



Universidade Federal de Santa Catarina

Centro Tecnológico (CTC)

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Formulação de um modelo bifásico considerando a pressão osmótica de Donnan com aplicações no estudo do fenômeno de inchaço em tecidos moles

por Rafael Geronimo

Florianópolis, SC

2023

Rafael Geronimo

**Formulação de um modelo bifásico considerando a pressão
osmótica de Donnan com aplicações no estudo do
fenômeno de inchaço em tecidos moles**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica na área de Análise e Projeto Mecânico.

Orientador: Prof. Eduardo Alberto Fancello,
Dr.

Coorientador: Prof. Thiago André Carniel,
Dr.

Florianópolis, SC

2023

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

Geronimo, Rafael

Formulação de um modelo bifásico considerando a pressão osmótica de Donnan com aplicações no estudo do fenômeno de inchaço em tecidos moles / Rafael Geronimo ; orientador, Eduardo Alberto Fancello, coorientador, Thiago André Carniel, 2023.

138 p.

Dissertação (mestrado profissional) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2023.

Inclui referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. Pressão osmótica. 3. Biomecânica. 4. Método de elementos finitos. 5. Poroelasticidade. I. Fancello, Eduardo Alberto. II. Carniel, Thiago André. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

Rafael Geronimo

**Formulação de um modelo bifásico considerando a pressão osmótica de Donnan
com aplicações no estudo do fenômeno de inchaço em tecidos moles**

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado, em XX de Julho de 2023, pela banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Renato Pavanello, Dr. Eng.
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Prof. Jucelio Tomás Pereira, Dr. Eng.
Universidade Federal do Paraná - UFPR

Prof. Eduardo Alberto Fancello, Dr. Eng.
Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Prof. Henrique Simas, Dr. Eng.
Coordenação do Programa de
Pós-Graduação

Prof. Eduardo Alberto Fancello, Dr.
Orientador

Florianópolis, SC
2023

Este trabalho é dedicado à minha família e amigos.

Agradecimentos

Primeiramente agradeço aos meus orientadores, Prof. Dr. Eduardo Alberto Fancello e Prof Dr. Thiago André Carniel pelo apoio e suporte para o desenvolvimento desta pesquisa, bem como as incontáveis contribuições técnicas e motivacionais em minha formação acadêmica e profissional.

Agradeço também aos professores membros da banca por aceitarem o convite para avaliar a presente dissertação. Também agradeço ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFSC (POSMEC) e a todos os membros do grupo de Análise e Projeto Mecânico (GRANTE).

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa concedida durante o período de mestrado.

Agradeço também especialmente aos amigos do laboratório de Análise e Projeto Mecânico Bruno Klahr, José Luís Medeiros Thiesen e Otávio Teixeira Pinto pela amizade, companheirismo e imensos esforços nas contribuições para o desenvolvimento desta pesquisa.

Finalmente, agradeço aos meus pais Arnaldo Haroldo Geronimo e Rosana Rech Geronimo e as minhas irmãs Vanessa Geronimo de Matos e Alinne Geronimo pelo apoio incondicional durante todo o mestrado.

“Começa a jornada, a sorte foi lançada e não há mais como fugir. Agarre os imprevistos e se livre dos vícios que te impedem de partir. A insegurança é comum, as vezes custa caro acreditar. Mas basta entender, do sacrifício nasce o triunfo.”
(Pra nunca se entregar - Jimmy and Rats)

Resumo

O comportamento biomecânico de tecidos moles envolve uma série de fenômenos bioquímicos que se relacionam diretamente com as estruturas que compõem o tecido, bem como o meio em que este permeia. Os tendões são tecidos moles altamente hidratados e pouco vascularizados. Em sua composição observa-se a presença de uma matriz extracelular formada por uma combinação de fibras (colágeno e elastina), além de uma substância base constituída por um conjunto de macromoléculas hidrofílicas. Dentre estas moléculas, encontram-se as cadeias denominadas de glicosaminoglicanos e proteoglicanos, caracterizadas por possuírem carga eletroquímica negativa. Devido à presença destas macromoléculas, quando um tecido mole é submergido em soluções hipotônicas, um desequilíbrio eletroquímico é estabelecido, dando origem a uma pressão osmótica que influencia a resposta biomecânica do contínuo. Nesse contexto, o presente estudo possui como objetivo principal utilizar um modelo bifásico poroelástico para investigar o fenômeno de inchaço observado em tecidos tendinosos quando submetidos a solicitações químicas. Para tal, desenvolveu-se um modelo poroelástico considerando o fenômeno de pressão osmótica originado pela solicitação química. O modelo proposto foi implementado em uma rotina laboratorial de elementos finitos e aplicado a uma simulação de validação, comparando seus resultados diretamente com o programa de análise biomecânica FEBio. O modelo implementado apresentou resultados satisfatórios em comparação ao o programa de simulação referência, permitindo a continuidade das investigações relacionadas ao fenômeno de inchaço observado experimentalmente em tendões. Adicionalmente, o estudo de caso investigado permitiu a expansão de conhecimentos relacionados à ocorrência do fenômeno de osmose em tecidos moles, bem como o esclarecimento quanto a influência das propriedades físico químicas do tecido em sua resposta mecânica.

Palavras-chave: Pressão osmótica, pororelasticidade, tendão, biomecânica, método de elementos finitos.

Abstract

The biomechanical behavior of soft tissues evolves a series of biochemical phenomena that are directly related to the structures that compose the tissue, as well as the environment that it permeates. Tendons are highly hydrated and poorly vascularized connective tissues. Its morphological composition is mainly composed of an extracellular matrix formed by a combination of fibers (collagen and elastin) together with a ground substance constituted by a set of hydrophilic macromolecules. These molecules include glycosaminoglycans and proteoglycans. In addition to have various properties and performing different morphological functions, these molecules are also responsible for providing tissues with a negative electrochemical charge called fixed charge density. This property is directly related to a series of biochemical phenomena that influences the chemical and mechanical response of the tissue. Due to the presence of these macromolecules, an electrochemical imbalance is established, creating a potential difference called osmotic pressure. This osmotic pressure imposes a mechanical loading on the tissue, affecting on its kinematic responses and acting directly on the fluid flow. In many studies, triphasic models are commonly used to describe the biomechanical behavior of soft tissues under chemical loading. However, these models are quite complex and computationally costly. Alternatively, poroelastic biphasic models have been modified to include electrochemical effects in research where the variable of interest does not include the ionic field. In this case, instead of considering a third field (ionic), the models incorporate the osmotic pressure phenomenon through a local update of the total pressure term. In this context, the main objective of the present study is to use a poroelastic biphasic model to study the swelling phenomenon observed in tendon tissues when subjected to chemical stimuli. For this purpose, a poroelastic model has been developed considering the osmotic pressure caused by chemical sollicitation based on Donnan's equation. The proposed model was implemented in an in-house finite element code and the results and accuracy of the model were compared with the FEBio software. Moreover, a sensitivity analysis of the constitutive parameters was performed to investigate into what extent such parameters influence the overall mechanical response of the model.

Keywords: Soft tissues biomechanics, biphasic formulation, poroelasticity, osmotic pressure, finite element method

Lista de figuras

Figura 1 – Configuração material e espacial de contínuo bifásico.	48
Figura 2 – Condições de Contorno do Modelo Bifásico.	52
Figura 3 – Condições de Contorno do Modelo Bifásico de Inchaço.	57
Figura 4 – Condições de contorno do modelo de validação.	73
Figura 5 – Curva logarítmica de crescimento do cF_0	75
Figura 6 – Malha e elemento do modelo.	75
Figura 7 – Disposição dos nós analisados.	76
Figura 8 – Curvas de magnitude de deslocamento do nó A a) Malha 1; b) Malha 2.	77
Figura 9 – Curvas de magnitude de deslocamento do nó B a) Malha 1; b) Malha 2.	77
Figura 10 – Curvas de potencial químico do nó C a) Malha 1; b) Malha 2.	78
Figura 11 – Curvas de potencial químico do nó D a) Malha 1; b) Malha 2.	78
Figura 12 – Campos da magnitude de deslocamento a) CEOS - Malha 1; b) FEBio - Malha 1; c) CEOS - Malha 2; d) FEBio - Malha 2.	79
Figura 13 – Campos de potencial químico a) CEOS - Malha 1; b) FEBio - Malha 1; c) CEOS - Malha 2; d) FEBio - Malha 2.	80
Figura 14 – Curvas de magnitude de deslocamento nos 100 segundos iniciais - Nó A a) Malha 1; b) Malha 2.	81
Figura 15 – Curvas de magnitude de deslocamento nos 100 segundos iniciais - Nó B a) Malha 1; b) Malha 2.	81
Figura 16 – Curvas de potencial químico nos 100 segundos iniciais - Nó C a) Malha 1; b) Malha 2.	82
Figura 17 – Curvas de potencial químico nos 100 segundos iniciais - Nó D a) Malha 1; b) Malha 2.	82
Figura 18 – a) Tendão flexor bovino inteiro b) Amostra retirada para experimentação.	84
Figura 19 – a) Dispositivo para o experimento de inchaço b) Restrições de deformação aplicadas pelo dispositivo.	85
Figura 20 – Ilustração do procedimento numérico.	86
Figura 21 – Malha do modelo numérico do estudo de caso.	87
Figura 22 – Curva volumétrica experimental e numérica \mathbf{p}^1	88
Figura 23 – Curva volumétrica experimental e numérica \mathbf{p}^2	89
Figura 24 – Variação de módulo de Elasticidade em 10% para o conjunto a) \mathbf{p}^1 e b) \mathbf{p}^2	90
Figura 25 – Variação de coeficiente de Poisson em a) 10% para o conjunto \mathbf{p}^1 e b) 3% para o conjunto \mathbf{p}^2	91
Figura 26 – Variação da densidade de carga fixa inicial em 10% para o conjunto a) \mathbf{p}^1 e b) \mathbf{p}^2	91

Figura 27 – Variação da permeabilidade hidráulica em 10% para o conjunto a) \mathbf{p}^1 e
b) \mathbf{p}^2 92

Figura 28 – Variação do tempo de crescimento de cF_0 em 10% para o conjunto a)
 \mathbf{p}^1 e b) \mathbf{p}^2 93

Lista de tabelas

Tabela 1 – Parâmetros do modelo de validação.	74
Tabela 2 – Coordenadas materiais dos nós inspecionados.	76
Tabela 3 – Conjuntos de restrições impostas aos parâmetros constitutivos no problema de ajuste de curva.	86
Tabela 4 – Parâmetros constitutivos do estudo de caso.	88

Lista de abreviaturas e siglas

MEF	Método dos Elementos Finitos
EVR	Elemento de Volume Representativo
<i>n_{gl}</i>	Número de graus de liberdade de deslocamento

Lista de símbolos

Variáveis

X_1, X_2, X_3	Sistema de coordenadas referente à configuração material (indeformada)
x_1, x_2, x_3	Sistema de coordenadas referente à configuração espacial
$\partial\Omega_X^i$	Fronteira da fase i do contínuo na configuração material
Ω_X^i	Região da fase i do contínuo na configuração material
$\partial\Omega_x$	Fronteira do contínuo na configuração espacial
Ω_x	Região do contínuo na configuração espacial
Ω_μ^i	Região i pertencente a um elemento de volume representativo em microescala
Ω_μ^s	Fase sólida pertencente a um elemento de volume representativo em microescala
Ω_μ^f	Fase fluida pertencente a um elemento de volume representativo em microescala
\mathbf{x}^i	Posição espacial da fase i pertencente ao contínuo bifásico
t	Tempo
\mathbf{X}^i	Posição material da fase i pertencente ao contínuo bifásico
\mathbf{x}^s	Posição espacial da fase sólida do modelo bifásico
\mathbf{x}^f	Posição espacial da fase fluida do modelo bifásico
\mathbf{x}	Posição espacial do modelo bifásico homogeneizado.
\mathbf{u}^i	Vetor de deslocamento de uma partícula da fase i do modelo bifásico
\mathbf{v}^i	Vetor velocidade de uma partícula da fase i do modelo bifásico
\mathbf{a}^i	Vetor aceleração de uma partícula da fase i do modelo bifásico
\mathbf{F}^i	Tensor gradiente de deformação da fase i do modelo bifásico
J^i	Jacobiano de transformação volumétrica da fase i do modelo bifásico
dw_x^i	Diferencial de volume da fase i na configuração espacial

dV_X^i	Diferencial de volume da fase i na configuração referencial
dv_x	Diferencial de volume do modelo bifásico na configuração espacial
ρ^i	Densidade aparente espacial da fase i do modelo bifásico
dm_x^i	Diferencial de massa da fase i do modelo bifásico
ρ_X^i	Densidade aparente material da fase i do modelo bifásico
ρ_μ^i	Densidade intrínseca da fase i pertencente ao elemento de volume representativo (microescala)
dv_μ^i	Diferencial de volume de uma fase i do elemento de volume representativo (microescala)
$\rho_{\mu x}$	Campo de densidade aparente do modelo bifásico na configuração espacial
ρ_μ^s	Densidade intrínseca da fase sólida do modelo bifásico
ρ_μ^f	Densidade intrínseca da fase fluida do modelo bifásico
dv_μ^s	Diferencial de volume da fase sólida do elemento de volume representativo (microescala)
dv_μ^f	Diferencial de volume da fase fluida do elemento de volume representativo (microescala)
ν^s	Fração volumétrica do meio sólido (solidez)
ν^f	Fração volumétrica do meio fluido (porosidade)
ν^i	Fração volumétrica da fase i pertencente ao modelo bifásico
σ	Tensor de tensões de Cauchy
σ^s	Tensão efetiva da fase sólida do modelo
σ^f	Tensão efetiva da fase fluida do modelo
p	Pressão de poro referente ao fluido
\mathbf{I}	Tensor identidade de segunda ordem
$\rho^i \mathbf{a}^i$	Forças inerciais impostas ao modelo bifásico
\mathbf{b}_x	Forças de corpo impostas ao modelo bifásico
\mathbf{v}^s	Vetor velocidade de uma partícula da fase sólida do modelo bifásico

\mathbf{v}^f	Vetor velocidade de uma partícula da fase fluida do modelo bifásico
$\boldsymbol{\omega}$	Velocidade relativa do meio poroso na configuração espacial referente à macroescala
\mathbf{n}	Vetor normal à superfície na configuração espacial
$\bar{\mathbf{t}}$	Vetor força de superfície espacial
$\bar{\mathbf{u}}$	Deslocamento prescrito inicial imposto ao modelo bifásico
\bar{p}	Pressão de poro inicial imposta ao modelo bifásico
\bar{q}	Fluxo de fluido na configuração espacial
$\partial\Omega_x^s _{\text{interface}}$	Superfície de interface referente ao meio sólido entre diferentes materiais poromecânicos de um domínio bifásico
$\partial\Omega_x^f _{\text{interface}}$	Superfície de interface referente ao meio fluido entre diferentes materiais poromecânicos de um domínio bifásico
$\Delta\pi$	Diferença de pressão osmótica interna e externa
ϕ_{int}	Coefficiente de osmose interno
ϕ_{ext}	Coefficiente de osmose externo
ϕ	Coefficiente de osmose
R	Constante universal dos gases perfeitos
T_{int}	Temperatura interna
T_{ext}	Temperatura externa
T	Temperatura
γ_{int}	Coefficiente de atividade interna
γ_{ext}	Coefficiente de atividade externa
c_e	Concentração do banho externo
c_F	Densidade de carga fixa (CFD)
c_{F_0}	Densidade de carga fixa inicial
ν_0^f	fração volumétrica de fluido inicial
J	Jacobiano volumétrico

\bar{c}	Osmolaridade do banho externo
μ^f	Potencial químico da fase fluida
δe	Variação do tensor de deformações de Euler Almansi
δW^s	Variação do trabalho total no meio sólido
δW^f	Variação do trabalho total no meio fluido
nel	Número total de elementos da malha
$\delta \mathbf{u}$	Variação virtual do campo de deslocamento
$\delta \mu^f$	Variação virtual do campo de potencial químico do fluido
$\mathcal{K}^{\mathbf{u}}$	Espaço de deslocamentos admissíveis para o modelo bifásico
\mathcal{K}^{μ^f}	Espaço de potenciais químicos admissíveis para o modelo bifásico
Ψ	Energia livre de Helmholtz
\mathbf{P}	Primeiro tensor de tensões de Piola-Kirchhoff
μ, λ	Parâmetros constitutivos de Lamé referente ao modelo de Neo-Hookean utilizados para representar o comportamento mecânico do esqueleto sólido nos experimentos numéricos
I_1	Primeiro invariante do gradiente de deformação
\mathbf{C}	Tensor de alongamentos de Cauchy-Green à direita
E	Módulo de elasticidade
ν	Coefficiente de Poisson
\mathbf{S}	Segundo tensor de tensões de Piola-Kirchhoff
\mathbf{b}	Tensor de alongamentos de Cauchy-Green à esquerda
$\boldsymbol{\kappa}_x$	Tensor de permeabilidade espacial de Darcy
k_0	Permeabilidade hidráulica inicial do meio
dv	Diferencial de volume espacial
\mathbf{q}	Vetor de deslocamentos nodais discretizado
$\boldsymbol{\mu}^f$	Vetor de potenciais químicos nodais discretizado
$\mathbf{N}^{\mathbf{u}}$	Matriz com as funções de interpolação para o campo de deslocamento

