	Aquiles humano	US
Vergari et al. (2011)	Digital flexor equino	DIC
Thorpe et al. (2012)	Digital flexor equino	DIC
Lavagnino, Gardner e Arnoczky (2013)	Cauda de rato	LVDT
Kösters et al. (2014)	Patelar humano	US
Coupe et al. (2015)	Aquiles humano	US

DIC: *Correlação Digital de Imagem*

US: *Ultrasonografia*

LVDT: *Transformador Diferencial de Variação Linear*

Tabela 3: Tipo de fascículo e técnica de medição empregada nos ensaios mostrados na Figura 4b.

Referência	Fascículo	Medição
Yamamoto, Hayashi e Yamamoto (1999)	Patelar de coelho	DIC
Hansen, Weiss e Barton (2002)	Cauda de rato	DIC
Robinson et al. (2004)	Cauda de rato	DIC
Haraldsson et al. (2005)	Patelar humano	DIC
Ikema et al. (2007)	Patelar de coelho	DIC
Legerlotz, Riley e Screen (2010)	Cauda de rato	DIC
Svensson et al. (2010a)	Patelar humano	DIC
Hanson, Aagaard e Magnusson (2012)	Aquiles humano	DIC
Thorpe et al. (2012)	Digital flexor equino	DIC
Legerlotz, Riley e Screen (2013)	Digital extensor bovino	DIC

DIC: *Correlação Digital de Imagem*

Tabela 4: Tipo de fibrila e técnica de medição empregada nos ensaios mostrados na Figura 4c.

Referência	Fibrila	Medição
Epell et al. (2006)	Pepino do mar	MEMS
Liu et al. (2006)	Pepino do mar	MEMS
Van Der Rijt et al. (2006)	Aquiles bovino	AFM
Shen et al. (2008)	Pepino do mar	MEMS
Svensson et al. (2010b)	Patelar humano	AFM
Yang et al. (2012)	Aquiles bovino	AFM
Svensson et al. (2013)	Patelar humano	AFM
Liu, Ballarini e Epell (2016)	Patelar de rato	MEMS

MEMS: *Sistemas Microeletromecânicos*
 AFM: *Microscopia de Força Atômica*

5 MODELAMENTO CONSTITUTIVO VARIACIONAL DAS FASES MICROESTRUTURAIS

Esta seção tem por objetivo particularizar os conceitos introduzidos na Seção 3.1, na formulação de modelos de viscoelasticidade em deformações finitas para as fases materiais microestruturais que compõem o EVR do fascículo do tendão (fibras e matriz celular). As hipóteses realizadas durante a formulação visam a consistência entre a morfologia de cada fase material e os ensaios mecânicos disponíveis na literatura e citados na seção anterior.

5.1 Modelo para as Fibras de Colágeno

5.1.1 Cinemática

Seguindo os desenvolvimentos de [Nguyen, Jones e Boyce \(2007\)](#), a cinemática de um ponto material de fibra de colágeno está definida pelo gradiente de deformação \mathbf{F} que é integralmente transmitido para suas duas fases principais: fibrilas e matriz da fibra (subscritos “f” e “m”). Cada uma dessas admite uma decomposição multiplicativa em parcelas elástica e viscosa (sobrescritos “e” e “v”), relacionadas aos braços de Maxwell da representação reológica ilustrada na Figura 6a. Em vista disso, e seguindo um modelo de misturas matriz-fibrilas, tem-se:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_m^e \mathbf{F}_m^v = \mathbf{F}_f^e \mathbf{F}_f^v. \quad (5.1)$$

Sabendo que o tensor direito de Cauchy-Green é dado por $\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ e em vista da decomposição (5.1), pode-se definir de forma análoga os tensores direito de Cauchy-Green viscosos e elásticos referentes à matriz e às fibrilas como,

$$\mathbf{C}_m^e \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{F}_m^{eT} \mathbf{F}_m^e, \quad \mathbf{C}_m^v \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{F}_m^{vT} \mathbf{F}_m^v, \quad (5.2)$$

$$\mathbf{C}_f^e \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{F}_f^{eT} \mathbf{F}_f^e, \quad \mathbf{C}_f^v \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{F}_f^{vT} \mathbf{F}_f^v. \quad (5.3)$$

A parte simétrica do gradiente de velocidade $\mathbf{l} \stackrel{\text{def}}{=} \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}$ define a taxa de deformação espacial, isto é, $\mathbf{d} \stackrel{\text{def}}{=} \text{sym}(\mathbf{l})$. Contudo, neste

trabalho, as taxas de deformação viscosas são definidas como,

$$\mathbf{d}_m^{\text{def}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{l}_m^v = \dot{\mathbf{F}}_m^v \mathbf{F}_m^{v-1}, \quad \mathbf{d}_f^{\text{def}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{l}_f^v = \dot{\mathbf{F}}_f^v \mathbf{F}_f^{v-1}, \quad (5.4)$$

onde considera-se o tensor vorticidade (*spin*) viscoso nulo, isto é, skew (\mathbf{l}_m^v) = $\mathbf{0}$ e skew (\mathbf{l}_f^v) = $\mathbf{0}$ (Anand e Gurtin, 2003, Gurtin e Anand, 2005).

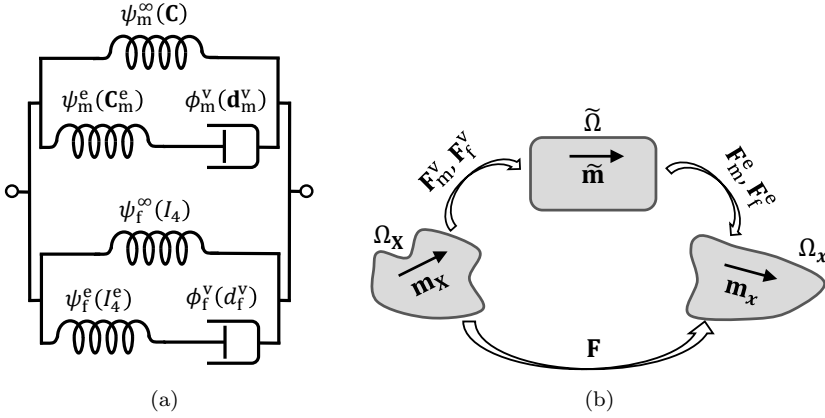


Figura 6: (a) Representação esquemática do modelo reológico da fibra. (b) Decomposição multiplicativa do gradiente de deformação.

A decomposição multiplicativa (5.1) pode ser ilustrada através da Figura 6b, onde introduzem-se os vetores unitários \mathbf{m}_x , $\tilde{\mathbf{m}}$ e \mathbf{m}_x referentes às direções axiais das fibrilas nas configurações referencial Ω_x , intermediária $\tilde{\Omega}$ e espacial Ω_x , respectivamente. Dessa cinemática, resultam os alongamentos,

$$\lambda_f \mathbf{m}_x = \mathbf{F} \mathbf{m}_x \quad \Rightarrow \quad \lambda_f = \sqrt{\mathbf{C} : \mathbf{A}_x}, \quad (5.5)$$

$$\lambda_f^v \tilde{\mathbf{m}} = \mathbf{F}_f^v \mathbf{m}_x \quad \Rightarrow \quad \lambda_f^v = \sqrt{\mathbf{C}_f^v : \mathbf{A}_x}, \quad (5.6)$$

$$\lambda_f^e \mathbf{m}_x = \mathbf{F}_f^e \tilde{\mathbf{m}} \quad \Rightarrow \quad \lambda_f^e = \sqrt{\mathbf{C}_f^e : \tilde{\mathbf{A}}}, \quad (5.7)$$

onde $\mathbf{A}_x \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{m}_x \otimes \mathbf{m}_x$ e $\tilde{\mathbf{A}} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\mathbf{m}} \otimes \tilde{\mathbf{m}}$ são chamados de tensores estruturais. Das relações (5.5) e (5.7) definem-se os invariantes,

$$I_4 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{C} : \mathbf{A}_x = (\lambda_f)^2, \quad (5.8)$$

$$I_4^e \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{C}_f^e : \tilde{\mathbf{A}} = (\lambda_f^e)^2, \quad (5.9)$$

que representam o quadrado dos alongamentos total e elástico das fibrilas na direção axial às moléculas de colágeno. Utilizando as relações (5.5-5.7), pode-se mostrar que o alongamento total na direção das fibrilas satisfaz a decomposição

$$\lambda_f = \lambda_f^e \lambda_f^v. \quad (5.10)$$

Em vista das equações (5.4) e (5.6), a taxa de deformação viscosa na direção das fibrilas pode ser definida como

$$d_f^v \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{d}_f^v : \tilde{\mathbf{A}} = \frac{\dot{\lambda}_f^v}{\lambda_f^v}. \quad (5.11)$$

5.1.2 Considerações sobre o Modelo Fenomenológico das Fibrilas

Com base nas ilustrações da Figura 7, considera-se que o EVR da fibra é composto por dois materiais distintos: um referente à substância base e outro representando as fibrilas, os quais são modelados pelas energias ψ_{sb} e ψ_{fibrila} , respectivamente. Em vista disso, a energia de deformação homogeneizada da fibra ψ_{fibra} , consistentes com a restrição cinemática de Taylor (regra das misturas, Equação (3.30)), resulta na expressão analítica:

$$\psi_{\text{fibra}} \stackrel{\text{def}}{=} (1 - \nu_f) \psi_{\text{sb}} + \nu_f \psi_{\text{fibrila}}, \quad (5.12)$$

onde ν_f é a fração volumétrica de fibrilas.

Neste trabalho, o comportamento mecânico das fibrilas é representado segundo os clássicos modelos de isotropia transversa baseados no quarto invariante (5.8). Tais modelos estão bem estabelecidos na literatura e são amplamente empregados no modelamento de tecidos biológicos fibrosos (Schröder e Neff, 2003; Merodio e Ogden, 2005; Ehret e Itskov, 2007; Holzapfel e Ogden, 2009; Helfenstern et al., 2010; Cheviakov, Ganghoffer e St.Jean, 2015). Com base nessa teoria constitutiva, a energia de deformação da fibrila é definida como:

$$\psi_{\text{fibrila}} \stackrel{\text{def}}{=} \psi_{\text{mf}} + \psi_f, \quad (5.13)$$

onde ψ_{mf} modela a matriz da fibrila e ψ_f tem por objetivo contabilizar a elevada rigidez verificada em ensaios experimentais na direção axial às moléculas de colágeno (ver EVR da fibrila na Figura 7).

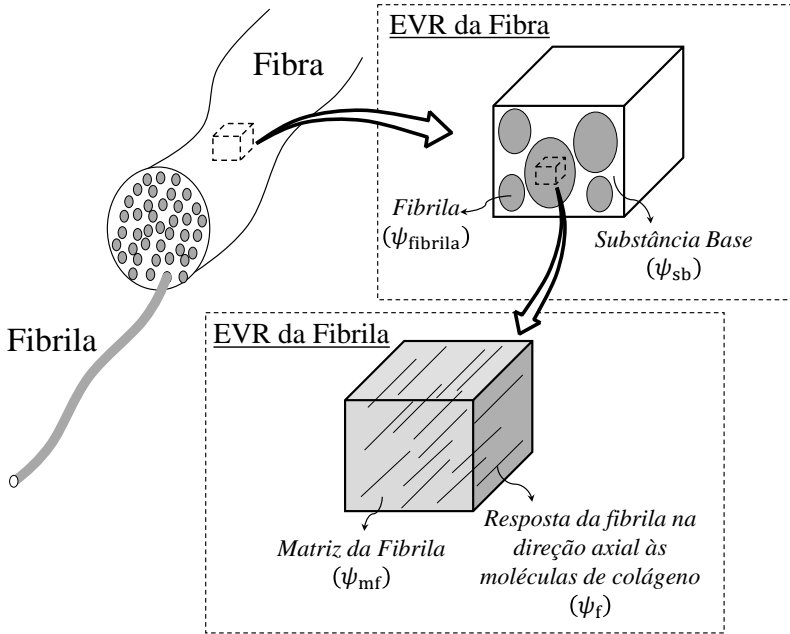


Figura 7: Elementos de volume representativos da fibra e da fibrila e respectivos modelos constitutivos microestruturais.

Os parâmetros materiais do conjunto energético $\{\psi_{sb}, \psi_{mf}, \psi_f\}$ dos modelos (5.12) e (5.13) devem ser calibrados com base em dados experimentais. Referente ao modelo ψ_f , os correspondentes parâmetros podem ser estimados através de ensaios experimentais de tração em fibrilas. Essa estratégia é empregada neste trabalho, sendo que mais detalhes são apresentados na Seção 6.1.2. Por outro lado, a caracterização independente de ψ_{sb} e ψ_{mf} não é trivial, devido à falta de dados experimentais. Para contornar essa dificuldade tecnológica, a energia de deformação da fibra é reapresentada como:

$$\psi_{fibrila} = \psi_m + \nu_f \psi_f, \quad \psi_m \stackrel{\text{def}}{=} (1 - \nu_f) \psi_{sb} + \nu_f \psi_{mf} \quad (5.14)$$

a qual emerge da substituição da Equação (5.13) em (5.12). Nesse novo formato, identifica-se ψ_m como a resposta das matrizes da fibra (substância base e a matriz da fibrila) em um senso homogêneo de Taylor (regra das misturas). Assim, o presente modelamento considera ψ_m como uma função isotrópica única, que tem por objetivo modelar a

resposta conjunta de ψ_{sb} e ψ_{mf} . Nesse caso em particular, ensaios de nanoindentação em fibras, na direção transversal às fibrilas, são utilizados para estimar os parâmetros constitutivos de ψ_m (mais detalhes na Seção 6.1.3).

No modelo proposto o potencial de dissipação φ da Equação (3.4) é nulo. Portanto, seguindo o arranjo reológico da Figura 6a, e de forma análoga a (5.14), o comportamento viscoso da fibra é definido pela soma dos potenciais referentes aos dispositivos viscosos dos braços de Maxwell, isto é,

$$\phi_{\text{fibra}} \stackrel{\text{def}}{=} \phi_m^v + \nu_f \phi_f^v. \quad (5.15)$$

Neste ponto, retoma-se a cinemática apresentada na seção anterior e defini-se o conjunto de variáveis internas por $\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \{\mathbf{F}_m^v, \lambda_f^v\}$. Assim, com base na representação reológica da Figura 6a, as contribuições energéticas totais das matrizes da fibra ψ_m e na direção axial às fibrilas ψ_f são decompostas aditivamente em,

$$\psi_m(\mathbf{F}, \mathbf{F}_m^v) \stackrel{\text{def}}{=} \psi_m^\infty(\mathbf{C}) + \psi_m^e(\mathbf{C}_m^e), \quad (5.16)$$

$$\psi_f(\lambda_f, \lambda_f^v) \stackrel{\text{def}}{=} \psi_f^\infty(I_4) + \psi_f^e(I_4^e), \quad (5.17)$$

onde o subscrito ∞ representa a resposta independente do tempo.

Em relação aos potenciais de dissipação (5.15), é conveniente apresentá-los em função da taxa objetiva de alguma medida de deformação. Portanto, neste trabalho, escolhem-se as taxas de deformação viscosas da matriz e na direção das fibrilas para tal, resultando em $\phi_m^v = \phi_m^v(\mathbf{d}_m^v)$ e $\phi_f^v = \phi_f^v(d_f^v)$.

No modelo em questão, propõe-se que a resposta à compressão da contribuição das fibrilas na direção axial às moléculas de colágeno deve ser nula. Desse modo, motivado pelos desenvolvimentos de [Vassoler, Reips e Fancello \(2012\)](#), definem-se as energias de Helmholtz por,

$$\psi_f^\infty \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < \lambda_f < 1 \\ \bar{\psi}_f^\infty(I_4) & \text{se } \lambda_f \geq 1 \end{cases}, \quad (5.18)$$

$$\psi_f^e \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < \lambda_f^e < 1 \\ \bar{\psi}_f^e(I_4^e) & \text{se } \lambda_f^e \geq 1 \end{cases}, \quad (5.19)$$

e o potencial de dissipação como,

$$\phi_f^v \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & \text{se } d_f^v < 0 \\ \bar{\phi}_f^v(d_f^v) & \text{se } d_f^v \geq 0 \end{cases} . \quad (5.20)$$

Em vista das dependências funcionais dos potenciais termodinâmicos e recapitulando o modelamento constitutivo variacional (Seção 3.1), o potencial em taxas (3.7) pode ser separado aditivamente em uma contribuição referente às matrizes e outra relacionada à rigidez uniaxial das fibrilas, isto é,

$$\mathcal{P}^{\text{fibra}} = \mathcal{P}^{\text{m}} + \nu_f \mathcal{P}^{\text{f}}, \quad (5.21)$$

onde $\mathcal{P}^{\text{m}} \stackrel{\text{def}}{=} \dot{\psi}_m + \phi_m^v$ e $\mathcal{P}^{\text{f}} \stackrel{\text{def}}{=} \dot{\psi}_f + \phi_f^v$.

O tratamento incremental das equações constitutivas, segundo a abordagem variacional considerada, é apresentado na sequência.

5.1.3 Potencial Incremental e Regra de Atualização das Variáveis Internas

A contraparte incremental do potencial em taxas (5.21) resulta em,

$$\mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{fibra}} = \mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{m}} + \nu_f \mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{f}}, \quad (5.22)$$

onde o potencial incremental referente às matrizes é dado por

$$\mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{m}} \stackrel{\text{def}}{=} \psi_m(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{m_{n+1}}^v) - \psi_m(\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_{m_n}^v) + \quad (5.23)$$

$$\Delta t \left[\phi_m^v(\dot{\mathbf{d}}_m^v) \right] \Big|_{t_n+\vartheta},$$

e o potencial incremental das fibrilas é definido como,

$$\mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{f}} \stackrel{\text{def}}{=} \psi_f(\lambda_{f_{n+1}}^v, \lambda_{f_{n+1}}^v) - \psi_f(\lambda_{f_n}^v, \lambda_{f_n}^v) + \quad (5.24)$$

$$\Delta t \left[\phi_f^v(\dot{d}_f^v) \right] \Big|_{t_n+\vartheta}.$$

Neste ponto, escolhe-se empregar o clássico algoritmo de Euler (Simo e Hughes, 1998) para a discretização das variáveis internas, de

maneira tal que as taxas de deformação (5.4) e (5.11) são aproximadas como:

$$\mathbf{d}_m^v \approx \dot{\mathbf{d}}_m^v = \mathring{\mathbf{F}}_m^v \mathbf{F}_{m_{n+\vartheta}}^{v-1}, \quad (5.25)$$

$$d_f^v \approx \dot{d}_f^v = \mathring{\lambda}_f^v \left(\lambda_{f_{n+\vartheta}}^v \right)^{-1}, \quad (5.26)$$

onde as taxas das variáveis internas são discretizada através de

$$\mathring{\mathbf{F}}_m^v \approx \mathring{\mathbf{F}}_m^v = \frac{1}{\Delta t} \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v - \mathbf{F}_{m_n}^v \right), \quad (5.27)$$

$$\mathring{\lambda}_f^v \approx \mathring{\lambda}_f^v = \frac{1}{\Delta t} \left(\lambda_{f_{n+1}}^v - \lambda_{f_n}^v \right), \quad (5.28)$$

sendo que

$$\mathbf{F}_{m_{n+\vartheta}}^v = (1 - \vartheta) \mathbf{F}_{m_n}^v + \vartheta \mathbf{F}_{m_{n+1}}^v, \quad (5.29)$$

$$\lambda_{f_{n+\vartheta}}^v = (1 - \vartheta) \lambda_{f_n}^v + \vartheta \lambda_{f_{n+1}}^v. \quad (5.30)$$

As equações (5.29) e (5.30) devem ser interpretadas como uma avaliação em ponto intermediário do estado das variáveis internas, controladas pelo parâmetro ϑ . Escolhendo o parâmetro $\vartheta = 1$ (referente à uma regra implícita), a substituição de (5.27) em (5.25) e (5.28) em (5.26) resultam nas seguintes regras de atualização:

$$\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v = \left(\mathbf{I} - \Delta t \dot{\mathbf{d}}_m^v \right)^{-1} \mathbf{F}_{m_n}^v, \quad (5.31)$$

$$\lambda_{f_{n+1}}^v = \left(1 - \Delta t \dot{d}_f^v \right)^{-1} \lambda_{f_n}^v, \quad (5.32)$$

onde \mathbf{I} representa o tensor identidade de segunda ordem. Nota-se, então, que as variáveis internas $\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v = \mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \left(\dot{\mathbf{d}}_m^v \right)$ e $\lambda_{f_{n+1}}^v = \lambda_{f_{n+1}}^v \left(\dot{d}_f^v \right)$ tornam-se dependentes de $\dot{\mathbf{d}}_m^v$ e \dot{d}_f^v , respectivamente.

Neste ponto, é importante enfatizar uma questão. A regra de atualização (5.31) possui uma expressão alternativa, obtida através do mapeamento exponencial (Weber e Anand, 1990):

$$\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v = \exp \left(\Delta t \dot{\mathbf{d}}_m^v \right) \mathbf{F}_{m_n}^v. \quad (5.33)$$

Essa última expressão tem sido extensivamente empregada na literatura em diversos modelos de fluxo inelástico (de Souza Neto, Peric e Owen, 2009), juntamente com a parametrização espectral de $\dot{\mathbf{d}}_m^v$, em potenciais isotrópicos arbitrários ou em combinação com o modelo

isotrópico de Hencky, visando obter algumas vantagens numéricas (Fancello, Ponthot e Stainier, 2006; Fancello, Ponthot e Stainier, 2008; Vas-soler, Reips e Fancello, 2012). Uma das vantagens para uso de (5.33) é a propriedade que sob a consideração de fluxo viscoso incompressível, a relação incremental $\text{tr}(\dot{\mathbf{d}}_m^v) = 0 \Leftrightarrow \det(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v) = 1$ é automaticamente respeitada.

Por outro lado, em vista da regra de atualização (5.31), o problema constitutivo variacional é formulado em um formato totalmente tensorial. Embora essa abordagem implica na solução simultânea das seis componentes independentes de $\dot{\mathbf{d}}_m^v$, a formulação mantém uma estrutura adequada na consideração de potenciais anisotrópicos acoplados. Além disso, não há necessidade de realizar a decomposição espectral de $\dot{\mathbf{d}}_m^v$, nem o cálculo das primeiras e segundas derivadas dessas quantidades espectrais. Ademais, se a restrição de fluxo viscoso incompressível for considerada, essa pode ser incorporada de forma trivial junto ao problema variacional por meio de um funcional Lagrangiano, cujos detalhes operacionais são expostos na próxima seção.

Por fim, com base nos argumentos previamente citados, escolheu-se a abordagem (5.31) em detrimento de (5.33) para o presente estudo.

5.1.4 Algoritmo de Atualização Variacional

A atualização constitutiva variacional representa o algoritmo local do modelo material, sendo composto de duas etapas: a primeira consiste na solução do problema local de otimização e posterior atualização das variáveis internas e a segunda no cálculo da tensão atualizada (tensão ao fim do incremento).

Solução do Problema Variacional

Em vista das parametrizações (5.31) e (5.32), as taxas de deformação viscosas tornam-se as variáveis primais do problema variacional. Desse modo, o princípio de mínimo (3.12) pode ser reescrito como,

$$\left(\dot{\mathbf{d}}_m^v, \dot{d}_f^v\right)^{\text{opt}} = \arg \inf_{(\dot{\mathbf{d}}_m^v, \dot{d}_f^v)} \left(\mathcal{P}_{\text{inc}}^m + \nu_f \mathcal{P}_{\text{inc}}^f\right) \Big|_{\mathbf{F}_{n+1} = \text{cte}}. \quad (5.34)$$

Sabendo que,

$$\mathcal{P}_{\text{inc}}^m = \mathcal{P}_{\text{inc}}^m \left[\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \left(\dot{\mathbf{d}}_m^v \right) \right], \quad \mathcal{P}_{\text{inc}}^f = \mathcal{P}_{\text{inc}}^f \left[\lambda_{f_{n+1}}, \lambda_{f_{n+1}}^v \left(\dot{d}_f^v \right) \right] \quad (5.35)$$

nota-se que o problema de otimização (5.34) é desacoplado em relação aos seus argumentos minimizantes. Desse modo, esse pode ser decomposto em dois problemas variacionais independentes, isto é, um referente à matriz:

$$\left(\dot{\mathbf{d}}_m^v \right)^{\text{opt}} = \arg \inf_{\dot{\mathbf{d}}_m^v} \mathcal{P}_{\text{inc}}^m |_{\mathbf{F}_{n+1} = \text{cte}}, \quad (5.36)$$

e outro que diz respeito à contribuição axial das fibrilas:

$$\left(\dot{d}_f^v \right)^{\text{opt}} = \arg \inf_{\dot{d}_f^v} \mathcal{P}_{\text{inc}}^f |_{\lambda_{f_{n+1}} = \text{cte}}. \quad (5.37)$$

No princípio de mínimo (5.34), a fração volumétrica de fibrilas ν_f representa um fator de escala, não influenciando no argumento minimizante. Portanto, ν_f é omitida em (5.37).

Neste trabalho, o fluxo viscoso da matriz é considerado incompressível. Assim, a restrição cinemática $J_{m_{n+1}}^v \stackrel{\text{def}}{=} \det \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \right) = 1$ é considerada na solução de (5.36) pela introdução do funcional Lagrangiano:

$$\mathcal{L} \left(\dot{\mathbf{d}}_m^v, \gamma_{n+1} \right) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{P}_{\text{inc}}^m + \gamma_{n+1} \left(J_{m_{n+1}}^v - 1 \right), \quad (5.38)$$

onde γ_{n+1} é um multiplicador de Lagrange. Consequentemente, o princípio variacional (5.36) é rerepresentado por,

$$\left(\dot{\mathbf{d}}_m^v, \gamma_{n+1} \right)^{\text{opt}} = \arg \underset{(\dot{\mathbf{d}}_m^v, \gamma_{n+1})}{\text{stat}} \mathcal{L} |_{\mathbf{F}_{n+1} = \text{cte}}. \quad (5.39)$$

A solução dos problemas variacionais (5.37) e (5.39) definem o algoritmo de atualização das variáveis internas. Uma vez que as soluções ótimas $\left(\dot{\mathbf{d}}_m^v \right)^{\text{opt}}$ e $\left(\dot{d}_f^v \right)^{\text{opt}}$ são obtidas, as variáveis internas são atualizadas através das equações (5.31) e (5.32). A estratégia de solução empregada aqui baseia-se no procedimento de Newton-Raphson, onde mais detalhes operacionais são apresentados no Apêndice A.

É importante enfatizar que a simetria de $\dot{\mathbf{d}}_m^v$ não foi introduzida como uma restrição no problema (5.39). Entretanto, sua natureza si-

métrica é considerada através das derivadas direcionais requeridas pelo procedimento de Newton-Raphson, resultando em apropriados operadores de Fréchet (ver [Itskov \(2002\)](#) e [Jog \(2007\)](#) para mais detalhes sobre derivadas direcionais em espaços simétricos). Nesse caso particular, as soluções resultantes do princípio (5.39) sempre retornarão tensores simétricos \mathbf{d}_m^v .

Tensão Incremental e Módulo Tangente Consistente

Através da definição (3.13) e levando em consideração o potencial (5.22), o formato incremental do primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff da fibra é calculado como:

$$\mathbf{P}_{n+1}^{\text{fibra}} = \left. \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{fibra}}}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} \right|_{\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}^{\text{opt}}} = \left(\mathbf{P}_{m_{n+1}} + \nu_f \mathbf{P}_{f_{n+1}} \right) \Big|_{\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}^{\text{opt}}}, \quad (5.40)$$

onde definem-se as tensões nas matrizes da fibra e na fibrila respectivamente por:

$$\mathbf{P}_{m_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^m}{\partial \mathbf{F}_{n+1}}, \quad \mathbf{P}_{f_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^f}{\partial \mathbf{F}_{n+1}}. \quad (5.41)$$

Em vista do potencial (5.23), a contribuição da tensão nas matrizes da fibra é obtida através de

$$\mathbf{P}_{m_{n+1}} = \frac{\partial \psi_m}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} = \frac{\partial \psi_m^\infty(\mathbf{C}_{n+1})}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} + \frac{\partial \psi_m^e(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e)}{\partial \mathbf{F}_{n+1}}. \quad (5.42)$$

Realizando as derivadas parciais, chega-se em,

$$\mathbf{P}_{m_{n+1}} = \mathbf{F}_{n+1} \mathbf{S}_{m_{n+1}}, \quad \mathbf{S}_{m_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{S}_{m_{n+1}}^\infty + \mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-1}} \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e \mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-T}}, \quad (5.43)$$

onde $\mathbf{S}_{m_{n+1}}$ é o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff das matrizes da fibra, dependente das seguintes definições de tensão:

$$\mathbf{S}_{m_{n+1}}^\infty \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \psi_m^\infty(\mathbf{C}_{n+1})}{\partial \mathbf{C}_{n+1}}, \quad \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \psi_m^e(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e)}{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}. \quad (5.44)$$

A tensão da fibrila é, analogamente, calculada como

$$\mathbf{P}_{f_{n+1}} = \frac{\partial \psi_f}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} = \frac{\partial \psi_f^\infty(I_{4_{n+1}})}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} + \frac{\partial \psi_f^e(I_{4_{n+1}}^e)}{\partial \mathbf{F}_{n+1}}, \quad (5.45)$$

resultando em,

$$\mathbf{P}_{f_{n+1}} = \mathbf{F}_{n+1} \mathbf{S}_{f_{n+1}}, \quad \mathbf{S}_{f_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} S_{f_{n+1}} \mathbf{A}_x, \quad (5.46)$$

onde $\mathbf{S}_{f_{n+1}}$ é o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff da fibrila, dependente das seguintes tensões escalares:

$$S_{f_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} S_{f_{n+1}}^\infty + \left(\lambda_{f_{n+1}}^v\right)^{-2} S_{f_{n+1}}^e, \quad (5.47)$$

$$S_{f_{n+1}}^\infty \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \psi_f^\infty(I_{4_{n+1}})}{\partial I_{4_{n+1}}}, \quad S_{f_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \psi_f^e(I_{4_{n+1}}^e)}{\partial I_{4_{n+1}}^e}. \quad (5.48)$$

Visando a implementação do modelo em um código não linear de elementos finitos, o módulo tangente material

$$\mathbb{C}_{x_{n+1}}^{\text{fibra}} = 2 \frac{d\mathbf{S}_{f_{n+1}}^{\text{fibra}}}{d\mathbf{C}_{n+1}}, \quad (5.49)$$

consistente como a discretização das equações constitutivas, deve ser fornecido (Simo e Taylor, 1985). Uma forma fechada para tal tensor é apresentada no Apêndice B.

É importante mencionar que todas as derivadas apresentadas neste trabalho (expressões das tensões, operadores de Newton-Raphson e módulos tangente consistentes) tiveram suas implementações verificadas mediante comparação com diferenciação numérica empregando os métodos de diferenças finitas ou derivada complexa⁷. O correto cômputo desses operados se refletiram nas altas taxas de convergência⁸ verificadas tanto para as soluções dos problemas constitutivos locais como no equilíbrio global de elementos finitos.

⁷Mais detalhes sobre o método da derivada complexa (do inglês *complex-step derivative*) podem ser obtidos em Lyness e Moler (1967), Carniel (2013) e Kiran e Khandelwal (2014).

⁸A taxa de convergência do algoritmo de Newton-Raphson, para sistemas não lineares bem comportados, deve ser no mínimo quadrática próximo à solução ótima.

5.2 Modelo para a Matriz Celular

No presente trabalho, a matriz celular é considerada um meio homogêneo e isotrópico. Assim, a sua representação utiliza o mesmo modelo isotrópico utilizado para as matrizes das fibras apresentado na seção anterior. De forma análoga a (5.23), o potencial incremental referente à matriz celular é definido como:

$$\mathcal{P}_{\text{inc}}^c \stackrel{\text{def}}{=} \psi_c \left(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{c_{n+1}}^v \right) - \psi_c \left(\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_{c_n}^v \right) + \Delta t \left[\phi_c^v \left(\dot{\mathbf{d}}_c^v \right) \right] \Big|_{t_{n+\vartheta}}, \quad (5.50)$$

onde a energia livre de Helmholtz das células é representada por

$$\psi_c \left(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{c_{n+1}}^v \right) \stackrel{\text{def}}{=} \psi_c^\infty \left(\mathbf{C}_{n+1} \right) + \psi_c^e \left(\mathbf{C}_{c_{n+1}}^e \right). \quad (5.51)$$

Em vista disso, a tensão incremental na matriz celular é calculada como,

$$\mathbf{P}_{n+1}^c = \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^c}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} \Big|_{\dot{\mathbf{d}}_c^v = (\dot{\mathbf{d}}_c^v)^{\text{opt}}}. \quad (5.52)$$

Vale enfatizar que a consideração de fluxo visco incompressível e a estratégia de solução do problema variacional da matriz celular seguem as mesmas abordagens empregadas na solução do princípio variacional (5.39) referente às matrizes da fibra.

5.3 Escolha de Potenciais Viscoelásticos Específicos

Os potenciais apresentados nesta seção são empregados no modelamento do comportamento fenomenológico das fases materiais da microestrutura. Na Seção 3.2, as grandezas microestruturais foram introduzidas distinguindo os subscritos $(\cdot)_{\mathbf{y}}$, $(\cdot)_{\mathbf{y}}$ ou $(\cdot)_{\mu}$ (ver rodapé na página 50). Entretanto, essa notação será omitida nesta seção por questões de clareza de exposição.

Com base no formato característico das curvas experimentais uniaxiais de tração em fibrilas (ver Figura 4c), o modelo proposto que contempla a resposta unidirecional da fibrila na direção preferencial às

moléculas de colágeno utiliza os seguintes potenciais:

$$\begin{cases} \bar{\psi}_f^\infty(I_4) \stackrel{\text{def}}{=} k_f^\infty (I_4 - 1)^{\alpha_f^\infty} \\ \bar{\psi}_f^e(I_4^e) \stackrel{\text{def}}{=} k_f^e (I_4^e - 1)^{\alpha_f^e} \\ \bar{\phi}_f^v(d_f^v) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\eta_f^v}{2} (d_f^v)^2 \end{cases}, \quad (5.53)$$

onde $\{k_f^\infty > 0, \alpha_f^\infty > 2, k_f^e > 0, \alpha_f^e > 2, \eta_f^v > 0\}$ é o conjunto de parâmetros constitutivos. Em (5.53), as energias de deformação foram obtidas de [Balzani et al. \(2006\)](#) e o potencial de dissipação apresenta forma quadrática em função da taxa de deformação viscosa na direção axial às fibrilas.

O comportamento viscoelástico das matrizes da fibra é modelado através dos potenciais:

$$\begin{cases} \psi_m^\infty(\mathbf{C}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu_m^\infty}{2} [\text{tr}(\mathbf{C}) - 3] - \mu_m^\infty \ln(J) + \frac{\kappa_m^\infty}{2} [\ln(J)]^2 \\ \psi_m^e(\mathbf{C}_m^e) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu_m^e}{2} [\text{tr}(\mathbf{C}_m^e) - 3] - \mu_m^e \ln(J_m^e) \\ \phi_m^v(\mathbf{d}_m^v) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\eta_m^v}{2} \mathbf{d}_m^v : \mathbf{d}_m^v \end{cases}, \quad (5.54)$$

onde $\{\mu_m^\infty, \kappa_m^\infty, \mu_m^e, \eta_m^v\}$ são os parâmetros materiais. Nesse conjunto de potenciais, as energias livres de Helmholtz são do tipo Neo-Hookean, apresentadas em [Bonet e Wood \(2008\)](#), e o potencial de dissipação é quadrático na taxa de deformação viscosa das matrizes da fibra.

Finalmente, para o modelamento do comportamento viscoelástico da matriz celular, empregam-se potenciais com os mesmos formatos de (5.54), isto é,

$$\begin{cases} \psi_c^\infty(\mathbf{C}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu_c^\infty}{2} [\text{tr}(\mathbf{C}) - 3] - \mu_c^\infty \ln(J) + \frac{\kappa_c^\infty}{2} [\ln(J)]^2 \\ \psi_c^e(\mathbf{C}_c^e) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu_c^e}{2} [\text{tr}(\mathbf{C}_c^e) - 3] - \mu_c^e \ln(J_c^e) \\ \phi_c^v(\mathbf{d}_c^v) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\eta_c^v}{2} \mathbf{d}_c^v : \mathbf{d}_c^v \end{cases}, \quad (5.55)$$

onde $\{\mu_c^\infty, \kappa_c^\infty, \mu_c^e, \eta_c^v\}$ é o conjunto de parâmetros constitutivos da matriz celular.

Nas expressões de Neo-Hookean $\psi_{(\cdot)}^\infty$, enquanto o parâmetro $\kappa_{(\cdot)}^\infty$

controla mudanças volumétricas, $\mu_{(\cdot)}^{\infty}$ contabiliza efeitos distorcionais. Para considerar uma resposta constitutiva incompressível, os valores de $\kappa_{(\cdot)}^{\infty}$ são tipicamente na ordem de $\sim (10^3 - 10^4) \mu_{(\cdot)}^{\infty}$ (Bonet e Wood, 2008).

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1 Identificação dos Parâmetros Constitutivos dos Modelos Microestruturais

Nesta seção são apresentadas as estratégias numéricas empregadas para estimar os parâmetros constitutivos dos modelos materiais formulados na Seção 5.3. As simulações numéricas de elementos finitos foram rodadas no programa comercial Abaqus, onde os modelos viscoelásticos foram implementados na subrotina de usuário UMAT. Essa subrotina é amplamente empregada em diversos trabalhos computacionais. Desse modo, não é o objetivo desta tese detalhar seu uso, sendo que mais detalhes podem ser facilmente encontrados na literatura da área.

6.1.1 Resposta da Matriz Celular

O objetivo desta seção é estimar os parâmetros constitutivos do modelo viscoelástico da matriz celular com base na resposta de células de fibroblasto submetidas a ensaios cíclicos de nanoindentação. Em vista desses ensaios, foi realizado um estudo sobre a compressibilidade, rigidez e dissipação local desse tipo de células, visando as investigações multiescala subsequentes.

Compressibilidade Local das Células

A identificação dos parâmetros constitutivos da matriz celular foi executada mediante a simulação de experimentos cíclicos de nanoindentação realizados por [Nawaz et al. \(2012\)](#). Nesses experimentos os autores reportam que para uma profundidade de indentação de $\sim 0,38 \pm 0,02 \mu\text{m}$ sob uma taxa de indentação $\sim 0,8 \mu\text{m/s}$, as forças obtidas foram de $\sim 72 \pm 5 \text{ pN}$ (ver Figura 9).

Com base nesse protocolo experimental, foi proposto o modelo em elementos finitos ilustrado na Figura 8. Esse modelo é composto de um indentador esférico rígido com $1,98 \mu\text{m}$ de diâmetro e uma amostra numérica com $10 \mu\text{m}$ de diâmetro e $4 \mu\text{m}$ de altura. A amostra celular é considerada homogênea e foi discretizada por 8.130 elementos finitos hexaédricos quadráticos com integração reduzida. Devido à simetria do ensaio, somente um quarto da amostra foi modelada. Nenhuma condi-

ção de atrito foi considerada na interface de contato entre o indentedor e a amostra.

Uma hipótese usualmente considerada no modelamento biomecânico de células vivas é considerá-las como materiais incompressíveis. Contudo, sob condições fisiológicas, as células podem estar sujeitas a consideráveis mudanças volumétricas (Hamann et al., 2002; Zlotek-Zlotkiewicz et al., 2015). Com base nessas observações, um conjunto de simulações numéricas é apresentado nas figuras 9 e 10 com o objetivo de avaliar a aptidão do modelo em representar os ensaios experimentais, considerando diferentes níveis de compressibilidade. Para este fim, empregou-se a seguinte estratégia. Enquanto os valores de κ_c^∞ foram aumentados gradativamente, para um valor fixo do parâmetro μ_c^∞ , os parâmetros viscoelástico μ_c^e e η_c^v foram modificados visando o ajuste entre as curvas numéricas e experimentais (ver Tabela 5).

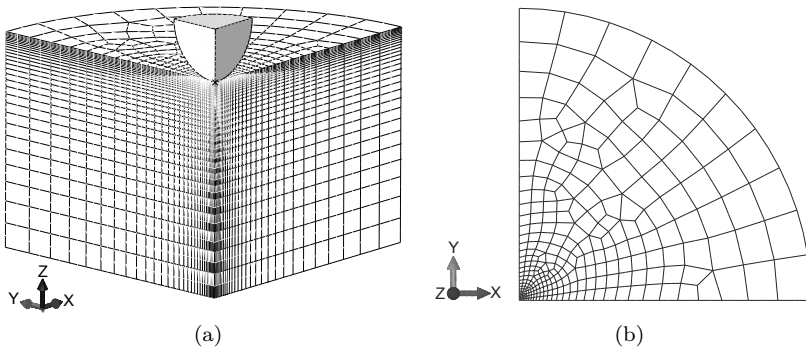


Figura 8: Modelo em elementos finitos empregado para a simulação dos testes de nanoindentação em células de fibroblasto. (a) Vista em perspectiva mostrando o indentedor e a amostra numérica em simetria de um quarto. (b) Vista superior da amostra enfatizando o refino de malha na região de indentação.

Como pode ser visto nas figuras 9 e 10, todos os resultados numéricos foram capazes de representar a resposta experimental. Na Figura 11 são mostrados os campos de deslocamento e a medida de von-Mises da tensão de Cauchy no instante de máxima penetração do indentedor para a simulação C4. Tais resultados mostram que esses campos são praticamente nulos próximos aos contornos da amostra. Portanto, as fronteiras tem mínima influência nas curvas de força-deslocamento do

indentador.

Especificamente para os resultados apresentados na Figura 10, nota-se que quando o valor do parametro κ_c^∞ aumenta (levando o comportamento do modelo para uma condição de incompressibilidade), a resposta de força-indentação muda sua curvatura nos primeiros $0,1 \mu\text{m}$ de deslocamento, divergindo do comportamento usual esperado. Com base nesses resultados numéricos, pode-se levantar à hipótese de que essas células parecem responder localmente, e sob ensaios de indentação, como um material compressível. Embora essa hipótese seja considerada na continuação do presente estudo, admite-se que investigações numéricas e experimentais adicionais são necessárias para comprovar tal hipótese, principalmente em diferentes condições de ensaio.

Os desenvolvimentos apresentados aqui foram publicados em [Carniel e Fancello \(2017b\)](#).

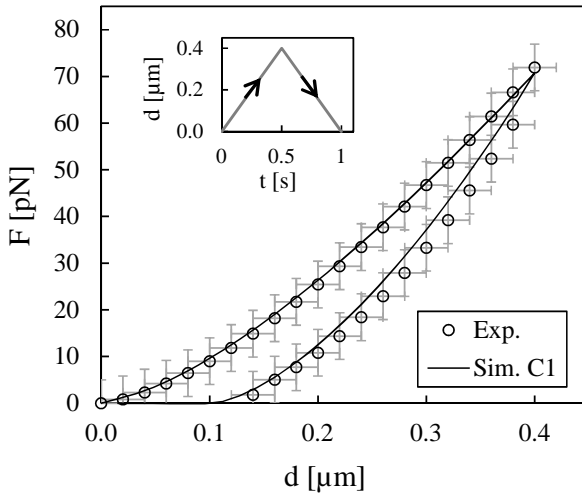


Figura 9: Comparação entre os resultados numérico e experimentais obtidos dos ensaios de nanoindentação em células de fibroblasto. Os dados experimentais foram obtidos de [Nawaz et al. \(2012\)](#). Os parâmetros constitutivos são apresentados na Tabela 5.

Tabela 5: Parâmetros constitutivos das células de fibroblasto referentes às curvas numéricas apresentadas nas figuras 9 e 10.

Parâmetros	ψ_c^∞		ψ_c^e	ϕ_c^v
	μ_c^∞ [Pa]	κ_c^∞ [Pa]	μ_c^e [Pa]	η_c^v [Pa · s]
Sim. C1	20	80	60	80
Sim. C2	20	800	48	58
Sim. C3	20	8.000	40	50
Sim. C4	20	80.000	40	50

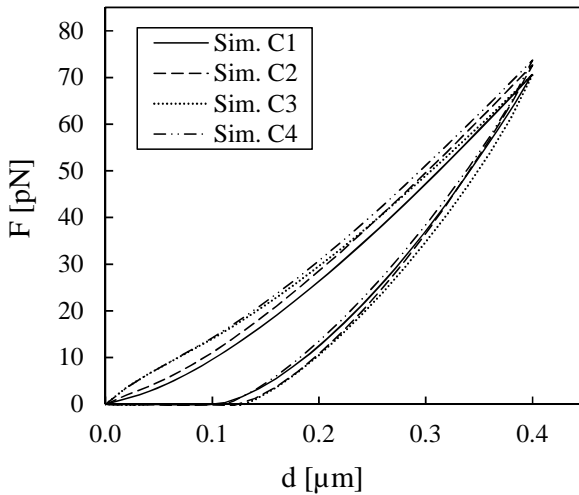


Figura 10: Sensibilidade dos resultados numéricos em relação à resposta compressível do modelo das células. Os parâmetros constitutivos relacionados a essas curvas são apresentados na Tabela 5.

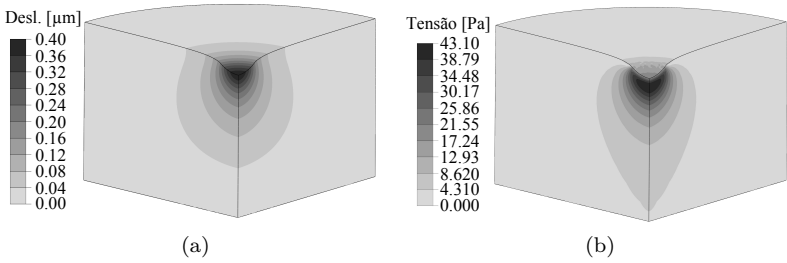


Figura 11: Campo de deslocamentos (a) e medida de von-Mises da tensão de Cauchy (b) no instante de maior penetração do indentedor para simulação C4.

Rigidez e Dissipação Local das Células

Uma prática usual na análise biomecânica de células é estimar sua rigidez local através do ajuste entre curvas obtidas por experimentos de nanoindentação e expressões analíticas baseadas em modelos de contato de Hertz (Vinckier e Semenza, 1998; Nawaz et al., 2012). O modelo de Hertz relativo ao presente ensaio de nanoindentação (Figura 8), fornece a força de contato F em função do deslocamento do indentedor d :

$$F(d) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4E\sqrt{r}}{3(1-\nu^2)} d^{3/2}, \quad (6.1)$$

onde r é o raio da ponta do indentedor e $\{E, \nu\}$ é o conjunto de parâmetros linear elástico do material indentedo representados através do módulo de Young e coeficiente de Poisson, respectivamente.

Problemas inversos baseados nesse modelo consistem, geralmente, em fixar por estimação um coeficiente de Poisson e calcular o módulo de Young para valores de força e deslocamento obtidos experimentalmente. Essa abordagem, entretanto, é altamente questionável, pois fornece valores de E dependentes da profundidade de indentação, uma vez que as expressões de Hertz são formuladas para materiais lineares elásticos e deformações infinitesimais. Por outro lado, ajustado o módulo de Young para uma dada profundidade, a expressão (6.1) é capaz de reproduzir com boa aproximação a curva força-deslocamento que foi utilizada para o ajuste (Efremov et al., 2014).

Motivado por esse fato, a Equação (6.1) será empregada aqui com o objetivo de reproduzir ensaios monotônicos de indentação para

um dado conjunto de parâmetros experimentais $\{E, \nu\}$. Assim, essas curvas monotônicas (reproduzidas pelo modelo Hertz) fornecerão a base “experimental” para o ajuste dos parâmetros constitutivos do modelo viscoelástico proposto.

Investigações experimentais apontam que o parâmetro E do modelo de Hertz pode variar de poucos Pascals até 150 kPa na superfície celular (Raman et al., 2011; Hecht et al., 2015; Haga et al., 2000). Uma distribuição log-normal entre 10 kPa até 100 kPa, com média em 46 kPa, foi reportada por Hecht et al. (2015). Com relação à dissipação energética sob ensaios cíclicos de nanoindentação, os laços de histerese podem apresentar grandes variações na superfície celular (Sirghi et al., 2008).

Em vista desses dados experimentais, foi decidido investigar, numericamente, o comportamento viscoelástico local dessas células considerando três níveis de rigidez e dissipação: limites inferior e superior e um valor médio. Para estas simulações, empregou-se as mesmas condições numéricas utilizadas na seção anterior.

Na Figura 12a são apresentadas as curvas experimentais reproduzidas mediante o modelo de Hertz com o parâmetro E igual a 10, 50 e 100 kPa. Foram considerados, também, três porcentagens de dissipação para cada nível de rigidez, isto é, laços de histerese de 16%, 33% e 56%. Os respectivos conjuntos de parâmetros constitutivos do modelo viscoelástico, relativos às simulações numéricas mostradas nas figuras 12b, 12c e 12d, são apresentados na Tabela 6.

O ajuste dos parâmetros constitutivos foi realizado empregando a seguinte estratégia. Com base no estudo da compressibilidade das células, (ver seção anteriormente), foi fixada a proporção de $\kappa_c^\infty = 10^2 \mu_c^\infty$ (resposta compressível para os parâmetros de ψ_c^∞ de (5.55), isto é, braço puramente elástico). Na sequência, os parâmetros μ_c^e e η_c^v foram identificados buscando o ajuste entre as partes monotônicas crescentes das curvas experimentais e numéricas e, também, para cada nível de histerese proposto (comparar os parâmetros da Tabela 6 com as curvas da Figura 12).

Em vista dos resultados numéricos apresentados na Figura 12, nota-se que o modelo foi capaz de prever todas as curvas monotônicas crescentes experimentais sob as três porcentagens de dissipação propostas.

Por fim, esses dados serão utilizados posteriormente para investigar a influência da variação das propriedades das células na rigidez e dissipação homogeneizada do fascículo.

Tabela 6: Parâmetros constitutivos das células de fibroblasto referentes às curvas numéricas apresentadas na Figura 12.

Parâmetros	ψ_c^∞		ψ_c^e	ϕ_c^v
	μ_c^∞ [kPa]	κ_c^∞ [kPa]	μ_c^e [kPa]	η_c^v [kPa · s]
Sim. S1	1,1	110	2,4	12,8
Sim. S2	1,1	110	2,6	4,5
Sim. S3	1,1	110	3,8	2,2
Sim. S4	6	600	11	52
Sim. S5	6	600	13	20
Sim. S6	6	600	18	10
Sim. S7	17	1700	17	70
Sim. S8	17	1700	22	28
Sim. S9	17	1700	32	12

6.1.2 Resposta Unidirecional da Fibrila

Os parâmetros constitutivos do modelo unidirecional das fibrilas (potenciais (5.53)) foram estimados com base nos ensaios experimentais de tração realizados por Svensson et al. (2010b) em fibrilas do tendão patelar humano com auxílio de microscopia de força atômica na direção axial, isto é, direção alinhada com as moléculas de colágeno (Figura 13). Desses ensaios experimentais foram escolhidos dois testes uniaxiais monotônicos e um teste cíclico sob três taxas de deformação, cujas curvas são mostradas na Figura 14. Nesse gráfico, definiu-se como par tensão-deformação unidirecional da fibrila a deformação de engenharia $\varepsilon_f \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_f - 1$ e o primeiro Piola-Kirchhoff $P_f \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_f S_f$, onde S_f é calculado através de (5.47). As taxas de deformação reportadas correspondem a derivada temporal da deformação axial de engenharia. As curvas submetidas a taxa de deformação de 0 %/s representam a resposta conservativa do material (ensaio “quase-estático”).

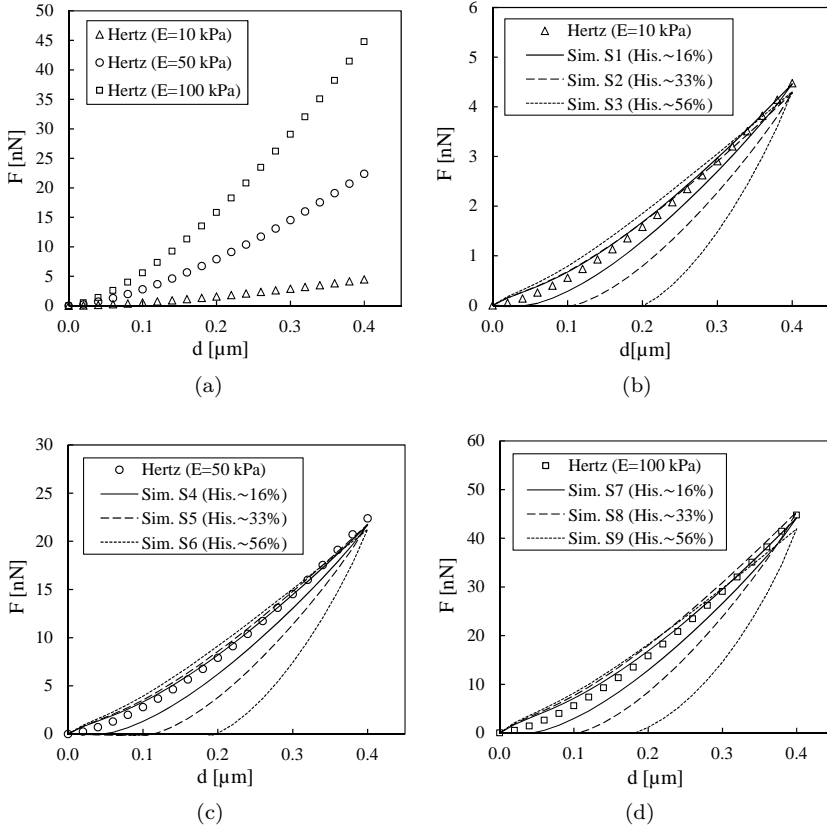


Figura 12: (a) Curvas monotônicas experimentais de nanoindentação reproduzidas através do modelo de Hertz. (b-d) Predições do modelo de elementos finitos para três níveis de rigidez e histerese das células. Os parâmetros constitutivos relacionados a essas curvas são apresentados na Tabela 6.

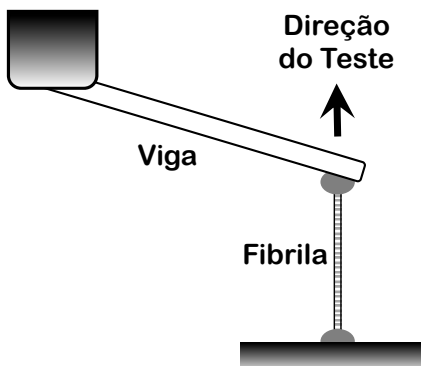


Figura 13: Ilustração dos ensaios de tração em fibrilas realizados com auxílio de microscopia de força atômica na direção axial às moléculas de colágeno. Mais detalhes em [Svensson et al. \(2010b\)](#).

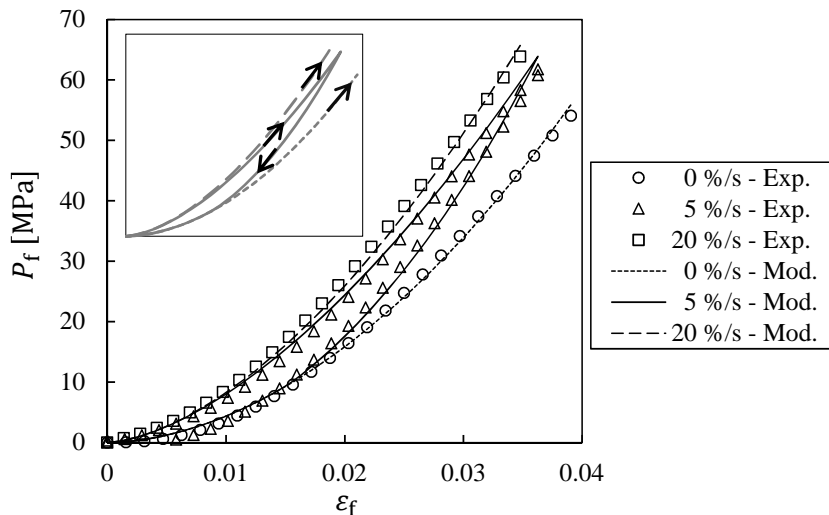


Figura 14: Comparação entre as curvas numéricas e experimentais em ensaios uniaxiais de tração em fibrilas ilustrados na Figura 13. Os dados experimentais foram obtidos de [Svensson et al. \(2010b\)](#).