$\mathbf{N}^{\mu f}$	Matriz com as funções de interpolação para o campo de pressões de poro
\mathbf{B}^u	Matriz com as derivadas das funções de interpolação para o campo de deslocamento que mapeiam o tensor de deformação de Almansi
\mathbf{h}^u	Vetor que reúne as derivadas das funções de interpolação para o campo de deslocamento que mapeiam o traço do tensor de deformação de Almansi
$\dot{\mathbf{q}}$	Vetor de velocidades nodais discretizado
\mathbf{G}^u	Matriz com as derivadas das funções de interpolação para o campo de deslocamento que mapeiam o gradiente de variação
$\mathbf{H}^{\mu f}$	Matriz com as derivadas das funções de interpolação para o campo de potenciais químicos que mapeiam o gradiente de variação
\mathbf{Q}^u	Matriz com as derivadas das funções de interpolação para o campo de deslocamento que mapeiam o gradiente transposto
\mathbf{b}^u	Vetor que reúne as derivadas das funções de interpolação para o campo de deslocamento que mapeiam o divergente
$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^s$	Matriz definida a partir do tensor de tensão de Cauchy do meio sólido
$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^f$	Matriz definida a partir do tensor de tensão de Cauchy do meio fluido
$\hat{\mathbf{T}}$	Matriz definida a partir do gradiente do campo de potencial químico do fluido
\mathbb{C}_x	Módulo tangente espacial consistente do meio sólido
$\mathbf{K}^{(\cdot)}$	Matrizes tangente discretizadas do procedimento de solução do método de Newton-Raphson
\mathbf{R}^u	Resíduo referente à parcela sólida do equacionamento discretizado
$\mathbf{R}^{\mu f}$	Resíduo referente à parcela fluida do equacionamento discretizado
$\mathbf{F}_{\text{int}}^u$	Força interna referente à parcela sólida do modelo bifásico
$\mathbf{F}_{\text{ext}}^u$	Força externa referente à parcela sólida do modelo bifásico
$\mathbf{F}_{\text{int}}^{\mu f}$	Força interna referente à parcela fluida do modelo bifásico
$\mathbf{F}_{\text{ext}}^{\mu f}$	Força externa referente à parcela fluida do modelo bifásico

t_{est}	Tempo de simulação em que a curva da densidade de carga fixa inicial cresce linearmente
\mathbf{p}	Conjunto de parâmetros otimizados numericamente para ajuste da curva numérica em relação à experimental
\mathcal{S}	Espaço de restrições para aplicação dos métodos de otimização nos parâmetros constitutivos
\mathbf{F}	Tensor gradiente de deformação
\mathbf{X}	Vetor de posição material
\mathbf{u}	Vetor de deslocamento de uma partícula do sólido
ϵ	Parâmetro de variação da derivada de Gateaux
$\Delta \mathbf{F}$	Derivada direcional do gradiente de deformação na direção do incremento de deslocamento
ΔJ	Derivada direcional do Jacobiano volumétrico na direção do incremento de deslocamento
\mathbf{E}	Tensor de deformações de Green-Lagrange
$\Delta \mathbf{E}$	Derivada direcional do Tensor de deformações de Green-Lagrange na direção do incremento de deslocamento
\mathbf{e}	Tensor de deformações de Euler-Almansi
$\Delta \mathbf{e}$	Derivada direcional do Tensor de deformações de Euler-Almansi na direção do incremento de deslocamento
\mathbf{S}^s	Segundo tensor de Piola-kirchoff da fase sólida do modelo bifásico
\mathbb{C}_X	Módulo tangente consistente material da fase sólida do modelo bifásico
ρ	Densidade aparente espacial
ds	Diferencial de superfície espacial
\mathbf{r}	Vetor diferença entre posição atual de uma partícula e sua posição no instante anterior na configuração espacial
ϵ	Tensor de permutação de terceira ordem
m^i	Massa total de uma fase i do modelo bifásico
dm^i	Diferencial de massa de uma fase i do modelo bifásico

dv^i	Diferencial de volume da fase i do modelo bifásico na configuração espacial
dV^i	Diferencial de volume da fase i do modelo bifásico na configuração material
\mathbf{r}_x	Vetor de resíduo espacial
$\boldsymbol{\eta}$	Função vetorial arbitrária
r_x	Escalar de resíduo espacial
η	Função escalar arbitrária
\mathbf{S}^f	Segundo tensor de Piola-kirchoff da fase fluida do modelo bifásico
λ^{op}	Constante originada pela derivada da equação constitutiva de pressão osmótica ideal de Donnan
$\boldsymbol{\kappa}_x$	Tensor de permeabilidade referencial de Darcy
\mathbb{K}_x	Módulo tangente da permeabilidade de Darcy espacial
\mathbb{K}_X	Módulo tangente da permeabilidade de Darcy referencial
$\boldsymbol{\omega}_x$	Velocidade relativa do meio poroso na configuração referencial referente à macroescala

Operadores

$\dot{(\cdot)}$	Derivada temporal total
$\ddot{(\cdot)}$	Segunda derivada temporal total
$(\cdot)^{-1}$	Operador de inversão
\mathcal{X}^i	Função de mapeamento da fase i do contínuo
\mathcal{X}^s	Função de mapeamento da fase sólida do modelo bifásico
\mathcal{X}^f	Função de mapeamento da fase fluida do modelo bifásico
\in	Pertence
\mathcal{X}^{-1}	Função de mapeamento inversa
∇_x	Operador gradiente em relação à configuração referencial
\det	Operador determinante

$(\cdot)^T$	Operador de transposição
$(\cdot)^{-1}$	Operador de inversão
$\nabla_{\mathbf{x}}$	Operador gradiente em relação à configuração espacial na macroescala
div	Operador de divergência em relação à configuração espacial
\int	Operador integral
\forall	Para todos
\otimes	Produto tensorial
\boxtimes	Produto tensorial quadrado
\odot	Produto tensorial ponto
\times	Produto vetorial (espaço vetorial tridimensional)
\cdot	Produto interno vetorial (escalar)
$:$	Produto interno tensorial (escalar)
$;$	Separação entre variáveis e parâmetros
\bullet	Produto interno adequado com a natureza das quantidades envolvidas
∂	Operador derivada parcial
$\delta(\cdot)$	Variação
tr	Operador traço
$\Delta(\cdot)$	Incremento
$\Delta\delta(\cdot)$	Derivada direcional da variação na direção do deslocamento
$\underline{(\cdot)}$	Notação compacta baseada na notação de Voigt
$\mathcal{A}_{e=1}^{nel}$	Operador consistente de montagem local-global padrão do MEF

Sobrescritos e Subscritos

$(\cdot)_{\mathbf{x}}$	Referente à configuração referencial
$(\cdot)_{\mathbf{x}}$	Referente à configuração espacial
$(\cdot)^{\text{opt}}$	Ponto ótimo
$(\cdot)_{n+1}$	Referente ao instante de tempo $n + 1$

$(\cdot)_n$	Referente ao instante de tempo n
$(\cdot)^i$	Referente à fase i (alguma fase do modelo bifásico)
$(\cdot)^s$	Referente à fase sólida
$(\cdot)^f$	Referente à fase fluida
$(\cdot)^{(e)}$	Referente ao elemento finito e
$(\cdot)^{\text{nó}}$	Referente ao nó do elemento finito
$(\cdot)^{it+1}$	Referente à iteração atual do processo iterativo de Newton-Raphson
$(\cdot)^{it}$	Referente à iteração anterior do processo iterativo de Newton-Raphson

Sumário

1	INTRODUÇÃO	35
1.1	Contexto	35
1.2	Motivação	37
1.3	Objetivos	38
1.3.1	Objetivo geral	39
1.3.2	Objetivos específicos	39
1.4	Organização do texto	39
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	41
2.1	Breve estado da arte sobre modelos hidro-mecânico-químicos em tecidos moles	41
2.2	Fundamentação Teórica	48
2.2.1	Modelagem bifásica	48
2.2.1.1	Conceitos gerais da mecânica do contínuo em um meio bifásico	48
2.2.1.2	Hipóteses do modelo bifásico	51
2.2.1.3	Equações de estado	52
2.2.2	Modelo de pressão osmótica	53
2.2.2.1	Pressão osmótica de Donnan	53
3	MODELAGEM BIFÁSICA EM DEFORMAÇÕES FINITAS CONSIDERANDO O FENÔMENO DE PRESSÃO OSMÓTICA DE DONNAN	57
3.1	Formulação no contínuo	57
3.2	Equações constitutivas	59
3.2.1	Modelos constitutivos para a fase sólida	59
3.2.1.1	Neo-Hookean compressível	60
3.2.2	Modelos constitutivos para a fase fluida	60
3.2.2.1	Lei de Darcy	60
3.2.2.2	Modelo de permeabilidade Isotrópica Constante	61
3.3	Formulação discreta	61
3.3.1	Discretização temporal e método de linearização	61
3.3.2	Discretização espacial via método de elementos finitos	63
3.3.3	Estratégia de solução	71
4	VERIFICAÇÃO DO MODELO	73
4.1	Parâmetros de simulação	73
4.2	Resultados e discussões	76

5	ESTUDO DE CASO: INCHAÇO EM TENDÕES	83
5.1	Descrição do experimento laboratorial	83
5.1.1	Descrição do experimento numérico	84
5.2	Ajuste de parâmetros	85
5.3	Resultados e discussão	87
5.3.1	Conjuntos ajustados	87
5.3.2	Análise de sensibilidade de parâmetros	89
6	CONCLUSÃO	95
6.1	Considerações finais	95
6.2	Sugestões para trabalhos futuros	96
	REFERÊNCIAS	99
	APÊNDICES	103
	APÊNDICE A – OPERAÇÕES AUXILIARES	105
A.1	Derivada direcional do gradiente de deformação	105
A.2	Derivada direcional do Jacobiano volumétrico	106
A.3	Derivada direcional do tensor de deformação de Green-Lagrange	106
A.4	Derivada direcional do tensor de deformação de Euler-Almansi	107
A.5	Derivada direcional dos campos virtuais de deformação	108
A.6	Derivada direcional do segundo tensor de tensões de Piola-Kirchoff	108
	APÊNDICE B – CONSERVAÇÃO DO MOMENTO LINEAR	111
	APÊNDICE C – CONSERVAÇÃO DO MOMENTO ANGULAR	113
	APÊNDICE D – CONSERVAÇÃO DA MASSA	115
	APÊNDICE E – PRINCÍPIO DOS TRABALHOS VIRTUAIS	119
	APÊNDICE F – LINEARIZAÇÃO DA FORMULAÇÃO FRACA	123
F.1	Linearização da equação do sólido	123
F.2	Linearização da equação do fluido	130

1 Introdução

1.1 Contexto

A engenharia de tecidos compõe um campo multidisciplinar foco de intensas pesquisas durante as últimas décadas. O interesse da comunidade científica justifica-se pelo grande potencial deste campo em contribuir no desenvolvimento de técnicas e aplicações relacionadas a questões clínicas. Quando condições patológicas comprometem a funcionalidade de tecidos ou órgãos do corpo humano, o tratamento geralmente aplicado consiste em transplantes de origem natural ou desenvolvidos artificialmente. No entanto, a aplicação destes tratamentos cirúrgicos encontra uma série de dificuldades. Transplantes de órgãos naturais deparam-se com escassez de doadores e casos de rejeição pelo sistema imune receptor. Em contrapartida, órgãos (ou tecidos) artificiais ainda enfrentam problemas de biocompatibilidade e funcionalidade, isto é, sua capacidade de imitar o comportamento das estruturas naturais do corpo humano ([IKADA, 2006](#)).

Nesse contexto, a engenharia de tecidos possui como objetivo principal investigar o comportamento biomecânico de tecidos ou órgãos do corpo humano visando construir estruturas capazes de suportar solicitações e desempenhar funções de forma idêntica, substituindo por completo ou estimulando a regeneração de órgãos e tecidos comprometidos por alguma condição patológica ([GROUNDS, 2018](#)). Como forma alternativa aos tratamentos clínicos convencionais, a medicina regenerativa surge como um campo de aplicação direta da engenharia de tecidos no tratamento de condições patológicas que comprometam a funcionalidade de órgãos e tecidos do corpo humano ([ATALA, 2012](#)).

Sendo assim, visando prover embasamento científico contínuo para o desenvolvimento de tratamentos clínicos, observou-se nos últimos anos uma grande quantidade de pesquisas destinadas a investigar o comportamento biomecânico de tecidos conectivos moles. Abrangendo tendões, cartilagens ou ligamentos, esse tipo de tecido possui como principais funções fisiológicas conectar, suportar e revestir os demais órgãos e estruturas do corpo humano. Ademais, diferentemente de tecidos epiteliais, musculares e nervosos que são compostos majoritariamente por células, os tecidos conectivos são estruturas altamente hidratadas e pouco vascularizadas, caracterizados pela presença de uma matriz extracelular formada por uma combinação de fibras (colágeno e elastina) e por uma substância base, constituída por um conjunto de macromoléculas, muitas dessas hidrofílicas ([MESCHER, 2018](#)).

A matriz extracelular constitui uma base para o tecido, realizando a conexão entre as células presentes na estrutura e outros tecidos ou órgãos. O fluido intersticial presente

na substância base atua diretamente nas atividades metabólicas das células presentes no tecido, provendo um meio de difusão para nutrientes e outros solutos. As fibras de colágeno presentes na matriz são responsáveis por prover resistência mecânica, constituindo estruturas como tendões, aponeuroses e membranas que efetuam o encapsulamento e sustentação dos órgãos. As fibras de elastina possuem características variáveis, oferecendo elasticidade ou rigidez aos tecidos. A substância base é composta por macromoléculas aniônicas (glicosaminoglicanos e proteoglicanos) e por glicoproteínas multiadesivas, que permitem a efetuação de ligações com proteínas receptoras de outras células, fornecendo rigidez e força tênsil à matriz extracelular. (MESCHER, 2018; JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2013).

Os fibroblastos são as células mais comumente presentes nos tecidos conectivos sendo responsáveis por sintetizar e secretar diversos componentes da matriz. Adipócitos são células de armazenamento de gordura presentes em todos os tecidos conectivos (especialmente nos tecidos adiposos). Macrófagos são células temporárias presentes nos tecidos conectivos, as quais desempenham o papel de fagocitar (englobar) células mortas, resíduos ou antígenos que adentrem ao tecido visando evitar infecções. Plasmócitos são células presentes na maioria dos tecidos conectivos, sua função consiste em sintetizar anti-corpos. Mastócitos são células que se originam na medula óssea, circulam pela corrente sanguínea e adentram nos tecidos conectivos como uma resposta anti-inflamatória ou para estimular a regeneração do tecido. Finalmente, alguns tecidos conectivos também contam com a presença de leucócitos que contribuem em sua resposta imunológica e regeneração (MESCHER, 2018; JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2013).

Existem diversos tecidos moles no corpo humano, essas estruturas possuem composições que variam em relação a densidade de células, fibras e substância base presente. Isso permite que cada tipo de tecido conectivo apresente funcionalidades e respostas biomecânicas distintas. Entretanto, as diferenças características dos tecidos conectivos moles também faz com que estas estruturas estejam sujeitas a diferentes patologias e mecanismos de dano (MESCHER, 2018; JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2013). Além de uma composição morfológica heterogênea, os tecidos conectivos moles também apresentam uma complexa organização estrutural. As fibras que compõem a matriz extracelular possuem direções preferenciais de deformação, caracterizando um comportamento biomecânico essencialmente anisotrópico. Ademais, quando submetidos à tração, os tecidos conectivos podem sofrer grandes deformações, apresentando um comportamento mecânico não linear e viscoso. Adicionalmente, as características mecânicas gerais destes tecidos também são influenciadas por diversos fatores, como por exemplo, morfologia, idade, espécie, temperatura, pressão osmótica, pH, taxa de deformação, entre outros. Condições de carregamento também podem ocasionar respostas mecânicas distintas, bem como alterações estruturais ocasionadas por agentes patológicos (HOLZAPFEL et al., 2001).

Outra importante característica morfológica dos tecidos conectivos moles provém da substância base. Este meio aquoso é rico em glicosaminoglicanos (GAGs), proteoglicanos e glicoproteínas multiadesivas. Os GAGs são macromoléculas eletronegativamente carregadas que desempenham funções fisiológicas e estruturais (MESCHER, 2018). Devido a suas dimensões, essas moléculas permanecem retidas na matriz extracelular do tecido, conferindo a esta uma densidade de carga fixa (FCD). Quando o tecido é submetido a um banho ionizado, a presença das cadeias internas de GAGs atrai íons contrários como forma de manter a eletro-neutralidade. Isso ocasiona um fenômeno de osmose que resulta em um aumento da concentração de soluto interna ao tecido em relação ao banho externo. O desequilíbrio de cargas, origina uma pressão no fluido intersticial que se sobrepõe à pressão do banho externo. A pressão osmótica (conhecida como pressão de Donnan) contribui diretamente para a ocorrência do fenômeno de inchaço observado no tecido, influenciando em sua resposta biomecânica, além de suas características químicas e morfológicas (LAI; HOU; MOW, 1991).

1.2 Motivação

Conforme descrito na contextualização supracitada, o comportamento biomecânico dos tecidos conectivos moles está associado a diversos fatores construtivos e morfológicos destas estruturas. Sendo assim, fica evidente que a caracterização das diversas variáveis, bem como dos aspectos fenomenológicos e morfológicos, contribui diretamente na modelagem computacional destes tecidos, aproximando o modelo científico do comportamento real da estrutura. Nesse contexto, considerar os efeitos eletroquímicos da concentração de carga nos tecidos e a pressão osmótica resultante, proporciona um aumento de representatividade em relação aos modelos clássicos utilizados na modelagem computacional dos tecidos conectivos. Adicionalmente, do ponto de vista de aplicações clínicas, considerar os efeitos da pressão osmótica mostra-se relevante, já que esta variável influencia diretamente nas respostas biomecânicas do fluxo de fluido intersticial e no campo de deformações sofrido pelo tecido (GALBUSERA et al., 2011).

Retomando a argumentação prévia, a pressão osmótica ocorre nos tecidos moles devido a um desequilíbrio entre as concentrações dos meios interno e externo ao tecido (LAI; HOU; MOW, 1991). Essa pressão exerce grande influência na resposta biomecânica do tecido, caracterizando um fenômeno de inchaço, evidenciado quando o tecido absorve grande quantidade de fluido, alterando suas características volumétricas e respostas mecânicas, como por exemplo, sua rigidez à compressão e taxa de deformação quando submetido a um ensaio de relaxação (GU; YAO, 2003). Tendo em vista a relevância clínica das suas consequências fenomenológicas, o efeito de inchaço tem sido objeto de estudo em diversas pesquisas referentes a tecidos moles. O trabalho de Lai, Hou e Mow (1991) surge como um dos pioneiros deste tipo de investigação, analisando os efeitos desse fenômeno em

cartilagens articulares por meio de uma teoria trifásica. Outra exemplificação relacionada à investigação do fenômeno de inchaço em tecidos moles foi realizada no trabalho de [Gu, Lai e Mow \(1998\)](#) que utilizou uma modelagem trifásica para estudar o transporte passivo de cargas do tecido e seus efeitos de inchaço e fluxo de fluido em tecidos moles.

Apesar da assertividade cientificamente comprovada do modelo trifásico na descrição da resposta biomecânica dos tecidos moles, a complexidade destes modelos, aliada ao seu alto custo computacional, estimularam o desenvolvimento de abordagens mais simplistas que também permitem a inclusão de fenômenos eletroquímicos na resposta do tecido. Desta maneira, visando investigar os efeitos da pressão osmótica por meio de uma formulação de menor complexidade (se comparada à trifásica), mas que simultaneamente proporcione uma previsibilidade comportamental precisa, desenvolveram-se abordagens bifásicas incluindo as variáveis relacionadas à pressão osmótica. Esse tipo de trabalho foi realizado por [Galbusera et al. \(2011\)](#) e [Wilson, Donkelaar e Huyghe \(2005\)](#), que incluem o efeito de osmose em uma formulação bifásica considerando a densidade de carga fixa (FCD) do tecido como uma função da deformação.