Para identificar os parâmetros constitutivos empregou-se um procedimento de ajuste de curvas não linear baseado no algoritmo de otimização por enxame de partículas (PSO). Sucintamente, esse procedimento visa minimizar uma medida de erro entre as curvas experimentais e numéricas, onde os parâmetros constitutivos são as variáveis de projeto. Mais detalhes sobre o emprego do PSO para a identificação de parâmetros constitutivos podem ser encontrados em [Vaz Jr, Cardoso e Stahlschmidt \(2013\)](#). O procedimento de ajuste e o algoritmo PSO foram implementados em um código laboratorial.

Na Figura 14 comparam-se as curvas experimentais com os resultados numéricas obtidos do procedimento de identificação de parâmetros, os quais são apresentados na Tabela 7. Com base nas curvas numéricas, percebe-se que o modelo representa satisfatoriamente o comportamento experimental sob taxas de deformação de até $0,20 \text{ s}^{-1}$. É importante enfatizar que as três previsões numéricas referem-se ao único conjunto de parâmetros constitutivos apresentado na Tabela 7.

Tabela 7: Parâmetros constitutivos unidirecional da fibrila referentes às curvas do modelo numérico apresentadas na Figura 14.

$\bar{\psi}_f^\infty$		$\bar{\psi}_f^e$		$\bar{\phi}_f^v$
k_f^∞ [MPa]	α_f^∞	k_f^e [MPa]	α_f^e	η_f^v [MPa · s]
970,17	2,82	194,16	2,39	565,61

6.1.3 Resposta da Fibra Transversal às Fibrilas

Uma vez que os parâmetros constitutivos do modelo unidirecional da fibrila foram identificados (seção anterior), esses são mantidos fixos no potencial da fibra (5.22). Deste modo, ficam a determinar a fração volumétrica de fibrilas ν_f e os parâmetros constitutivos referentes aos potenciais da matriz da fibra (5.54).

A fração volumétrica das fibrilas foi estimada a partir de análises de imagens obtidas por microscopia de transmissão eletrônica realizadas por [Kalson et al. \(2015\)](#) em tendões do cauda de ratos, escolhendo assim um valor $\nu_f = 0,75$ (75%).

Os parâmetros do modelo associado às matrizes da fibra foram identificados mediante a simulação do ensaio de nanoindentação em fibras na direção transversal a essas. Os testes experimentais foram

conduzidos por [Aifantis, Shrivastava e Odegard \(2011\)](#) em tendões da coxa de bezerras utilizando indentador de Berkovich e sob controle de força (ver gráfico inserido da Figura 16).

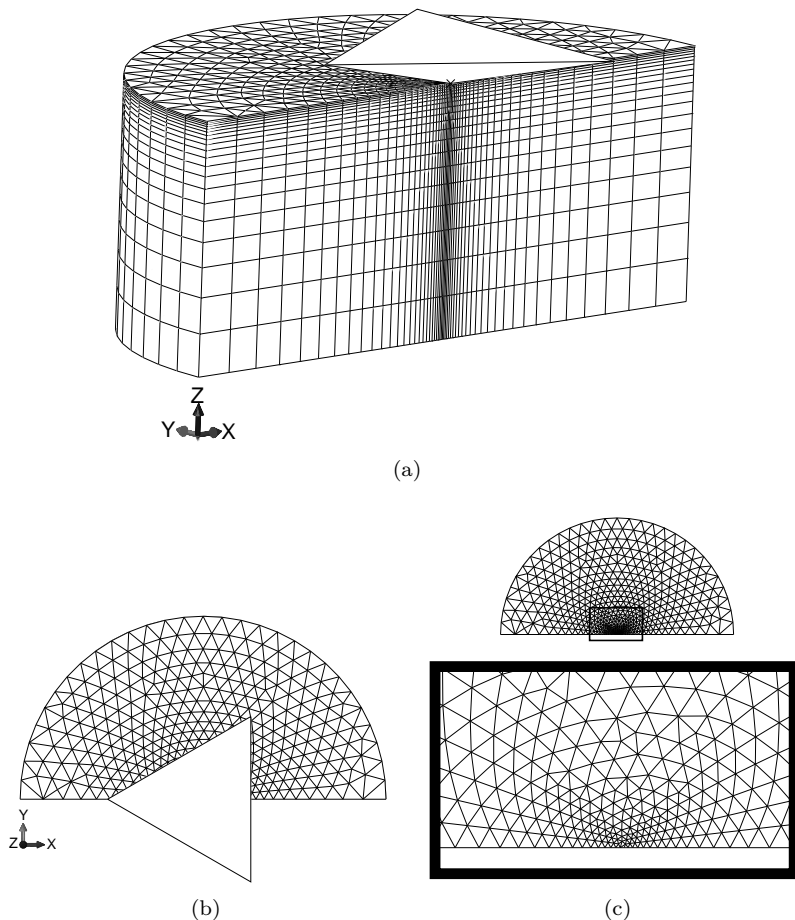


Figura 15: (a-b) Modelo de elementos finitos do ensaio de nanoindentação transversal às fibras utilizando o indentador de Berkovich e considerando a amostra em meia simetria. (c) Detalhes do refino de malha realizado na região de indentação.

Na Figura 15 são mostrados detalhes do modelo de elementos finitos. A amostra numérica possui $200\ \mu\text{m}$ de diâmetro e $80\ \mu\text{m}$ de

altura, sendo discretizada por 20.360 elementos finitos prismáticos lineares de seis nós. Devido à simetria do ensaio, somente metade amostra foi considerada. O indentador de Berkovich foi modelado como um corpo rígido, considerando os ângulos característicos de $65,3^\circ$ e $77,05^\circ$ na construção da geometria (mais detalhes sobre a geometria do indentador podem ser encontrados em [Fischer-Cripps \(2010\)](#)). Foi considerada ausência de atrito na interface de contato entre o indentador e a amostra.

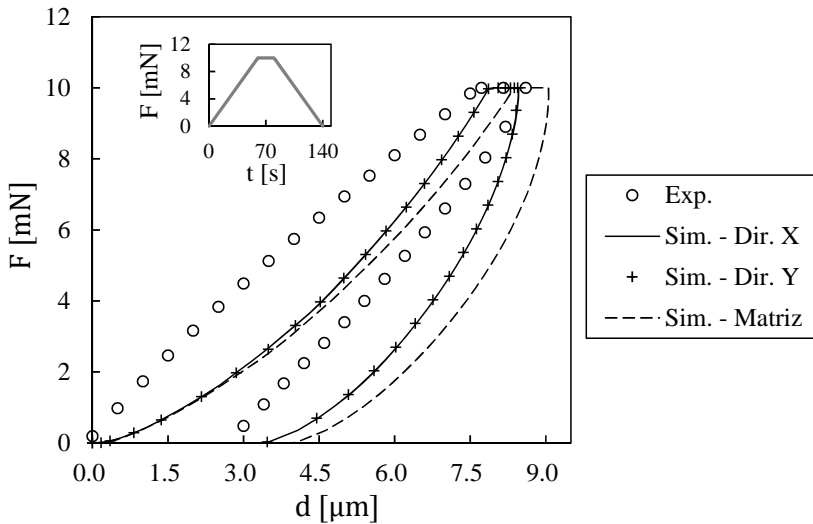


Figura 16: Gráficos de força-deslocamento para os ensaios de nanoindentação em fibras na direção transversal às fibrilas. As simulações numéricas consideraram as fibrilas orientadas na direção X e Y segundo o eixo referencial da Figura 15b. A linha tracejada representa a resposta numérica considerando somente o modelo das matrizes da fibra. A curva experimental foi obtida de [Aifantis, Shrivastava e Odegard \(2011\)](#).

Um conjunto de simulações numéricas foi rodado e os respectivos resultados apresentados na Figura 16, juntamente com um representante dos ensaios experimentais. Os parâmetros constitutivos das matrizes da fibra são listados na Tabela 8.

Levando em consideração as análises experimentais, os autores

não informaram a posição do indentedor em relação à direção preferencial das fibrilas dentro das fibras. A fim de investigar a influência da direção das fibrilas, foram simulados dois casos particulares: o primeiro considerando as fibrilas orientadas na direção X e o segundo orientando-as na direção Y da amostra (ver eixo referencial na Figura 15b). Relativo a essas simulações, pode-se notar que não houve diferenças entre os resultados.

Tabela 8: Parâmetros constitutivos do modelo das matrizes da fibra referentes às simulações apresentadas na Figura 16.

ψ_m^∞		ψ_m^e	ϕ_m^v
μ_m^∞ [MPa]	κ_m^∞ [MPa]	μ_m^e [MPa]	η_m^v [MPa · s]
12,50	50,00	100,00	400,00

Também foi simulado um caso considerando somente a resposta das matrizes da fibra. O resultado dessa simulação apresenta uma resposta menos rígida, enfatizando a contribuição unidirecional das fibrilas, mesmo estando orientadas transversalmente ao indentedor. Ademais, na Figura 17 são mostrados os campos de deslocamento e a medida de von-Mises da tensão de Cauchy no instante de máxima penetração do indentedor, enfatizando que os resultados numéricos apresentam mínima influência dos contornos da amostra.

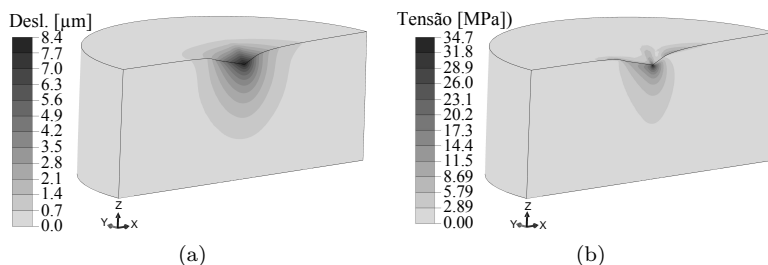


Figura 17: Campo de deslocamentos (a) e medida de von-Mises da tensão de Cauchy (b) para o instante de maior penetração do indentedor.

Comparando os resultados numéricos e experimentais da Figura

16, percebe-se claramente que as simulações não foram capazes de reproduzir fielmente a curva experimental. Em vista disso, esses resultados merecem mais discussões.

Analisando a parte de carregamento da curva experimental, nota-se uma relação quase linear entre a força aplicada ao indentador e a profundidade de indentação. Entretanto, testes de nanoindentação realizados em diversos tipos de materiais, utilizando o indentador de Berkovich, reportam formatos de curvas similares às obtidas pelas simulações numéricas da Figura 16 (ver por exemplo, Oyen e Ko (2007), Fischer-Cripps (2010) e Liu et al. (2015)).

Em investigações sobre as respostas mecânicas de vasos sanguíneos sob ensaios de nanoindentação, Akhtar et al. (2009) enfatizam que devido à geometria do indentador de Berkovich, seu emprego para indentação de tecidos moles leva a problemas na interpretação dos dados. Ademais, os autores sugerem, nesse caso, a utilização de indentadores planos ou esféricos a fim de contornar as dificuldades experimentais.

Com base nessas observações, pode-se questionar o formato não usual da curva experimental da Figura 16. Contudo, é importante enfatizar que esses ensaios experimentais, que fornecem informações sobre a resposta viscoelástica das matrizes da fibra e suas interação com as fibrilas, foram os únicos encontrados durante a revisão bibliográfica realizada nesta tese.

Em vista do exposto acima, a estratégia empregada para estimar os parâmetros constitutivos foi a seguinte. Ignorando o formato da curva experimental, definiram-se como critérios de ajuste dois comportamentos mecânicos importantes para as posteriores análises multiescala, isto é, uma estimativa da rigidez e da dissipação energética. Nesse caso, os dados experimentais referentes à profundidade de indentação, o nível de deslocamento sob fluência e a porcentagem de energia dissipada no laço de histerese, foram os alvos das simulações (comparar as curvas numéricas e experimental da Figura 16).

Por fim, nota-se que mais estudos e novos protocolos experimentais devem ser propostos visando verificar o comportamento mecânico transversal das fibras de colágeno dos tendões.

6.2 Experimentos Numéricos Multiescala

As simulações numéricas apresentadas nesta seção foram rodadas em um código laboratorial não linear de elementos finitos tridimensional

desenvolvido em linguagem FORTRAN, sendo que mais detalhes são descritos na Seção 3.2.4.

6.2.1 Protocolo dos Ensaios em Multiescala

Devido à morfologia e biomecânicas dos tendões, as maiores solicitações mecânicas ocorrem na direção axial aos fascículos e fibras de colágeno. Motivada por esse fato, os experimentos numéricos multiescala propostos nesta seção visam investigar o comportamento viscoelástico uniaxial dos fascículos da região central dos tendões sob ensaios cíclicos de tração. Portanto, nessa condição de ensaio, o gradiente de deformação macroscópico é dado por:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}, \quad (6.2)$$

onde λ_1 representa o alongamento na direção axial às fibras e λ_2 e λ_3 são os alongamentos transversais.

Assim como comentado na Seção 2.1, a amplitude fisiológica das deformações macroscópicas axiais (na direção das fibras) em tendões, varia de 2 a 4%. Em vista disso, define-se o máximo de 4% de deformação axial macroscópica ($\lambda_1 = 1,04$) para as análises em multiescala.

Definido o alongamento axial, os alongamentos transversais são encontrados utilizando medições experimentais com base na razão de Poisson⁹. Nesse caso, a razão de Poisson é usualmente calculada por:

$$-\frac{\varepsilon_{eng_2}}{\varepsilon_{eng_1}} = -\frac{\varepsilon_{eng_3}}{\varepsilon_{eng_1}}, \quad (6.3)$$

onde $\varepsilon_{eng(\cdot)} \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_{(\cdot)} - 1$ é a deformação de engenharia. Testes experimentais em fascículos reportam valores da razão (6.3) variando entre 0,7 a 4,0 com médias entre 0,7 (Cheng e Screen, 2007) e 0,8 (Reese e Weiss, 2013). Com base nesses valores, escolhe-se a razão de 0,75 nas análises em multiescala aqui propostas. Consequentemente, para $\lambda_1 = 1,04$ os alongamentos transversais máximos resultam em $\lambda_2 = \lambda_3 = 0,97$.

⁹É importante enfatizar que o coeficiente de Poisson é uma razão constante que se aplica somente em elasticidade isotrópica sob cinemática linearizada (Böl et al., 2015); uma vez que a amostra está sujeita a deformações finitas, o coeficiente de Poisson perde seu significado físico original.

No trabalho experimental publicado em [Svensson et al. \(2010a\)](#), os autores apresentam ensaios cíclicos de tração em fascículos sob duas taxas de deformação axial de engenharia: $\dot{\epsilon}_{eng1} = 0,1 \text{ \%}/s$ e $\dot{\epsilon}_{eng1} = 1 \text{ \%}/s$. Em vista desse protocolo experimental, propõe-se estudar a resposta homogeneizada uniaxial cíclica dos fascículos sob essas duas taxa e também a $10 \text{ \%}/s$. Assim, para um alongamento máximo predefinido de $\lambda_1 = 1,04$, os tempos de análise para cada taxa são dados por:

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_{eng1} = 0,1 \text{ \%}/s & \Rightarrow t|_{\lambda_1=1,04} = 40 \text{ s.} \\ \dot{\epsilon}_{eng1} = 1 \text{ \%}/s & \Rightarrow t|_{\lambda_1=1,04} = 4 \text{ s.} \\ \dot{\epsilon}_{eng1} = 10 \text{ \%}/s & \Rightarrow t|_{\lambda_1=1,04} = 0,4 \text{ s.} \end{cases} \quad (6.4)$$

Nesse ponto é importante enfatizar uma questão. Na consideração de um estado uniaxial, o gradiente de deformação macroscópico (6.2) é totalmente definido pelo alongamento axial λ_1 , uma vez que os alongamentos transversais são resultantes da condição de tensões nulas nas faces livres, isto é, $(\mathbf{P})_{22} = (\mathbf{P})_{33} = 0$. A teoria multiescala empregada neste trabalho é guiada pela imposição de um campo cinemático \mathbf{F} definido a priori¹⁰. Nesse caso em particular, as tensões transversais homogeneizadas podem não ser nulas, e conseqüentemente, não representar um estado uniaxial de tensões. Por outro lado, em vista dos EVRs propostos neste trabalho (mais detalhes na próxima seção), verificou-se que a imposição de um gradiente de deformação macroscópico no formato de (6.2), incrementado linearmente para valores de $(\lambda_1; \lambda_2; \lambda_3) = (1; 1; 1)$ até $(\lambda_1; \lambda_2; \lambda_3) = (1,04; 0,97; 0,97)$, resulta em valores de tensões transversais homogeneizadas significativamente menores que a componente axial (ver Figura 21). Mais detalhes sobre essa questão serão abordados na seqüência do manuscrito.

6.2.2 Geometria e Discretização do EVR

Como parcialmente exposto na Seção 4, a geometria do EVR do fascículo foi proposta com base em análises tridimensionais de imagem realizadas por [Kalsou et al. \(2015\)](#). Referente à esse estudo, notou-se que a microestrutura do fascículo é formada basicamente por fibras (feixes de fibrilas) helicoidais imersas em uma matriz de células. Assim, através dos dados experimentais fornecidos pelo autores, propõem-se geometrias de EVRs como as ilustradas na figuras 18 e 19. Nesses

¹⁰Essa abordagem é usualmente conhecida do inglês como “*strain-driven homogenization*” ([Dijk, 2016](#)).

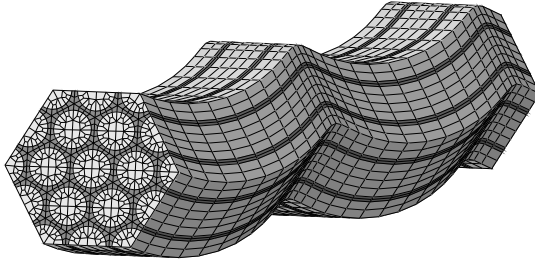
EVRs, as fibras possuem diâmetro de $4,8 \mu\text{m}$ e são compostas por duas voltas, cuja a geometria da helicoide apresenta passo de $99,3 \mu\text{m}$, diâmetro de $4,6 \mu\text{m}$ e com hélice à esquerda. Embora os EVRs apresentem contornos não usuais, i.e., com faces onduladas e hexaédricas, eles são periódicos. Todos os EVRs simulados via multiescala foram discretizados com elementos finitos isoparamétricos hexaédricos de oito nós.

Vale enfatizar, novamente, que a relação constitutiva proposta para modelar as fibras tem por base um modelo isotrópico transversal (Seção 5.1). Nesse caso, os planos de isotropia são definidos perpendicularmente às direções axiais das fibrilas, representadas pelos vetores referencial \mathbf{m}_x e espacial \mathbf{m}_w da Equação (5.5). No presente modelamento, as direções axiais das fibrilas na configuração referencial (vetores \mathbf{m}_x) são calculadas com base na tangente da equação da hélice utilizada para gerar a geometria da fibra (ver Figura 30). Assim, percebe-se que a contribuição do modelo unidirecional das fibrilas varia em cada ponto de integração da malha empregada na discretização da fibra.

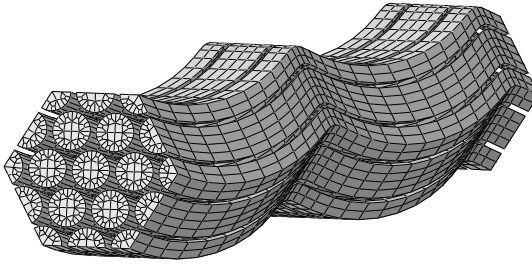
Cabe lembrar neste ponto que o objetivo principal do trabalho (detalhado na Seção 1.3) visa quantificar a relevância das fases microestruturais nas respostas viscoelásticas do tecido e estudar os campos cinemáticos locais, a fim de compreender possíveis micromecanismos presentes nesses tecidos. Nessa perspectiva, os resultados numéricos obtidos mostraram que o refino de malha empregado na discretização dos EVRs foi suficiente para avaliar de forma satisfatória os requisitos previamente citados.

Com relação ao modelo e às análises em multiescala, citam-se algumas hipóteses consideradas:

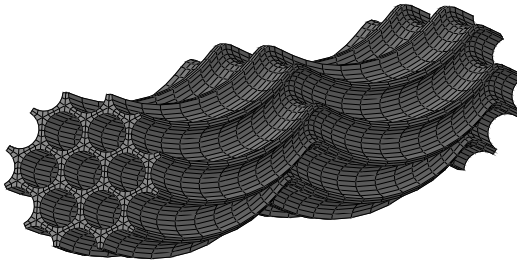
- continuidade das fibrilas, hipótese fortemente suportada por dados experimentais (Provenzano e Vanderby, 2006; Screen, 2009; Svensson et al., 2012; Svensson et al., 2017);
- a matriz intrafascicular (onde as fibras estão imersas) é formada predominantemente de células (ver morfologia na Seção 2.1);
- compartilhamento dos nós dos elementos das superfícies de contato entre a matriz celular e as fibras, isto é, não há deslocamentos relativos nesses nós;
- fração volumétrica de fibras de 70%.



(a) EVR do fascículo.



(b) Fibras.



(c) Matriz celular.



(d) Vista lateral de uma fibra do EVR.

Figura 18: Elemento de volume representativo do fascículo discretizado via elementos finitos (EVR 2 da Figura 19).

6.2.3 Condições de Contorno Multiescala e Representatividade do EVR

Embora muitos estudos numéricos suportam o fato que a restrição cinemática de periodicidade nos contornos¹¹ apresenta maior taxa de convergência dos resultados homogeneizados com o aumento do EVR (Nguyen et al., 2012), neste trabalho empregou-se a restrição cinemática de deslocamentos lineares nos contornos. O motivo dessa escolha é duplo. Em primeiro lugar, mesmo os EVRs sendo periódicos, o mapeamento dos respectivos nós das faces periódicas não é uma tarefa simples neste caso, devido à geometria não usual dos contornos. Além disso, se não houver correspondência um-para-um dos nós das faces periódicas, essa restrição cinemática não pode ser imposta de forma forte. Entretanto, existem técnicas numéricas que tornam possível a imposição dessa restrição de forma fraca. Contudo, essas estratégias modificam a estrutura padrão do código convencional de elementos finitos e aumentam o custo computacional (mais detalhes em Nguyen et al. (2012)). Em segundo lugar, com base nos resultados obtidos utilizando a condição de contorno de deslocamentos lineares, verificou-se que a possível aplicação da condição periódica nos contornos não afetaria consideravelmente os resultados apresentados. Entretanto, essa hipótese somente pode ser confirmada com a implementação e avaliação dos resultados em vista dessa condição de contorno microestrutural.

Está bem estabelecido no campo de pesquisa da homogeneização que o EVR deve apresentar informações geométricas suficientes para representar satisfatoriamente a microestrutura do material. Desse modo, foi realizado um estudo de sensibilidade dos resultados homogeneizados em relação às dimensões do EVR. Para essas análises, três EVRs foram propostos, os quais podem ser visualizados na Figura 19. Os EVRs 1, 2 e 3 são compostos por 6.120, 21.600 e 48.600 elementos, respectivamente. Empregou-se a todos os EVRs o mesmo refino de malha. Deste modo, esses EVRs se diferenciam em tamanho somente no plano transversal às fibras.

Simularam-se ensaios monotônicos de tração sob taxa de $\dot{\epsilon}_{eng_1} = 0,1$ %/s, seguindo as condições de ensaio propostas na Seção 6.2.1. Os parâmetros dos modelos constitutivos referentes às contribuições das fibrilas e das matrizes das fibras são listados nas Tabelas 7 e 8, e com fração volumétrica de fibrilas de 75%. Para a matriz celular, empregou-

¹¹Mais detalhes sobre as condições de contorno multiescala são apresentadas na Seção 3.2.2

se os parâmetros constitutivos da simulação S8¹² da Tabela 6.

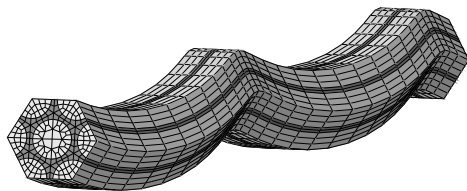
Na Figura 20 são comparadas as curvas numéricas (na direção axial às fibras) com três curvas experimentais obtidas da literatura. Os gráficos são apresentados em função dos valores axiais do primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff homogeneizado versus alongamento macroscópico. Percebe-se que o formato das curvas e os níveis de tensão mostram-se condizentes com os dados experimentais. Esse fato indica que os parâmetros constitutivos identificados para os modelos das fases microestruturais apresentam coerência em relação aos resultados obtidos do procedimento de homogeneização.

Comparando as curvas numéricas, pode-se notar que com o aumento das dimensões dos EVRs, os resultados homogeneizados mostram um padrão de convergência, tendendo a um comportamento menos rígido do material. Embora a resposta homogeneizada do EVR 2 ainda não apresenta convergência em relação ao EVR 3, a diferença percentual entre ambas é pequena (aproximadamente 6% entre as tensões a 4% de deformação). Ademais, verificou-se que o tempo de simulação pode aumentar mais 100% do EVR 2 para o EVR 3 sob as mesmas condições de ensaio e discretização temporal.

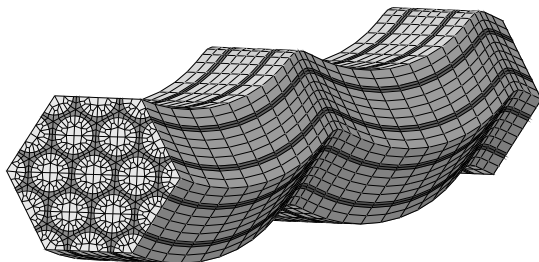
Com relação ao emprego da restrição cinemática de deslocamentos lineares, notou-se que essa condição de contorno afeta significativamente os resultados locais próximos aos contornos do EVR. Desse modo, como deseja-se, também, obter informações sobre a cinemática local da microestrutura, o EVR 1 é descartado a priori (mais detalhes na Seção 6.2.7).

Por fim, em vista dessas análises e consciente dos erros numéricos envolvidos, o EVR 2 é o candidato escolhido para as simulações subsequentes. Ademais, enfatiza-se novamente que os valores das tensões transversais homogeneizadas são muito menores que a da componente axial, como pode ser visualizado nos resultados do EVR 2 apresentados na Figura 21.

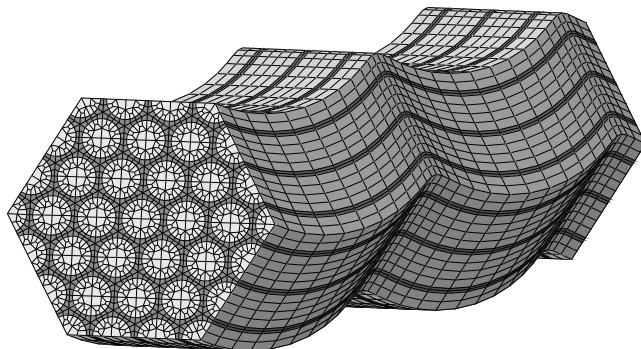
¹²Na Seção 6.2.4 é verificado que a contribuição da matriz celular na rigidez e dissipação do fascículo na direção axial as fibras é muito pequena. Portanto, qualquer conjunto de parâmetros da Tabela 6 pode ser utilizado sem afetar significativamente os resultados apresentados nessa seção.



(a) EVR 1



(b) EVR 2



(c) EVR 3

Figura 19: Elementos de volume representativo (EVR) propostos para o fascículo do tendão.

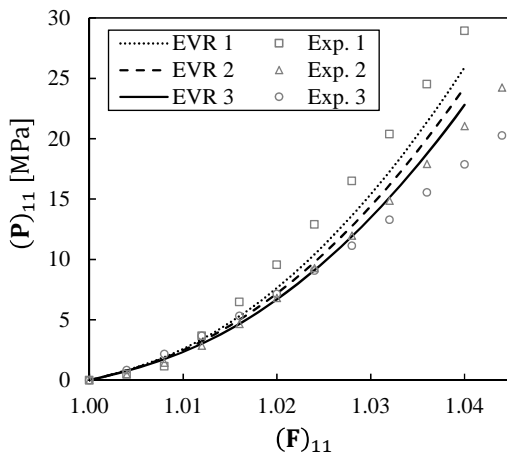


Figura 20: Curvas tensão-alongamento homogeneizadas na direção axial às fibras para os três EVRs mostrados na Figura 19. Os dados experimentais 1, 2 e 3 foram obtidos de [Legerlotz, Riley e Screen \(2010\)](#), [Haraldsson et al. \(2005\)](#) e [Svensson et al. \(2010a\)](#), respectivamente.