As pesquisas supramencionadas aplicam a teoria bifásica (incluindo os efeitos da pressão osmótica) para investigar o fenômeno de inchaço em tecidos cartilagosos e discos intervertebrais. No entanto, dados teóricos e experimentais ([SCREEN et al., 2006](#); [MASIC et al., 2015](#)), evidenciaram a ocorrência deste fenômeno também em tecidos tendinosos, constituindo uma temática pouco investigada na literatura atual. Neste contexto, pode-se questionar a aplicabilidade das formulações bifásicas (considerando o efeito de pressão osmótica) na simulação da resposta biomecânica de tecidos tendinosos.

1.3 Objetivos

Tendo como principal motivação a problemática abordada, esta pesquisa almeja investigar o efeito da pressão osmótica e seu conseqüente fenômeno de inchaço em tecidos tendinosos por meio da implementação computacional de uma formulação bifásica, considerando os efeitos eletroquímicos de forma análoga às pesquisas de [Galbusera et al. \(2011\)](#) e [Wilson, Donkelaar e Huyghe \(2005\)](#). Análises qualitativas do modelo implementado e estudos de caso envolvendo o fenômeno de inchaço em tendões também fazem parte do escopo deste trabalho. Por fim, comparam-se os resultados obtidos com dados experimentais, utilizando a formulação proposta juntamente com métodos de otimização como forma de ajustar a representatividade do modelo aplicado à tecidos tendinosos. Com base na motivação supracitada (Seção 1.2), propõe-se o cumprimento dos seguintes objetivos principais e específicos.

1.3.1 Objetivo geral

O objetivo principal desta pesquisa consiste em investigar efeito da pressão osmótica e seu consequente fenômeno de inchaço em tecidos tendinosos por meio de uma formulação bifásica, considerando a variável de pressão osmótica conforme o equacionamento ideal de Donnan via método de elementos finitos, de forma semelhante aos modelos utilizados por Galbusera et al. (2011) e Wilson, Donkelaar e Huyghe (2005).

1.3.2 Objetivos específicos

Para alcançar o objetivo geral, um conjunto de objetivos específicos são elencados na sequência.

1. Implementar um modelo computacional com formulação bifásica considerando a variável de pressão osmótica conforme o equacionamento ideal de Donnan.
2. Validar o modelo implementado por meio de comparação direta dos resultados das simulações com programa de elementos finitos FEBio.
3. Aplicar o modelo implementado na investigação dos efeitos da pressão osmótica no comportamento biomecânico dos tendões utilizando dados de entrada obtidos na literatura e por experimentos laboratoriais.

1.4 Organização do texto

O conteúdo desta dissertação está disposto da seguinte maneira.

- No Capítulo 1, retrata-se uma contextualização da temática relacionada ao presente trabalho de dissertação, apresentando ao leitor aspectos morfológicos e comportamentais dos tecidos biológicos moles, bem como a motivação para execução desta pesquisa.
- No Capítulo 2, um estado da arte relacionado a aplicações de modelos hidromecânicos-químicos em tecidos moles é apresentado. Posteriormente, o aborda uma fundamentação teórica relacionada aos modelos bifásicos e de pressão osmótica.
- No Capítulo 3, são retratados os conceitos fundamentados anteriormente, demonstrando a formulação bifásica no contínuo incluindo a variável de pressão osmótica, as equações constitutivas envolvidas, a formulação discreta incluindo etapas de linearização, discretização temporal e espacial (via método de elementos finitos) e a estratégia de solução.

- No Capítulo 4, apresenta-se o procedimento de validação da formulação implementada por meio da execução de simulações com o código elaborado e comparação direta com resultados obtidos utilizando o programa de elementos finitos desenvolvido para aplicações biomecânicas, FEBio.
- No Capítulo 5, um estudo de caso é realizado por meio de ensaios experimentais de osmose livre semiconfinada e aplicação da técnica de ajuste de parâmetros, seguida por uma análise de sensibilidade para os casos avaliados.
- No Capítulo 6, relatam-se as conclusões obtidas a respeito dos resultados desta pesquisa, propondo ideias para novos trabalhos desta temática.
- Finalmente, as páginas finais desta dissertação retratam Referências e Apêndices, onde encontram-se cálculos e informações pertinentes à um maior entendimento do texto principal.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Breve estado da arte sobre modelos hidro-mecânico-químicos em tecidos moles

Historicamente, o comportamento biomecânico dos tecidos biológicos moles tornou-se alvo de estudo em diversas áreas de pesquisa. Os primeiros trabalhos dedicados a investigar esta temática surgiram por volta da década de sessenta. Inicialmente, os tecidos moles eram modelados como estruturas de comportamento elástico ou viscoelástico, com respostas não lineares e anisotrópicas. Tal abordagem é exemplificada pela pesquisa de [Fung \(1967\)](#), onde o autor, utilizando dados experimentais obtidos em ensaios de tração da artéria mesentérica de coelhos, propõe um modelo matemático para a resposta não linear de tecidos moles quando submetidos a grandes deformações. O trabalho supracitado enfatiza o comportamento viscoelástico dos tecidos moles ao destacar a forte dependência do campo de tensões com o histórico de deformações sofridas pelo tecido.

Outras pesquisas utilizaram abordagens análogas para investigar o comportamento dos tecidos moles. Nesse contexto, o artigo de [Hayes e Mockros \(1971\)](#) investigou o comportamento viscoelástico de articulações cartilaginosas, bem como o efeito da degeneração destas estruturas. Os autores utilizaram ensaios de relaxação em torção e deformação uniaxial para determinar os parâmetros viscoelásticos destes tecidos e avaliar o efeito de agentes patológicos na sua resposta mecânica. Adicionalmente, o trabalho de [Wu e Yao \(1976\)](#) examinou o comportamento do anel fibroso de discos intervertebrais quando submetidos à deformações finitas. Assumindo o tecido como um material incompressível e elástico não-linear, os autores apresentaram um equacionamento para a função de energia de deformação dos anéis fibrosos, considerando duas direções para as fibras em sua estrutura.

Uma abordagem bifásica na descrição do comportamento biomecânico dos tecidos moles foi apresentada por [Mow et al. \(1980\)](#) ao investigar o comportamento viscoelástico de articulações cartilaginosas. Os autores modelaram o tecido composto por uma matriz incompressível e linearmente elástica, completamente saturada por um fluido também incompressível. Nesse contexto, o comportamento dissipativo do tecido resulta do movimento relativo entre a fase sólida e fluida. Os autores utilizaram o modelo matemático desenvolvido para descrever o comportamento de relaxação obtido experimentalmente em amostras de tecido cartilaginoso femoral bovino e da patela humana. Adicionalmente, [Mow et al. \(1980\)](#) enfatizaram que o modelo bifásico de permeabilidade não linear aparenta ser o mais adequado para descrever precisamente o comportamento biomecânico

da cartilagem das articulações. No trabalho supracitado, os autores evidenciaram que os efeitos dissipativos decorrentes do movimento entre as fases compõem um fator de extrema relevância quanto as propriedades viscoelásticas deste tipo de tecido.

Após a década de 80, devido à representatividade comprovada na previsão da resposta biomecânica dos tecidos moles, aliada ao grande potencial em investigar fenômenos de alta complexidade, a teoria bifásica passou a ser imensamente aplicada na investigação comportamental dos tecidos moles. A exemplo, o trabalho de Myers, Lai e Mow (1984) propôs uma extensão do modelo, incorporando deformações induzidas pelas cargas iônicas presentes no tecido. A investigação de Myers, Lai e Mow (1984) incrementou o modelo matemático previamente descrito por Mow et al. (1980), visando estudar o fenômeno de inchaço anisotrópico e não homogêneo observado experimentalmente em cartilagens de articulações quando submetidas a uma diferença de concentração química. A pesquisa de Myers, Lai e Mow (1984) demonstrou o alto potencial de aplicação da teoria bifásica ao incorporar fenômenos eletroquímicos no comportamento biomecânico dos tecidos moles. Ademais, após expandir o modelo matemático e desenvolver uma série de experimentações, os autores enfatizaram a contribuição do fluxo de fluido na resposta mecânica deste tipo de tecido, especialmente em casos de compressão.

As pesquisas de Mak (1986a) e Mak (1986b) também desenvolveram uma extensão da teoria bifásica (poroelastica) inicialmente proposta por Mow et al. (1980). O autor investigou o comportamento viscoelástico do tecido como consequência de dois mecanismos de dissipação: o movimento relativo entre as fases e a viscoelasticidade intrínseca da matriz sólida. Nessa pesquisa duas modelagens distintas foram desenvolvidas, a primeira considerando a propriedade de resistência ao cisalhamento como uma função linearmente viscoelástica e a resistência volumétrica puramente elástica. Posteriormente, a segunda abordagem considerou o comportamento viscoelástico no tecido em deformações volumétricas e cisalhantes. O autor evidenciou que o comportamento viscoelástico do tecido associa-se a ambos os mecanismos dissipativos, ressaltando que a teoria de poroviscoelasticidade proporciona maior precisão quanto à previsibilidade do fluxo de fluido intersticial no tecido. Adicionalmente, o autor finaliza sua discussão sugerindo que para maior precisão do modelo poroviscoelástico, novas pesquisas devem considerar a dependência da permeabilidade do tecido com a deformação.

Com o desenvolvimento dos modelos analíticos de poroelasticidade (MOW et al., 1980) e poroviscoelasticidade (MAK, 1986a; MAK, 1986b) surgiram estudos que utilizam as modelagens supracitadas como base para aplicação do método de elementos finitos na investigação comportamental de tecidos biológicos com geometrias de alta complexidade. A exemplo disso, a pesquisa de Spilker, Suh e Mow (1988) utilizou a teoria bifásica para aplicação do método de elementos finitos juntamente com a técnica dos resíduos ponderados. O trabalho em questão assumiu o tecido composto por um fluido invíscido e

incompressível juntamente com uma fase sólida isotrópica e elástica. Efeitos de viscosidade foram incorporados por uma força de corpo proporcional à velocidade relativa entre as fases, enquanto a permeabilidade do modelo foi considerada como uma função exponencial da deformação. Com sua pesquisa, os autores ressaltaram a importância do desenvolvimento de modelos numéricos para solução de problemas representativos quanto ao comportamento biomecânico dos tecidos moles, bem como as potenciais contribuições clínicas e tecnológicas potencializadas por esses modelos.

Outra aplicação do método de elementos finitos para investigação da resposta biomecânica dos tecidos moles foi proposta no trabalho de [Spilker e Suh \(1990\)](#). Os autores descreveram uma formulação de elementos finitos utilizando a teoria bifásica com permeabilidade linear. O método de resíduos ponderados foi aplicado nas equações de conservação de momento e condições de contorno para ambas as fases do tecido. Adicionalmente, a equação de continuidade para misturas incompressíveis foi introduzida na formulação através de um método de penalização. Para solução do equacionamento integral, os autores utilizaram a técnica de diferenças finitas, obtendo os valores nodais de deslocamento da fase sólida e velocidade da fase fluida. A formulação foi aplicada utilizando um elemento axissimétrico, visando investigar a resposta de relaxação sofrida por amostras de tecido em compressão livre e confinada. Adicionalmente, foram investigados efeitos de malha e parâmetros de simulação, como distorção de malha, número de penalização e discretização temporal. Conforme destacado pelos próprios autores, a pesquisa de [Spilker e Suh \(1990\)](#) contribuiu diretamente na solução de problemas de interesse clínico envolvendo tecidos moles, servindo como base para o desenvolvimento e aprimoramento da formulação, incluindo análises tridimensionais e não linearidades no problema, como por exemplo, a dependência da permeabilidade com a deformação e o efeito de deformações finitas.

A alta complexidade morfológica dos tecidos moles ocasiona uma grande variedade de processos fenomenológicos que interferem em sua resposta mecânica. Em virtude disso, as teorias que visam investigar o comportamento destes tecidos tornaram-se cada vez mais complexas e abrangentes. A exemplo disso, a investigação de [Lai, Hou e Mow \(1991\)](#) surgiu como uma formulação de maior abrangência em relação à teoria bifásica. Considerando o tecido como uma mistura terciária, os autores incluíram em sua formulação, além das fases sólida e fluida, uma fase iônica diretamente relacionada aos efeitos físico-químicos baseados na teoria de [Donnan \(1924\)](#). A inclusão desta fase ocorre por meio da dependência da função de energia livre de Helmholtz com a densidade de cargas presente no tecido. Visando contabilizar nos campos de deformação e tensão, os efeitos ocasionados por solicitações químicas e mecânicas, [Lai, Hou e Mow \(1991\)](#) investigaram o comportamento de deformação e inchaço em articulações cartilaginosas, analisando quantitativamente a contribuição fenomenológica da pressão osmótica de Donnan e do efeito de repulsão eletrostática das cargas internas presentes no tecido. Em suas conclusões, os autores evidenciaram a capacidade da modelagem trifásica na obtenção dos campos de tensão e deformação da

matriz sólida, pressão e fluxo do fluido intersticial e distribuição de íons internos ao tecido. Os resultados demonstraram que o efeito de inchaço das cartilagens é consequência do fenômeno de pressão osmótica e da expansão química das cargas internas. Adicionalmente, a teoria trifásica demonstrou-se capaz de obter todos os campos relacionados às variáveis das três fases presentes no tecido quando submetido a solicitações químicas e mecânicas.

Considerando a alta complexidade relacionada às teorias de múltiplas fases, surgem uma variedade de problemas de valor de contorno (envolvendo tecidos moles) cuja solução analítica torna-se inviável. Sendo assim, aplicações de métodos numéricos, como por exemplo, o método de elementos finitos (MEF), tornam-se uma ferramenta de extrema relevância na resolução destes problemas. Nesse contexto, a pesquisa de [Sun et al. \(1999\)](#) exemplifica a alta aplicabilidade dos métodos numéricos na aplicação das teorias de múltiplas fases para investigação comportamental de tecidos moles. Neste trabalho, os autores propuseram um modelo matemático modificado para a teoria trifásica, por meio de uma formulação mista de elementos finitos que possui como graus de liberdade o deslocamento da fase sólida e os potenciais eletroquímicos/químicos modificados das demais fases. Os autores utilizaram a formulação para investigar o comportamento de relaxação e inchaço em tecidos moles, resolvendo problemas de compressão confinada com deformação infinitesimal do tecido e comparando diretamente os resultados obtidos (via MEF) com respostas calculadas analiticamente pelo método de diferenças finitas e dados experimentais. Em sua discussão [Sun et al. \(1999\)](#) evidenciaram a concordância entre a formulação desenvolvida e os resultados analíticos/experimentais para casos unidimensionais, ressaltando a potencial aplicação do método numérico em casos tridimensionais com geometrias complexas.

Investigações relacionando a teoria trifásica ao método de elementos finitos continuaram sendo amplamente utilizadas na biomecânica, sendo aprimoradas e aplicadas no contexto de problemas cada vez mais complexos e representativos quando ao comportamento fenomenológico dos tecidos moles. A título de exemplo, o trabalho de [Chen, Chen e Hisada \(2006\)](#) expandiu a representatividade da teoria trifásica para a investigação comportamental de tecidos moles considerando o caso de grandes deformações. Para tal, os autores consideraram em sua formulação uma configuração referencial para o tecido com base no estado material da matriz sólida e aplicação da transformação de Piola da velocidade relativa das fases fluida e iônica do tecido. Posteriormente, os autores aplicaram a formulação em uma análise de elementos finitos não linear, investigando variáveis, como por exemplo, o deslocamento da matriz sólida, fluxo de fluido, fluxo de íons, pressão hidrostática e potencial elétrico. Adicionalmente, após validar a formulação proposta com resultados de problemas lineares com deformações infinitesimais em compressão confinada (já esclarecidos na literatura), os autores investigaram o fenômeno de inchaço em cartilagens de articulações considerando três dimensões para o deslocamento, não linearidades (variação de porosidade com deformação) e grandes deformações. Os resultados obtidos foram comparados diretamente com experimentos *in vitro*, onde amostras do tecido foram

submetidas a variações de concentração do banho externo, ocasionando o fenômeno de inchaço. Em suas conclusões, os autores ressaltaram que os efeitos locais de deformação e não linearidades desempenham um papel relevante no comportamento do tecido, devendo portanto ser considerados para maior precisão do modelo.

Outro importante objeto de estudo comumente abordado em investigações de aplicação da teoria trifásica consiste nos discos intervertebrais (IVD). Por exemplo, o trabalho de Yao e Gu (2007) utilizou a teoria trifásica aliada ao método de elementos finitos para formular um modelo não homogêneo de um disco intervertebral, composto respectivamente por um núcleo pulposo, anel fibroso e por revestimentos cartilagosos superior e inferior (*endplate*). Os autores utilizaram um modelo numérico tridimensional para investigar os aspectos fenomenológicos relacionados à mecânica e eletroquímica do disco intervertebral quando submetido a compressão axial não confinada. Como resultados, o modelo computacional permitiu a obtenção dos campos de pressão de fluido, tensão efetiva no sólido e potencial eletroquímico em cada uma das estruturas do disco sob compressão, bem como as respostas na interface núcleo/anel. Adicionalmente, foi investigada a influência da permeabilidade do revestimento cartilagosos em relação ao transporte de soluto e concentração de íons no disco. Como principais conclusões, os autores constataram que alterações em propriedades do núcleo como porosidade, densidade de carga fixa e módulo de elasticidade afetam diretamente as respostas mecânicas e eletroquímicas do disco.

Pesquisas mais recentes como a de Hatano et al. (2015), utilizaram a teoria trifásica e o método de elementos finitos para investigar fenômenos eletroquímicos em tecidos moles cardíacos (cardiomiócitos). No trabalho supracitado os autores propuseram um modelo tridimensional em micro-escala considerando efeitos eletroquímicos na contração cardíaca. Como variáveis de interesse, a formulação visou a obtenção dos campos de fluxo de fluido intracelular (citossol), movimento relativo de íons e o gradiente elétrico interno. Para tal, o modelo trifásico utilizado considerou os cardiomiócitos como um tecido mole composto por uma fase sólida denominada citoesqueleto, uma fase fluida representada pelo citossol e uma fase iônica descrita pelo movimento de íons. Para validar a formulação os autores desenvolveram um modelo tridimensional representando um quarto do cardiomiócito e reproduziram uma série de simulações verificadas em estudos prévios. Posteriormente, o modelo foi utilizado na investigação do comportamento biomecânico de um túbulo transversal, permitindo a realização de análises comportamentais do tecido relacionadas a variáveis como o coeficiente de difusão, distribuição de íons, movimento de fluido e gradiente elétrico.

Conforme exemplificado anteriormente, existe uma ampla aplicação da formulação trifásica na investigação de tecidos moles cartilagosos (LAI; HOU; MOW, 1991; CHEN; CHEN; HISADA, 2006), discos intervertebrais (YAO; GU, 2007) e cardiomiócitos (HATANANO et al., 2015). A alta abrangência da teoria na representatividade fenomenológica de

diferentes tecidos moles possibilita o aprimoramento contínuo de modelos computacionais, capazes de contribuir diretamente no desenvolvimento de técnicas relacionadas a medicina regenerativa e sintetização de tecidos moles. No entanto, além da alta representatividade, os modelos trifásicos caracterizam-se por uma grande complexidade, o que dificulta sua formulação e aumenta o custo computacional na aplicação de métodos numéricos. Nesse contexto, modelos bifásicos embasados na formulação de [Mow et al. \(1980\)](#) têm sido modificados para contabilizar fenômenos eletroquímicos relevantes ao comportamento mecânico de tecidos moles, permitindo uma análise simplificada quando o fluxo de íons não é objeto de estudo na investigação.