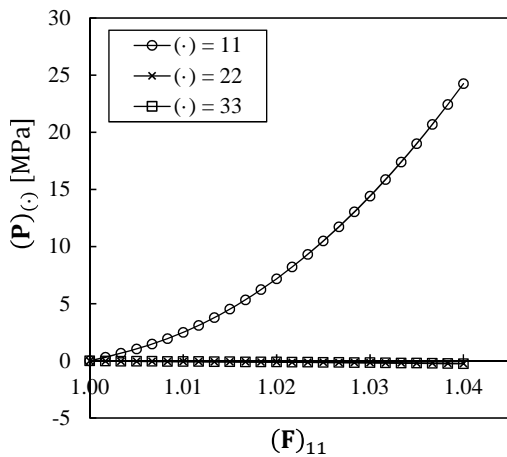


Figura 21: Tensões homogeneizadas axial às fibras 11 e transversais 22 e 33 relativas ao EVR 2.

6.2.4 Influência da Matriz Celular na Resposta do Fascículo

Assim como abordado na Seção 6.1.1, as células do tendão são estruturas heterogêneas cuja a resposta mecânica varia pontualmente na superfície celular. Porém, na presente abordagem multiescala, a matriz celular é considerada um meio homogêneo e isotrópico.

Em vista do estudo numérico realizado sobre o comportamento local das células (Seção 6.1.1), propõe-se investigar sua influência na resposta homogeneizada do fascículo sob as três taxas de deformação propostas em (6.4). Para esse fim, é atribuído a toda fase material celular os limites inferiores e superiores de rigidez e dissipação locais (previamente investigados na Seção 6.1.1), cujas curvas e respectivos parâmetros constitutivos são mostrados na Figura 12 e Tabela 6.

Na Figura 22 são apresentadas as curvas tensão-alongamento uniaxiais homogeneizadas quando a matriz celular é modelada pelos seguintes parâmetros materiais:

- limites inferiores e superiores de rigidez $\{S1, S3\}$ e $\{S7, S9\}$, respectivamente;
- limites inferiores e superiores de histerese $\{S1, S7\}$ e $\{S3, S9\}$, respectivamente.

Os conjuntos de parâmetros materiais S1, S3, S7 e S9 são listados na Tabela 6.

Nota-se claramente nos gráficos da Figura 22, que para todas as taxas de deformação, enquanto os limites superiores de rigidez das células $\{S7, S9\}$ aumentam muito pouco a rigidez homogeneizada em comparação com os limites inferiores $\{S1, S3\}$, os laços de histerese homogeneizados não são afetados.

Assim, com base nesses resultados, conclui-se que a variação dos parâmetros constitutivos da matriz celular (identificados dentro da variação experimental dos ensaios utilizados) não afeta significativamente nem a rigidez nem a dissipação do fascículo, em vista da cinemática macroscópica imposta. Em outras palavras, têm-se fortes evidências numéricas que suportam a hipótese que as células não contribuem com as respostas viscoelásticas dos tendões na direção axial às fibras. Por outro lado, estudos experimentais são necessários para suportar essa hipótese.

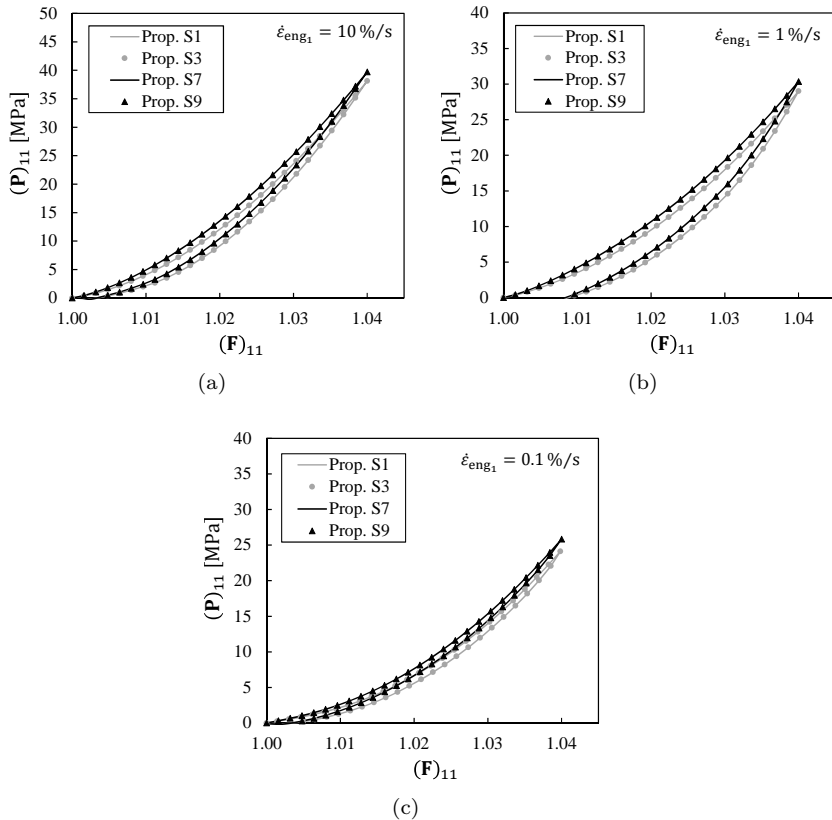


Figura 22: Influência da matriz celular nas respostas homogeneizadas do fascículo sob ensaios cíclicos uniaxiais em taxas de deformação de engenharia de (a) 10 %/s, (b) 1 %/s e (c) 0,1 %/s. Os parâmetros constitutivos da matriz celular S1, S3, S7 e S9 são listados na Tabela 6.

6.2.5 Influência da Fração Volumétrica de Fibrilas na Resposta do Fascículo

Análises experimentais mostram que a fração volumétrica de fibrilas ν_f pode variar de 60% a 80% na composição da fibra (Goh et al. 2008; Screen et al., 2011; Szczesny e Elliott, 2014; Kalson et al., 2015). Motivado por esse fato, propõe-se avaliar a resposta homo-

geneizada do fascículo considerando três fração volumétrica de fibrilas: 60%, 70% e 80%. Nesse caso, as simulações foram rodadas considerando a taxa de $\dot{\epsilon}_{eng_1} = 0,1 \text{ \%}/s$.

Na Figura 23 são apresentadas as três curvas resultantes das análises multiescala. Pode-se notar que, como esperado, a fração volumétrica de fibrilas afeta consideravelmente a rigidez do fascículo na direção axial às fibras de colágeno. Por exemplo, para a curva com $\nu_f = 80\%$, a tensão no alongamento 1,04 é aproximadamente 30% maior do que a tensão da curva com $\nu_f = 60\%$. Por outro lado, sob a taxa de deformação macroscópica imposta, a variação na dissipação energética é pequena, cujos laços de histerese são de 10%, 9,4% e 8,9% para as curvas com ν_f de 60%, 70% e 80%, respectivamente.

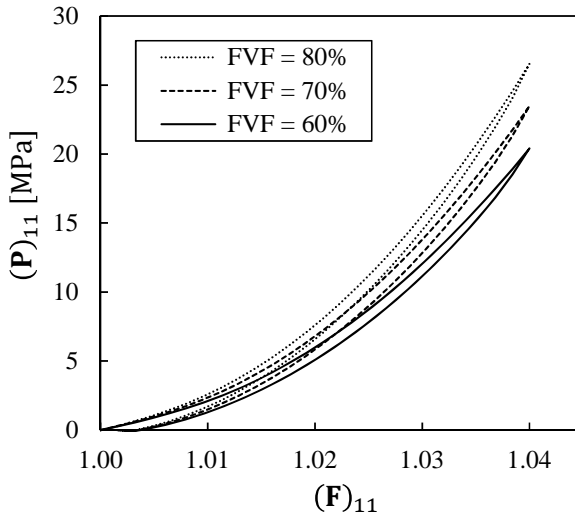


Figura 23: Sensibilidade dos resultados homogeneizados do fascículo em relação à fração volumétrica de fibrilas (FVF).

6.2.6 Contribuição da Resposta Unidirecional das Fibrilas na Dissipação do Fascículo

Das análises realizadas na Seção 6.2.4, chegou-se a conclusão que a variação dos parâmetros constitutivos da matriz celular na dissipação axial do fascículo é pouco relevante. Nesse caso, a maior parte da

dissipação macroscópica é contabilizada pelas fibras de colágeno, isto é, provêm das contribuições unidirecionais das fibrilas e das interações entre elas e a substância base.

A abordagem constitutiva proposta neste trabalho torna possível avaliar, de forma independente, a contribuição viscoelástica/elástica de cada modelo material nas respostas homogeneizadas. Nessa perspectiva, quantificou-se a contribuição da resposta unidirecional das fibrilas na dissipação homogeneizada do fascículo sob as três taxas de deformação previamente propostas.

Na Figura 24 comparam-se os comportamentos viscoelásticos homogeneizados com a variação da taxa de deformação para dois casos em particular: a) todos os modelos constitutivos viscoelásticos (Figura 24a) e b) somente o modelo unidirecional das fibrilas viscoelástico e os demais elásticos (Figura 24b).

Analisando as figuras 24a e 24c, percebe-se que o aumento da taxa de deformação de 0,1 %/s para 1 %/s resulta em um acréscimo significativo na histerese de 8,6% para 25%, seguido de um decréscimo para 13,3% na taxa de 10 %/s.

Como comentado anteriormente, [Svensson et al. \(2010a\)](#) realizam testes cíclicos de tração em fascículos do tendão patelar humano sob taxa de deformação de 0,1 %/s e 1 %/s. Os autores reportaram que para uma deformação máxima de 4%, ambas as taxas resultaram em laços de histerese de aproximadamente 25%. Com base nesses dados experimentais, percebe-se que o laço de histerese calculado a partir do resultado numérico sob taxa de 1 %/s está totalmente de acordo com o valor experimental apresentado em [Svensson et al. \(2010a\)](#). Entretanto, o valor numérico de histerese sob taxa de 0,1 %/s não corresponde aos dados experimentais. Nesse caso, o modelo falha em prever esse comportamento nessa taxa específica para esse tipo de tendão.

É importante enfatizar que embora os parâmetros constitutivos do modelo unidirecional da fibrila foram identificados com base em dados experimentais com variação de taxa (ver Figura 14), os parâmetros do modelo que contabiliza a resposta da fibra transversal às fibrilas foram estimados com base em um único experimento (ver Figura 16). Portanto, mais experimentos com variação de taxa são necessários visando estudar a resposta mecânica transversal das fibras.

Com relação à Figura 24b, nota-se que quando considera-se somente a contribuição viscoelástica do modelo unidirecional das fibrilas, a resposta homogeneizada do fascículo sob taxa de 0,1% é meramente elástica. Ademais, sob as taxas de 1 %/s e 10 %/s, os níveis de energia

dissipada permanecem praticamente os mesmos (Figura 24c).

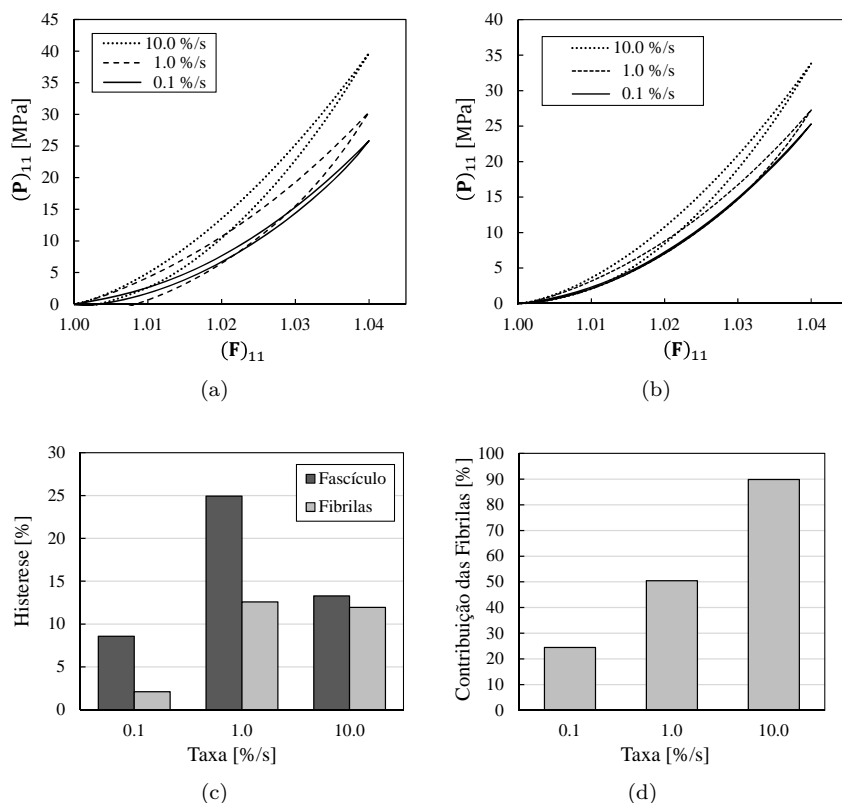


Figura 24: Curvas tensão-alongamento homogeneizadas considerando dois casos: (a) comportamento viscoelástico de todas as fases materiais; (b) somente a contribuição viscoelástica unidirecional das fibrilas e demais fases elásticas. (c) Comparação do percentual de histerese homogeneizado das curvas de (a) e (b). (d) Contribuição percentual da resposta viscoelástica unidirecional das fibrilas na dissipação total do fascículo.

Na Figura 24d são quantificadas as contribuições percentuais da dissipação unidirecional das fibrilas em relação à dissipação total do fascículo para cada taxa de deformação. Nesse caso, verifica-se um aumento considerável da contribuição das fibrilas na dissipação do fas-

cículo com o aumento da taxa de deformação. Particularmente para a taxa de 1 %/s (a qual está de acordo com dados experimentais), pode-se ver que a contribuição unidirecional das fibrilas contribuem com 50% da dissipação total do fascículo. Já para a taxa de 10 %/s, praticamente toda a energia dissipada pelo fascículo é contabilizada pelas fibrilas.

Por fim, com base nessas investigações numéricas, um importante ponto é verificado. Embora somente a análise sob taxa de 1 %/s apresente concordância com os dados experimentais, têm-se fortes evidências numéricas que suportam a hipótese que as fibrilas são importantes fontes de dissipação energética nos tecidos tendinosos, principalmente quando submetidos a altas taxas de deformação.

6.2.7 Análises Micromecânicas no EVR do Fascículo

Nesta seção é apresentado um estudo do comportamento local do EVR do fascículo com base nos resultados numéricos obtidos da solução das equações de equilíbrio multiescala via método dos elementos finitos. Esse estudo visa investigar possíveis micromecanismos e teorias emergentes da mecanobiologia dos tendões, e assim, relacioná-los aos comportamentos mecânicos macroscópicos.

Motivadas pelos resultados da seção anterior, as análises microestruturais apresentadas aqui foram rodadas considerando a taxa de deformação macroscópica de 1 %/s. Ademais, o conjunto de propriedades S1 da Tabela 6 foi empregado para modelar a matriz celular. O protocolo dos ensaios numéricos é o mesmo das análises anteriores.

Um dos estudos refere-se à cinemática das fibras no interior do EVR em um plano transversal. Na Figura 25 é apresentado o padrão de deslocamento das fibras em uma seção transversal do EVR para quatro níveis de alongamento macroscópico: 1,00, 1,01, 1,03 e 1,04. Uma vez que a cinemática macroscópica é definida a priori, pode-se notar a influência da condição de contorno multiescala, a qual restringe fortemente a cinemática nos contornos do EVR. Além disso, essa condição de contorno resulta em um padrão não usual de deformação das fibras internas do EVR, isto é, seguindo a geometria helicoidal.

Ciente da patologia numérica resultante das condições de contorno, analisou-se somente o comportamento das fibras internas. Com relação a essa análise, apresentam-se na Figura 26 as deformações locais entre as fibras $\varepsilon_{\text{eng}}^{f/f}$ em função da deformação macroscópica axial às fibras $\varepsilon_{\text{eng}_1} = \lambda_1 - 1$. A medida $\varepsilon_{\text{eng}}^{f/f}$ representa a deformação de en-

genharia calculada com base nos alongamentos dos segmentos de reta que conectam a fibra central com as fibras que a circundam (ver seção indeformada da Figura 25). Com base nessas curvas, ajustaram-se duas equações de reta: um referente à curva superior e outra a curva inferior. Os coeficientes lineares dessas curvas podem ser interpretados em analogia à razão de Poisson (6.3), os quais variam de 1,74 até 3,63.

Trabalhos experimentais da literatura reportam razões de Poisson (6.3) de até 3 em tendões (Lynch et al., 2003; Vergari et al., 2011; Chernak e Thelen, 2012) e de até 4 em fascículos (Cheng e Screen, 2007; Reese e Weiss, 2013) em estados trativos, indicando significativa redução volumétrica. Ademais, alguns estudos enfatizam perda de água durante testes de tração uniaxiais (Lynch et al., 2003; Ahmadzadeh et al., 2014; Böl et al., 2015).

Com base nesses dados, percebe-se que a cinemática transversal das fibras, resultantes das análises locais da Figura 25, apresentam concordância com os dados experimentais reportados na literatura. Assim, essa cinemática pode ter uma forte influência nas grandes deformações transversais macroscópicas observadas experimentalmente. Além disso, podem resultar em esforços internos importantes que induzem o escoamento de fluidos através do tecido.

Nas figuras 27 e 28 são mostrados os campos axiais $(\epsilon)_{11}$ e transversais $(\epsilon)_{22}$ e $(\epsilon)_{33}$ da medida de deformação logarítmica para a fibra central do EVR e, também, para os elementos da matriz celular que circundam essa fibra. Esses campos foram avaliados no alongamento macroscópico máximo, i.e., $\lambda_1 = 1,04$. Vale mencionar que as condições de contorno multiescala “contaminam” as respostas nos contornos do EVR. Portanto, os resultados dos elementos localizados nas extremidades esquerda e direita devem ser desconsiderados. Nesse caso, verificam-se que os valores das deformações transversais das fibras são significativamente menores que aqueles encontrados na matriz celular. Por exemplo, enquanto os maiores valores compressivos das deformações logarítmicas transversais nas fibras alcançam valores de aproximadamente -0,02 ($\sim 2\%$ de deformação de malha), a matriz celular está sujeita a níveis de compressão de malha de até 93%, isto é, deformações logarítmicas locais de aproximadamente -2,7. Assim, nota-se claramente que as fibras comportam-se como estruturas muito mais rígidas que as células.

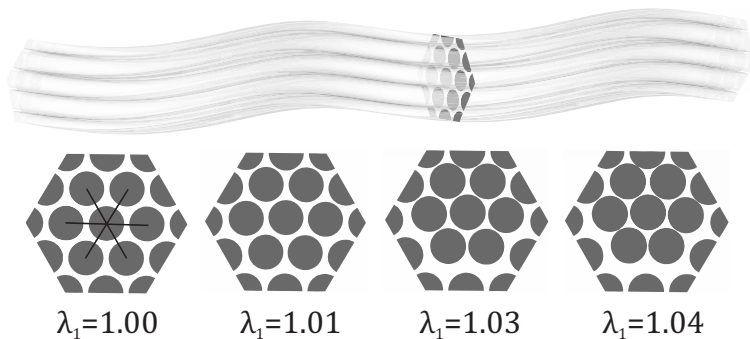


Figura 25: Cinemática das fibras em uma seção transversal do EVR em função do nível de alongamento axial macroscópico. Cada segmento de reta, mostrado na seção indeformada, conecta o nó central da fibra do meio com os nós centrais das fibras adjacentes.

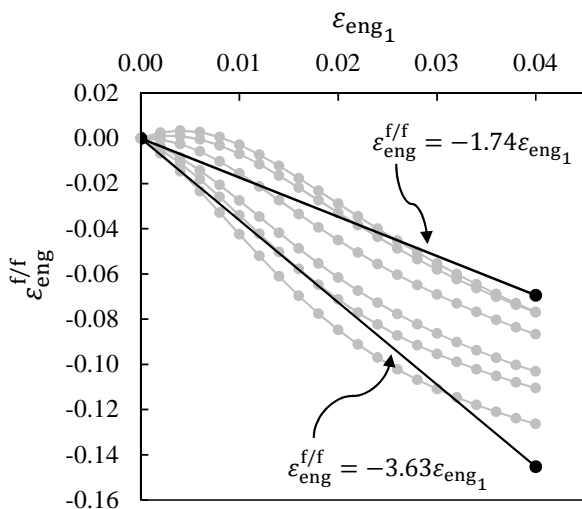


Figura 26: Deformação local de engenharia $\epsilon_{eng}^{f/f}$ referente aos segmentos de reta mostrados na Figura 25 em função da deformação macroscópica axial às fibras ϵ_{eng_1} . As equações de reta foram ajustadas para as curvas superior e inferior.

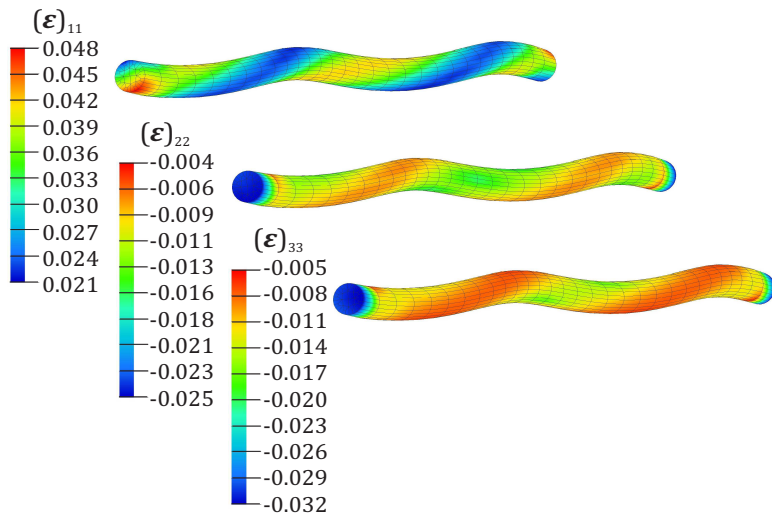


Figura 27: Deformações logarítmicas axial e transversais da fibra central do EVR para $\lambda_1 = 1,04$.

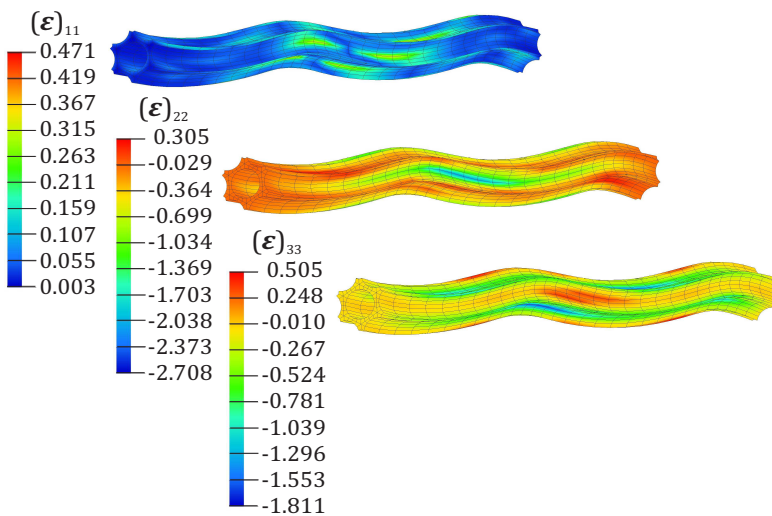


Figura 28: Deformações logarítmicas axial e transversais da matriz celular central do EVR para $\lambda_1 = 1,04$.

Esse fato pode ser evidenciado em mais detalhes na Figura 29, onde mostra-se a evolução dos deslocamento nodais locais de uma amostra da matriz celular obtida da malha apresentada na Figura 28. Analisando o padrão de deformação dessa malha, pode-se notar que a cinemática das fibras resulta em grandes estados compressivos na matriz celular. Além disso, percebe-se que os deslocamentos que induzem a deformação cisalhante da malha da matriz celular na direção tangente às hélices das fibras são significativamente menores que os levam a compressão e ao cisalhamento no plano transversal às fibras.

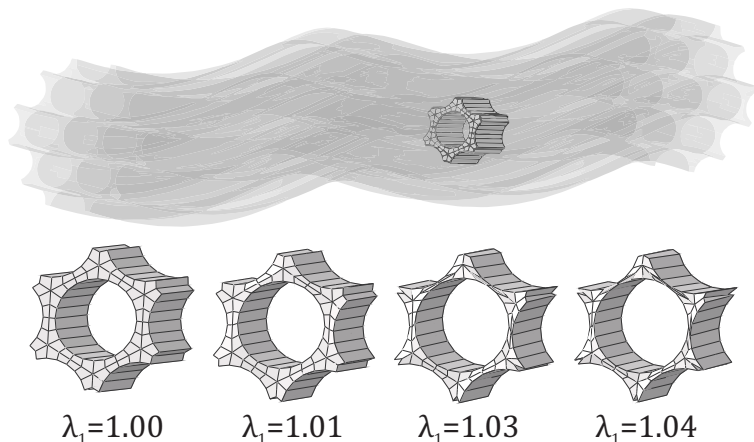


Figura 29: Deformação da malha de uma seção da matriz celular localizada no interior da EVR do fascículo.

Com base nesses resultados, verifica-se que, sob estados uniaxiais macroscópicos, a cinemática transversal das fibras pode caracterizar um importante micromecanismo relacionado à mecanotransdução celular, impondo às células significativos estados compressivos e cisalhantes no plano transversal às fibras.

Em vista dos elevados valores de deformações locais presentes na matriz celular, levanta-se a hipótese de que algumas regiões das células podem estar sujeitas ao dano mecânico. Assim, mesmo sob os baixos níveis fisiológicos de deformação macroscópica, processos localizados de degradação material podem estar presentes nessa fase material. Como investigado anteriormente, a variação da rigidez da matriz celular na resposta macroscópica parece ser irrelevante. Portanto, esses hipotéticos micromecanismos de dano celular não afetarão a rigidez macros-

cópica, mas sim, podem modificar o fenótipo celular e influenciar em processos fisiológicos e na homeostase¹³ do tecido, levando a condições patológicas relacionadas à tendinopatias (Sharma e Maffulli, 2005).

Na Figura 30 é mostrada a cinemática (direções \mathbf{m}_e da Equação (5.5)) e os níveis dos alongamentos locais λ_f das fibrilas para cada ponto de integração da fibra em vista do alongamento macroscópico λ_1 . Dessa análise, verifica-se que as fibrilas apresentam uma distribuição heterogênea de deformações no interior da fibra. Além disso, os valores dos alongamentos locais na direção das moléculas de colágeno não ultrapassam o nível máximo do alongamento axial macroscópico.

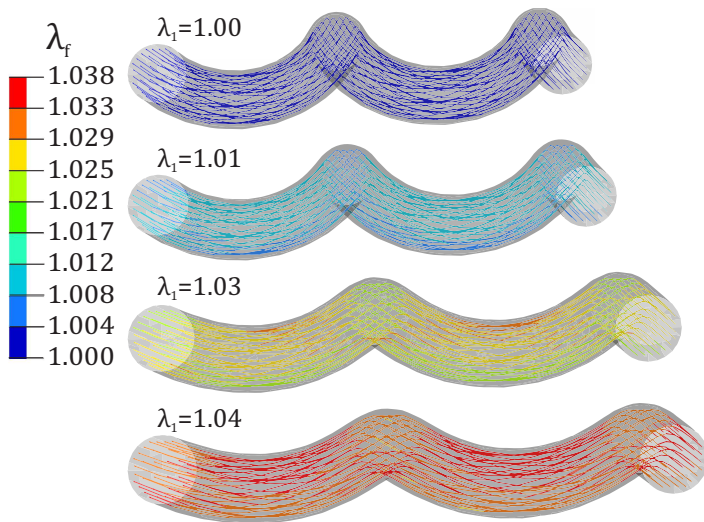


Figura 30: Deformação unidirecional das fibrilas. As linhas representam as direções das fibrilas, em cada ponto de integração, no interior da fibra.

Testes experimentais de tração e previsões numéricas com base em dinâmica molecular apontam que processos de dano e falha mecânica em fibrilas ocorrem acima de 10% de deformação axial na direção das moléculas de colágeno (Svensson et al., 2013; Depalle et al., 2014; Liu, Ballarini e Eppell, 2016). Portanto, confrontando esses dados com

¹³A homeostase é uma propriedade de um sistema, a qual por meio de processos físico-químicos visa manter o equilíbrio do meio interno, independentemente das condições do ambiente externo.

os resultados numéricos apresentados na Figura 30, conclui-se que as fibrilas possivelmente não são afetadas por mecanismos de dano mecânico guiados por deformação sob regime fisiológico de deformações axiais.

Em vista do formalismo teórico fornecido pela termodinâmica do contínuo, base do modelamento constitutivo proposto neste trabalho, pode-se obter uma importante informação sobre os processos dissipativos locais presentes nas fases materiais microestruturais.

Da inequação de energia livre (3.1) e em vista dos modelos constitutivos específicos (Seção 5.3), as densidades de potência viscosa dissipada, para cada modelo constitutivo microestrutural, são calculadas por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{D}_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \phi_c^v}{\partial \dot{\mathbf{F}}_c^v} : \dot{\mathbf{F}}_c^v \quad \Rightarrow \quad \mathcal{D}_c = \eta_c^v \mathbf{d}_c^v : \mathbf{d}_c^v \\ \mathcal{D}_m \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \phi_m^v}{\partial \dot{\mathbf{F}}_m^v} : \dot{\mathbf{F}}_m^v \quad \Rightarrow \quad \mathcal{D}_m = \eta_m^v \mathbf{d}_m^v : \mathbf{d}_m^v, \\ \mathcal{D}_f \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \phi_f^v}{\partial \dot{\lambda}_f^v} \dot{\lambda}_f^v \quad \Rightarrow \quad \mathcal{D}_f = \eta_f^v (d_f^v)^2 \end{array} \right. \quad (6.5)$$

onde \mathcal{D}_c , \mathcal{D}_m e \mathcal{D}_f são as densidades de potência referentes à matriz celular, às matrizes da fibra e da contribuição unidirecional das fibrilas, respectivamente. Essas quantidades representam a taxa de energia (potência) dissipada localmente por unidade de volume. Assim, esses campos escalares podem ajudar a compreender possíveis mecanismos dissipativos presentes em cada fase material do EVR e, também, quantificar a contribuição desses na dissipação energética macroscópica.

Na Figura 31 são mostrados os campos de potência dissipada para a fibra central e para os elementos da matriz celular que envolvem essa fibra (os mesmos analisados nas figuras 27 e 28). Em vista do ensaio cíclico empregado, os campos escalares dissipativos foram avaliados em três instantes de deformação macroscópica: a) em $\lambda_1 = 1,02$ durante a fase de carregamento; b) no alongamento máximo $\lambda_1 = 1,04$; c) em $\lambda_1 = 1,02$ na fase de descarregamento. Vale enfatizar, novamente, que as condições de contorno multiescala “contaminam” as respostas nos contornos do EVR. Portanto, os resultados dos elementos localizados nas extremidades esquerda e direita devem ser desconsiderados.

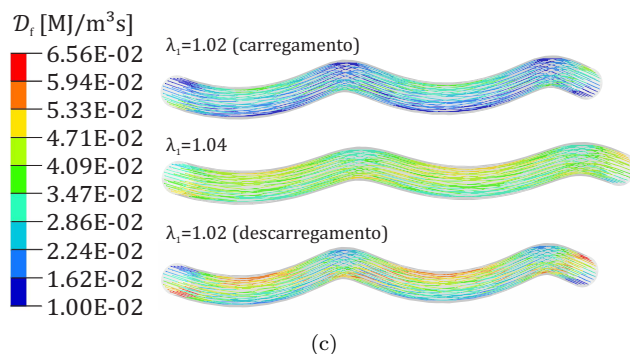
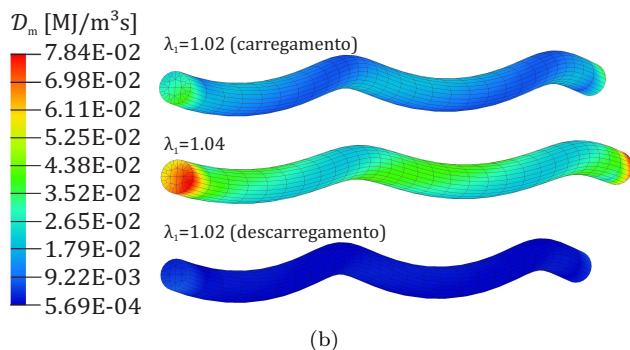
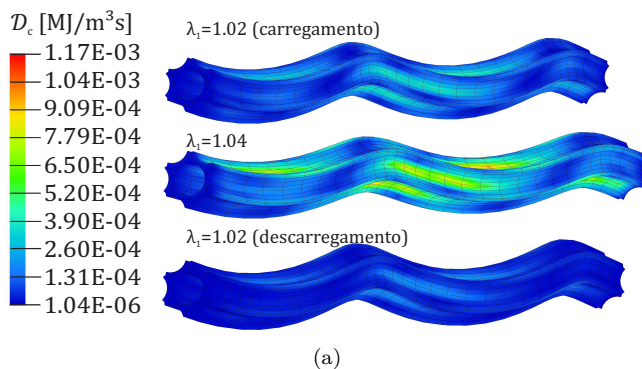


Figura 31: Dissipações viscosas em três instantes de deformação macroscópica.

Comparando o campo \mathcal{D}_c com \mathcal{D}_m e \mathcal{D}_f , pode-se notar que os valores numéricos da matriz celular são de, aproximadamente, duas or-

dens de grandeza menores que os valores da fibra. Esses dados apontam que a matriz celular contribui muito pouco com a dissipação do tecido, reforçando os resultados numérico previamente investigado na Seção 6.2.4.

Em relação às dissipações internas das matrizes da fibra \mathcal{D}_m e da contribuição unidirecional das fibrilas \mathcal{D}_f , dois fatos são relevante (figuras 31b e 31c). Em primeiro lugar, percebe-se que durante o estágio de carregamento (de $\lambda_1 = 1,02$ até $\lambda_1 = 1,04$), ambas contribuições constitutivas têm distribuições em formato helicoidal e com valores numéricos em mesma ordem de grandeza. Em segundo lugar, verifica-se que durante o descarregamento, o campo \mathcal{D}_f apresenta valores com, aproximadamente, duas ordens de grandeza maiores que os encontrados em \mathcal{D}_m . De acordo com esses dados numéricos, enquanto ambas as contribuições (matrizes da fibra e fibrilas) dissipam energia durante o carregamento, somente a contribuição unidirecional das fibrilas contribuir com a dissipação energética na fase de descarregamento.

Por fim, verifica-se novamente, que as fibrilas podem tem um importante papel não somente na rigidez do tecido, mas também na dissipação de energia.

6.2.8 Comportamento Anisotrópico em Cisalhamento Simples

Estudos experimentais e numéricos reportam que alguns tipos de tendões podem estar sujeitos a estados não homogêneos de deformações *in vivo* ou responder de forma anisotrópica sob carregamentos específicos. Um exemplo é o tendão calcâneo humano (tendão de Aquiles), no qual são verificados campos não homogêneos de deslocamento que podem induzir importantes deformações cisalhantes locais (mais detalhes em Handsfield et al. (2016)). Outro exemplo emerge da investigação experimental conduzida por Böl et al. (2015) empregando ensaios semiconfinados de compressão em amostras cúbicas sob diferentes orientações em relação às fibras de colágeno. Os resultados dessas análises mostraram que os tendões apresentam anisotropia mecânica em compressão (um estudo numérico relacionado a esses experimentos é apresentado na Seção 8).

Ensaio mecânicos específicos em fascículos, como de compressão semiconfinada ou cisalhamento, não foram encontrados durante a revisão bibliográfica realizada nesta tese. Sabendo que fascículos de diferentes tipos de tendões apresentam dimensões micrométricas (~ 100 -

300 μm de diâmetro), percebe-se que o desenvolvimento de dispositivos e protocolos experimentais para ensaios mecânicos específicos nessa escala, não é trivial. Entretanto, o emprego da teoria de multiescala aliada ao método dos elementos finitos fornece um ambiente numérico apropriado para o estudo da resposta do material em diversas condições de ensaios. Assim, existe a possibilidade de investigar o comportamento material, mesmo quando restrições tecnológicas dificultam a análise experimental.

Motivado pelo exposto acima, propõe-se avaliar as respostas viscoelásticas do EVR do fascículo sob ensaios cíclicos de cisalhamento simples, cujos os gradientes de deformação macroscópicos são dados por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Plano (12) = (13)} \Rightarrow \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & \gamma_{12} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \gamma_{13} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \text{Plano (31) = (21)} \Rightarrow \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \gamma_{21} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \gamma_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \text{Plano (23) = (32)} \Rightarrow \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \gamma_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \gamma_{32} & 1 \end{bmatrix} \end{array} \right. . \quad (6.6)$$

Os testes de cisalhamento foram baseados na geometria do EVR, onde a direção 1 refere-se a coordenada referencial global e está alinhada com o eixo axial das fibras. Já as direções 2 e 3 formam os planos transversais às fibras (ver Figura 32). Nessas análises multiescala foram aplicadas deformações macroscópicas cisalhantes máximas de 25%, isto é, $\gamma_{(\cdot)} = 0,25$. Os parâmetros constitutivos dos modelos microestruturais são os mesmos da seção anterior.

Na Figura 33 são apresentados os resultados homogeneizados referentes aos planos cisalhantes mostrados na Figura 32. Percebe-se que as curvas homogeneizadas diferem para cada plano cisalhante, indicando que o EVR proposto responde de forma anisotrópica sob cisalhamento. Embora o estado cisalhante γ_{31} possa não ser usual, com base na morfologia e biomecânica dos tendões, as condições γ_{12} e γ_{23} possivelmente estarão presentes em regiões específicas do tecido (ver os resultados reportados em Handsfield et al. (2016)).

Enfatiza-se, também, que os níveis de tensão são muito menores

que os encontrados em estados trativos com apenas 4% de deformação macroscópica na direção das fibras (comparar figuras 20 e 33). Contudo, mais investigações numéricas devem ser realizadas a fim de avaliar a relevância do cisalhamento na biomecânica dos tendões.

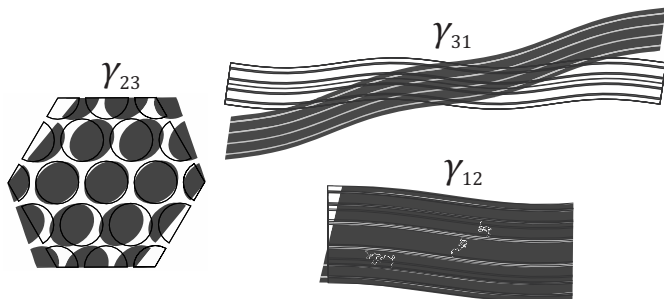


Figura 32: Geometrias referenciais (arestas) e deformadas do EVR do fascículo quando submetidas a ensaios de cisalhamento simples com 25% de deformação macroscópica.

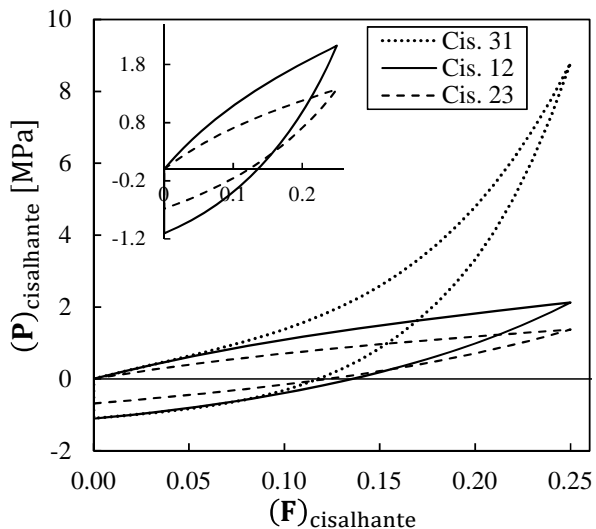


Figura 33: Respostas homogeneizadas para os três planos cisalhantes apresentados na Figura 32.

Por fim, a ideia dessa seção foi exemplificar a aplicabilidade das

análises em multiescala mesmo quando dados experimentais não estão disponíveis. Além disso, esses resultados motivam o desenvolvimento de novas técnicas experimentais, as quais fornecerão dados importantes sobre a biomecânica multiescala dos tendões, contribuindo com a proposição de modelos constitutivos mais elaborados.

7 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

7.1 Conclusões

Nessa tese foi apresentado um estudo numérico multiescala do comportamento viscoelástico de fascículo de tendões. Em vista das diversas escalas estruturais dos tendões, uma detalhada pesquisa bibliográfica foi realizada para fundamentar a escolha da escala macroscópica do fascículo. A geometria do elemento de volume representativo do fascículo foi proposta com base em estudos tridimensionais, via imagem, da morfologia do tecido. Modelos de viscoelasticidade específicos para as fases materiais microestruturais (fibras e matriz celular) foram formulados em um escopo constitutivo variacional, consistente com a teoria multiescala empregada e propícios à implementação em códigos convencionais de elementos finitos. Os parâmetros constitutivos desses modelos foram identificados com base em dados experimentais relativos à ensaios micromecânicos disponíveis na literatura. Por fim, foi realizado um conjunto de simulações numéricas e multiescala, cujos os resultados levaram às seguintes conclusões:

- *Referente à modelagem constitutiva*
 - A abordagem incremental considerada na discretização das equações constitutivas resultou em um algoritmo de atualização variacional apresentado em um formato totalmente tensorial. Mesmo sendo uma alternativa a outras abordagens constitutivas, o algoritmo é apropriado à consideração de potenciais que não são funções isotrópicas das deformações, como por exemplo, em funções anisotrópicas acopladas.
- *Referente ao comportamento mecânico das células*
 - Os resultados numéricos obtidos através da simulação de ensaios de nanoindentação em células de fibroblasto indicaram que elas parecem responder localmente de forma compressível. Foi verificado que o modelo constitutivo e a metodologia proposta oferecem um escopo numérico conveniente ao estudo das respostas viscoelásticas locais de células vivas sujeitas a testes de nanoindentação.
- *Referentes às investigações multiescala*
 - Os resultados numéricos suportam a hipótese que a resposta viscoelástica dos tendões, na direção axial às fibras, é pouco sensíveis a variações nas propriedades viscoelásticas das cé-

lulas. Em outras palavras, as células do tendão (como unidades estruturais) afetam muito pouco a rigidez e dissipação do tecido.

- A fração volumétrica de fibrilas afeta consideravelmente a rigidez do fascículo na direção axial às fibras de colágeno.
- Ao contrário do que intuitivamente se esperava, as fibrilas parecem ter um importante papel na dissipação energética dos tecidos tendinosos. Com base nos resultados numéricos, verificou-se que as fibrilas contribuem consideravelmente com a dissipação energética em dois casos particulares: a) quando submetidas a altas taxas de deformação; b) na fase de descarregamento em regimes cíclicos de tração.
- Sob estados uniaxiais de tração, a cinemática transversal das fibras impõem grandes deformações compressivas e cisalhantes na matriz celular no plano transversal às fibras. Assim, esse comportamento pode representar um importante micromecanismo relacionado à mecanotransdução celular.
- A cinemática transversal das fibras explica as grandes deformações transversais (Poisson) observadas experimentalmente em testes de tração em tendões e fascículos. Ademais, essa cinemática particular pode estar relacionada ao escoamento de fluídos frequentemente observado nessa condição de ensaio.
- As células dos tendões são responsáveis pela produção e regulação da matriz extracelular, contribuindo na homeostase do tecido. Nesse contexto e com base nas grandes deformações locais verificadas na matriz celular, levantou-se a hipótese que as células podem estar sujeitas à mecanismos localizados de dano guiados por deformações. Nesse caso, se a taxa de danificação local é maior que a de cura, condições patológicas secundárias podem se estabelecer no tecido tendinoso, com por exemplo, em tendinopatias relacionadas ao uso excessivo do tendão.
- Se por um lado evidências numéricas suportam hipotéticos processos de dano nas células, por outro lado, os mesmos resultados numéricos confrontados com dados experimentais desacreditam micromecanismos de dano guiados por deformação nas fibrilas em níveis macroscópicos de deformação fisiológica.

- Ensaios numéricos multiescala de cisalhamento simples foram realizados, onde verificou-se que os fascículos respondem de forma anisotrópica. Nesse caso, o objetivo foi investigar o comportamento material sob ensaios não usuais, onde questões tecnológicas limitam à análise experimental.

Finalmente, os resultados e hipóteses levantadas nessa tese tem por objetivo motivar linhas de pesquisa interdisciplinares, como por exemplo, as relacionadas à mecanotransdução celular e à engenharia de tecidos tendinosos, contribuindo assim com futuras aplicações clínicas.

7.2 Trabalhos Futuros

Em vista dos desenvolvimentos e estudos realizados no decorrer da tese, propõem-se os seguintes trabalhos futuros:

- Implementação de uma estratégia numérica para consideração de estados macroscópicos uniaxiais e semiconfinados junto a teoria multiescala, isto é, onde as tensões homogeneizadas são nulas em faces livres.
- Proposição de uma nova condição de contorno multiescala em vista do EVR não usual utilizado neste trabalho. Isto, porque, foi verificado que a condição de contorno multiescala de deslocamentos lineares nos contornos restringe significativamente a cinemática do EVR.
- Consideração de um lei de atrito entre a fibra e a matriz celular.
- Estudos numéricos multiescala em outras escalas microestruturais, como por exemplo, em um EVR da fibra.
- Desenvolvimento de modelos viscoelásticos anisotrópicos acoplados propícios à representação das respostas viscoelásticas homogeneizadas do fascículo.
- Consideração de processos patológicos no modelamento constitutivo. Excluindo ruptura acidentais de tendões, isto é, em condições não fisiológicas, o emprego dos preceitos clássicos da mecânica do dano contínuo no estudo de algumas patologias desses tecidos são questionáveis. Por exemplo, [Couppe et al. \(2015\)](#) reportam aumento de rigidez do tendão de Aquiles em pacientes com diabetes, resultando em problemas ortopédicos.
- Extensão do modelo para acoplamento fluido-estrutura para análises em poro-visco-elasticidade ou poro-eletro-visco-elasticidade

([Khayyeri et al., 2015](#); [Cowin e Doty, 2007](#)), contabilizando desta maneira a possibilidade de transporte de nutrientes em um ambiente pouco vascularizado.

8 DIGRESSÃO: UM MODELO HIPERELÁSTICO ORTOTRÓPICO ACOPLADO APLICADO AO COMPORTAMENTO MECÂNICO DE TENDÕES

Esta seção apresenta um estudo sobre a modelagem fenomenológica do comportamento mecânico conservativo e anisotrópico de tendões. Este trabalho foi publicado em [Carniel e Fancello \(2017a\)](#) e visa aprimorar pesquisas futuras relacionadas a efeitos dissipativos acoplados e investigações multiescala em situações onde os tendões estão submetidos a estados compressivos.

Em relação ao modelamento fenomenológico dissipativo dos tendões, pode-se empregar o modelo viscoelástico variacional proposto para as fibras de colágeno (Seção 5.1), o qual foi desenvolvido de forma conveniente para considerar potenciais anisotrópicos acoplados (ver discussões no final da seção 5.1.3). Em vista disso, os potenciais hipereelástico ortotrópicos apresentado aqui podem ser incorporados de forma trivial nessa abordagem variacional.

Já em um contexto multiescala, os resultados e discussões apresentados neste estudo fornecem subsídios para investigar possíveis micromecanismos que acoplam os comportamentos mecânicos dos tendões em estados compressivos e relacioná-los com a mecanobiologia dos mesmos.

8.1 Introdução

Visando a modelagem de tendões, uma investigação experimental foi conduzida por [Böl et al. \(2015\)](#) empregando ensaios semiconfinados de compressão em amostras sob diferentes orientações em relação às fibras de colágeno. Os resultados dessas análises mostraram quantitativamente um comportamento que era qualitativamente esperado: os tendões apresentam anisotropia mecânica mesmo em compressão.

Testes mecânicos experimentais revelam discrepâncias significativas nas respostas sob compressão e tração. Por exemplo, redução volumétrica tem sido verificada em compressão e também em tração. Ademais, os níveis de tensão diferem consideravelmente entre ambas as condições de ensaio (comparar as figuras 35 e 36). Em vista desses resultados, pode-se argumentar que as tensões compressivas podem ser desconsideradas. Enquanto essa afirmação é verdadeira em certas aplicações práticas, a quantificação e predição apropriada desses com-

portamentos mecânicos acoplados certamente fornecerão importantes informações para um melhor entendimento dos comportamentos conservativos e dissipativos que ocorrem nas escalas microscópicas dos tendões.

Diversos modelos constitutivos empregados no modelamento de tecidos fibrosos são baseados em energias de deformação compostas de dois termos: um associado à matriz e outro às fibras. Enquanto a contribuição energética da matriz usualmente é descrita por uma função isotrópica das deformações, a das fibras é expressa por uma função de valores positivos de deformações projetadas na direção das fibras (entre outros, [Holzapfel e Gasser \(2001\)](#), [Chen, Joli e Feng \(2014\)](#), [Vassoler, Reips e Fanello \(2012\)](#), [Vassoler, Stainier e Fanello \(2016\)](#)). Devido às suas simplicidades, esses modelos fornecem respostas isotrópicas em estados compressivos na direção das fibras, em contraste com as evidências experimentais mencionadas.

Motivado por esse fato, propõe-se aqui um arranjo prático de modelos hiperelásticos, identificando seus respectivos parâmetros constitutivos de modo a representar satisfatoriamente o comportamento mecânico acoplado de tendões, mesmo quando submetidos a estados compressivos. Enquanto a rigidez elevada verificada em ensaios trativos é representada por um modelo de reforço de fibras, a resposta acoplada é modelada por meio de um potencial do tipo Fung em termos da família de tensores Lagrangianos generalizados de Seth-Hill, ampliando sua bem conhecida aplicação. Ademais, sabendo que os tendões podem estar submetidos a consideráveis estados compressivos, a medida logarítmica de deformação da família de Seth-Hill é usada em detrimento da usualmente empregada deformação de Green-Lagrange. Neste contexto, o modelo proposto visa lidar com os seguintes fenômenos:

1. acoplamentos mecânicos entre as estruturas de colágeno e suas matrizes, observados em ensaios compressivos;
2. rigidez na direção das fibras (para valores positivos de deformação) muito maior que a verificada nas direções ortogonais às fibras ou em compressão.

8.2 Comportamento Mecânico Experimental

8.2.1 Ensaios de Cisalhamento

Purslow (2009) investigou o comportamento de tendões de bovinos sob ensaios de cisalhamento simples nas direções longitudinal e transversal aos fascículos. Os resultados dos módulos de cisalhamento calculados na faixa inicial de deformações indicaram uma baixa rigidez mecânica, variando de 2,94 kPa até 6,38 kPa. Além disso, nenhuma diferença significativa foi verificada entre essas direções.

8.2.2 Ensaios de Compressão Semiconfinada

Ensaios de compressão semiconfinada foram conduzidos por Böl et al. (2015) em amostras cúbicas (4 mm de aresta) de tendões de suínos. Os experimentos foram realizados em três modos distintos, como ilustrado na Figura 34. No modo I os fascículos são comprimidos na direção axial. No modo II os fascículos são transversalmente comprimidos mas é permitido o alongamento na direção axial. Finalmente, no modo III, os fascículos são transversalmente comprimidos e restritos em sua direção axial. As curvas do primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff versus alongamento relativas a esses modos de compressão são apresentadas na Figura 35.

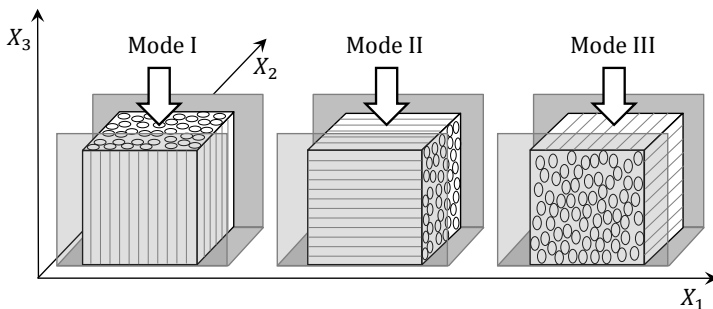


Figura 34: Ilustração dos ensaios de compressão semiconfinada conduzidos por Böl et al. (2015).

Em vista do eixo coordenado da Figura 34 e levando em consi-

derando um campo homogêneo de deformações, o gradiente de deformação no final dos testes é

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}, \quad (8.1)$$

onde $\lambda_2 = 1,0$ e $\lambda_3 = 0,7$, necessitando encontrar λ_1 para cada modo compressivo. Através dos experimentos os autores fornecem os Jacobianos volumétricos no final de cada ensaio, i.e., $J_I = J_{III} = 0,88 \pm 0,04$ e $J_{II} = 0,84 \pm 0,05$. Considerando a Equação (8.1), a mudança de volume é dada por $J \stackrel{\text{def}}{=} \det(\mathbf{F}) = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3$, resultando nos valores médios $(\bar{\cdot})$,

$$\begin{cases} \bar{J}_I = \bar{J}_{III} = 0,88 & \Rightarrow \bar{\lambda}_1^I = \bar{\lambda}_1^{III} = 1,25714 \\ \bar{J}_{II} = 0,84 & \Rightarrow \bar{\lambda}_1^{II} = 1,20 \end{cases}. \quad (8.2)$$

Em vista desses testes, é razoável considerar que os modos I e III geram estados homogêneos de deformação (na escala da amostra). Contudo, os resultados do modo II merecem mais discussão.

Devido à uma tensão compressiva de apenas 350 kPa na direção X_3 , as amostras alcançam um alongamento médio de $\bar{\lambda}_1^{II} = 1,20$, i.e., aproximadamente 20% de deformação na direção axial às fibras. Esse nível de deformação representa um valor consideravelmente elevado se comparado aqueles observados em testes de tração. Esse fato pode ser verificado na Figura 36, onde valores mínimos de 14 MPa são necessários para obter apenas 5% de deformação axial. Além disso, ensaios experimentais de tração em fascículos individuais de tendões revelam ruptura em níveis de deformações de 10-20% (Yamamoto, Hayashi e Yamamoto 1999, Robinson et al., 2004, Legerlotz, Riley e Screen, 2010, Svensson et al., 2010a, Thorpe et al., 2012). Devido a esses contrastes, não está claro se o valor médio/homogêneo de $\bar{\lambda}_1^{II} = 1,20$ observado experimentalmente no modo II pode ser atribuído para ambas fibras e matriz. Ademais, os baixos valores de rigidez cisalhante encontrados por Purslow (2009) realçam a significativa diferença de rigidez entre as estruturas de colágeno (fascículos, fibras, fibrilas) e suas matrizes (matriz interfascicular, matriz celular e substância base).

É importante mencionar que evitar o deslizamento entre as fibras e fascículos é uma questão importante em protocolos de ensaios

de tração em tecidos tendinosos, motivando por exemplo, o emprego de garras criogênicas (Vergari et al., 2011, Thorpe et al., 2012). Por fim, com base nessas observações, considera-se a hipótese de que os fascículos e fibras podem não estar submetidos ao valor médio observado $\bar{\lambda}_1^{\text{II}} = 1,20$. Consequentemente, pode-se questionar se os testes no modo II levam a estados homogêneos de deformação. Assim, os dados fornecidos para esse modo não serão usados no presente modelamento constitutivo.

8.2.3 Ensaios de Tração

Devido à característica fisiológica dos tecidos tendinosos, os ensaios de tração na direção axial às fibras são os mais abrangentes na literatura. Uma breve revisão bibliográfica foi listada na Tabela 2 (Seção 4), sendo que algumas das correspondentes curvas tensão-alongamento são rerepresentadas na Figura 36.

Grandes variações são notadas nessas curvas. Além de questões técnicas relacionadas aos experimentos, essas diferenças podem ser atribuídas a condições patológicas, envelhecimentos, gênero, disfunções hormonais, sedentarismo, entre outros (Franchi et al., 2007, Riley, 2008, Magnusson, Langberg e Kjaer, 2010, Arya e Kulig, 2010, Aro, de Campos Vidal e Pimentel, 2012, Nourissat, Berenbaum e Duprez, 2015, Coupe et al., 2015). Entretanto, independentemente das técnicas de medição e protocolos experimentais, tipo do tendão e possíveis patologias, o formato não linear característico de todas as curvas mantém-se o mesmo.