Seguindo a proposta supramencionada, o trabalho de [Wilson, Donkelaar e Huyghe \(2005\)](#) surgiu como um dos primeiros modelos bifásicos a incorporar o fenômeno eletroquímico de inchaço que ocorre em tecidos moles. Com base na hipótese de [Lanir \(1987\)](#), os autores apresentaram um modelo bifásico em elementos finitos, incorporando o fenômeno de inchaço por meio da introdução de uma variável de pressão osmótica diretamente dependente da deformação do tecido. Para avaliar a representatividade do modelo proposto, os autores compararam os resultados obtidos numericamente pela formulação bifásica com a validação realizada por [Frijns, Huyghe e Janssen \(1997\)](#) para discos intervertebrais. Adicionalmente, os autores investigaram a correlação entre o modelo bifásico de inchaço com modelos mecânicos-eletroquímicos visando avaliar a aplicabilidade de cada um para diferentes tecidos moles. Em suas conclusões, os autores enfatizaram que o modelo bifásico de inchaço aproxima-se de uma formulação trifásica de acordo com as propriedades do material investigado, podendo ser aplicado para descrever o comportamento mecânico de tecidos moles quando submetidos a solicitações mecânicas e químicas. Portanto, devido à alta complexidade dos modelos trifásicos, a formulação bifásica de inchaço aparece como uma alternativa para estudos onde o fluxo de íons não é variável de interesse.

Uma abordagem semelhante foi apresentada no trabalho de [Ehlers, Karajan e Markert \(2009\)](#). Por meio de uma extensão da formulação bifásica, os autores incorporaram a influência de fenômenos eletroquímicos básicos na resposta biomecânica dos tecidos moles. Em sua formulação, os autores descreveram o tecido composto por uma matriz sólida carregada, de característica anisotrópica e intrinsecamente viscoelástica, completamente saturada por uma fase fluida. Adicionalmente, o modelo também incluiu não homogeneidades, como por exemplo, a dependência da porosidade com a deformação do tecido, o alinhamento das fibras de colágeno e o efeito de osmose ocasionado pela variação das cargas do tecido com a deformação. Os autores utilizaram o modelo para reproduzir computacionalmente a resposta viscoelástica do núcleo pulposo sob cisalhamento e o comportamento de inchaço observado experimentalmente nestes tecidos quando submetidos a uma variação na concentração de soluto do banho externo. Como principais conclusões, os autores destacaram a capacidade do modelo em reproduzir o comportamento mecânico viscoelástico, elástico e anisotrópico dos tecidos e, simultaneamente, incorporar fenômenos

básicos de osmose, adequando-se para aplicações em simulações envolvendo geometrias complexas com um tempo de processamento adequado.

Além das expansão da teoria bifásica para incorporar os efeitos eletroquímicos, abordagens mais simples para inclusão dos fenômenos de osmose foram investigadas anteriormente na literatura. Nesse contexto, o trabalho de [Galbusera et al. \(2011\)](#) realizou uma análise comparativa entre formulações numéricas bifásicas utilizadas para incorporar o fenômeno de inchaço em tecidos moles. Por meio de um modelo poroelástico de elementos finitos da região lombar de uma coluna vertebral, os autores compararam a formulação de [Wilson, Donkelaar e Huyghe \(2005\)](#) com outras duas abordagens para representação do efeito da pressão osmótica, aplicadas respectivamente nas pesquisas de [Schmidt et al. \(2010\)](#) e [Olsen e Oloyede \(2002\)](#). Três algoritmos distintos foram propostos: o primeiro com uma pressão de poro fixa nos contornos (FBP); o segundo com pressão osmótica fixa em todo disco ou apenas no núcleo (FOP/FOP-N); o terceiro considerando a pressão osmótica dependente da densidade de carga fixa e , portanto, da deformação sofrida pelo tecido (BS). Os modelos foram submetidos a dois ciclos de solicitações, representando o fenômeno de inchaço livre e cargas fisiológicas que simulam atividades cotidianas. Como principais resultados, os autores verificaram diferenças mínimas ao caracterizar o efeito de osmose como pressão de poro no contorno (FBP) ou uma parcela volumétrica fixa (FOP). Em contrapartida, o modelo bifásico de inchaço (BS) apresentou-se como uma formulação promissora, descrevendo de forma mais precisa os fenômenos fisiológicos que ocorrem no tecido. Finalmente, os autores concluíram que modelos simples (FBP e FOP/FOP-N) adequam-se em investigações onde o objeto de estudo consiste na cinemática do tecido, enquanto o modelo bifásico de inchaço (BS) pode ser aplicado em casos onde há conhecimento das propriedades do material e necessita-se de uma descrição fenomenológica mais assertiva.

A teoria bifásica de inchaço apresentou-se como uma formulação alternativa, permitindo um equilíbrio entre representatividade do modelo e custo computacional para execução de análises em geometrias de grande complexidade, ao mesmo tempo em que proporciona resultados similares aos obtidos por teorias trifásicas em diversos casos de solicitação ([WILSON; DONKELAAR; HUYGHE, 2005](#)). Neste âmbito, o trabalho de [Jacobs et al. \(2014\)](#) utilizou um equacionamento constitutivo de hiperelasticidade, juntamente com a formulação bifásica de inchaço, para desenvolver um modelo representativo em relação às diferentes respostas biomecânicas observadas em discos intervertebrais submetidos a múltiplas condições de solicitação. Para tal, os autores utilizaram o método *signed distance functions* para criar uma geometria tridimensional de alta complexidade, onde cada ponto é definido conforme um padrão obtido via imagens amostrais de alta resolução da estrutura a ser modelada. Utilizando propriedades de material otimizadas para a teoria bifásica de inchaço, o modelo foi validado através de comparações entre resultados experimentais e numéricos. Adicionalmente, foram investigados os papéis do núcleo pulposo (NP), anel

fibroso (AF) e da placa terminal cartilaginosa (CEP) na resposta geral do disco quando submetido a sollicitações químicas e mecânicas. Finalmente, em suas conclusões, os autores ressaltaram a aplicabilidade dos modelos numéricos para análises quantitativas sob as estruturas que compõem os tecidos moles, permitindo a obtenção de variáveis de interesse, aumentando a previsibilidade comportamental do tecido e, conseqüentemente contribuindo para o desenvolvimento das técnicas de medicina regenerativa.

2.2 Fundamentação Teórica

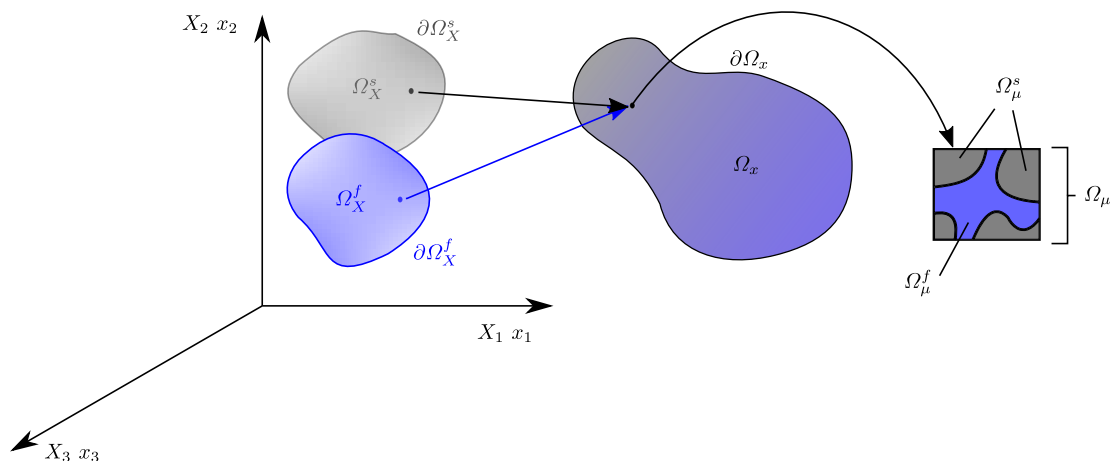
2.2.1 Modelagem bifásica

A mecânica do contínuo utilizada para a descrição do modelo bifásico é apresentada nesta seção com base nas literaturas clássicas relacionadas à temática (HOLZAPFEL, 2000; GURTIN; FRIED; ANAND, 2010; BONET; WOOD, 2008). Enfatiza-se que o objetivo desta Seção consiste em apresentar os princípios e hipóteses relevantes da formulação bifásica.

2.2.1.1 Conceitos gerais da mecânica do contínuo em um meio bifásico

Um contínuo bifásico composto por uma fase sólida e uma fluida é ilustrado na Figura 1 em suas configurações material (ou referencial) e espacial (ou deformada).

Figura 1 – Configuração material e espacial de contínuo bifásico.



Fonte: Autoria própria.

O eixo maiúsculo $\{X_1, X_2, X_3\}$ representa a configuração material, enquanto o minúsculo $\{x_1, x_2, x_3\}$ representa a configuração espacial do contínuo. Os superíndices s e f associam-se, respectivamente, às fases sólida e fluida do material. O contorno $\partial\Omega_X^i$ e a região Ω_X^i referem-se à cada fase i do contínuo na configuração material. Já o contorno $\partial\Omega_x$ e meio interno Ω_x relacionam-se à configuração espacial do contínuo (fases homogeneizadas). Finalmente, Ω_μ^i define um Elemento de Volume Representativo (EVR) que representa o contínuo em uma microescala da sua configuração espacial, podendo distinguir as regiões pertencentes a cada fase: Ω_μ^s e Ω_μ^f .

A posição espacial \mathbf{x}^i de cada uma das fases que compõem o contínuo é dada por

$$\mathbf{x}^i = \mathcal{X}^i(\mathbf{X}^i, t). \quad (2.1)$$

onde as variáveis t e \mathbf{X}^i representam o tempo e a posição na configuração material, respectivamente. O termo \mathcal{X}^i consiste na função de mapeamento de cada fase i .

O modelo bifásico homogeneizado não distingue a posição das fases na macroescala da configuração espacial. Sendo assim, mesmo que cada uma das fases possua uma função de mapeamento distinta, considera-se que sua posição espacial \mathbf{x}^i é coincidente, ou seja

$$\mathbf{x}^s = \mathbf{x}^f = \mathbf{x}. \quad (2.2)$$

Com a posição espacial mapeada, pode-se definir o campo de deslocamento \mathbf{u}^i na configuração espacial de cada fase conforme

$$\mathbf{u}^i = \mathbf{x}^i - \mathbf{X}^i = \mathcal{X}^i(\mathbf{X}^i, t) - \mathbf{X}^i. \quad (2.3)$$

Os campos espaciais de velocidade \mathbf{v}^i e aceleração \mathbf{a}^i são obtidos por meio da primeira e segunda derivada temporal do campo de deslocamento. Logo,

$$\mathbf{v}^i(\mathbf{x}^i, t) = \frac{d}{dt}\mathbf{u}^i(\mathbf{x}^i, t) = \dot{\mathcal{X}}^i(\mathbf{X}^i, t), \quad (2.4)$$

$$\mathbf{a}^i(\mathbf{x}^i, t) = \frac{d}{dt}\mathbf{v}^i(\mathbf{x}^i, t) = \ddot{\mathcal{X}}^i(\mathbf{X}^i, t), \quad (2.5)$$

onde as notações $(\dot{})$ e $(\ddot{})$ representam a primeira e segunda derivada temporal, respectivamente.

No modelo bifásico homogeneizado, ambas as fases (fluida e sólida) do contínuo ocupam a mesma posição \mathbf{x} em um determinado instante de tempo t , independentemente de sua posição na descrição material \mathbf{X}^i e da sua respectiva função de mapeamento. Portanto, uma função inversa de mapeamento, que retorna os pontos situados na descrição espacial para a configuração material também pode ser definida para cada fase conforme

$$\mathbf{X}^i = [\mathcal{X}^i(\mathbf{x}^i, t)]^{-1} = [\mathcal{X}^i(\mathbf{x}, t)]^{-1}. \quad (2.6)$$

Vale ressaltar que, apesar de ambas as fases ocuparem a mesma posição na descrição espacial, suas funções de mapeamento não são necessariamente idênticas, isto é, a seguinte relação pode ser válida:

$$\mathcal{X}^s \neq \mathcal{X}^f.$$

O gradiente de deformação de cada fase \mathbf{F}^i é definido conforme

$$\mathbf{F}^i = \frac{\partial \mathcal{X}^i(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{X}^i} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}^i}. \quad (2.7)$$

Através do gradiente de deformação, pode-se definir o Jacobiano volumétrico de cada fase J^i , como sendo o determinante do gradiente de deformação

$$J^i = \det(\mathbf{F}^i). \quad (2.8)$$

A transformação volumétrica material para espacial é relacionada através do Jacobiano volumétrico. Portanto, utilizando elementos diferenciais, tem-se que o volume de cada fase i na configuração espacial dv_x^i relaciona-se com o volume na configuração material dV_X^i por meio da seguinte relação:

$$dv_x^i = J^i dV_X^i. \quad (2.9)$$

No entanto, ambas as fases ocupam o mesmo volume na configuração espacial, logo a Eq. (2.9) pode ser escrita sem o índice i no termo espacial,

$$dv_x = J^i dV_X^i. \quad (2.10)$$

Outra propriedade importante do contínuo consiste na densidade aparente ρ^i de cada fase. Essa é definida como o diferencial de massa da fase dm_x^i dividido pelo diferencial de volume ocupado pela fase dv_x , ambos na configuração espacial. Desta maneira, tem-se que a densidade aparente para cada fase é dada por

$$\rho^i = \frac{dm_x^i}{dv_x}. \quad (2.11)$$

Pode-se relacionar a densidade aparente da configuração espacial de cada fase i com sua configuração material, obtendo a expressão:

$$\rho^i = \frac{dV_X^i}{dv_x} \rho_X^i = [J^i]^{-1} \rho_X^i, \quad (2.12)$$

Observando o EVR na sua configuração espacial (ver Fig. 1), pode-se distinguir o volume ocupado por cada fase (sólida e fluida) que compõem o contínuo. Desta forma, pode-se calcular a densidade intrínseca ρ_μ^i de cada fase conforme

$$\rho_\mu^i(\mathbf{x}, t) = \frac{dm_x^i}{dv_\mu^i}, \quad (2.13)$$

onde dv_μ^i é o elemento diferencial de volume ocupado pela fase i no EVR (microescala).

Em relação às variáveis volumétricas do contínuo, o volume total de um EVR na configuração espacial v_x , é definido pelo somatório do volume intrínseco de cada fase i . Portanto, na forma diferencial, tem-se que:

$$dv_x = \sum dv_\mu^i = dv_\mu^s + dv_\mu^f. \quad (2.14)$$

Para cada ponto espacial, pode-se definir uma respectiva fração volumétrica como sendo a razão entre o volume intrínseco da fase presente no EVR e o volume do elemento analisado na escala macroscópica. Desta maneira, tem-se a definição das grandezas de solidez ν^s e porosidade ν^f , respectivamente,

$$\nu^s = \frac{dv_\mu^s}{dv_x}, \quad (2.15)$$

$$\nu^f = \frac{dv_\mu^f}{dv_x}. \quad (2.16)$$

Adicionalmente, pode-se estabelecer uma relação entre a densidade aparente e intrínseca de cada fase i em sua configuração espacial, dada por

$$\rho^i(\mathbf{x}, t) = \nu^i \rho_\mu^i(\mathbf{x}, t). \quad (2.17)$$

2.2.1.2 Hipóteses do modelo bifásico

Na descrição finita do modelo bifásico considerado neste trabalho, as seguintes hipóteses são consideradas:

1. Incompressibilidade das fases:

$$\dot{\rho}_\mu^i = 0. \quad (2.18)$$

2. Mistura saturada:

$$\nu^s + \nu^f = 1. \quad (2.19)$$

3. Tensão efetiva total aditiva:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^s + \boldsymbol{\sigma}^f, \quad (2.20)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ representa o tensor de tensões de Cauchy como uma soma da tensão efetiva da fase sólida $\boldsymbol{\sigma}^s$ com a fase fluida $\boldsymbol{\sigma}^f$.

4. Tensão hidrostática no fluido, i.e:

$$\boldsymbol{\sigma}^f = -p\mathbf{I}, \quad (2.21)$$

onde p representa a pressão de poro.

5. Forças inerciais $\rho^i \mathbf{a}^i$ e forças de corpo \mathbf{b}_x nulas:

$$\rho^i \mathbf{a}^i = \mathbf{0}, \quad (2.22)$$

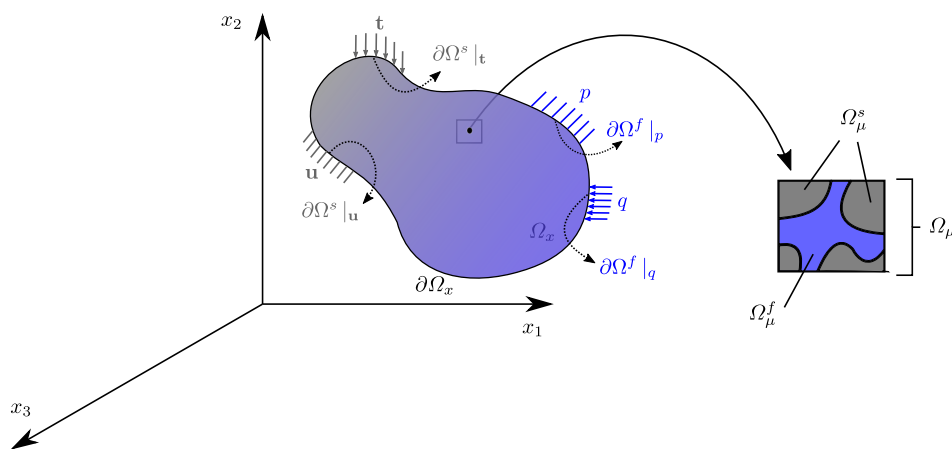
$$\mathbf{b}_x = \mathbf{0}. \quad (2.23)$$

2.2.1.3 Equações de estado

Considerando o modelo bifásico e as hipóteses apresentadas previamente, pode-se desenvolver o equacionamento referente às conservações de momento linear e angular, bem como o balanço de massa relacionado ao fluxo de fluido. O desenvolvimento matemático detalhado destes equacionamentos são demonstrados nos Apêndices B, C e D.