8.3 Modelamento Fenomenológico

Seguindo a clássica abordagem de decomposição aditiva da energia de deformação, a energia livre de Helmholtz é apresentada como

$$\psi(\mathbf{C}) \stackrel{\text{def}}{=} \psi_{m/f}(\mathbf{C}) + \psi_f(I_4), \quad (8.3)$$

onde $\psi_{m/f}$ modela a contribuição energética de interações microestruturais entre as estruturas de colágeno de suas matrizes, enquanto a função escalar ψ_f representa a energia de deformação na direção axial a uma família de fibras. É importante notar que, diferente do que possa parecer, esse modelo não pretende representar uma separação de fases materiais (matriz versus fibras). Ambos os termos na função de

Helmholtz (8.3), levam em consideração a energia acumulada na matriz e nas fibras. Mesmo assim, o formato aditivo foi mantido, pois visa contabilizar os seguintes fenômenos aqui discutidos:

1. acoplamentos mecânicos entre as estruturas de colágeno e suas matrizes observados em ensaios de compressão (controlado por $\psi_{m/f}$);
2. rigidez na direção das fibras (para valores positivos de deformação) muito maior que a verificada nas direções ortogonais às fibras ou em compressão (controlado por ψ_f).

Os argumentos da Equação (8.3) são o tensor direito de Cauchy-Green $\mathbf{C} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ e o invariante

$$I_4 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{C} : \mathbf{M}_x = \lambda_f^2, \quad (8.4)$$

no qual $\mathbf{M}_x \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{m}_x \otimes \mathbf{m}_x$ é chamado de tensor estrutural, \mathbf{m}_x é um vetor representando as direções das fibras na configuração referencial e λ_f é o alongamento na direção das fibras.

8.3.1 Modelo Ortotrópico Acoplado

Com base nas investigações experimentais conduzidas por Purslow (2009) e Böl et al. (2015) (cujos resultados foram discutidos na Seção 8.2), a anergia livre $\psi_{m/f}$ é definida como,

$$\psi_{m/f}(\mathbf{C}) \stackrel{\text{def}}{=} \psi_{NH}(\hat{\mathbf{C}}) + \psi_{Fung}(\mathbf{E}_{(n)}). \quad (8.5)$$

Uma vez que os resultados de Purslow mostraram que o comportamento cisalhante de tendões não muda consideravelmente entre as direções axial e transversal às fibras, a energia isotrópica de Neo-Hookean

$$\psi_{NH}(\hat{\mathbf{C}}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu}{2} \left[\text{tr}(\hat{\mathbf{C}}) - 3 \right], \quad (8.6)$$

é escolhida para capturar o comportamento em cisalhamento. Em (8.6), $\mu > 0$ é um parâmetro material e $\hat{\mathbf{C}} \stackrel{\text{def}}{=} J^{-2/3} \mathbf{C}$ é a parte isocórica do tensor direito de Cauchy-Green. Entretanto, como já mencionado anteriormente, essa energia isotrópica não é capaz de reproduzir os ensaios semiconfinados de compressão apresentados na Seção 8.2. Desse modo, uma energia livre de Helmholtz ψ_{Fung} adicional é definida como

$$\psi_{\text{Fung}}(\mathbf{E}_{(n)}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{C}{2} (e^Q - 1), \quad (8.7)$$

a qual representa um modelo ortotrópico acoplado baseado no trabalho pioneiro de [Fung, Fronek e Patitucci \(1979\)](#). Na Equação (8.7), o expoente é dado por $Q \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_{(n)} : \mathbb{A} : \mathbf{E}_{(n)}$ e $C > 0$ é um parâmetro material com unidade de tensão. O tensor de quarta ordem \mathbb{A} contém os parâmetros ortotrópicos e pode ser mapeado em notação de Voigt (variável tensorial sublinhada) como:

$$\underline{\mathbb{A}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} (\underline{\mathbb{A}})_{1111} & (\underline{\mathbb{A}})_{1122} & (\underline{\mathbb{A}})_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ & (\underline{\mathbb{A}})_{2222} & (\underline{\mathbb{A}})_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ & & (\underline{\mathbb{A}})_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ & & & (\underline{\mathbb{A}})_{1212} & 0 & 0 \\ \text{sym} & & & & (\underline{\mathbb{A}})_{2323} & 0 \\ & & & & & (\underline{\mathbb{A}})_{3113} \end{bmatrix}. \quad (8.8)$$

O tensor de segunda ordem $\mathbf{E}_{(n)}$ representa uma família de tensores Lagrangianos representados como,

$$\mathbf{E}_{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{1}{n} (\mathbf{U}^n - \mathbf{I}) & n \neq 0 \\ \ln(\mathbf{U}) & n = 0 \end{cases}, \quad (8.9)$$

onde n é um número real, \mathbf{U} é o tensor alongamento direito e \mathbf{I} é o tensor identidade de segunda ordem. Como pode ser visto na Figura 1 (Seção 2.1), as fibras de colágeno podem ser consideradas retas no ponto de vista de um observador macroscópico, apresentando uma direção preferencial ao eixo axial dos fascículos. De acordo como isso e considerando X_1 a direção axial das fibras e fascículos (ver modo II da Figura 34), propõe-se que o comportamento material responde segundo os seguintes acoplamentos:

$$\begin{cases} (\underline{\mathbb{A}})_{1111} = c_a \\ (\underline{\mathbb{A}})_{2222} = (\underline{\mathbb{A}})_{3333} = c_t \\ (\underline{\mathbb{A}})_{1122} = (\underline{\mathbb{A}})_{1133} = c_{at} \\ (\underline{\mathbb{A}})_{2233} = c_{tt} \\ (\underline{\mathbb{A}})_{1212} = (\underline{\mathbb{A}})_{2323} = (\underline{\mathbb{A}})_{3113} = 0 \end{cases}, \quad (8.10)$$

onde $\{c_a, c_t, c_{at}, c_{tt}\}$ são parâmetros materiais adimensionais relaciona-

dos às direções das fibras, i.e., axial, transversal, axial-transversal e transversal-transversal, respectivamente. Pode-se notar que os termos cisalhantes são nulos, uma vez que a correspondente energia é contabilizada pelo modelo ψ_{NH} em (8.6). A substituição de (8.10) em (8.8) resulta em

$$\underline{\underline{\mathbb{A}}} = \begin{bmatrix} c_a & c_{at} & c_{at} & 0 & 0 & 0 \\ & c_t & c_{tt} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_t & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 \\ \text{sym} & & & & 0 & 0 \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{\mathbb{A}}}^* \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} c_a & c_{at} & c_{at} \\ & c_t & c_{tt} \\ \text{sym} & & c_t \end{bmatrix}, \quad (8.11)$$

no qual define-se a submatriz $\underline{\underline{\mathbb{A}}}^* \stackrel{\text{def}}{=} \underline{\underline{\mathbb{A}}}(1..3, 1..3)$.

A verificação da convexidade do potencial de Fung (8.7) em relação a $\mathbf{E}_{(n)}$ é trivial. Percebe-se que ψ_{Fung} é uma função não decrescente e estritamente convexa de Q , sendo esse argumento uma função quadrática e estritamente convexa de $\mathbf{E}_{(n)}$. Consequentemente, garante-se a convexidade do potencial de Fung uma vez que a positividade semidefinida do tensor simétrico \mathbb{A} é garantida (Rockafellar, 1970). Vale enfatizar que essa propriedade é válida para qualquer tensor de segunda ordem simétrico $\mathbf{E}_{(n)}$. Na presente proposição, a positividade semidefinida de \mathbb{A} é garantida se a matriz $\underline{\underline{\mathbb{A}}}^*$ for positivo definida, i.e., todos seus autovalores devem ser estritamente positivos. Em vista disso e após algumas manipulações analíticas, esse requisito leva as seguintes restrições nos parâmetros constitutivos:

$$\mathbf{g} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} c_t - c_{tt} \\ 1/2(c_a + c_t + c_{tt}) + B \\ 1/2(c_a + c_t + c_{tt}) - B \end{bmatrix} > \mathbf{0}, \quad (8.12)$$

com $B = 1/2\sqrt{c_a^2 + c_t^2 + 2(c_t c_{tt} - c_a c_t - c_a c_{tt}) + 8c_{at}^2}$.

Garantida a convexidade de $\psi_{Fung}(\mathbf{E}_{(n)})$, as consequências físicas da escolha de um membro específico da família de $\mathbf{E}_{(n)}$ dependem da aptidão do potencial hiperelástico resultante em representar o comportamento material observado. No modelamento constitutivo de tecidos moles, alguns autores empregam a deformação de Green-Lagrange $\mathbf{E} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_{(2)}$ (Holzapfel e Weizsäcker, 1998, Holzapfel, 2006, Duong, Nguyen e Staat, 2015) ou mesmo a deformação de engenharia (Rosen et al., 2008) para representar o potencial de Fung (8.7).

Entretanto, propõe-se neste trabalho utilizar a medida de deformação logarítmica da família (8.9), isto é:

$$\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{E}_{(0)} = \ln(\mathbf{U}) = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{C}). \quad (8.13)$$

As razões que motivam essa escolha são basicamente duas. Em primeiro lugar, sabe-se que sob grandes estados compressivos, i.e., para $\lambda \rightarrow 0$, as deformações de engenharia e de Green-Lagrange convergem para valores finitos (-1,0 e -0,5, respectivamente) enquanto a deformação logarítmica tende consistentemente ao infinito negativo. Portanto, essa medida de deformação parece ser uma conveniente escolha no modelamento de tecidos biológicos, que podem estar sujeitos a consideráveis estados compressivos. Em segundo lugar, a medida de deformação logarítmica forneceu melhores resultados que aqueles obtidos com a deformação de Green-Lagrange durante a identificação dos parâmetros constitutivos, como detalhado na Seção 8.6.

8.3.2 Modelo Unidirecional

Como já mencionado, a rigidez de tendões verificada em ensaios de tração é consideravelmente maior que a observada em compressão. Devido a esse fato experimental, é proposto que parte da rigidez na direção axial às fibras, i.e., adicionalmente a componente $(\mathbb{A})_{1111}$ da Equação (8.8), é ativada sob tração por meio do potencial ψ_f de (8.3). Essa função é definida como:

$$\psi_f(I_4) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < \lambda_f < 1 \\ k_1 (I_4 - 1)^2 + k_2 (I_4 - 1)^3 & \text{se } \lambda_f \geq 1 \end{cases}, \quad (8.14)$$

onde $k_1 > 0$ e $k_2 > 0$ são parâmetros materiais.

8.4 Tensão e Módulo Tangente Material

Através do formalismo da hiperelasticidade (Holzapfel, 2000; Bonet e Wood, 2008; Gurtin, Fried e Anand, 2010), o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff é definido como

$$\mathbf{S} \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{C}}, \quad (8.15)$$

e o primeiro tensor de Piola–Kirchhoff é recuperado através de $\mathbf{P} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{FS}$. Em vista de (8.15), as derivadas das energias livre de Helmholtz (8.3) resultam em:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_{m/f} + \mathbf{S}_f, \quad \mathbf{S}_{m/f} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{S}_{NH} + \mathbf{S}_{Fung}, \quad (8.16)$$

onde,

$$\mathbf{S}_{NH} = J^{-2/3} \text{dev}_{\mathbf{x}} (\mu \mathbf{I}), \quad (8.17)$$

$$\mathbf{S}_{Fung} = \mathbf{T} : \mathbb{H}, \quad \mathbf{S}_f = 2 \frac{\partial \psi_f}{\partial I_4} \mathbf{M}_{\mathbf{x}}. \quad (8.18)$$

Na Equação (8.17) é introduzido o operador deviatórico na configuração referencial $\text{dev}_{\mathbf{x}} (\cdot) \stackrel{\text{def}}{=}} (\cdot) - 1/3 [(\cdot) : \mathbf{C}] \mathbf{C}^{-1}$ (Simo, 1998). Em vista de (8.18), pode-se definir as seguintes derivadas,

$$\mathbf{T} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \psi_{Fung}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = C e^{Q_{\mathbb{A}}} : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \mathbb{H} \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{C}}, \quad (8.19)$$

e

$$\frac{\partial \psi_f}{\partial I_4} = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < \lambda_f < 1 \\ 2k_1 (I_4 - 1) + 3k_2 (I_4 - 1)^2 & \text{se } \lambda_f \geq 1 \end{cases}. \quad (8.20)$$

O tensor de quarta ordem \mathbb{H} é obtido através da derivada da decomposição espectral de $\boldsymbol{\varepsilon}$ em relação a \mathbf{C} , cuja uma forma fechada é apresentada em Miehe e Lambrecht (2001).

Em um código convencional de elementos finitos não linear, o módulo tangente consistente deve ser fornecido (Simo e Taylor, 1985). Levando em consideração uma formulação Lagrangiana total (Belytschko, Liu e Moran (2000)), a linearização das equações de equilíbrio resulta no módulo tangente material

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}} \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}}. \quad (8.21)$$

As derivadas direcionais de (8.16) resultam nos operadores de quarta ordem

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}} = \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{m/f}} + \mathbb{C}_{\mathbf{x}_f}, \quad \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{m/f}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{NH}} + \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{Fung}}, \quad (8.22)$$

onde,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{NH}} \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \mathbf{S}_{NH}}{\partial \mathbf{C}}, \quad (8.23)$$

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{Fung}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{H} : \mathbb{E} : \mathbb{H} + \mathbf{T} : \mathbf{L}, \quad (8.24)$$

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_f} \stackrel{\text{def}}{=} \left(4 \frac{\partial^2 \psi_f}{\partial I_4^2} \right) (\mathbf{M}_x \otimes \mathbf{M}_x). \quad (8.25)$$

A contribuição do modelo de Neo-Hookean (8.23) no módulo tangente está bem estabelecida na literatura, sendo que mais detalhes podem ser encontrados em Holzapfel (2000) e Bonet e Wood (2008). Levando em consideração o tensor (8.24), pode-se definir o operador de quarta ordem

$$\mathbb{E} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2 \psi_{Fung}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial \boldsymbol{\varepsilon}} = C e^Q \mathbb{A} + 2 C e^Q [(\mathbb{A} : \boldsymbol{\varepsilon}) \otimes (\mathbb{A} : \boldsymbol{\varepsilon})], \quad (8.26)$$

e o operador de sexta ordem \mathbf{L} como

$$\mathbf{L} \stackrel{\text{def}}{=} 4 \frac{\partial^2 \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}}.$$

Devido ao custo computacional associado ao cálculo de \mathbf{L} , pode-se utilizar alternativamente a contração $\mathbf{T} : \mathbf{L}$. Uma forma fechada para essa operação é encontrada em Miehe e Lambrecht (2001). Por fim, a contribuição da energia ψ_f no módulo tangente material é expressa por:

$$\frac{\partial^2 \psi_f}{\partial I_4^2} = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < \lambda_f < 1 \\ 2k_1 + 6k_2 (I_4 - 1) & \text{se } \lambda_f \geq 1 \end{cases}. \quad (8.27)$$

8.5 Identificação dos Parâmetros Constitutivos

A fim de verificar se o modelo proposto é apto a representar as respostas mecânicas experimentais, uma estratégia de otimização é empregada para identificar os parâmetros constitutivos. Esse procedimento de identificação é realizado através do ajuste entre os resultados fornecidos pelo modelo numérico e os dados experimentais referentes aos ensaios de compressão semiconfinada e de tração.

8.5.1 Ensaios Numéricos

Em relação aos testes semiconfinados ilustrados na Figura 34, supõe-se que as amostras estão sujeitas a estados homogêneos de deformações dados pelo gradiente de deformação (8.1). Enquanto os alongamentos (λ_2, λ_3) são, a priori, definidos pelos experimentos, o alongamento λ_1 deve obter valores que satisfaçam a condição de tensão nula nas faces livres das amostras, i.e., a componente $(\mathbf{P})_{11}$ do primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff deve respeitar:

$$(\mathbf{P})_{11}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = 0. \quad (8.28)$$

Uma vez que $\lambda_2 = 1,0$ no decorrer dos ensaios, o alongamento λ_3 varia linearmente de 1,0 até 0,7, sendo que λ_1 resulta da solução de (8.28) para cada incremento de tempo.

Os ensaios uniaxiais de tração na direção das fibras, por outro lado, são controlados pelo alongamento λ_1 . Assim, os alongamentos transversais (λ_2, λ_3) devem ser encontrados a fim de satisfazer a condição de tensão nula nas faces livres, isto é:

$$\begin{cases} (\mathbf{P})_{22}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = 0 \\ (\mathbf{P})_{33}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = 0 \end{cases}. \quad (8.29)$$

8.5.2 Estratégia de Otimização

A identificação dos parâmetros constitutivos é um problema inverso, usualmente solucionado com base na minimização de uma função objetivo que fornece uma medida da diferença entre os dados experimentais e numéricos:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} && f(\mathbf{p}) \\ & \mathbf{p} \in \mathcal{R} && , \\ & \underline{\mathbf{p}} \leq \mathbf{p} \leq \bar{\mathbf{p}} && \end{aligned} \quad (8.30)$$

onde $f(\mathbf{p})$ é a função objetivo, \mathbf{p} é o vetor das variáveis de projeto, nesse caso contendo os parâmetros constitutivos, $\underline{\mathbf{p}}$ e $\bar{\mathbf{p}}$ são os limites inferior e superior dos parâmetros materiais (restrições laterais) e $\mathcal{R} \stackrel{\text{def}}{=} \{\mathbf{p} \mid \mathbf{g}(\mathbf{p}) > \mathbf{0}\}$ representa o espaço de busca restrito pelas equações (8.12).

Sabe-se que com o aumento da complexidade do modelo, maior é o número de parâmetros constitutivos e consequentemente mais experimentos são necessários para identificá-los. Ciente que os dados experimentais disponíveis podem levar a não unicidade de solução (diferentes mínimos locais), um algoritmo heurístico não local baseado em Otimização por Enxame de Partículas (PSO) foi empregado visando a busca dos melhores otimizadores globais. Mais detalhes sobre esse algoritmo e sua aplicação na identificação de parâmetros materiais são discutidos em [Vaz Jr, Cardoso e Stahlschmidt \(2013\)](#).

A estratégia proposta para a identificação dos parâmetros constitutivos é baseada em dois problemas de otimização. O primeiro considera os ensaios semiconfinados de compressão e o segundo leva em consideração os testes de tração. Devido à discussão apresentada na Seção 8.2, somente os modos I e III foram considerados durante o processo de identificação. Para esses modos, a energia ψ_f é inativa. Ademais, a variação experimental do módulo cisalhante, apresentado na Seção 8.2, é estabelecida como limites inferior e superior para o parâmetro cisalhante μ . Assim, somente os parâmetros do modelo $\psi_{m/f}$ são sensíveis as cinemáticas impostas pelos ensaios semiconfinados de compressão. Portanto, para o primeiro problema de otimização, propõe-se a seguinte função objetivo:

$$\begin{aligned} f = & \omega_1 f_{\mathbf{p}} \left[(\mathbf{P})_{33}^{\text{Mode I}} \right] + \omega_2 f_{\mathbf{p}} \left[(\mathbf{P})_{33}^{\text{Mode III}} \right] + \\ & \omega_3 f_{\lambda} (\lambda_1^{\text{Mode I}}) + \omega_4 f_{\lambda} (\lambda_1^{\text{Mode III}}), \end{aligned} \quad (8.31)$$

onde a função erro $f_{\lambda}(\cdot) = \left| (\cdot)^{\text{Exp}} - (\cdot)^{\text{Model}} \right|$ e a raiz do erro quadrático médio $f_{\mathbf{p}}(\cdot) = \sqrt{1/N \sum_{i=1}^N \left[(\cdot)_i^{\text{Exp}} - (\cdot)_i^{\text{Model}} \right]^2}$ são introduzidas e N é o número de pontos das curvas tensão-alongamento. As constantes ω_i ,

$i = 1..4$, representam fatores de peso escolhidos heurísticamente a fim de evitar que uma função prevaleça sobre as outras na função objetivo f . A notação $(\cdot)^{\text{Exp}}$ representa o valor médio dos dados experimentais. É importante notar, que através da função objetivo (8.31), o algoritmo de otimização busca pelo melhor conjunto de parâmetros constitutivos que minimizem, simultaneamente, a diferença entre as curvas tensão-alongamento e também, os alongamentos λ_1 no final de cada ensaio, para ambos os modos I e III.

Uma vez que os parâmetros $\{\mu, C, c_a, c_t, c_{at}, c_{tt}\}$ do modelo $\psi_{m/f}$ foram encontrados, eles são mantidos fixos, e os parâmetros remanescentes $\{k_1, k_2\}$ de ψ_f buscam reproduzir os ensaios uniaxiais de tração. Essa tarefa é realizada no segundo problema de otimização, onde a função objetivo é definida como a raiz do erro quadrático médio da curva uniaxial de tensão do primeiro Piola-Kirchhoff, i.e., $f = f_{\mathbf{P}} \left[(\mathbf{P})_{11}^{\text{Tensile}} \right]$.

8.6 Resultados

O primeiro procedimento de otimização foi rodado considerando os dados experimentais dos modos I e III, simultaneamente. Esse procedimento resultou no conjunto de parâmetros listados na Tabela 9. Usando estes parâmetros materiais, ambos os modos I e III foram simulados, cujas curvas tensão-alongamento podem ser visualizadas na Figura 35. Nota-se que o modelo $\psi_{m/f} = \psi_{NH} + \psi_{Fung}$ satisfatoriamente reproduziu as curvas de compressão, bem como os alongamentos λ_1 (gráfico de barras inserido) ao final dos correspondentes ensaios.

O mesmo procedimento descrito acima foi realizado usando a medida de Green-Lagrange no modelo de Fung. Nesse caso, foi verificado que, apesar dessa medida ter reproduzido igualmente bem as curvas tensão-alongamento, a deformação de Green não foi capaz de prever os alongamentos transversais λ_1 dentro das variações experimentais (convergência em 1,17 e 1,11 para os modos I e III, respectivamente).

Referente aos ensaios de tração, quatro curvas experimentais foram escolhidas e individualmente reproduzidas pelo modelo: limites inferior e superior e duas curvas intermediárias. As correspondentes curvas de tração são apresentadas na Figura 36 e o conjunto de parâmetro identificados são listados na Tabela 10. Os alongamentos transversais para todos os casos foram de aproximadamente $\lambda_2 = \lambda_3 = 0,982$ no alongamento axial $\lambda_1 = 1,05$. Levando esses resultados em consideração e definindo a deformação uniaxial de engenharia como $\varepsilon_{eng(\cdot)} \stackrel{\text{def}}{=}$

$\lambda_{(\cdot)} - 1$, pode-se calcular a razão,

$$-\frac{\varepsilon_{eng_2}}{\varepsilon_{eng_1}} = -\frac{\varepsilon_{eng_3}}{\varepsilon_{eng_1}} \approx 0,35. \quad (8.32)$$

A relação (8.32) é usualmente denominada de coeficiente de Poisson na literatura de biomecânica. Contudo, é importante enfatizar que o coeficiente de Poisson é uma razão constante que se aplica somente em elasticidade isotrópica sob cinemática linearizada (Böl et al. (2015)); uma vez que a amostra está sujeita a deformações finitas, o coeficiente de Poisson perde seu significado físico original.

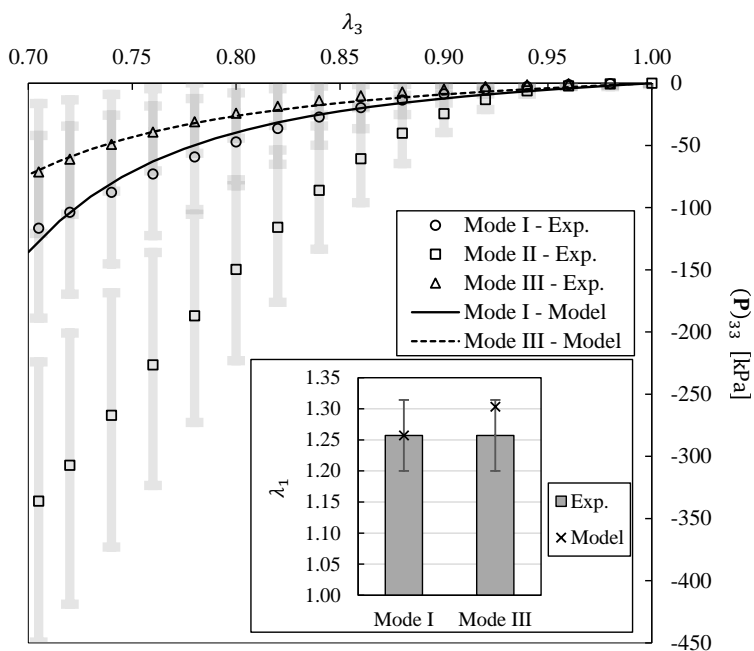


Figura 35: Comparação entre os resultados numéricos e experimentais obtidos do procedimento de identificação de parâmetros para os testes de compressão semiconfinada conduzidos por Böl et al. (2015).

Tabela 9: Parâmetros constitutivos referentes às curvas numéricas mostradas na Figura 35.

Modelo Constitutivo	Parâmetro	Valor
ψ_{Fung}	C [kPa]	9,98
	c_a	14,92
	c_t	14,70
	c_{at}	9,64
	c_{tt}	11,24
ψ_{NH}	μ [kPa]	3,76

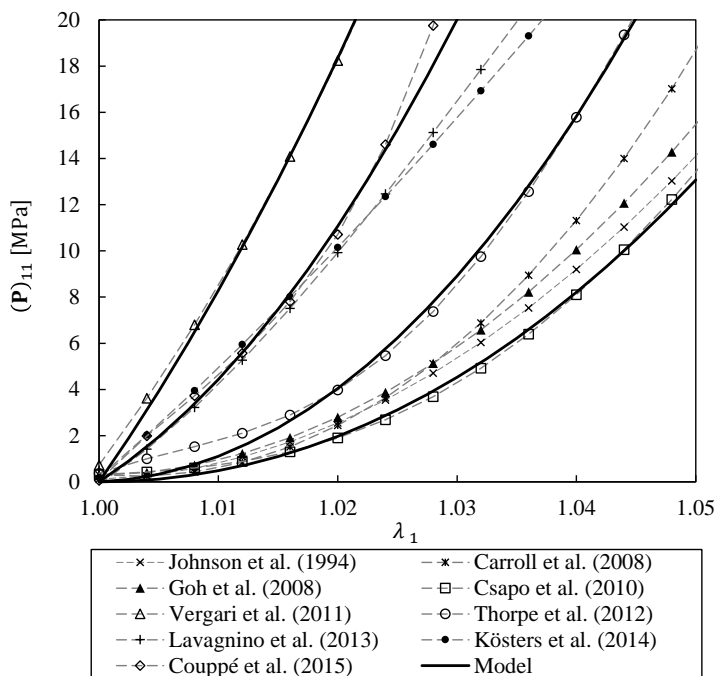


Figura 36: Ensaios uniaxiais de tração em tecidos tendinosos. Os tipos de tendões e técnicas de medição são mostrados na Tabela 2. Os parâmetros constitutivos e relativas curvas experimentais simuladas são listados na Tabela 10.

Tabela 10: Parâmetros constitutivos do modelo ψ_f referentes às curvas numéricas mostradas na Figura 36.

Referência	Parâmetro	
	k_1 [MPa]	k_2 [MPa]
Csapo et al. (2010)	0,010	197,340
Vergari et al. (2011)	92,779	305,870
Thorpe et al. (2012)	2,893	357,230
Coupe et al. (2015)	42,217	411,360

8.7 Discussões e Considerações Finais

De acordo com os resultados numéricos obtidos dos ensaios de compressão, dois pontos são significantes. O primeiro está relacionado com o fato do modo I ser claramente mais rígido que o modo III, apesar da pequena diferença entre os parâmetros axial e transversal c_a e c_t (aproximadamente 1,4%). Essa diferença na resposta mecânica deve ser atribuída aos relevantes valores dos acoplamentos c_{at} e c_{tt} . O segundo ponto refere-se a rigidez transversal-transversal c_{tt} ser 16,6% maior que o termo axial-transversal c_{at} . Nesse caso, percebe-se que importantes micromecanismos são ativados acoplando as direções transversais nos modos compressivos I e III.