Sendo assim, por meio dos equacionamentos de balanço mecânico e conservação de massa, pode-se estruturar o modelo bifásico homogeneizado como um problema de valor de contorno (PVC), submetido às condições gerais ilustradas pela Figura 2.

Figura 2 – Condições de Contorno do Modelo Bifásico.



Fonte: Autoria própria.

Portanto, considerando as equações de estado referentes ao balanço mecânico, conservação de massa, velocidade relativa do fluido, tensão efetiva e de poro (apresentadas nos Apêndices B, C e D), juntamente com as condições de contorno referentes a força, deslocamento, pressão e fluxo de fluido (ilustradas na Figura 2), obtém-se a formulação

forte do meio bifásico dada por,

$$\left\{ \begin{array}{lll}
 \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, & \text{onde } \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T & \text{Conservação de momentos,} \\
 \operatorname{div} (\mathbf{v}^s + \boldsymbol{\omega}) = 0, & & \text{Conservação de massa,} \\
 \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^s + \boldsymbol{\sigma}^f, & \text{onde } \boldsymbol{\sigma}^f = -p\mathbf{I} & \text{Decomposição da tensão efetiva,} \\
 \boldsymbol{\omega} = \nu^f (\mathbf{v}^f - \mathbf{v}^s), & & \text{Velocidade relativa do fluido,} \\
 \\
 \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}, & \text{em } \partial\Omega^s |_{\mathbf{u}} & \text{CC Dirichlet sólido,} \\
 \bar{\mathbf{t}} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}, & \text{em } \partial\Omega^s |_{\mathbf{t}} & \text{CC Neumann sólido,} \\
 \\
 p = \bar{p}, & \text{em } \partial\Omega^f |_p & \text{CC Dirichlet fluido,} \\
 \bar{q} = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}, & \text{em } \partial\Omega^f |_{\bar{q}} & \text{CC Neumann fluido.}
 \end{array} \right. \quad (2.24)$$

2.2.2 Modelo de pressão osmótica

A equação constitutiva escolhida para representar o efeito de inchaço em tecidos moles consiste no modelo de pressão osmótica de Donnan, assumindo condições químicas ideais. O modelo foi escolhido devido ao fato de ser uma formulação já bem estabelecida e investigada na literatura ([WILSON; DONKELAAR; HUYGHE, 2005](#); [GALBUSERA et al., 2011](#); [CORTES et al., 2014](#)), além permitir uma validação direta entre os resultados obtidos por meio do código desenvolvido neste trabalho com aqueles fornecidos pelo programa comercial de elementos finitos FEBio ([MAAS et al., 2012](#)).

2.2.2.1 Pressão osmótica de Donnan

A teoria do equilíbrio de membranas de [Donnan \(1924\)](#) apresenta o caso onde uma solução iônica composta por duas fases é separada por uma membrana que é permeável ao solvente e íons, porém restringe o movimento de cargas internas constituídas por moléculas maiores. Esta situação ocasiona fenômenos eletroquímicos dados por uma distribuição heterogênea de íons, bem como o surgimento de uma pressão osmótica e diferença de potencial eletroquímico entre as fases ([OVERBEEK, 1956](#)).

Nesse contexto, a teoria de Donnan adequa-se ao fenômeno de inchaço observado em tecidos moles. Esse comportamento ocorre devido a presença de cargas negativamente carregadas fixas na matriz extracelular (GAGs). Estas cargas representam a chamada densidade de cargas fixas do tecido (FCD), que por sua vez, estabelece um fluxo de íons entre a matriz sólida e fluido intersticial, visando neutralizar o desequilíbrio eletroquímico entre as fases ([LAI; HOU; MOW, 1991](#); [HUYGHE; JANSSEN, 1997](#)). Entretanto, essa redistribuição de cargas torna a concentração de íons internos à matriz sólida maior que a concentração do banho externo. Este desequilíbrio iônico ocasiona a denominada pressão osmótica de Donnan no fluido intersticial, constituindo um mecanismo fenomenológico que contribui

diretamente para o comportamento de inchaço observado no tecido (GALBUSERA et al., 2011; WILSON; DONKELAAR; HUYGHE, 2005; LAI; HOU; MOW, 1991).

Em condições hipertônicas, ou seja, em um meio onde a concentração externa de íons é muito maior que a densidade de carga fixa interna ao tecido, a pressão osmótica de Donnan torna-se negligenciável. Por outro lado, em condições hipotônicas, a pressão osmótica assume um valor a ser considerado na tensão volumétrica (LAI; HOU; MOW, 1991; ZIMMERMAN et al., 2021). O modelo matemático da pressão osmótica de Donnan satisfaz este comportamento e, adicionalmente, estabelece uma dependência entre carga interna do tecido e a deformação. Esta relação é relevante, já que a concentração interna de íons varia com o fluxo de fluido, que por sua vez é diretamente afetado pela deformação no tecido. Portanto, considerar uma parcela que compõe a pressão de poro como um termo dependente da densidade de carga fixa no tecido e da deformação volumétrica aumenta a representatividade da formulação bifásica quanto ao fenômeno eletroquímico de inchaço e ao comportamento biomecânico geral dos tecidos moles.

Ademais, o modelo bifásico de inchaço (com pressão osmótica de Donnan) é uma teoria macroscópica, ou seja, não considera a influência de estruturas e campos elétricos a nível molecular (ZIMMERMAN et al., 2021). Sendo assim, a teoria não considera o fenômeno de repulsão química entre cadeias de glicosaminoglicanos internas ao tecido, que também contribui diretamente com o comportamento de inchaço observado nos tecidos (LAI; HOU; MOW, 1991). Apesar disso, investigações na literatura, mostram adequação entre teoria bifásica de inchaço e a formulação trifásica (que considera os campos moleculares) na representação do comportamento de inchaço em tecidos moles sob solicitações mecânicas e químicas (WILSON; DONKELAAR; HUYGHE, 2005).

Sendo assim, considerando a teoria de Lanir (1987) no comportamento biomecânico dos tecidos, pode-se assumir que o movimento de íons ocorre muito mais rápido que o fluxo de fluido ou deformações da fase sólida, fazendo com que as cargas móveis internas ao tecido entrem em equilíbrio químico com o banho externo praticamente de forma instantânea (LANIR, 1987; WILSON; DONKELAAR; HUYGHE, 2005; GALBUSERA et al., 2011). Seguindo esta hipótese, amplamente utilizada por investigações recentes (WILSON; DONKELAAR; HUYGHE, 2005; GALBUSERA et al., 2011; CORTES et al., 2014; ZIMMERMAN et al., 2021), o presente trabalho utiliza uma formulação bifásica de inchaço com uma forma simplificada da equação de pressão osmótica de Donnan descrita por Huyghe e Janssen (1997):

$$\Delta\pi = \phi_{int}RT_{int}\sqrt{c_F^2 + 4\left(\frac{\gamma_{ext}^{\pm}}{\gamma_{int}^{\pm}}\right)^2 c_e^2} - 2\phi_{ext}RT_{ext}c_e, \quad (2.25)$$

onde $\Delta\pi$ representa a diferença de pressão osmótica interna e externa ao tecido, ϕ_{int} e ϕ_{ext} são os coeficientes de osmose interno e externo, R é a constante universal dos gases

perfeitos, T_{int} e T_{ext} consistem na temperatura interna e externa respectivamente, γ_{int} e γ_{ext} representam os coeficientes de atividade externa e interna respectivamente, c_e é concentração do banho externo e c_F é densidade de carga fixa (FCD).

Neste modelo, a pressão osmótica no tecido depende diretamente da deformação volumétrica, por meio da densidade de carga fixa (FCD), dada por

$$c_F = c_{F0} \left[\frac{\nu_0^f}{\nu_0^f - (1 - J)} \right], \quad (2.26)$$

onde ν_0^f é a fração volumétrica de fluido inicial presente no tecido, c_{F0} a densidade de carga fixa na referência e J o Jacobiano volumétrico.

Como forma de facilitar o cálculo da pressão osmótica, será considerado um cenário físico-químico ideal de osmose. Sendo assim, assume-se as seguintes simplificações em relação às variáveis da Eq. (2.25).

1. Coeficientes de osmose (ϕ_{int} e ϕ_{ext}): essas variáveis são funções que representam desvios do cenário físico-químico ideal. Elas podem depender da concentração do banho externo, da quantidade de íons no tecido e a densidade de carga fixa. A exemplo de outras investigações encontradas na literatura (LAI; HOU; MOW, 1991; ZIMMERMAN et al., 2021), a formulação deste trabalho não fará distinção entre valores internos e externos do coeficiente de pressão osmótica, considerando condições físico-químicas ideais.

$$\phi_{int} = \phi_{ext} = \phi = 1. \quad (2.27)$$

2. Coeficientes de atividade do meio (γ_{int}^\pm e γ_{ext}^\pm): de forma semelhante aos coeficientes de osmose, os parâmetros de atividade do meio também representam condições ideais de osmose. Quando considerado um cenário físico-químico ideal, a razão entre essas variáveis torna-se unitária (ATESHIAN et al., 2009). Essa simplificação foi utilizada para investigação do efeito de inchaço em cartilagens submetidas a um banho isotônico de *NaCl* (0.15M) (LAI; HOU; MOW, 1991; WILSON; DONKELAAR; HUYGHE, 2005; GALBUSERA et al., 2011; ZIMMERMAN et al., 2021). Adicionalmente, essa simplificação é suportada por resultados experimentais de Maroudas e Evans (1972), na pesquisa os autores analisaram o coeficiente de atividade do cloreto de sódio na cartilagem (interno) e identificaram variações de baixa magnitude em função da concentração do sal no banho externo. Ademais, os autores também constataram que esses coeficientes assumem valores relativamente próximos quando a solução externa possui a concentração de 0.15M NaCl.

$$\frac{\gamma_{ext}^\pm}{\gamma_{int}^\pm} = 1. \quad (2.28)$$

3. Temperatura interna e externa (T_{int} e T_{ext}): considera-se que as temperaturas interna e externa do tecido são equivalentes.

$$T_{int} = T_{ext} = T. \quad (2.29)$$

4. Osmolaridade do banho (\bar{c}): representando a concentração total de solutos presentes no banho externo, a osmolaridade do banho será incluída na formulação analogamente à aproximação implementada no programa de simulação numérica biomecânica FEBio (MAAS et al., 2012). Sendo assim, a osmolaridade do banho é aproximada para o dobro da concentração externa em massa de soluto por volume.

$$\bar{c} = 2c_{ext}. \quad (2.30)$$

Finalmente, levando em consideração as simplificações das Eq. (2.27), Eq. (2.28), Eq. (2.29) e Eq. (2.30), tem-se a equação da pressão osmótica de equilíbrio de Donnan em condições físico-químicas ideais:

$$\Delta\pi = RT \left(\sqrt{c_F^2 + \bar{c}^2} - \bar{c} \right). \quad (2.31)$$

Este modelo será utilizado na formulação bifásica de inchaço como forma de incluir o fenômeno na simulação biomecânica de um tecido mole sobre solicitações químicas e mecânicas.

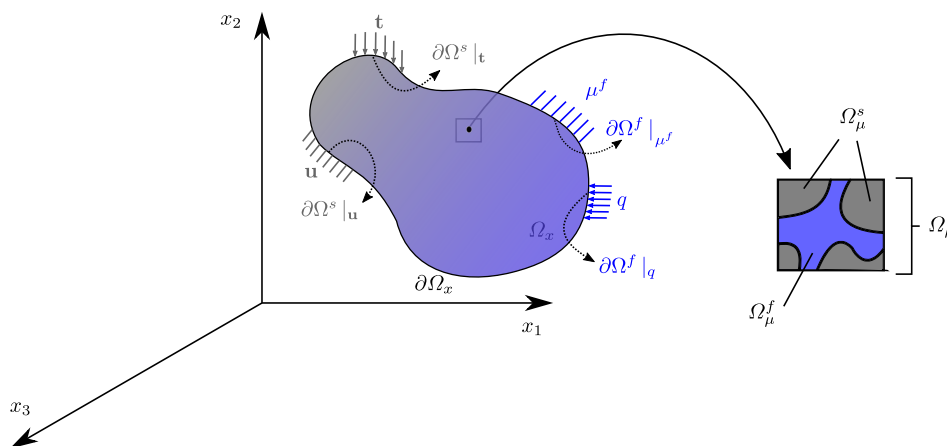
3 Modelagem bifásica em deformações finitas considerando o fenômeno de pressão osmótica de Donnan

3.1 Formulação no contínuo

A formulação no contínuo utilizada para descrever o modelo bifásico considerando a pressão osmótica de Donnan é análoga ao equacionamento descrito previamente na Seção 2.2.1, necessitando apenas a inserção da variável de pressão osmótica como uma parcela da pressão de poro, alteração das condições de contorno nas equações de governo (formulação forte) e a posterior execução dos cálculos de linearização para obtenção da formulação integral.

Sendo assim, primeiramente considera-se um contínuo bifásico composto por uma matriz sólida incompressível, completamente saturada por um fluido invíscido e também incompressível, submetido às condições de contorno ilustradas na Figura 3.

Figura 3 – Condições de Contorno do Modelo Bifásico de Inchaço.



Fonte: Autoria própria.

Apesar de similar à formulação bifásica apresentada na Seção 2.2.1, o modelo bifásico de inchaço diferencia-se da formulação clássica primeiramente nas condições de

contorno referentes à fase fluida. A condição de Dirichlet do fluido não mais refere-se à pressão de poro total p , e sim a uma parcela dessa, denominada potencial químico da água μ^f . Desta maneira, a pressão de poro total da fase fluida passa a ser composta por duas parcelas distintas. A primeira referente ao potencial químico da fase, e a segunda representada pela pressão osmótica $\Delta\pi$, originada pela diferença entre a concentração do meio externo e a presença de cargas fixas internas ao tecido. Portanto, tem-se a seguinte relação para a pressão de poro

$$p = \mu^f + \Delta\pi. \quad (3.1)$$

Segundo Sandler (2017), a energia molar parcial de Gibbs em uma determinada solução é denominada de potencial químico e comumente designada pela letra μ . Sendo assim, no contexto da teoria bifásica de inchaço, o potencial químico da água μ^f representa uma medida de pressão hidrostática relacionada à energia livre de Gibbs contida em cada molécula da fase fluida. Por outro lado, conforme exposto anteriormente na Seção 2.2.2, a pressão osmótica é ocasionada devido a um desequilíbrio químico induzido pela presença de cargas negativas na matriz sólida do tecido, podendo ser obtida por meio de equações constitutivas, como por exemplo, a equação da pressão osmótica de Donnan em condições ideais representada pela Eq (2.31).

Portanto, analogamente a modelagem bifásica clássica apresentada na Seção 2.2.1, a formulação forte (ou diferencial) no contínuo representando o modelo bifásico de inchaço pode ser definida por meio de um problema de valor de contorno (PVC) composto pelas equações constitutivas que governam o comportamento das fases sólida e fluida, juntamente com o seguinte conjunto de equações:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{div } \boldsymbol{\sigma} = 0, & \text{onde } \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \quad \text{Conservação de momentos,} \\ \text{div } (\mathbf{v}^s + \boldsymbol{\omega}) = 0, & \text{Conservação de massa,} \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^s + \boldsymbol{\sigma}^f, & \text{onde } \boldsymbol{\sigma}^f = -(\mu^f + \Delta\pi)\mathbf{I} \quad \text{Decomposição da tensão efetiva,} \\ \boldsymbol{\omega} = \nu^f(\mathbf{v}^f - \mathbf{v}^s), & \text{Velocidade relativa do fluido,} \\ \\ \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}, & \text{em } \partial\Omega^s|_{\mathbf{u}} \quad \text{CC Dirichlet sólido,} \\ \bar{\mathbf{t}} = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}, & \text{em } \partial\Omega^s|_{\mathbf{t}} \quad \text{CC Neumann sólido,} \\ \\ \mu^f = \bar{\mu}^f, & \text{em } \partial\Omega^f|_{\mu^f} \quad \text{CC Dirichlet fluido,} \\ \bar{q} = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}, & \text{em } \partial\Omega^f|_{\bar{q}} \quad \text{CC Neumann fluido.} \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Para resolver o PVC definido pelo conjunto de Eqs. (3.2) utilizando o método de elementos finitos, é necessário conhecer as condições de contorno e estabelecer as relações constitutivas que governam o comportamento de ambas as fases. Adicionalmente, deve-se

obter a forma integral do problema, também denominada como formulação fraca, para posterior solução numérica.

Sendo assim, para obtenção do equacionamento integral, pode-se utilizar o Princípio dos Trabalhos Virtuais (PTV) na formulação forte. Aplicando o PTV no equacionamento diferencial, conforme detalhado no Apêndice E, obtêm-se a seguinte formulação fraca para o modelo bifásico de inchaço

$$\begin{cases} \delta W^s = \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv - \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta\pi) \text{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv - \int_{\partial\Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u} \in \mathcal{K}^u, \\ \delta W^f = \int_{\Omega_x} \text{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f \, dv - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x \delta \mu^f \, dv + \int_{\partial\Omega_x} \bar{q} \delta \mu^f \, ds = 0 \quad \forall \delta \mu^f \in \mathcal{K}^{\mu^f}, \end{cases} \quad (3.3)$$

onde \mathcal{K}^u e \mathcal{K}^{μ^f} são, respectivamente, os espaços de deslocamento e potencial químico admissíveis para o modelo.

3.2 Equações constitutivas

Para permitir a solução do PTV apresentado pelo conjunto de Eqs. (3.3) é necessário, além de conhecer as condições de contorno, complementar os equacionamentos de balanço mecânico (Eq. B.7) e conservação da massa (Eq. D.21) com relações que governem o comportamento de deformação da fase sólida e o fluxo da fase fluida. Sendo assim, nesta seção são apresentadas algumas equações constitutivas já estabelecidas na literatura (BONET; WOOD, 2008; HOLZAPFEL, 2000) e comumente utilizadas para modelagens bifásicas (MAAS et al., 2023)

3.2.1 Modelos constitutivos para a fase sólida

A energia livre de Helmholtz ou energia de deformação Ψ representa a energia armazenada no material após a deformação e pode ser definida pelo trabalho realizado pelas solicitações de tensão \mathbf{P} para deformar o material em um determinado intervalo de tempo $[t_0, t]$:

$$\Psi = \int_{t_0}^t \dot{\Psi} \, dt. \quad (3.4)$$

Considerando a derivada temporal do potencial energético, pode-se obter um tensor de segunda ordem representando uma grandeza de tensão na configuração material, isto é, o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff. Para tal, inicia-se com a derivada temporal de 3.4 considerando o potencial elástico como função da deformação. Sendo assim, pela regra da cadeia:

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} : \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} : \dot{\mathbf{F}}. \quad (3.5)$$

Da Eq. (3.5) define-se o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{P} como função da a energia da deformação do contínuo:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \Psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}}. \quad (3.6)$$

A partir da Eq. (3.6) pode-se utilizar as relações estabelecidas pela mecânica do contínuo para modelos conservativos visando obter outras grandezas de tensão, como por exemplo, o segundo tensor de Piola Kirchhoff e o tensor de Cauchy.