Como já mencionado, os resultados numéricos sob tração mostraram uma razão final (8.32) de $\approx 0,35$, indicando aumento de volume. Por outro lado, trabalhos experimentais da literatura empregando testes de tração frequentemente reportam a razão (8.32) de até 3, indicando significativa redução volumétrica (Lynch et al., 2003; Vergari et al., 2011; Chernak e Thelen, 2012). Nesse caso particular, o modelo falha em prever essas grandes deformações transversais, uma vez que esse comportamento é modelado por meio do potencial de Fung, cujos os correspondentes parâmetros materiais foram identificados, a priori, com base nos ensaios de compressão semiconfinada (ver o gráfico de barras inserido na Figura 35). Nesse contexto, nota-se que a formulação de um modelo fenomenológico simples baseado nos preceitos da mecânica do contínuo, que seja capaz de modelar as grandes diferenças nas respostas mecânicas dos tendões sob compressão e tração, ainda é uma tarefa desafiadora nesse campo de pesquisa.

Evidências experimentais suportam a teoria de que os carregamentos trativos são transmitidos principalmente através das fibrilas

(Provenzano e Vanderby, 2006; Screen, 2009; Svensson et al., 2011). Embora essas estruturas apresentem comportamento viscoelástico (Shen et al., 2011; Yang et al., 2012), as células e outros componentes da matriz extracelular, como as proteoglicanas e a água, são apontadas como as principais fontes de dissipação (Provenzano e Vanderby, 2006; Shen et al., 2011; Connizzo, Yannascoli e Soslowsky, 2013; Kösters et al., 2014). Sabe-se que as proteoglicanas não apresentam interações fortes com as fibrilas e são orientadas ortogonalmente a elas. Ademais, a dinâmica dos fluídos em meio as microestruturas do tendão (escoamento intersticial), parece ser dependente da direção (Screen et al., 2011; Ahmadzadeh et al., 2014; Böl et al., 2015). Portanto, em vista desses micromecanismos e morfologias, os efeitos viscosos podem apresentar direções preferenciais através das escalas dos tendões, os quais podem refletir macroscopicamente em comportamentos viscoelásticos anisotrópicos. De acordo como isso, o modelo hiperelástico proposto aqui pode contribuir com futuros desenvolvimentos na modelagem de comportamentos dissipativos de tendões. Além disso, esses resultados motivam estudos multiescala em estados macroscópicos de compressão semiconfinada.

REFERÊNCIAS

- AHMADZADEH, H. et al. Micromechanical poroelastic finite element and shear-lag models of tendon predict large strain dependent Poisson's ratios and fluid expulsion under tensile loading. *Acta Biomaterialia*, Acta Materialia Inc., v. 22, p. 83–91, 2014.
- AIFANTIS, K. E.; SHRIVASTAVA, S.; ODEGARD, G. M. Transverse mechanical properties of collagen fibers from nanoindentation. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, v. 22, n. 6, p. 1375–1381, 2011.
- AKHTAR, R. et al. Nanoindentation of histological specimens: Mapping the elastic properties of soft tissues. *Journal of materials research*, v. 24, n. 3, p. 638–646, 2009. ISSN 0884-2914.
- ANAND, L.; GURTIN, M. E. A theory of amorphous solids undergoing large deformations , with applications to polymers and metallic glasses. v. 40, p. 1–29, 2003.
- ARO, A. A. de; de Campos Vidal, B.; PIMENTEL, E. R. Biochemical and anisotropical properties of tendons. *Micron*, Elsevier Ltd, v. 43, n. 2-3, p. 205–214, 2012.
- ARORA, J. *Introduction to optimum design*. Second edi. [S.l.]: Elsevier Academic Press, 2004.
- ARYA, S.; KULIG, K. Tendinopathy alters mechanical and material properties of the Achilles tendon. *Journal of applied physiology (Bethesda, Md. : 1985)*, v. 108, n. 3, p. 670–675, 2010.
- BALZANI, D. et al. A polyconvex framework for soft biological tissues. Adjustment to experimental data. *International Journal of Solids and Structures*, v. 43, n. 20, p. 6052–6070, 2006. ISSN 00207683.
- BATHE, K. *Finite Element Procedures*. [S.l.]: Pearson Education, Inc., 2006.
- BELYTSCHKO, T.; LIU, W.; MORAN, B. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2000.
- BERDICHEVSKY, V. *Variational principles of continuum mechanics: I Fundamentals*. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
- BLANCO, P. J. et al. Variational Foundations and Generalized Unified Theory of RVE-Based Multiscale Models. *Archives of Computational Methods in Engineering*, v. 23, n. 2, p. 191–253, 2014. ISSN 18861784.

BLANCO, S.; POLINDARA, C. A.; GOICOLEA, J. M. A regularised continuum damage model based on the mesoscopic scale for soft tissue. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier Ltd, v. 58, p. 20–33, 2015.

BÖL, M. et al. Tissue-scale anisotropy and compressibility of tendon in semi-confined compression tests. *Journal of Biomechanics*, Elsevier, v. 48, n. 6, p. 1092–1098, 2015.

BONET, J.; WOOD, R. *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*. 2nd editio. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2008.

BUEHLER, M. J. Nature designs tough collagen: explaining the nanostructure of collagen fibrils. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 103, p. 12285–12290, 2006.

CARNIEL, T. A. *Modelo viscoelástico-viscoplástico com dano acoplado aplicado em análises transientes não lineares de treliças tridimensionais*. Tese (Mestrado) — Universidade do Estado de Santa Catarina, 2013.

CARNIEL, T. A.; FANCELLO, E. A. A transversely isotropic coupled hyperelastic model for the mechanical behavior of tendons. *Journal of Biomechanics*, v. 54, p. 49–57, mar 2017.

CARNIEL, T. A.; FANCELLO, E. A. Modeling the Local Viscoelastic Behavior of Living Cells under Nanoindentation Tests. *Latin American Journal of Solids and Structures*, p. 1–19, 2017.

CARROLL, C. C. et al. Influence of aging on the in vivo properties of human patellar tendon. *Journal of applied physiology (Bethesda, Md. : 1985)*, v. 105, n. 6, p. 1907–1915, 2008.

CHEN, Z.; JOLI, P.; FENG, Z. Anisotropic hyperelastic behavior of soft biological tissues. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, n. 13, p. 1436–1444, 2014.

CHENG, V. W. T.; SCREEN, H. R. C. The micro-structural strain response of tendon. *Journal of Materials Science*, v. 42, n. 21, p. 8957–8965, 2007. ISSN 00222461.

CHERNAK, L. A.; THELEN, D. G. Tendon motion and strain patterns evaluated with two-dimensional ultrasound elastography. *Journal of Biomechanics*, Elsevier, v. 45, n. 15, p. 2618–2623, 2012.

CHEVIAKOV, A. F.; GANGHOFFER, J. F.; ST.JEAN, S. Fully non-linear wave models in fiber-reinforced anisotropic incompressible

hyperelastic solids. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, v. 71, p. 8–21, 2015.

CONNIZZO, B. K.; YANNASCOLI, S. M.; SOSLOWSKY, L. J. Structure-function relationships of postnatal tendon development: A parallel to healing. *Matrix Biology*, International Society of Matrix Biology, v. 32, n. 2, p. 106–116, 2013.

COUPPE, C. et al. Human Achilles tendon glycation and function in diabetes. *Journal of Applied Physiology*, v. 9, n. 23, 2015.

COWIN, S.; DOTY, S. *Tissue Mechanics*. New York, NY: Springer New York, 2007.

CSAPO, R. et al. On muscle, tendon and high heels. *The Journal of experimental biology*, v. 213, n. Pt 15, p. 2582–2588, 2010. ISSN 0022-0949.

de Souza Neto, E. et al. An RVE-based multiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects. *Mechanics of Materials*, v. 80, p. 136–144, 2015.

de Souza Neto, E. A.; FEIJÓO, R. A. *Variational Foundations of Multi-Scale Models of Solid: Small and Large Strain Kinematical Formulation*. [S.l.], 2006. 1–53 p.

de Souza Neto, E. A.; FEIJÓO, R. A. On the equivalence between spatial and material volume averaging of stress in large strain multi-scale solid constitutive models. *Mechanics of Materials*, v. 40, n. 10, p. 803–811, 2008.

de Souza Neto, E. A.; PERIC, D.; OWEN, D. R. J. *Computational Methods for Plasticity: Theory and Applications*. [S.l.: s.n.], 2009. 814 p.

DEPALLE, B. et al. Influence of cross-link structure, density and mechanical properties in the mesoscale deformation mechanisms of collagen fibrils. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, p. 1–13, 2014.

DIJK, N. P. van. Formulation and implementation of stress-driven and/or strain-driven computational homogenization for finite strain. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 107, n. 12, p. 1009–1028, sep 2016.

DUENWALD, S. E.; VANDERBY, R.; LAKES, R. S. Viscoelastic relaxation and recovery of tendon. *Annals of Biomedical Engineering*, v. 37, n. 6, p. 1131–1140, 2009. ISSN 00906964.

DUENWALD, S. E.; VANDERBY, R.; LAKES, R. S. Stress relaxation

- and recovery in tendon and ligament: Experiment and modeling. *Biorheology*, v. 47, n. 1, p. 1–14, 2010.
- DUONG, M. T.; NGUYEN, N. H.; STAAT, M. Physical response of hyperelastic models for composite materials and soft tissues. *Asia Pacific Journal on Computational Engineering*, v. 2, n. 3, p. 1–18, 2015.
- EFENDIEV, Y.; HOU, T. *Multiscale finite element methods: theory and applications*. [S.l.]: Springer Science+Business Media, 2009.
- EFREMOV, Y. M. et al. Mechanical properties of fibroblasts depend on level of cancer transformation. *Biochimica et Biophysica Acta - Molecular Cell Research*, Elsevier B.V., v. 1843, n. 5, p. 1013–1019, 2014.
- EHRET, A. E.; ITSKOV, M. A polyconvex hyperelastic model for fiber-reinforced materials in application to soft tissues. *Journal of Materials Science*, v. 42, n. 21, p. 8853–8863, 2007. ISSN 00222461.
- El Sayed, T. et al. A variational constitutive model for soft biological tissues. *Journal of biomechanics*, v. 41, n. 7, p. 1458–66, jan 2008.
- EPPPELL, S. J. et al. Nano measurements with micro-devices: mechanical properties of hydrated collagen fibrils. *Journal of the Royal Society, Interface / the Royal Society*, v. 3, n. 6, p. 117–121, 2006. ISSN 1742-5689.
- FANCELLO, E.; PONTHOT, J.; STAINIER, L. A variational framework for nonlinear viscoelastic models in finite deformation regime. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 215, n. 2, p. 400–408, jun 2008.
- FANCELLO, E.; PONTHOT, J.-P.; STAINIER, L. A variational formulation of constitutive models and updates in non-linear finite viscoelasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 65, n. 11, p. 1831–1864, mar 2006.
- FANCELLO, E.; VASSOLER, J. M.; STAINIER, L. A variational constitutive update algorithm for a set of isotropic hyperelastic-viscoplastic material models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 197, n. 49-50, p. 4132–4148, sep 2008.
- FANG, F.; LAKE, S. P. Modelling approaches for evaluating multiscale tendon mechanics. *Interface focus*, v. 6, 2016.
- FISCHER-CRIPPS, A. C. The sharpness of a Berkovich indenter. *Journal of Materials Research*, v. 25, n. 05, p. 927–934, 2010. ISSN 0884-2914.

FRANCHI, M. et al. Collagen structure of tendon relates to function. *TheScientificWorldJournal*, v. 7, p. 404–420, 2007.

FRATZL, P. *Collagen: structure and mechanics*. [S.l.]: Springer Science+Business Media, 2008.

FUNG, Y. C.; FRONEK, K.; PATITUCCI, P. Pseudoelasticity of arteries and the choice of its mathematical expression. *The American journal of physiology*, v. 237, n. 5, p. H620–H631, 1979.

GOH, K. L. et al. Ageing Changes in the Tensile Properties of Tendons: Influence of Collagen Fibril Volume Fraction. *Journal of Biomechanical Engineering*, v. 130, n. 2, p. 021011, 2008. ISSN 01480731.

GURTIN, M.; FRIED, E.; ANAND, L. *The mechanics and thermodynamics of continua*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.

GURTIN, M. E.; ANAND, L. The decomposition $F = FeFp$, material symmetry, and plastic irrotationality for solids that are isotropic-viscoplastic or amorphous. *International Journal of Plasticity*, v. 21, n. 9, p. 1686–1719, 2005. ISSN 07496419.

HAGA, H. et al. Elasticity mapping of living fibroblasts by AFM and immunofluorescence observation of the cytoskeleton. *Ultramicroscopy*, v. 82, p. 253–258, 2000. ISSN 03043991.

HAMANN, S. et al. Measurement of Cell Volume Changes by Fluorescence Self-Quenching. *Journal of Fluorescence*, v. 12, n. 2, p. 139–145, 2002.

HANDSFIELD, G. G. et al. A 3D model of the Achilles tendon to determine the mechanisms underlying nonuniform tendon displacements. *Journal of Biomechanics*, v. 51, p. 17–25, 2016. ISSN 00219290.

HANSEN, K. a.; WEISS, J. a.; BARTON, J. K. Recruitment of tendon crimp with applied tensile strain. *Journal of biomechanical engineering*, v. 124, n. 1, p. 72–77, 2002. ISSN 01480731.

HANSON, P.; AAGAARD, P.; MAGNUSSON, S. P. Biomechanical properties of isolated fascicles of the Iliopsoas and Achilles tendons in African American and Caucasian men. *Annals of Anatomy*, Elsevier GmbH., v. 194, n. 5, p. 457–460, 2012.

HARALDSSON, B. T. et al. Region-specific mechanical properties of the human patella tendon. *Journal of Applied Physiology*, v. 98, p. 1006–1007, 2005.

HECHT, F. M. et al. Imaging viscoelastic properties of live cells by

AFM: power-law rheology on the nanoscale. *Soft matter*, v. 11, n. 23, p. 4584–4591, 2015. ISSN 1744-6848.

HELFENSTEIN, J. et al. On non-physical response in models for fiber-reinforced hyperelastic materials. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier Ltd, v. 47, n. 16, p. 2056–2061, 2010.

HERCHENHAN, A. et al. Tenocyte contraction induces crimp formation in tendon-like tissue. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, v. 11, n. 3-4, p. 449–459, 2012.

HILL, R. On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proceedings of the Royal Society A*, v. 326, p. 131–147, 1972.

HOLZAPFEL, G. A. *Nonlinear Solid Mechanics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2000.

HOLZAPFEL, G. A. Determination of material models for arterial walls from uniaxial extension tests and histological structure. *Journal of Theoretical Biology*, v. 238, n. 2, p. 290–302, 2006. ISSN 00225193.

HOLZAPFEL, G. a.; GASSER, T. C. A viscoelastic model for fiber-reinforced composites at finite strains: Continuum basis, computational aspects and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 190, n. 34, p. 4379–4403, 2001. ISSN 00457825.

HOLZAPFEL, G. a.; OGDEN, R. W. Constitutive modelling of passive myocardium: a structurally based framework for material characterization. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, v. 367, n. 1902, p. 3445–75, 2009. ISSN 1364-503X.

HOLZAPFEL, G. A.; WEIZSÄCKER, H. W. Biomechanical behavior of the arterial wall and its numerical characterization. *Computers in Biology and Medicine*, v. 28, n. 4, p. 377–392, 1998. ISSN 00104825.

IKEMA, Y. et al. Ex vivo infiltration of fibroblasts into the tendon deteriorates the mechanical properties of tendon fascicles but not those of tendon bundles. *Clinical Biomechanics*, v. 22, n. 1, p. 120–126, 2007. ISSN 02680033.

ITSKOV, M. The derivative with respect to a tensor: some theoretical aspects and applications. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, v. 82, p. 535–544, 2002.

JIRÁSEK, M.; BAZANT, Z. *Inelastic analysis of structures*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2002.

- JOG, C. *Foundations and Applications of Mechanics Volume I: Continuum Mechanics*. 2 edition. ed. [S.l.]: Alpha Science Intl Ltd, 2007. I. 510 p.
- JOHNSON, G. a. et al. Tensile and viscoelastic properties of human patellar tendon. *Journal of orthopaedic research : official publication of the Orthopaedic Research Society*, v. 12, n. 6, p. 796–803, 1994.
- KALSON, N. S. et al. A structure-based extracellular matrix expansion mechanism of fibrous tissue growth. *eLife*, v. 4, 2015. ISSN 2050-084X.
- KANNUS, P. Structure of the tendon connective tissue. *Scandinavian journal of medicine & science in sports*, v. 10, n. 6, p. 312–320, 2000.
- KHAYYERI, H. et al. A fibre-reinforced poroviscoelastic model accurately describes the biomechanical behaviour of the rat achilles tendon. *PLoS ONE*, v. 10, n. 6, p. 1–18, 2015. ISSN 19326203.
- KIERSZENBAUM, A.; TRES, L. *Histology and cell biology: an introduction to pathology*. Third. [S.l.]: Elsevier, 2012.
- KINTZEL, O.; KHAN, S.; MOSLER, J. A novel isotropic quasi-brittle damage model applied to LCF analyses of Al2024. *International Journal of Fatigue*, Elsevier Ltd, v. 32, n. 12, p. 1948–1959, dec 2010.
- KINTZEL, O.; MOSLER, J. An incremental minimization principle suitable for the analysis of low cycle fatigue in metals: A coupled ductile-brittle damage model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier B.V., v. 200, n. 45-46, p. 3127–3138, oct 2011.
- KIRAN, R.; KHANDELWAL, K. Complex step derivative approximation for numerical evaluation of tangent moduli. *Computers and Structures*, Elsevier Ltd, v. 140, p. 1–13, 2014.
- KÖSTERS, A. et al. Influence of loading rate on patellar tendon mechanical properties in vivo. *Clinical Biomechanics*, Elsevier Ltd, v. 29, n. 3, p. 323–329, 2014.
- LANGER, R.; VACANTI, J. P. Tissue Engineering. *Science*, v. 260, n. May, p. 920–926, 1993. ISSN 00368075.
- LAVAGNINO, M.; GARDNER, K.; ARNOCZKY, S. P. Age-related changes in the cellular, mechanical, and contractile properties of rat tail tendons. *Connective Tissue Research*, v. 54, n. October 2012, p. 70–75, 2013. ISSN 0300-8207.
- LAVAGNINO, M. et al. Tendon mechanobiology: Current knowledge and future research opportunities. *Journal of Orthopaedic Research*,

v. 33, n. 6, p. 813–822, 2015. ISSN 1554527X.

LEGERLOTZ, K.; RILEY, G. P.; SCREEN, H. R. C. Specimen dimensions influence the measurement of material properties in tendon fascicles. *Journal of Biomechanics*, Elsevier, v. 43, n. 12, p. 2274–2280, 2010.

LEGERLOTZ, K.; RILEY, G. P.; SCREEN, H. R. C. GAG depletion increases the stress-relaxation response of tendon fascicles, but does not influence recovery. *Acta Biomaterialia*, v. 9, n. 6, p. 6860–6866, 2013.

LIM, J. J.; TEMENOFF, J. S. Tendon and Ligament Tissue Engineering: Restoring Tendon/Ligament and Its Interfaces. In: MEYER, U. et al. (Ed.). *Fundamentals of Tissue Engineering and Regenerative Medicine*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009. cap. 20, p. 255–269.

LIU, M. et al. A combined experimental-numerical approach for determining mechanical properties of aluminum subjects to nanoindentation. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 5, n. August, p. 15072, 2015. ISSN 2045-2322.

LIU, Y.; BALLARINI, R.; EPPELL, S. J. Tension tests on mammalian collagen fibrils. *Interface Focus*, v. 6, n. 1, p. 20150080, 2016. ISSN 2042-8898.

LIU, Z. et al. Mechanical Testing of Hydrated Collagen Nanofibrils Using MEMS Technology. In: *2006 Sixth IEEE Conference on Nanotechnology*. [S.l.]: IEEE, 2006. v. 00, n. c, p. 177–180. ISBN 1-4244-0077-5.

LYNCH, H. et al. Effect of Fiber Orientation and Strain Rate on Nonlinear Tendon Tensile Properties. *Journal of biomechanical engineering*, v. 125, p. 726–731, 2003.

LYNESS, J. N.; MOLER, C. B. Numerical Differentiation of Analytic Functions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 4, n. 2, 1967.

MAGNUSSON, S. P.; LANGBERG, H.; KJAER, M. The pathogenesis of tendinopathy: balancing the response to loading. *Nature reviews. Rheumatology*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 5, p. 262–268, 2010.

MANDEL, J. *Plasticité Classique et Viscoplasticité. Cours and Lectures au CISM No. 97*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1971.

MARINO, M.; VAIRO, G. Influence of inter-molecular interactions on the elasto-damage mechanics of collagen fibrils: A bottom-up approach towards macroscopic tissue modeling. *Journal of the Mechanics and*

Physics of Solids, Elsevier, v. 73, p. 38–54, 2014.

MERODIO, J.; OGDEN, R. W. Mechanical response of fiber-reinforced incompressible non-linearly elastic solids. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, v. 40, n. 2-3, p. 213–227, 2005. ISSN 00207462.

MIEHE, C.; LAMBRECHT, M. Algorithms for computation of stresses and elasticity moduli in terms of Seth-Hill's family of generalized strain tensors. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, v. 17, n. 5, p. 337–353, 2001. ISSN 10698299.

MOSLER, J. Variationally consistent modeling of finite strain plasticity theory with non-linear kinematic hardening. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier B.V., v. 199, n. 45-48, p. 2753–2764, nov 2010.

MOSLER, J.; BRUHNS, O. On the implementation of rate-independent standard dissipative solids at finite strain - Variational constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier B.V., v. 199, n. 9-12, p. 417–429, jan 2010.

MOUW, J. K.; OU, G.; WEAVER, V. M. Extracellular matrix assembly: a multiscale deconstruction. *Nature Reviews Molecular Cell Biology*, Nature Publishing Group, v. 15, n. 12, p. 771–785, 2014.

NAWAZ, S. et al. Cell Visco-Elasticity Measured with AFM and Optical Trapping at Sub-Micrometer Deformations. *PLoS ONE*, v. 7, n. 9, 2012. ISSN 19326203.

NGUYEN, T. D.; JONES, R. E.; BOYCE, B. L. Modeling the anisotropic finite-deformation viscoelastic behavior of soft fiber-reinforced composites. *International Journal of Solids and Structures*, v. 44, p. 8366–8389, 2007.

NGUYEN, V. D. et al. Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Computational Materials Science*, v. 55, p. 390–406, 2012. ISSN 09270256.

NOURISSAT, G.; BERENBAUM, F.; DUPREZ, D. Tendon injury : from biology to tendon repair. *Nature Publishing Group*, Nature Publishing Group, v. 11, n. 4, p. 1–11, 2015.

ORTIZ, M.; STAINIER, L. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 7825, n. 98, p. 419–444, 1999.

OYEN, M. L.; KO, C. C. Examination of local variations in viscous, elastic, and plastic indentation responses in healing bone. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, v. 18, n. 4, p. 623–628,

2007. ISSN 09574530.

PERIĆ, D. et al. On micro-to-macro transitions for multi-scale analysis of non-linear heterogeneous materials: Unified variational basis and finite element implementation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 87, n. 1-5, p. 149–170, 2011.

PINTO, O. T. *Estudo Numérico Experimental De Tecido Conjuntivo Mole Submetido a Deformações Finitas*. Tese (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2014.

PROVENZANO, P. P.; VANDERBY, R. Collagen fibril morphology and organization: Implications for force transmission in ligament and tendon. *Matrix Biology*, v. 25, n. 2, p. 71–84, 2006. ISSN 0945053X.

PURSLOW, P. P. The shear modulus of connections between tendon fascicles. *TIC-STH'09: 2009 IEEE Toronto International Conference - Science and Technology for Humanity*, p. 134–136, 2009.

RAMAN, A. et al. Mapping nanomechanical properties of live cells using multi-harmonic atomic force microscopy. *Nature Nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 12, p. 809–814, 2011.

REESE, S. P.; WEISS, J. a. Tendon fascicles exhibit a linear correlation between poisson's ratio and force during uniaxial stress relaxation. *Journal of biomechanical engineering*, v. 135, n. 3, p. 34501, 2013. ISSN 1528-8951.

RILEY, G. Tendinopathy-from basic science to treatment. *Nature clinical practice. Rheumatology*, v. 4, n. 2, p. 82–89, 2008. ISSN 1745-8382.

ROBINSON, P. S. et al. Strain-rate sensitive mechanical properties of tendon fascicles from mice with genetically engineered alterations in collagen and decorin. *Journal of biomechanical engineering*, v. 126, n. 2, p. 252–257, 2004.

ROCKAFELLAR, R. *Convex Analysis*. [S.l.]: Princeton University Press, 1970.

ROSEN, J. et al. Biomechanical properties of abdominal organs in vivo and postmortem under compression loads. *Journal of biomechanical engineering*, v. 130, n. 2, p. 021020, 2008. ISSN 01480731.

SANDER, L. M. Alignment localization in nonlinear biological media. *Journal of biomechanical engineering*, v. 135, n. 7, p. 71006, 2013. ISSN 1528-8951.

SCHRÖDER, J.; NEFF, P. Invariant formulaiton of hyperelastic transverse isotropy based on polyconvex free energy functions.

- International Journal of Solids and Structures*, v. 40, n. 2, p. 401–445, 2003. ISSN 00207683.
- SCOTT, J. E. Proteoglycan-fibrillar collagen interactions. *Biochemical Journal*, v. 252, p. 313–323, 1988.
- SCOTT, J. E. Proteoglycan: collagen interactions in connective tissues. Ultrastructural, biochemical, functional and evolutionary aspects. *International Journal of Biological Macromolecules*, v. 13, p. 157–161, 1991.
- SCREEN, H. R. Hierarchical approaches to understanding tendon mechanics. *Journal of Biomechanical Science and Engineering*, v. 4, n. 4, p. 481–499, 2009.
- SCREEN, H. R. C. et al. Extrafibrillar diffusion and intrafibrillar swelling at the nanoscale are associated with stress relaxation in the soft collagenous matrix tissue of tendons. *Soft Matter*, v. 7, n. 23, p. 11243–11251, 2011. ISSN 1744-683X.
- SHARMA, P.; MAFFULLI, N. Tendon Injury and Tendinopathy: Healing and Repair. *Journal of Bone and Joint Surgery*, v. 87, n. 1, p. 187–202, 2005.
- SHEN, Z. L. et al. Stress-strain experiments on individual collagen fibrils. *Biophysical journal*, Elsevier, v. 95, n. 8, p. 3956–3963, 2008.
- SHEN, Z. L. et al. Viscoelastic properties of isolated collagen fibrils. *Biophysical Journal*, Biophysical Society, v. 100, n. 12, p. 3008–3015, 2011.
- SILVER, F. H.; FREEMAN, J. W.; SEEHRA, G. P. Collagen self-assembly and the development of tendon mechanical properties. *Journal of Biomechanics*, v. 36, n. 10, p. 1529–1553, 2003. ISSN 00219290.
- SIMO, J. Numerical analysis and simulation of plasticity. *Handbook of numerical analysis*, VI, n. Part 3, 1998.
- SIMO, J.; HUGHES, T. *Computational inelasticity*. 7. ed. [S.l.]: Springer-Verlag New York. Inc., 1998. v. 7.
- SIMO, J.; TAYLOR, R. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 48, n. 1, p. 101–118, feb 1985.
- SIRGHI, L. et al. Probing elasticity and adhesion of live cells by atomic force microscopy indentation. *European Biophysics Journal*, v. 37, n. 6, p. 935–945, 2008. ISSN 01757571.
- STAINIER, L. Consistent incremental approximation of dissipation

pseudo-potentials in the variational formulation of thermo-mechanical constitutive updates. *Mechanics Research Communications*, Elsevier Ltd., v. 38, n. 4, p. 315–319, 2011.

STARBORG, T. et al. Using transmission electron microscopy and 3View to determine collagen fibril size and three-dimensional organization. *Nature protocols*, v. 8, n. 7, p. 1433–48, 2013. ISSN 1750-2799.

SVENSSON, R. B. et al. Mechanical properties of human patellar tendon at the hierarchical levels of tendon and fibril. *Journal of Applied Physiology*, v. 112, n. 3, p. 419–426, 2012.

SVENSSON, R. B. et al. Tensile properties of human collagen fibrils and fascicles are insensitive to environmental salts. *Biophysical Journal*, v. 99, n. 12, p. 4020–4027, 2010. ISSN 00063495.

SVENSSON, R. B. et al. Viscoelastic behavior of discrete human collagen fibrils. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, Elsevier Ltd, v. 3, n. 1, p. 112–115, 2010.

SVENSSON, R. B. et al. Tensile force transmission in human patellar tendon fascicles is not mediated by glycosaminoglycans. *Connective tissue research*, v. 52, n. December 2010, p. 415–421, 2011. ISSN 0300-8207.

SVENSSON, R. B. et al. Evidence of structurally continuous collagen fibrils in tendon. *Acta Biomaterialia*, Acta Materialia Inc., p. 1–9, 2017.

SVENSSON, R. B. et al. Fracture mechanics of collagen fibrils: Influence of natural cross-links. *Biophysical Journal*, Biophysical Society, v. 104, n. 11, p. 2476–2484, 2013.

SZCZESNY, S. E.; ELLIOTT, D. M. Incorporating plasticity of the interfibrillar matrix in shear lag models is necessary to replicate the multiscale mechanics of tendon fascicles. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, Elsevier, v. 40, p. 325–338, 2014.

THORPE, C. T. et al. The role of the non-collagenous matrix in tendon function. *International Journal of Experimental Pathology*, v. 94, n. 4, p. 248–259, 2013. ISSN 09599673.

THORPE, C. T. et al. Specialization of tendon mechanical properties results from interfascicular differences. *Journal of The Royal Society Interface*, v. 9, n. July, p. 3108–3117, 2012.

Van Der Rijt, J. A. J. et al. Micromechanical testing of individual collagen fibrils. *Macromolecular Bioscience*, v. 6, n. 9, p. 699–702,

2006. ISSN 16165187.

VASSOLER, J. M.; REIPS, L.; FANCELLO, E. A. A variational framework for fiber-reinforced viscoelastic soft tissues. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 89, n. 13, p. 1691–1706, mar 2012.

VASSOLER, J. M.; STAINIER, L.; FANCELLO, E. A. A variational framework for fiber-reinforced viscoelastic soft tissues including damage. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2016.

Vaz Jr, M.; CARDOSO, E. L.; STAHLSCHEMIDT, J. Particle swarm optimization and identification of inelastic material parameters. *Engineering Computations*, v. 30, n. 7, p. 936–960, 2013. ISSN 0264-4401.

VERGARI, C. et al. True stress and Poisson's ratio of tendons during loading. *Journal of Biomechanics*, v. 44, n. 4, p. 719–724, 2011. ISSN 00219290.

VINCKIER, A.; SEMENZA, G. Measuring elasticity of biological materials by atomic force microscopy. *FEBS Letters*, v. 430, n. 1-2, p. 12–16, 1998. ISSN 00145793.

WANG, J. H. C. Mechanobiology of tendon. *Journal of Biomechanics*, v. 39, n. 9, p. 1563–1582, 2006. ISSN 00219290.

WEBER, G.; ANAND, L. Finite deformation constitutive equations and a time integration procedure for isotropic, hyperelastic-viscoplastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 79, n. 2, p. 173–202, 1990. ISSN 00457825.

WILCHEZ, D. F. T. *Estudo Do Comportamento Mecânico De Ligamentos e Tendões Utilizando Medição Ótica*. Tese (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2012.

YAMAMOTO, E.; HAYASHI, K.; YAMAMOTO, N. Mechanical properties of collagen fascicles from the rabbit patellar tendon. *Journal of biomechanical engineering*, v. 121, n. 1, p. 124–131, 1999. ISSN 01480731.

YANAGISHITA, M. Function of proteoglycans in the extracellular matrix. *Acta pathologica japonica*, v. 43, n. 3, p. 283–293, 1993.

YANG, L. et al. Micromechanical analysis of native and cross-linked collagen type I fibrils supports the existence of microfibrils. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, Elsevier Ltd, v. 6, p. 148–158, 2012.

YANG, Q.; STAINIER, L.; ORTIZ, M. A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 54, n. 2, p. 401–424, feb 2006.

ZLOTEK-ZLOTKIEWICZ, E. et al. Optical volume and mass measurements show that mammalian cells swell during mitosis. *The Journal of Cell Biology*, v. 211, n. 4, p. 765–774, nov 2015.

APÊNDICES

A ALGORITMO CONSTITUTIVO VARIACIONAL

A.1 Solução do Problema Constitutivo Variacional Referente à Matriz

A.1.1 Condição de Estacionaridade

Em vista do problema variacional (5.39), os argumentos que extremizam o funcional \mathcal{L} são obtidos através da solução da sua condição de estacionaridade:

$$d\mathcal{L} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \left. \frac{\partial \mathcal{L}(\dot{\mathbf{d}}_m^v, \gamma_{n+1})}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} \right|_{\mathbf{F}_{n+1} = \text{cte}} = \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^m}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} + \gamma_{n+1} \frac{\partial J_{m_{n+1}}^v}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = \mathbf{0} \\ \left. \frac{\partial \mathcal{L}(\dot{\mathbf{d}}_m^v, \gamma_{n+1})}{\partial \gamma_{n+1}} \right|_{\mathbf{F}_{n+1} = \text{cte}} = J_{m_{n+1}}^v - 1 = 0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

A primeira derivada do $\mathcal{P}_{\text{inc}}^m$ em relação à $\dot{\mathbf{d}}_m^v$ é obtida por,

$$\frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^m(\dot{\mathbf{d}}_m^v)}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = \frac{\partial \psi_m^e(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e)}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} + \Delta t \frac{\partial \phi_m^v(\dot{\mathbf{d}}_m^v)}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v}, \quad (\text{A.2})$$

sendo que,

$$\frac{\partial \psi_m^e(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e)}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = -\Delta t \text{sym} \left[\left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right)^T \mathbf{M}_{m_{n+1}}^e \right], \quad (\text{A.3})$$

onde $\mathbf{M}_{m_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e$ é denominado de tensor de Mandel elástico e $\mathbf{S}_{m_{n+1}}^e$ é o segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff elástico, definido como,

$$\mathbf{S}_{m_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \psi_m^e(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e)}{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}. \quad (\text{A.4})$$

A derivada do jacobiano volumétrico viscoso em relação a $\dot{\mathbf{d}}_m^v$ resulta

em,

$$\frac{\partial J_{m_{n+1}}^V}{\partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V} = \Delta t J_{m_{n+1}}^V \mathbf{F}_{m_{n+1}}^V \mathbf{F}_{m_n}^{V^{-1}}. \quad (\text{A.5})$$

A.1.2 Solução via Newton-Raphson

Neste trabalho, o sistema de equações não lineares (A.1) é solucionado de forma convencional empregando o procedimento de Newton-Raphson. Das equações resultantes da condição de estacionaridade, definem-se,

$$\mathbf{r}_{m_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{Bmatrix} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V} \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1}} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{m_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{Bmatrix} \mathring{\mathbf{d}}_m^V \\ \gamma_{n+1} \end{Bmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

onde $\mathbf{r}_{m_{n+1}}$ é um resíduo e $\mathbf{x}_{m_{n+1}}$ representa o conjunto de variáveis incógnitas do sistema não linear local. Desse modo, um incremento δ referente à uma iteração do algoritmo de Newton-Raphson é obtido através da solução do sistema linear:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V \partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V} : \delta \mathring{\mathbf{d}}_m^V + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1} \partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V} \delta \gamma_{n+1} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V \partial \gamma_{n+1}} : \delta \mathring{\mathbf{d}}_m^V + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1} \partial \gamma_{n+1}} \delta \gamma_{n+1} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1}} \end{cases}, \quad (\text{A.7})$$

o qual pode ser apresentado em um arranjo compacto,

$$\mathbf{J}_{m_{n+1}} \star \delta \mathbf{x}_{m_{n+1}} = -\mathbf{r}_{m_{n+1}}. \quad (\text{A.8})$$

Em (A.8) o símbolo \star representa o produto adequado entre os incrementos $\delta \mathbf{x}_{m_{n+1}}$ e a matriz jacobiana,

$$\mathbf{J}_{m_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \mathbf{r}_{m_{n+1}}}{\partial \mathbf{x}_{m_{n+1}}} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V \partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V} & \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1} \partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathring{\mathbf{d}}_m^V \partial \gamma_{n+1}} & \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1} \partial \gamma_{n+1}} \end{Bmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

A segunda derivada do funcional lagrangiano em relação à taxa de deformação viscosa resulta em,

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = \frac{\partial^2 \mathcal{P}_{\text{inc}}^m}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} + \gamma_{n+1} \frac{\partial^2 J_{m_{n+1}}^v}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v}, \quad (\text{A.10})$$

onde,

$$\frac{\partial^2 \mathcal{P}_{\text{inc}}^m}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = \frac{\partial^2 \psi_m^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} + \Delta t \frac{\partial^2 \phi_m^v}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v}. \quad (\text{A.11})$$

Em vista de (A.3), a segunda derivada do Helmholtz elástico em relação à taxa de deformação viscosa da matriz é apresentada como,

$$\frac{\partial^2 \psi_m^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = -\mathbb{I}_{\text{sym}} : \mathbb{A}_{n+1} : \mathbb{I}_{\text{sym}}, \quad (\text{A.12})$$

onde introduzem-se os seguintes operadores de quarta ordem:

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} & \Delta t^2 \left(\mathbf{F}_{m_n}^{v-T} \mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right) \boxtimes \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{M}_{m_{n+1}}^e \right)^T + \\ & \Delta t \left[\left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right)^T \boxtimes \mathbf{I} \right] : \left[\frac{\partial \mathbf{M}_{m_{n+1}}^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{M}_{m_{n+1}}^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = & \left(\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e \right) : \left[\frac{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} \right] + \\ & \left(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e \boxtimes \mathbf{I} \right) : \left[\frac{\partial \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = -2\Delta t \mathbb{I}_{\text{sym}} : \mathbb{B}_{n+1} : \mathbb{I}_{\text{sym}}, \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = -\Delta t \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e : \mathbb{B}_{n+1} : \mathbb{I}_{\text{sym}}, \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbb{B}_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \left(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e \mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right) \boxtimes \mathbf{I}, \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} 4 \frac{\partial^2 \psi_m^e \left(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e \right)}{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e \partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}. \quad (\text{A.18})$$

Em vista de (A.5), a segunda derivada do jacobiano volumétrico viscoso

da matriz em relação à taxa de deformação viscosa resulta em,

$$\frac{\partial^2 J_{m_{n+1}}^v}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = \Delta t^2 J_{m_{n+1}}^v \mathbb{I}_{\text{sym}} : \mathbb{D}_{n+1} : \mathbb{I}_{\text{sym}}, \quad (\text{A.19})$$

para,

$$\begin{aligned} \mathbb{D}_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} & \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right) \otimes \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right) + \\ & \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right) \boxtimes \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

As derivadas cruzadas de (A.9) são obtidas por,

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1} \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v \partial \gamma_{n+1}} = \frac{\partial J_{m_{n+1}}^v}{\partial \dot{\mathbf{d}}_m^v}, \quad (\text{A.21})$$

a qual é apresentada em (A.5). Finalmente,

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \gamma_{n+1} \partial \gamma_{n+1}} = 0. \quad (\text{A.22})$$

Nas equações apresentadas neste trabalho, o tensor de quarta ordem \mathbb{I}_{sym} representa o tensor simetrizador e definem-se os produtos tensoriais: $(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})_{ijkl} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{A})_{ij} (\mathbf{B})_{kl}$ e $(\mathbf{A} \boxtimes \mathbf{B})_{ijkl} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{A})_{ik} (\mathbf{B})_{jl}$ para quaisquer tensores de segunda ordem \mathbf{A} e \mathbf{B} .

A.2 Solução do Problema Constitutivo Variacional Referente às Fibrilas

A.2.1 Estratégia de Solução

O procedimento de solução do problema variacional incremental na direção das fibrilas segue uma estratégia análoga a proposta em [Vassoler, Reips e Fancello \(2012\)](#). Primeiramente, define-se um estado preditor elástico “congelando” o fluxo viscoso no instante de tempo t_n , isto é,

$$\lambda_{f_{n+1}}^{\text{ePr}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\lambda_{f_{n+1}}}{\lambda_{f_n}^v}. \quad (\text{A.23})$$

Desse modo, apresenta-se o seguinte procedimento de solução:

1. Se $\lambda_{f_{n+1}}^{\text{ePr}} < 1$ e $\lambda_{f_{n+1}} > 1$ (mola “ ∞ ” em tração e mola “e” em

compressão da Figura 6a), atribui-se $\lambda_{f_{n+1}}^e = 1$. Desse modo, $\lambda_{f_{n+1}}^v = \lambda_{f_{n+1}}$ e o problema variacional (5.37) apresenta solução fechada utilizando a parametrização (5.32).

2. Se $\lambda_{f_{n+1}}^{ePR} < 1$ e $\lambda_{f_{n+1}} < 1$ (ambas as molas em compressão), considera-se $\dot{d}_f^v = 0$.
3. Se $\lambda_{f_{n+1}}^{ePR} > 1$ e $\lambda_{f_{n+1}} > 1$ (ambas as molas em tração), resolve-se o problema variacional (5.37).

A.2.2 Condição de Estacionaridade

Considerando o problema variacional projetado na direção das fibrilas (5.37) e para estados trativos (item 3 da seção anterior), tem-se que a equação associada a variação $d\mathcal{P}_{\text{inc}}^f = 0$ é dada por,

$$\left. \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^f \left(\dot{d}_f^v \right)}{\partial \dot{d}_f^v} \right|_{\lambda_{f_{n+1}} = \text{cte}} = \frac{\partial \psi_f^e \left(I_{4_{n+1}}^e \right)}{\partial \dot{d}_f^v} + \Delta t \frac{\partial \phi_f^v \left(\dot{d}_f^v \right)}{\partial \dot{d}_f^v} = 0. \quad (\text{A.24})$$

onde $I_{4_{n+1}}^e = \left(\lambda_{f_{n+1}}^e \right)^2$. A primeira derivada de (A.24) resulta em,

$$\frac{\partial \psi_f^e \left(I_{4_{n+1}}^e \right)}{\partial \dot{d}_f^v} = -\Delta t \left(\frac{\lambda_{f_{n+1}}^v}{\lambda_{f_n}^v} \right) M_{f_{n+1}}^e, \quad (\text{A.25})$$

sendo que $M_{f_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} \left(\lambda_{f_{n+1}}^e \right)^2 S_{f_{n+1}}^e$, onde introduz-se a tensão escalar elástica,

$$S_{f_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\partial \psi_f^e \left(I_{4_{n+1}}^e \right)}{\partial I_{4_{n+1}}^e}. \quad (\text{A.26})$$

A.2.3 Solução via Newton-Raphson

Através da equação não linear (A.24) define-se o resíduo,

$$r_{f_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \mathcal{P}_{\text{inc}}^f \left(\dot{d}_f^v \right)}{\partial \dot{d}_f^v} \right|_{\lambda_{f_{n+1}} = \text{cte}}. \quad (\text{A.27})$$

Como comentado previamente na Seção A.1.2, o algoritmo de Newton-Raphson baseia-se na linearização de (A.27), resultando na derivada parcial,

$$\frac{\partial r_{f_{n+1}}}{\partial \dot{d}_f^v} = \frac{\partial^2 \psi_f^e(I_{4_{n+1}}^e)}{\partial \dot{d}_f^v \partial \dot{d}_f^v} + \Delta t \frac{\partial^2 \phi_f^v(\dot{d}_f^v)}{\partial \dot{d}_f^v \partial \dot{d}_f^v}, \quad (\text{A.28})$$

onde,

$$\frac{\partial^2 \psi_f^e(I_{4_{n+1}}^e)}{\partial \dot{d}_f^v \partial \dot{d}_f^v} = \left(\Delta t \frac{\lambda_{f_{n+1}}^v}{\lambda_{f_n}^v} \right)^2 \left[M_{f_{n+1}}^e + \left(\lambda_{f_{n+1}}^e \right)^4 C_{f_{n+1}}^e \right], \quad (\text{A.29})$$

e define-se o módulo escalar elástico,

$$C_{f_{n+1}}^e \stackrel{\text{def}}{=} 4 \frac{\partial^2 \psi_f^e(I_{4_{n+1}}^e)}{\partial I_{4_{n+1}}^e \partial I_{4_{n+1}}^e}. \quad (\text{A.30})$$

B MÓDULO TANGENTE MATERIAL

Em vista da formulação constitutiva variacional, o módulo tangente material consistente é definido formalmente como,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^{\text{fibra}} \stackrel{\text{def}}{=} 4 \frac{d^2 \mathcal{P}_{\text{inc}}^{\text{red}}}{d\mathbf{C}_{n+1} d\mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{B.1})$$

ou em vista da derivada total do segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff, isto é,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^{\text{fibra}} = 2 \frac{d\mathbf{S}_{n+1}^{\text{fibra}}}{d\mathbf{C}_{n+1}}. \quad (\text{B.2})$$

Sendo $\mathbf{S}_{n+1}^{\text{fibra}} = \mathbf{S}_{m_{n+1}} + \nu_f \mathbf{S}_{f_{n+1}}$, o operador de quarta ordem $\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^{\text{fibra}}$ pode ser separado aditivamente em,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^{\text{fibra}} = \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^m + \nu_f \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^f, \quad (\text{B.3})$$

onde,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^m \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{d\mathbf{S}_{m_{n+1}}}{d\mathbf{C}_{n+1}}, \quad \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^f \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{d\mathbf{S}_{f_{n+1}}}{d\mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{B.4})$$

referem-se as contribuições das matrizes da fibra e da fibrila, respetivamente. As expressões analíticas dos operadores apresentados em (B.4) são fornecidas nos apêndices B.1 e B.2. Ademais, em vista de uma formulação Lagrangeana atualizada (Belytschko, Liu e Moran, 2000), o módulo tangente espacial $\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}$ é obtido por,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^{\text{fibra}} = \frac{1}{J_{n+1}} (\mathbf{F}_{n+1} \boxtimes \mathbf{F}_{n+1}) : \mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^{\text{fibra}} : (\mathbf{F}_{n+1} \boxtimes \mathbf{F}_{n+1})^T. \quad (\text{B.5})$$

B.1 Contribuição da Matriz

De (B.4) tem-se,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^m \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{d\mathbf{S}_{m_{n+1}}}{d\mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{B.6})$$

onde a derivada total do segundo tensor tensão de Piola-Kirchhoff é dada por,

$$\frac{d\mathbf{S}_{m_{n+1}}}{d\mathbf{C}_{n+1}} = \frac{\partial\mathbf{S}_{m_{n+1}}}{\partial\mathbf{C}_{n+1}} + \left[\frac{\partial\mathbf{S}_{m_{n+1}}}{\partial\dot{\mathbf{d}}_m^v} \right] : \left[\frac{d\dot{\mathbf{d}}_m^v}{d\mathbf{C}_{n+1}} \right]. \quad (\text{B.7})$$

As derivadas parciais de (B.7) resultam em,

$$\frac{\partial\mathbf{S}_{m_{n+1}}}{\partial\mathbf{C}_{n+1}} = \frac{1}{2} \left(\mathbb{C}_{m_{n+1}}^\infty + \mathbb{I}_{\text{sym}} : \mathbb{W}_{n+1} : \mathbb{I}_{\text{sym}} \right), \quad (\text{B.8})$$

e

$$\frac{\partial\mathbf{S}_{m_{n+1}}}{\partial\dot{\mathbf{d}}_m^v} = \mathbb{I}_{\text{sym}} : \mathbb{Z}_{n+1} : \mathbb{I}_{\text{sym}}, \quad (\text{B.9})$$

onde introduzem-se os tensores de quarta ordem:

$$\mathbb{C}_{m_{n+1}}^\infty \stackrel{\text{def}}{=} 4 \frac{\partial^2 \psi_m^\infty(\mathbf{C}_{n+1})}{\partial\mathbf{C}_{n+1} \partial\mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{B.10})$$

$$\mathbb{W}_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-1}} \boxtimes \mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-1}} \right) : \mathbb{C}_{m_{n+1}}^e : \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-T}} \boxtimes \mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-T}} \right), \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} & -2\Delta t \left[\mathbf{F}_{m_n}^{v^{-1}} \boxtimes \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-1}} \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e \right) \right] + \\ & \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-1}} \boxtimes \mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v^{-1}} \right) : \left[\frac{\partial\mathbf{S}_{m_{n+1}}^e}{\partial\dot{\mathbf{d}}_m^v} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

sendo que a derivada $\partial\mathbf{S}_{m_{n+1}}^e / \partial\dot{\mathbf{d}}_m^v$ é apresentada em (A.16).

A derivada $d\dot{\mathbf{d}}_m^v / d\mathbf{C}_{n+1}$ de (B.7) é obtida através da solução do sistema linear resultante da derivada total do resíduo $\mathbf{r}_{m_{n+1}}$. Desse modo, derivando (A.6), chega no sistema de equações,

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial\dot{\mathbf{d}}_m^v \partial\dot{\mathbf{d}}_m^v} : \frac{d\dot{\mathbf{d}}_m^v}{d\mathbf{C}_{n+1}} + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial\gamma_{n+1} \partial\dot{\mathbf{d}}_m^v} \otimes \frac{d\gamma_{n+1}}{d\mathbf{C}_{n+1}} = - \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial\mathbf{C}_{n+1} \partial\dot{\mathbf{d}}_m^v} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial\dot{\mathbf{d}}_m^v \partial\gamma_{n+1}} : \frac{d\dot{\mathbf{d}}_m^v}{d\mathbf{C}_{n+1}} + \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial\gamma_{n+1} \partial\gamma_{n+1}} \frac{d\gamma_{n+1}}{d\mathbf{C}_{n+1}} = - \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial\mathbf{C}_{n+1} \partial\gamma_{n+1}} \end{cases}, \quad (\text{B.13})$$

que pode ser apresentado na forma compacta,

$$\frac{\partial\mathbf{r}_{m_{n+1}}}{\partial\mathbf{x}_{m_{n+1}}} \star \frac{d\mathbf{x}_{m_{n+1}}}{d\mathbf{C}_{n+1}} = - \frac{\partial\mathbf{r}_{m_{n+1}}}{\partial\mathbf{C}_{n+1}}, \quad (\text{B.14})$$

onde,

$$\frac{d\mathbf{x}_{m_{n+1}}}{d\mathbf{C}_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{Bmatrix} \frac{d\dot{\mathbf{d}}_m^v}{d\mathbf{C}_{n+1}} \\ \frac{d\gamma_{n+1}}{d\mathbf{C}_{n+1}} \end{Bmatrix}, \quad \frac{\partial \mathbf{r}_{m_{n+1}}}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{Bmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathbf{C}_{n+1} \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathbf{C}_{n+1} \partial \gamma_{n+1}} \end{Bmatrix}, \quad (\text{B.15})$$

No sistema linear (B.14) $\partial \mathbf{r}_{m_{n+1}} / \partial \mathbf{x}_{m_{n+1}}$ é a matriz Jacobiana do método de Newton-Raphson previamente introduzida em (A.9). Já o símbolo \star representa o produto adequado entre os tensores. As derivadas de $\partial \mathbf{r}_{m_{n+1}} / \partial \mathbf{C}_{n+1}$ resumem-se em,

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathbf{C}_{n+1} \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = \frac{\partial^2 \psi_m^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1} \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v}, \quad \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \mathbf{C}_{n+1} \partial \gamma_{n+1}} = \mathbf{0}, \quad (\text{B.16})$$

onde,

$$\frac{\partial^2 \psi_m^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1} \partial \dot{\mathbf{d}}_m^v} = -\Delta t \mathbb{I}_{\text{sym}} : \mathbb{G}_{n+1} : \mathbb{I}_{\text{sym}}, \quad (\text{B.17})$$

$$\mathbb{G}_{n+1} = \left[\left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^v \mathbf{F}_{m_n}^{v-1} \right)^T \boxtimes \mathbf{I} \right] : \left[\frac{\partial \mathbf{M}_{m_{n+1}}^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \right], \quad (\text{B.18})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{M}_{m_{n+1}}^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} &= \left(\mathbf{I} \boxtimes \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e \right) : \left[\frac{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \right] + \\ &\quad \left(\mathbf{C}_{m_{n+1}}^e \boxtimes \mathbf{I} \right) : \left[\frac{\partial \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}_{m_{n+1}}^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \frac{1}{2} \mathbb{C}_{m_{n+1}}^e : \left[\frac{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} \right], \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}_{m_{n+1}}^e}{\partial \mathbf{C}_{n+1}} = \left(\mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v-T} \boxtimes \mathbf{F}_{m_{n+1}}^{v-T} \right) : \mathbb{I}_{\text{sym}}. \quad (\text{B.21})$$

B.2 Contribuição das Fibrilas

O módulo tangente na direção das fibrilas resulta no operador,

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}_{n+1}}^f \stackrel{\text{def}}{=} C_{f_{n+1}} (\mathbf{A}_{\mathbf{x}} \otimes \mathbf{A}_{\mathbf{x}}), \quad C_{f_{n+1}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\lambda_{f_{n+1}}} \frac{dS_{f_{n+1}}}{d\lambda_{f_{n+1}}}. \quad (\text{B.22})$$

A derivada total em (B.22) é apresentada como,

$$\frac{dS_{f_{n+1}}}{d\lambda_{f_{n+1}}} = \frac{\partial S_{f_{n+1}}}{\partial \lambda_{f_{n+1}}} + \frac{\partial S_{f_{n+1}}}{\partial d_f^v} \left(\frac{dd_f^v}{d\lambda_{f_{n+1}}} \right). \quad (\text{B.23})$$

Em vista de (5.47), as derivadas parciais de (B.23) resultam em,

$$\frac{\partial S_{f_{n+1}}}{\partial \lambda_{f_{n+1}}} = \lambda_{f_{n+1}} C_{f_{n+1}}^\infty + \frac{\lambda_{f_{n+1}}^e}{\left(\lambda_{f_{n+1}}^v\right)^3} C_{f_{n+1}}^e, \quad (\text{B.24})$$

$$\frac{\partial S_{f_{n+1}}}{\partial d_f^v} = - \left(\frac{\Delta t}{\lambda_{f_{n+1}}^v \lambda_{f_n}^v} \right) \left[2S_{f_{n+1}}^e + \left(\lambda_{f_{n+1}}^e\right)^2 C_{f_{n+1}}^e \right], \quad (\text{B.25})$$

onde define-se a quantidade,

$$C_{f_{n+1}}^\infty \stackrel{\text{def}}{=} 4 \frac{\partial^2 \psi_f^\infty (I_{4_{n+1}})}{\partial I_{4_{n+1}} \partial I_{4_{n+1}}}. \quad (\text{B.26})$$

Assim, escalar $C_{f_{n+1}}$ fica resumido como,

$$\begin{aligned} C_{f_{n+1}} = & C_{f_{n+1}}^\infty + \left(\lambda_{f_{n+1}}^v\right)^{-4} C_{f_{n+1}}^e - \\ & \left(\frac{\Delta t}{\lambda_{f_{n+1}}^v \lambda_{f_{n+1}}^v \lambda_{f_n}^v} \right) \left[2S_{f_{n+1}}^e + \right. \\ & \left. \left(\lambda_{f_{n+1}}^e\right)^2 C_{f_{n+1}}^e \right] \left(\frac{dd_f^v}{d\lambda_{f_{n+1}}} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

A derivada total de d_f^v em relação à $\lambda_{f_{n+1}}$ apresentada em (B.23) é calculada derivando o resíduo $r_{f_{n+1}}$ obtido da condição de estacionaridade (A.24). Portanto,

$$\frac{dr_{f_{n+1}}}{d\lambda_{f_{n+1}}} = \frac{\partial r_{f_{n+1}}}{\partial \lambda_{f_{n+1}}} + \frac{\partial r_{f_{n+1}}}{\partial d_f^v} \left(\frac{dd_f^v}{d\lambda_{f_{n+1}}} \right) = 0, \quad (\text{B.28})$$

chegando em,

$$\frac{dd_f^v}{d\lambda_{f_{n+1}}} = \left(\frac{\partial r_{f_{n+1}}}{\partial d_f^v} \right)^{-1} \left(- \frac{\partial r_{f_{n+1}}}{\partial \lambda_{f_{n+1}}} \right). \quad (\text{B.29})$$

A derivada $\partial r_{f_{n+1}} / \partial \dot{d}_f^v$ é apresentada em (A.28). Já $\partial r_{f_{n+1}} / \partial \lambda_{f_{n+1}}$ resulta em,

$$\frac{\partial r_{f_{n+1}}}{\partial \lambda_{f_{n+1}}} = - \left(\frac{\Delta t \lambda_{f_{n+1}}^v}{\lambda_{f_{n+1}} \lambda_{f_n}^v} \right) \left[2M_{f_{n+1}}^e + \left(\lambda_{f_{n+1}}^e \right)^4 C_{f_{n+1}}^e \right]. \quad (\text{B.30})$$