3.2.1.1 Neo-Hookean compressível

O modelo de Neo-Hookean consiste em um contínuo elástico cuja energia de deformação é descrita por,

$$\Psi = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3) - \mu \ln J + \frac{\lambda}{2}(\ln J)^2, \quad (3.7)$$

onde o Jacobiano volumétrico J é calculado conforme a Eq. (2.8). O invariante I_1 é obtido conforme o seguinte equacionamento:

$$I_1 = \text{tr } \mathbf{C} = \text{tr}(\mathbf{F}^T \mathbf{F}). \quad (3.8)$$

E os coeficientes de Lamé μ e λ são calculados por meio do módulo de elasticidade E e do coeficiente de Poisson ν , conforme:

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \quad (3.9)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}, \quad (3.10)$$

O segundo tensor de Piola-Kirchhoff \mathbf{S} é calculado por meio da Eq. 3.6, resultando em: (HOLZAPFEL, 2000; GURTIN; FRIED; ANAND, 2010; BONET; WOOD, 2008)

$$\mathbf{S} = \mu(\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1}) + \lambda(\ln J)\mathbf{C}^{-1}. \quad (3.11)$$

Utilizando a transformação de Piola (HOLZAPFEL, 2000; GURTIN; FRIED; ANAND, 2010; BONET; WOOD, 2008), verifica-se que o tensor de tensões de Cauchy é obtido conforme:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\mu}{J}(\mathbf{b} - \mathbf{I}) + \frac{\lambda}{J}(\ln J)\mathbf{I}. \quad (3.12)$$

3.2.2 Modelos constitutivos para a fase fluida

3.2.2.1 Lei de Darcy

A lei de Darcy governa o fluxo do fluido estabelecendo uma relação linear entre este e a grandeza que gera o movimento relativo interno ao contínuo poroso (COUSSY,

2004). Sendo assim, a presente formulação utiliza a lei de Darcy conforme implementado nas investigações de [Wilson, Donkelaar e Huyghe \(2005\)](#) e [Galbusera et al. \(2011\)](#)

$$\boldsymbol{\omega} = -\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f, \quad (3.13)$$

onde relaciona-se linearmente a velocidade relativa da fase fluida presente no meio poroso com o gradiente espacial do potencial químico. Essa relação é construída por meio de um tensor espacial de segunda ordem que representa a permeabilidade $\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}}$ do meio poroso de acordo com um modelo constitutivo pré-determinado.

3.2.2.2 Modelo de permeabilidade Isotrópica Constante

O modelo de permeabilidade isotrópica constante assume que a permeabilidade do meio poroso não sofre alterações na configuração espacial do contínuo ([HOLMES; MOW, 1990](#); [MAAS et al., 2023](#); [CARNIEL et al., 2023](#)). Desta maneira, o equacionamento para o tensor de segunda ordem de permeabilidade consiste em

$$\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} = k_0 \mathbf{I}, \quad (3.14)$$

onde k_0 é a propriedade de permeabilidade hidráulica do meio.

3.3 Formulação discreta

3.3.1 Discretização temporal e método de linearização

Considerando um intervalo temporal $[t_n, t_{n+1}]$, onde cada tempo t_{n+1} consiste no instante anterior t_n somado a um incremento Δt , pode-se reescrever a formulação integral do problema bifásico de inchaço apresentada pela Eq. (3.3), discretizando-a no tempo conforme:

$$\begin{cases} \delta W_{n+1}^s = \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^s : \delta \mathbf{e}_{n+1} dv - \int_{\Omega_x} (\mu_{n+1}^f + \Delta \pi_{n+1}) \text{tr}(\delta \mathbf{e}_{n+1}) dv - \int_{\partial \Omega_x} \bar{\mathbf{t}}_{n+1} \cdot \delta \mathbf{u}_{n+1} ds = 0, \\ \delta W_{n+1}^f = \int_{\Omega_x} \text{div}(\mathbf{v}_{n+1}^s) \delta \mu_{n+1}^f dv - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega}_{n+1} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} (\delta \mu_{n+1}^f) dv + \int_{\partial \Omega_x} \bar{\mathbf{q}}_{n+1} \delta \mu_{n+1}^f ds = 0. \end{cases} \quad (3.15)$$

Com o objetivo de resolver o equacionamento incremental do equilíbrio de momento e massa, utiliza-se o método de solução numérica de Newton-Raphson. Portanto, é necessário obter as derivadas direcionais da formulação integral em relação aos incrementos de potencial químico $\Delta \mu^f$ e deslocamento $\Delta \mathbf{u}$. O desenvolvimento matemático relacionado à obtenção das derivadas de *Gâteaux* para a formulação integral de inchaço é apresentado no Apêndice F.

Conhecendo as derivadas direcionais supramencionadas, pode-se utilizar uma série de Taylor, truncada nos termos de primeira ordem, a partir dos campos virtuais de

deslocamento e potencial químico para descrever o problema na configuração espacial, isto é,

$$\begin{aligned} \delta W_{n+1}^s + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\delta W_{n+1}^s] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} + \frac{\partial}{\partial \mu_{n+1}^f} [\delta W_{n+1}^s] \cdot \Delta \mu_{n+1}^f &= 0 \\ \delta W_{n+1}^f + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\delta W_{n+1}^f] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} + \frac{\partial}{\partial \mu_{n+1}^f} [\delta W_{n+1}^f] \cdot \Delta \mu_{n+1}^f &= 0, \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde as derivadas direcionais são elencadas abaixo,

- A derivada direcional de δW_{n+1}^s em relação ao deslocamento \mathbf{u}_{n+1} na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}_{n+1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\delta W_{n+1}^s] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} &= \int_{\Omega_x} \delta \mathbf{e}_{n+1} : \mathbb{C}_{x_{n+1}} : \Delta \mathbf{e}_{n+1} dv \\ &+ \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^s : [\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u}_{n+1} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u}_{n+1}] dv \\ &- \int_{\Omega_x} (\mu_{n+1}^f + \Delta \pi_{n+1}) \mathbf{I} : [\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u}_{n+1} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u}_{n+1}] dv \\ &- \int_{\Omega_x} (\mu_{n+1}^f + \Delta \pi_{n+1} + \lambda_{n+1}^{op}) \operatorname{div} \delta \mathbf{u}_{n+1} \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1} dv \\ &+ \int_{\Omega_x} 2(\mu_{n+1}^f + \Delta \pi_{n+1}) (\mathbf{I} \odot \mathbf{I}) \Delta \mathbf{e}_{n+1} : \delta \mathbf{e}_{n+1} dv. \end{aligned} \quad (3.17)$$

- A derivada direcional de δW_{n+1}^s em relação ao potencial químico da fase fluida μ_{n+1}^f na direção do incremento $\Delta \mu_{n+1}^f$

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{n+1}^f} [\delta W_{n+1}^s] \cdot \Delta \mu_{n+1}^f = - \int_{\Omega_x} \Delta \mu_{n+1}^f \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}_{n+1}) dv. \quad (3.18)$$

- A derivada direcional de δW_{n+1}^f em relação ao potencial químico da fase fluida μ_{n+1}^f na direção do incremento $\Delta \mu_{n+1}^f$

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{n+1}^f} [\delta W_{n+1}^f] \cdot \Delta \mu_{n+1}^f = \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu_{n+1}^f \cdot (\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} : \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mu_{n+1}^f) dv. \quad (3.19)$$

- A derivada direcional de δW_{n+1}^f em relação ao deslocamento \mathbf{u}_{n+1} na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}_{n+1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\delta W_{n+1}^f] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} &= \int_{\Omega_x} \frac{\delta \mu_{n+1}^f}{\Delta t} \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1} dv \\ &- \int_{\Omega_x} \delta \mu_{n+1}^f \operatorname{tr} [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}_{n+1}^s \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}] dv \\ &+ \int_{\Omega_x} (\operatorname{div} \mathbf{v}_{n+1}^s) (\operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1}) \delta \mu_{n+1}^f dv \\ &+ \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu_{n+1}^f \cdot (\mathbb{K}_{x_{n+1}} : \Delta \mathbf{e}_{n+1}) \nabla_{\mathbf{x}} \mu_{n+1}^f dv. \end{aligned} \quad (3.20)$$

3.3.2 Discretização espacial via método de elementos finitos

Com o objetivo de obter uma solução aproximada para a formulação incremental demonstrada na Eq. (3.15), um método numérico de aproximação por elementos finitos (MEF) é empregado de forma análoga aos trabalhos de Klahr (2022) e Thiesen (2021). Sendo assim, utiliza-se uma discretização espacial com elementos finitos mistos, contendo graus de liberdade relacionados ao deslocamento nodal do sólido \mathbf{u} e ao potencial químico do fluido μ^f . Enfatiza-se, também, que o sistema acoplado pode ser formulado de forma monolítica, isto é, ambos as equações são resolvidas simultaneamente, ou de forma sequencial, onde a solução dos equacionamentos integrais é realizada de forma separada.

O passo inicial para discretizar espacialmente a formulação bifásica de inchaço consiste na construção de vetores dos campos de deslocamento e potencial químico aproximados por funções de interpolação definidas localmente em cada elemento e presente na malha de elementos finitos

$$\mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \mathbf{N}_{n+1}^{u(e)} \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.21)$$

$$\mu_{n+1}^{f(e)} = \left[\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^{f(e)}} \right]^T \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)}. \quad (3.22)$$

Considerando elementos isoparamétricos, utilizam-se as mesmas funções de interpolação para aproximar os campos virtuais de deslocamento e potencial químico, bem como seus respectivos campos incrementais

$$\delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \mathbf{N}_{n+1}^{u(e)} \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.23)$$

$$\delta \mu_{n+1}^{f(e)} = \left[\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^{f(e)}} \right]^T \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)}, \quad (3.24)$$

$$\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \mathbf{N}_{n+1}^{u(e)} \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.25)$$

$$\Delta \mu_{n+1}^{f(e)} = \left[\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^{f(e)}} \right]^T \Delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)}, \quad (3.26)$$

onde $\mathbf{q}_{n+1}^{(e)}$ e $\boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)}$ são vetores que contém os valores nodais de deslocamento e potencial químico. Considerando um cenário tridimensional, cada nó de deslocamento do elemento possui três graus de liberdade, enquanto os nós referentes à fase fluida são compostos por um grau de liberdade.

$$\mathbf{q}_{n+1}^{(e)} = \left[q_{x_1}^1 \ q_{x_2}^1 \ q_{x_3}^1 \ q_{x_1}^2 \ q_{x_2}^2 \ q_{x_3}^2 \ \dots \ q_{x_1}^{n^u} \ q_{x_2}^{n^u} \ q_{x_3}^{n^u} \right]^T, \quad (3.27)$$

$$\boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} = \left[\mu^{f1} \ \mu^{f2} \ \mu^{f3} \ \dots \ \mu^{fn^{\mu^f}} \right]^T, \quad (3.28)$$

onde n^u representa o número de nós referentes ao deslocamento, e n^{μ^f} consiste no número de nós relacionados ao potencial químico do elemento.

Outra operação necessária para a aproximação por elementos finitos consiste no cálculo do traço da variação da deformação de Euler-Almansi $\delta \mathbf{e}$. Sendo assim, para essa aproximação por cálculo matricial é definida a matriz $\mathbf{h}_{n+1}^{u(e)}$, cuja operação fica,

$$\text{tr} \left(\delta \mathbf{e}_{n+1}^{(e)} \right) = \mathbf{h}_{n+1}^{u(e)T} \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.40)$$

onde

$$\mathbf{h}_{n+1}^{u(e)T} = \left[\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x_1} \quad \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x_2} \quad \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x_3} \quad \cdots \quad \frac{\partial N_{n^u}^{(e)}}{\partial x_3} \right]_{[1 \times 3n^u]}. \quad (3.41)$$

Retomando a aproximação do campo de deslocamentos globais do elemento, dado pela Eq. (3.21), pode-se obter uma relação similar referente ao campo de velocidades do sólido por meio da taxa temporal do campo de deslocamentos e das mesmas funções de interpolação.

$$\mathbf{v}_{n+1}^{s(e)} = \mathbf{N}_{n+1}^{u(e)} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.42)$$

onde $\dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)}$ é o campo de velocidades nodais da fase sólida.

Outras operações necessárias à discretização por elementos finitos consistem nos gradientes dos campos virtuais de deslocamento e potencial químico, bem como os campos incrementais destas grandezas. Sendo assim, essas operações são aproximadas por meio das seguintes equações:

$$\underline{\nabla}_x \delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.43)$$

$$\underline{\nabla}_x \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.44)$$

$$\underline{\nabla}_x \delta \mu_{n+1}^{f(e)} = \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)} \delta \mu_{n+1}^{f(e)}, \quad (3.45)$$

$$\underline{\nabla}_x \Delta \mu_{n+1}^{f(e)} = \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)} \Delta \mu_{n+1}^{f(e)}, \quad (3.46)$$

onde os gradientes dos deslocamentos virtuais e seus incrementos podem ser representados em cada elemento por tensores de segunda ordem, em notação de Voigt, conforme

$$\underline{\nabla}_x \delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \left[\frac{\partial \delta u_1}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \delta u_2}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \delta u_2}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \delta u_2}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \delta u_3}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \delta u_3}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \delta u_3}{\partial x_3} \right]^T, \quad (3.47)$$

$$\underline{\nabla}_x \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \left[\frac{\partial \Delta u_1}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Delta u_1}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \Delta u_1}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \Delta u_2}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Delta u_2}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \Delta u_2}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \Delta u_3}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Delta u_3}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \Delta u_3}{\partial x_3} \right]^T. \quad (3.48)$$

Já os gradientes espaciais em relação ao potencial químico e ao seu incremento são representados conforme,

$$\underline{\nabla}_x \delta \mu_{n+1}^{f(e)} = \left[\frac{\partial \delta \mu^f}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \delta \mu^f}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \delta \mu^f}{\partial x_3} \right]^T, \quad (3.49)$$

$$\underline{\nabla}_x \Delta \mu_{n+1}^{f(e)} = \left[\frac{\partial \Delta \mu^f}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Delta \mu^f}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \Delta \mu^f}{\partial x_3} \right]^T. \quad (3.50)$$

Aplicando a operação de gradiente espacial nas matrizes $\mathbf{N}_{n+1}^{u(e)}$ e $\mathbf{N}_{n+1}^{\mu f(e)}$, obtêm-se as matrizes $\mathbf{G}_{n+1}^{u(e)}$ e $\mathbf{H}_{n+1}^{\mu f(e)}$ conforme:

$$\mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \dots \\ \frac{\partial x_1}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_1}{\partial N_2^u} & 0 & 0 & \dots \\ \frac{\partial x_2}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_2}{\partial N_2^u} & 0 & 0 & \dots \\ \frac{\partial x_3}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_3}{\partial N_2^u} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_1} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\partial x_1}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_1}{\partial N_2^u} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\partial x_2}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_2}{\partial N_2^u} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\partial x_3}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_3}{\partial N_2^u} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_1} & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\partial x_1}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_1}{\partial N_2^u} & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\partial x_2}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_2}{\partial N_2^u} & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\partial x_3}{\partial N_1^u} & 0 & 0 & \frac{\partial x_3}{\partial N_2^u} & \dots \end{bmatrix}_{[9 \times 3n^u]}, \quad (3.51)$$

$$\mathbf{H}_{n+1}^{\mu f(e)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^{\mu f}}{\partial x_1} & \frac{\partial N_2^{\mu f}}{\partial x_1} & \frac{\partial N_3^{\mu f}}{\partial x_1} & \dots \\ \frac{\partial x_1}{\partial N_1^{\mu f}} & \frac{\partial x_1}{\partial N_2^{\mu f}} & \frac{\partial x_1}{\partial N_3^{\mu f}} & \dots \\ \frac{\partial x_2}{\partial N_1^{\mu f}} & \frac{\partial x_2}{\partial N_2^{\mu f}} & \frac{\partial x_2}{\partial N_3^{\mu f}} & \dots \\ \frac{\partial x_3}{\partial N_1^{\mu f}} & \frac{\partial x_3}{\partial N_2^{\mu f}} & \frac{\partial x_3}{\partial N_3^{\mu f}} & \dots \end{bmatrix}_{[3 \times n^{\mu f}]}. \quad (3.52)$$

Os gradientes transpostos do campo virtual de deslocamentos e seu incremento são respectivamente,

$$\underline{\nabla_x^T \delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)}} = \left[\frac{\partial \delta u_1}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \delta u_2}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \delta u_3}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \delta u_2}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \delta u_3}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \delta u_2}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \delta u_3}{\partial x_3} \right]^T, \quad (3.53)$$

$$\underline{\nabla_x^T \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)}} = \left[\frac{\partial \Delta u_1}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Delta u_2}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Delta u_3}{\partial x_1} \quad \frac{\partial \Delta u_1}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \Delta u_2}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \Delta u_3}{\partial x_2} \quad \frac{\partial \Delta u_1}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \Delta u_2}{\partial x_3} \quad \frac{\partial \Delta u_3}{\partial x_3} \right]^T, \quad (3.54)$$

sendo que esses tensores de segunda ordem podem ser aproximados por

$$\underline{\nabla_x^T \delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)}} = \mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)} \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.55)$$

$$\underline{\nabla_x^T \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)}} = \mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)} \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.56)$$

onde a matriz de mapeamento $\mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)}$ é definida como:

$$\mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_1} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_1} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_1} & \dots \\ \frac{\partial N_1^u}{\partial x_2} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_2} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_2} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_2} & \dots \\ \frac{\partial N_1^u}{\partial x_3} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_3} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_3} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1^u}{\partial x_3} & 0 & 0 & \frac{\partial N_2^u}{\partial x_3} & \dots \end{bmatrix}_{[9 \times 3n^u]}. \quad (3.57)$$

O gradiente transposto do campo de velocidade também pode ser aproximado por meio da matriz $\mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)}$, conforme:

$$\nabla_x^T \mathbf{v}_{n+1}^{s(e)} = \mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)}. \quad (3.58)$$

A operação de divergente do campo virtual de deslocamentos e do campo incremental são aproximados por:

$$\operatorname{div} \delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.59)$$

$$\operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} = \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}, \quad (3.60)$$

onde a matriz $\mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T}$, obtida por meio da operação de divergente em relação às coordenadas espaciais na matriz $\mathbf{N}_{n+1}^{u(e)}$, é estabelecida como

$$\mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} = \mathbf{h}_{n+1}^{u(e)T} = \left[\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x_1} \quad \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x_2} \quad \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x_3} \quad \dots \quad \frac{\partial N_{n^u}^{(e)}}{\partial x_3} \right]_{[1 \times 3n^u]}. \quad (3.61)$$

Adicionalmente, a matriz $\mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T}$ também pode ser utilizada para mapear a operação de divergência da velocidade do sólido, obtendo a seguinte aproximação:

$$\operatorname{div} \mathbf{v}_{n+1}^{s(e)} = \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)}. \quad (3.62)$$

Considerando a formulação incremental da Eq. (3.15), pode-se discretizar espacialmente a forma fraca do problema da seguinte maneira:

$$\begin{cases} \delta W_{n+1}^{s(e)} = \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{s(e)} : \delta \mathbf{e}_{n+1}^{(e)} dv - \int_{\Omega_x} (\mu_{n+1}^{f(e)} + \Delta \pi_{n+1}^{(e)}) \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}_{n+1}^{(e)}) dv - \int_{\partial \Omega_x} \bar{\mathbf{t}}_{n+1}^{(e)} \cdot \delta \mathbf{u}_{n+1}^{(e)} ds = 0, \\ \delta W_{n+1}^{f(e)} = \int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}_{n+1}^{s(e)}) \delta \mu_{n+1}^{f(e)} dv - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(e)} \cdot \nabla_x (\delta \mu_{n+1}^{f(e)}) dv + \int_{\partial \Omega_x} \bar{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)} \delta \mu_{n+1}^{f(e)} ds = 0, \end{cases} \quad (3.63)$$

onde o termo de pressão osmótica $\Delta\pi_{n+1}^{(e)}$ consiste em um campo escalar calculado diretamente no ponto de Gauss, conforme o modelo apresentado na Seção (2.2.2), e somado ao potencial químico como componente da pressão de poro total atuante no tecido.

Sendo assim, considerando as aproximações desenvolvidas nesta seção, pode-se escrever a formulação bifásica de inchaço discretizada em elementos finitos de forma que as operações matriciais, em notação de Voigt, equivalem-se às relações tensoriais que definem o equacionamento incremental:

$$\begin{aligned} \delta W_{n+1}^{s(e)} = & \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)T} \underline{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^{s(e)} dv \right] \right\} \\ & - \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{h}_{n+1}^{u(e)} (\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} + \Delta\pi_{n+1}^{(e)}) dv \right] \right\} \\ & - \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\partial\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{u(e)T} \bar{t}_{n+1}^{(e)} ds \right] \right\} = 0, \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\begin{aligned} \delta W_{n+1}^{f(e)T} = & \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)} dv \right] \right\} \\ & + \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\kappa}_{x_{n+1}}^{(e)} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} dv \right] \right\} \\ & + \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)T} \left[\int_{\partial\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \bar{q}_{n+1}^{(e)} ds \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Considerando a arbitrariedade dos campos virtuais contidos nos vetores $\delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)}$ e $\delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)}$, pode-se definir as parcelas do equacionamento discretizado no seguinte sistema:

$$\begin{cases} \mathbf{R}^u = \mathbf{F}_{\text{int}}^u - \mathbf{F}_{\text{ext}}^u, \\ \mathbf{R}^{\mu^f} = \mathbf{F}_{\text{int}}^{\mu^f} - \mathbf{F}_{\text{ext}}^{\mu^f}, \end{cases} \quad (3.66)$$

com

$$\mathbf{F}_{\text{int}}^u = \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)T} \underline{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^{s(e)} dv - \int_{\Omega_x} \mathbf{h}_{n+1}^{u(e)} (\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} + \Delta\pi_{n+1}^{(e)}) dv \right], \quad (3.67)$$

$$\mathbf{F}_{\text{ext}}^u = \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left[\int_{\partial\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{u(e)T} \bar{t}_{n+1}^{(e)} ds \right], \quad (3.68)$$

$$\mathbf{F}_{\text{int}}^{\mu^f} = \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)} dv + \int_{\Omega_x} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\kappa}_{x_{n+1}}^{(e)} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} dv \right], \quad (3.69)$$

$$\mathbf{F}_{\text{ext}}^{\mu^f} = -\mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left[\int_{\partial\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \bar{q}_{n+1}^{(e)} ds \right], \quad (3.70)$$

onde $\underline{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^{s(e)}$ consiste no tensor de tensões de Cauchy da fase sólida, $\boldsymbol{\kappa}_{x_{n+1}}^{(e)}$ representa o tensor de permeabilidade de Darcy relacionado ao contínuo e $\mathcal{A}_{e=1}^{nel}$ é um operador de superposição utilizado pelo método de elementos finitos.

Discretizando o equacionamento linearizado apresentado pelas Eq. (3.17 - 3.20) obtêm-se os componentes necessários para construção da matriz tangente utilizada no método numérico de Newton-Raphson conforme,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\delta W_{n+1}^s] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} = & \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)T} \underline{\mathbb{C}}_{x_{n+1}} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \\ & + \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)T} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^s \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \\ & - \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)T} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^f \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \\ & - \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)} \left(\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f + \Delta \pi_{n+1} + \lambda_{n+1}^{op} \right) \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \\ & + \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} 2 \left(\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f + \Delta \pi_{n+1} \right) \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)T} (\mathbf{I} \odot \mathbf{I}) \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{n+1}^f} [\delta W_{n+1}^s] \cdot \Delta \mu_{n+1}^f = - \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)T} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{h}_{n+1}^{u(e)} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)T} dv \right] \Delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \right\}, \quad (3.72)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu_{n+1}^f} [\delta W_{n+1}^f] \cdot \Delta \mu_{n+1}^f = \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\kappa}_x \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)} dv \right] \Delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \right\}, \quad (3.73)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\delta W_{n+1}^f] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} = & \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \left[\int_{\Omega_x} \frac{\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)}}{\Delta t} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \\ & - \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \left(\mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)} \right)^T \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \\ & + \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\} \\ & + \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \hat{\mathbf{T}}_{n+1}^{(e)T} \underline{\mathbb{K}}_{x_{n+1}} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)} dv \right] \Delta \mathbf{q}_{n+1}^{(e)} \right\}, \end{aligned} \quad (3.74)$$

com a matriz $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^s$ sendo definida pelo tensor de Cauchy da fase sólida

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^s = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{s(e)}] & 0 & 0 \\ 0 & [\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{s(e)}] & 0 \\ 0 & 0 & [\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{s(e)}] \end{bmatrix}_{[9 \times 9]}. \quad (3.75)$$

A matriz $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^f$ é construída por meio da tensão total na fase fluida, ou seja, a soma do potencial químico e pressão osmótica:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^f = \begin{bmatrix} [p_{n+1}^{(e)} \mathbf{I}] & 0 & 0 \\ 0 & [p_{n+1}^{(e)} \mathbf{I}] & 0 \\ 0 & 0 & [p_{n+1}^{(e)} \mathbf{I}] \end{bmatrix}_{[9 \times 9]}, \quad \text{onde } p_{n+1}^{(e)} = \mu_{n+1}^{f(e)} + \Delta\pi_{n+1}^{(e)}. \quad (3.76)$$

A matriz $\hat{\mathbf{T}}_{n+1}^{(e)}$ é mapeada pelos componentes do vetor obtido pela operação de gradiente do potencial químico da fase fluida.

$$\hat{\mathbf{T}}_{n+1}^{(e)} = \begin{bmatrix} \nabla_x \mu_1^f & 0 & 0 \\ 0 & \nabla_x \mu_2^f & 0 \\ 0 & 0 & \nabla_x \mu_3^f \\ \nabla_x \mu_2^f & \nabla_x \mu_1^f & 0 \\ 0 & \nabla_x \mu_3^f & \nabla_x \mu_2^f \\ \nabla_x \mu_3^f & 0 & \nabla_x \mu_1^f \end{bmatrix}_{[6 \times 3]}, \quad \text{onde } \begin{bmatrix} \nabla_x \mu_1^f \\ \nabla_x \mu_2^f \\ \nabla_x \mu_3^f \end{bmatrix} = \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^{f(e)}} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)}. \quad (3.77)$$

Finalmente, o tensor de quarta ordem $\underline{\mathbb{K}}_{x_{n+1}}$ é mapeado em notação de Voigt conforme descrito em [Jog e Hutter \(2003\)](#) para tensores de quarta ordem com simetria menor.

Devido à arbitrariedade dos campos virtuais, as componentes da matriz tangente para a solução numérica monolítica são, respectivamente,

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{n+1}^{uu} = & \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \int_{\Omega_x} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)T} \underline{\mathbb{C}}_{x_{n+1}} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)} dv \right. \\ & + \int_{\Omega_x} \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)T} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^s \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} dv \\ & - \int_{\Omega_x} \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)T} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1}^f \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} dv \\ & - \int_{\Omega_x} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)} \left(\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^{f(e)T}} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} + \Delta\pi_{n+1} + \lambda_{n+1}^{op} \right) \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} dv \\ & \left. + \int_{\Omega_x} 2 \left(\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^{f(e)T}} \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f(e)} + \Delta\pi_{n+1} \right) \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)T} (\mathbf{I} \odot \mathbf{I}) \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)} dv \right\}, \end{aligned} \quad (3.78)$$

$$\mathbf{K}_{n+1}^{u\mu^f} = -\mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \int_{\Omega_x} \mathbf{h}_{n+1}^{u(e)} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)T} dv \right\}, \quad (3.79)$$

$$\mathbf{K}_{n+1}^{\mu^f\mu^f} = \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \int_{\Omega_x} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \boldsymbol{\kappa}_x \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)} dv \right\}, \quad (3.80)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{n+1}^{\mu^f u} = & \mathcal{A}_{e=1}^{nel} \left\{ \int_{\Omega_x} \frac{\mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)}}{\Delta t} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} dv \right. \\ & - \int_{\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \left(\mathbf{Q}_{n+1}^{u(e)} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)} \right)^T \mathbf{G}_{n+1}^{u(e)} dv \\ & + \int_{\Omega_x} \mathbf{N}_{n+1}^{\mu^f(e)} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^{(e)} \mathbf{b}_{n+1}^{u(e)T} dv \\ & \left. + \int_{\Omega_x} \mathbf{H}_{n+1}^{\mu^f(e)T} \mathbf{T}_{n+1}^{\wedge(e)T} \underline{\mathbb{K}}_{x_{n+1}} \mathbf{B}_{n+1}^{u(e)} dv \right\}. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Desta maneira, o equacionamento linearizado referente à formulação bifásica de inchaço pode ser sumarizado no seguinte sistema discreto:

$$\begin{cases} \mathbf{R}^u = \mathbf{K}_{n+1}^{uu} \Delta \mathbf{q}_{n+1} + \mathbf{K}_{n+1}^{u\mu^f} \Delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f, \\ \mathbf{R}^{\mu^f} = \mathbf{K}_{n+1}^{\mu^f u} \Delta \mathbf{q}_{n+1} + \mathbf{K}_{n+1}^{\mu^f\mu^f} \Delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f. \end{cases} \quad (3.82)$$

onde pode-se substituir as relações da Eq. (3.66) e reescrever o problema na forma matricial,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{n+1}^{uu} & \mathbf{K}_{n+1}^{u\mu^f} \\ \mathbf{K}_{n+1}^{\mu^f u} & \mathbf{K}_{n+1}^{\mu^f\mu^f} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_{n+1} \\ \Delta \boldsymbol{\mu}_{n+1}^f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{ext}}^u \\ \mathbf{F}_{\text{ext}}^{\mu^f} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\text{int}}^u \\ \mathbf{F}_{\text{int}}^{\mu^f} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{R}^u \\ \mathbf{R}^{\mu^f} \end{bmatrix} \quad (3.83)$$

3.3.3 Estratégia de solução

Conforme mencionado previamente, pode-se obter uma solução aproximada do problema de valor de contorno representado pela Eq. (3.2) por meio da utilização do método numérico de Newton-Raphson no equacionamento acoplado discretizado da Eq. (3.63). Neste âmbito, o trabalho de Thiesen (2021) realizou uma investigação a respeito da eficiência de algoritmos para solução de problemas bifásicos no contexto de tecidos moles. O método monolítico de solução foi uma das técnicas investigadas pelo autor, o qual consiste em resolver ambas as equações da formulação integral simultaneamente, sendo este o método utilizado na solução do equacionamento proposto neste trabalho. Sendo assim, faz-se necessária a obtenção das derivadas cruzadas de linearização apresentadas nas Eq. (3.17 - 3.20) para posterior construção e solução numérica (via Newton-Raphson) do sistema matricial demonstrado na Eq. (3.83).

O método de Newton-Raphson aplicado ao sistema matricial consiste em um processo iterativo que, após um valor inicial arbitrário, atualiza os vetores compostos pelas

variáveis de interesse \mathbf{u} e μ^f conforme,

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_{n+1}^{k+1} &= \mathbf{q}_{n+1}^k + \Delta\mathbf{q}_{n+1}^{k+1}, \\ \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f^{k+1}} &= \boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f^k} + \Delta\boldsymbol{\mu}_{n+1}^{f^{k+1}},\end{aligned}\tag{3.84}$$

onde k representa o número de iterações do método de Newton-Raphson. Para este método de solução, o critério de convergência estabelecido consistiu na comparação direta entre a norma infinita de cada vetor residual com um valor de tolerância igual a 10^{-10} . O valor de tolerância foi determinado visando garantir uma maior precisão dos resultados obtidos na formulação desenvolvida e maior concordância com o programa de simulação referência FEBio.

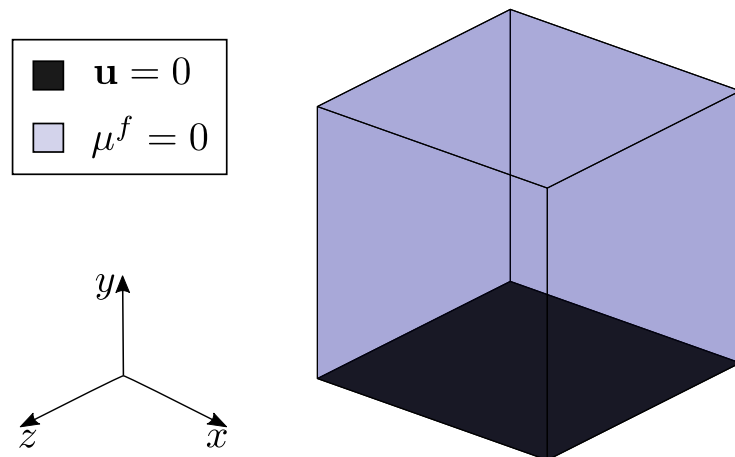
4 Verificação do modelo

A formulação bifásica de inchaço apresentada nas seções anteriores foi implementada em um código laboratorial de elementos finitos, intitulado de CEOS e desenvolvido na linguagem FORTRAN. Posteriormente, a fim de validar o modelo implementado, um caso simples envolvendo o fenômeno de pressão osmótica foi comparado com resultados obtidos do FEBio, o qual consiste em um programa de elementos finitos com foco em simulações relacionadas à biomecânica.

4.1 Parâmetros de simulação

O modelo de validação desenvolvido para esta análise inicial consiste em uma amostra numérica de formato cúbico, com arestas de 5mm. Para solucionar o problema bifásico é necessário definir condições de contorno referentes a cada uma das fases que compõem o modelo numérico. Sendo assim, para a simulação de validação, foram consideradas condições de contorno para a fase sólida e fluida, ilustradas na Figura 4. As

Figura 4 – Condições de contorno do modelo de validação.



Fonte: Autoria própria.

restrições relacionadas à fase sólida consistem no deslocamento nulo em todos os graus de liberdade da base do cubo, ou seja, no plano $y = 0$. Já a condição de contorno referente à fase fluida, consiste na pressão nula (potencial químico do fluido $\mu^f = 0$) imposta em todas as faces do cubo exceto a face no plano $y = 0$. Adicionalmente, o modelo é submetido a uma variação de concentração do banho externo, caracterizando um experimento de inchaço (*free swelling*).

Para a simulação de validação, a matriz sólida foi modelada por meio do equacionamento constitutivo de Neo Hookean (Eq. 3.12). De forma conjunta, foi utilizado o modelo de pressão osmótica ideal de Donnan (Eq. 2.31). Em relação à permeabilidade, utilizou-se o modelo isotrópico e constante (Eq. 3.14). Os parâmetros constitutivos utilizados são descritos na Tabela 1. Os parâmetros do modelo de Donnan $\{\nu_0^f, cF_0, \bar{c}, R \text{ e } T\}$ con-

Tabela 1 – Parâmetros do modelo de validação.

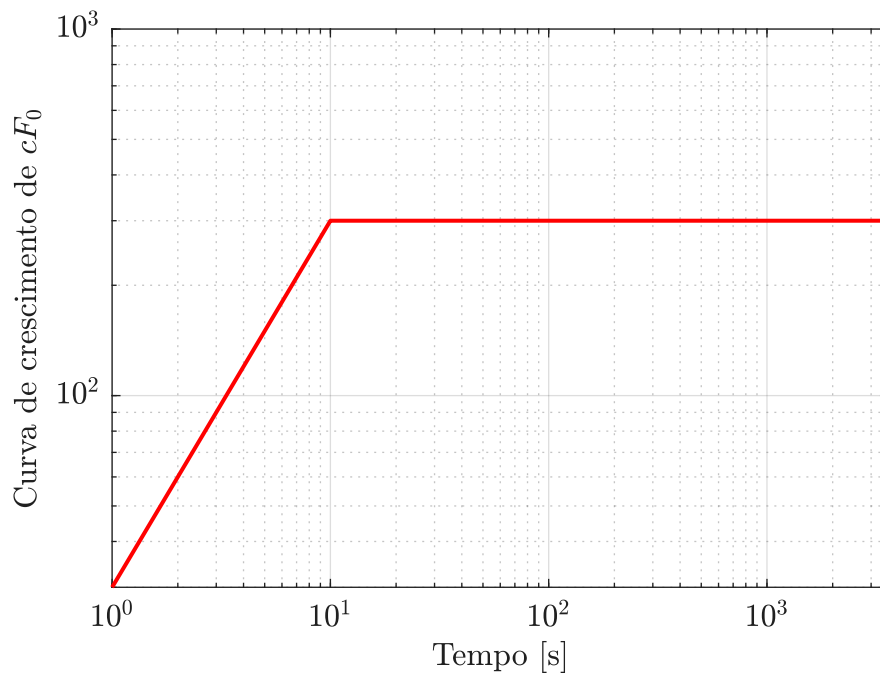
E	ν	ν_0^f	cF_0	\bar{c}	R	T	k_0
[MPa]	-	-	[mM]	[mM]	[mJ/nmolK]	[K]	[mm ⁴ /Ns]
2	0,4	0,8	300	150	8,3145e-6	310	0,001

Fonte: Autoria própria.

sistem, respectivamente, na fração volumétrica de fluido do tecido, densidade de carga fixa inicial, osmolaridade do banho, coeficiente de osmose, constante ideal dos gases e temperatura do tecido. Finalmente, k_0 representa a permeabilidade hidráulica utilizada no modelo constante.

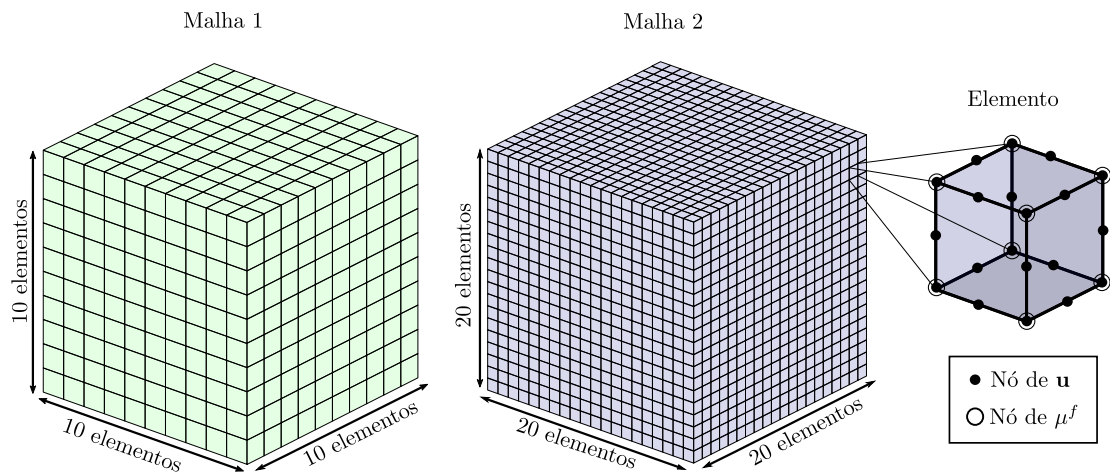
Como consequência da diferença de concentração interna e externa ao tecido, uma pressão osmótica instantânea surge no início da análise, podendo ocasionar problemas de instabilidade numérica (dependendo da sua magnitude). Para contornar esta questão, adotou-se uma estratégia que consiste em prescrever uma curva de crescimento para a densidade de carga fixa cF_0 . O modelo de Donnan impõe que a pressão osmótica é nula nos casos onde a densidade de carga fixa inicial é nula ou a osmolaridade do banho é muito maior que a densidade de carga. Sendo assim, prescrever um valor pequeno para a densidade de carga fixa inicial gera uma pressão osmótica de baixa magnitude no início da análise. Pode-se então utilizar a curva de crescimento para o cF_0 até o valor desejado, aumentando a pressão osmótica gradativamente e facilitando a convergência do problema. Para a simulação de validação adotou-se uma curva linear de crescimento para o cF_0 durante os primeiros dez segundos de simulação. A curva supracitada é ilustrada em escala logarítmica na Figura 5.

Quanto aos aspectos de simulação relacionados ao método de elementos finitos, foram utilizados elementos quadráticos hexaédricos em todas as simulações. Cada um dos elementos contém vinte nós associados aos graus de liberdade do deslocamento \mathbf{u} e oito nós para aproximação do campo de potencial químico da fase fluida μ^f (elemento misto). Em relação à malha, foram realizadas duas simulações com malhas uniformes e distintas, a primeira contendo 1000 elementos, e a segunda malha sendo composta por 8000 elementos. A Figura 6 apresenta uma ilustração de ambas as malhas utilizadas, detalhando o elemento quadrático hexaédrico quanto à sua disposição dos nós de deslocamento e potencial químico.

Figura 5 – Curva logarítmica de crescimento do cF_0 .

Fonte: Autoria própria.

Figura 6 – Malha e elemento do modelo.

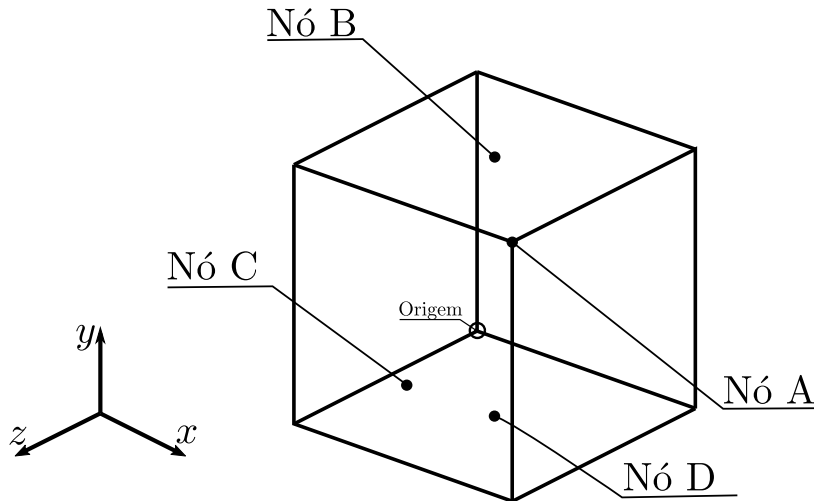


Fonte: Autoria própria.

Para verificar a eficácia do modelo, quatro pontos foram selecionados de forma que representem a mesma posição espacial em ambas as malhas. Sendo assim, para esses pontos específicos foram capturados os resultados relacionados às variáveis primais da análise: magnitude de deslocamento \mathbf{u} e potencial químico μ^f . A Figura 7 apresenta a disposição de cada um destes pontos na amostra numérica, representando-os como os nós

(A, B) para análise de deslocamento, e (C, D) para verificação do potencial químico. As coordenadas materiais dos pontos de análise ilustrados na Figura 7 são dispostas na Tabela 2, o ponto de origem e os eixos do sistema de coordenadas material também são dispostos na Figura supracitada.

Figura 7 – Disposição dos nós analisados.



Fonte: Autoria própria.

Tabela 2 – Coordenadas materiais dos nós inspecionados.

Nó	x [mm]	y [mm]	z [mm]
A	5,0	5,0	5,0
B	2,5	5,0	2,5
C	0,5	0,0	2,5
D	2,5	0,0	2,5

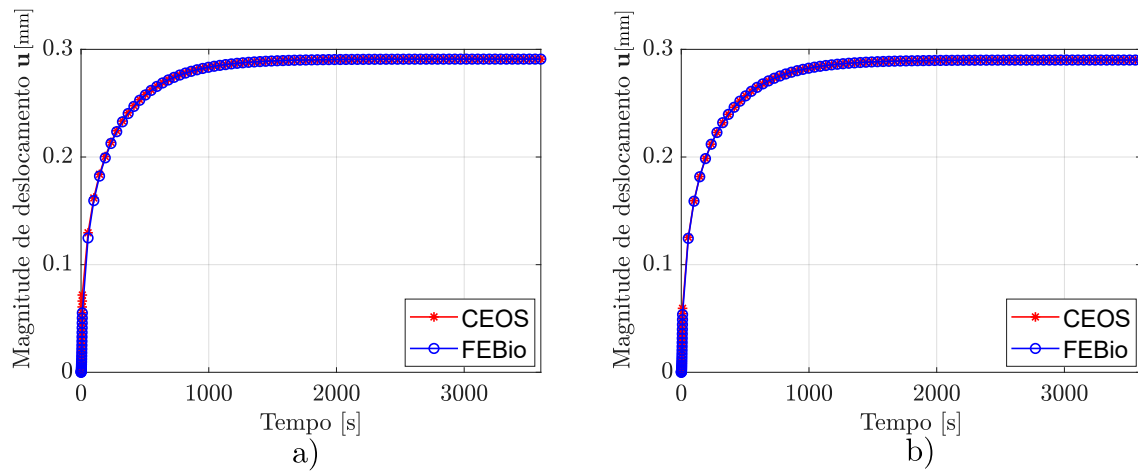
Fonte: Autoria própria.

4.2 Resultados e discussões

As curvas da magnitude de deslocamento dos pontos A e B (ilustrados na Figura 7) obtidas com a formulação implementada no código laboratorial de elementos finitos (CEOS) e simulações no programa FEBio são apresentadas nas Figuras 8 e 9. Analogamente, as curvas referentes ao potencial químico dos pontos C e D (também ilustrados na Figura 7) são dispostas nas Figuras 10 e 11.

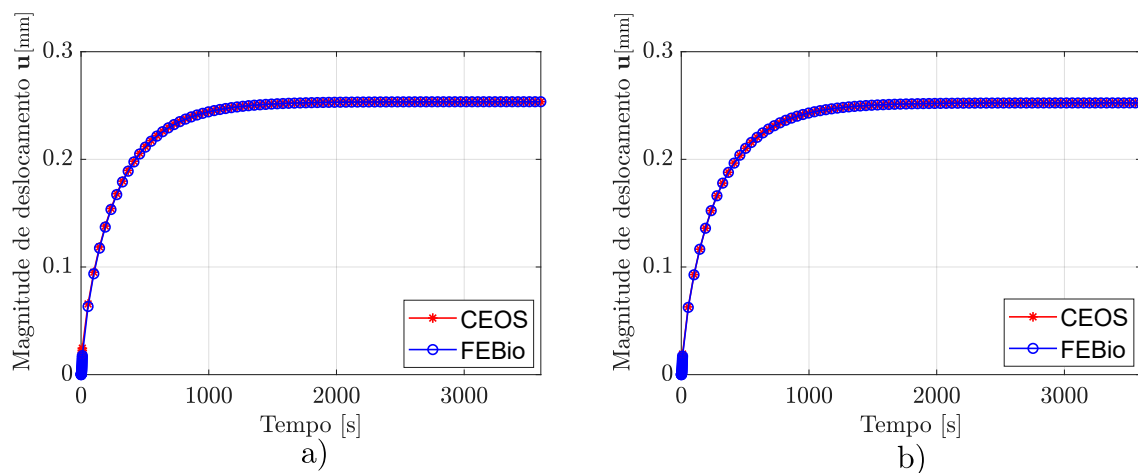
Analisando o comportamento de cada uma das curvas apresentadas percebe-se uma boa correlação entre a formulação desenvolvida e os resultados obtidos pelo programa FEBio. Após atingir a magnitude nominal da densidade de carga fixa inicial cF_0 , os valores

Figura 8 – Curvas de magnitude de deslocamento do nó A a) Malha 1; b) Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

Figura 9 – Curvas de magnitude de deslocamento do nó B a) Malha 1; b) Malha 2.

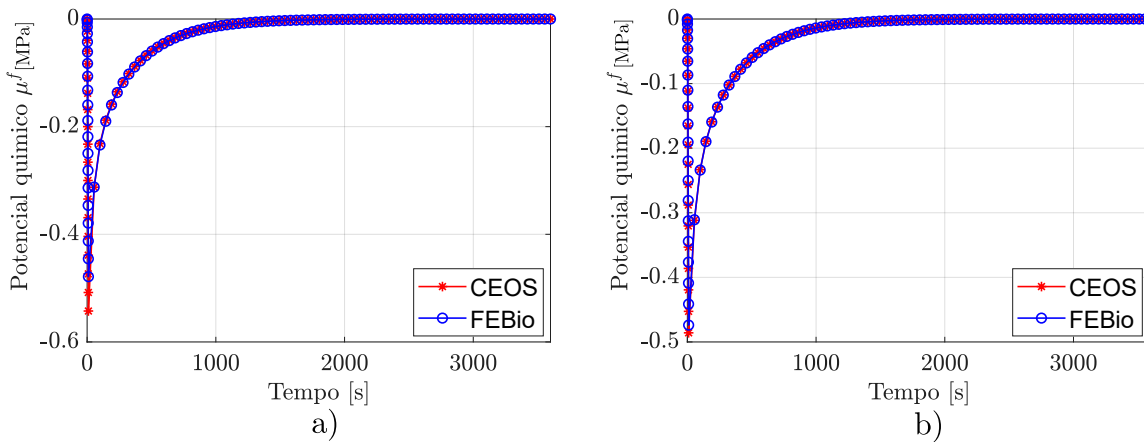


Fonte: Autoria própria.

de deslocamento e potencial químico obtidos em cada um dos códigos tornam-se próximos, demonstrando concordância entre a formulação implementada e os resultados já validados no programa FEBio.

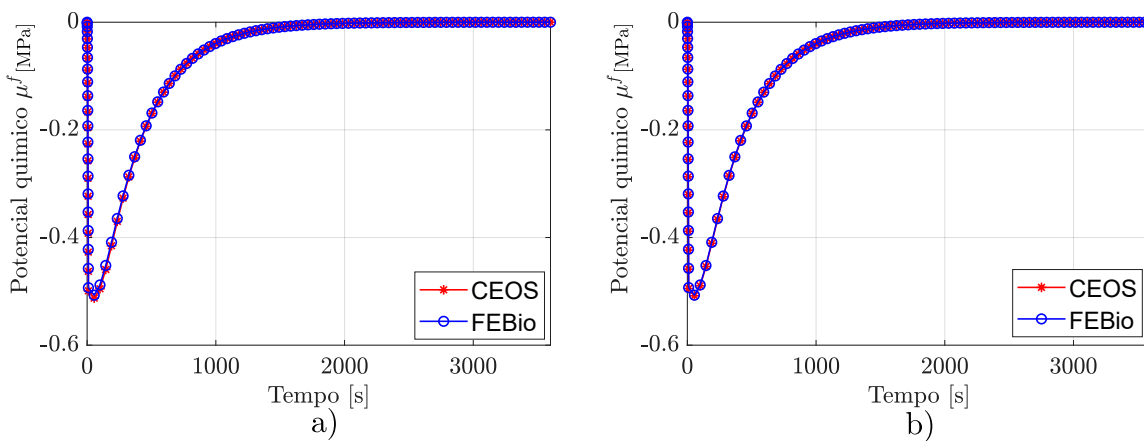
Pode-se verificar a conformidade entre as formulações por meio da análise dos campos da magnitude de deslocamento e potencial químico apresentados nas Figuras 12 e 13. Nestas, nota-se para ambas as malhas uma ampla correspondência no comportamento dos campos obtidos através da formulação proposta com os resultados apresentados pelo programa numérico FEBio. A Figura 12 apresenta a magnitude de deslocamento da amostra numérica no tempo de 3600 segundos. Neste instante a geometria apresenta o deslocamento máximo em suas arestas superiores. O campo de deformação estabelecido

Figura 10 – Curvas de potencial químico do nó C a) Malha 1; b) Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

Figura 11 – Curvas de potencial químico do nó D a) Malha 1; b) Malha 2.

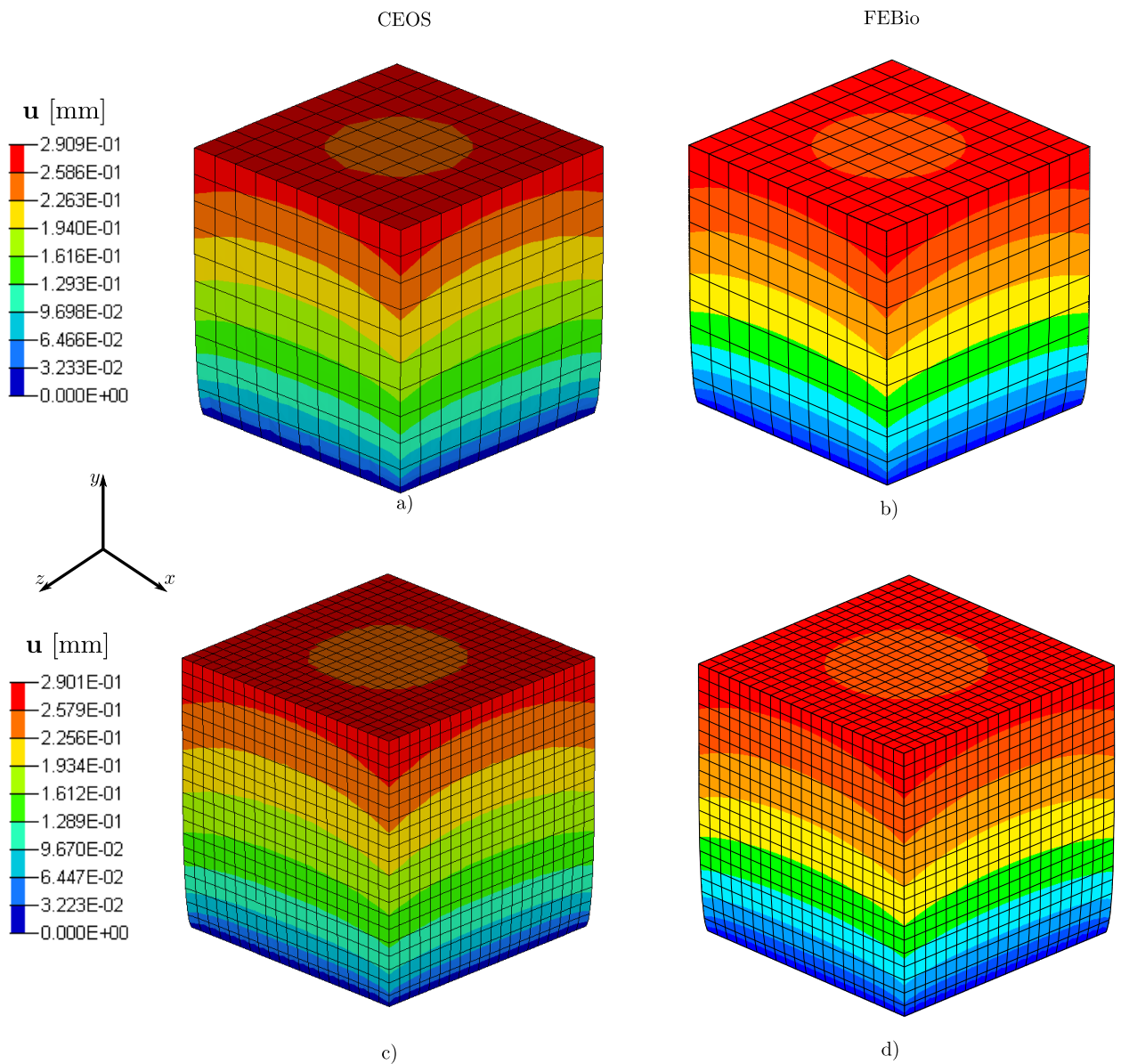


Fonte: Autoria própria.

consiste no fenômeno de inchaço que é ocasionado pelo gradiente de potencial químico, demonstrado na Figura 13 para o mesmo instante de tempo. Na campo supracitado pode-se perceber que o potencial químico da amostra torna-se negativo, fazendo com que o fluxo de fluido se estabeleça de fora para dentro da amostra numérica.

Uma divergência de valores pode ser percebida nas curvas, sobretudo na fase inicial da simulação durante os primeiros dez segundos. Em relação esta divergência inicial de resultados obtidos por ambos os códigos, percebe-se uma maior adequação de valores quando utiliza-se uma malha com maior refinamento. Para verificar essa hipótese, pode-se analisar os gráficos de cada uma das curvas dos pontos {A, B, C e D} para os primeiros 100 segundos de simulação conforme ilustrado pelas Figuras 14, 15, 16 e 17. Analisando as

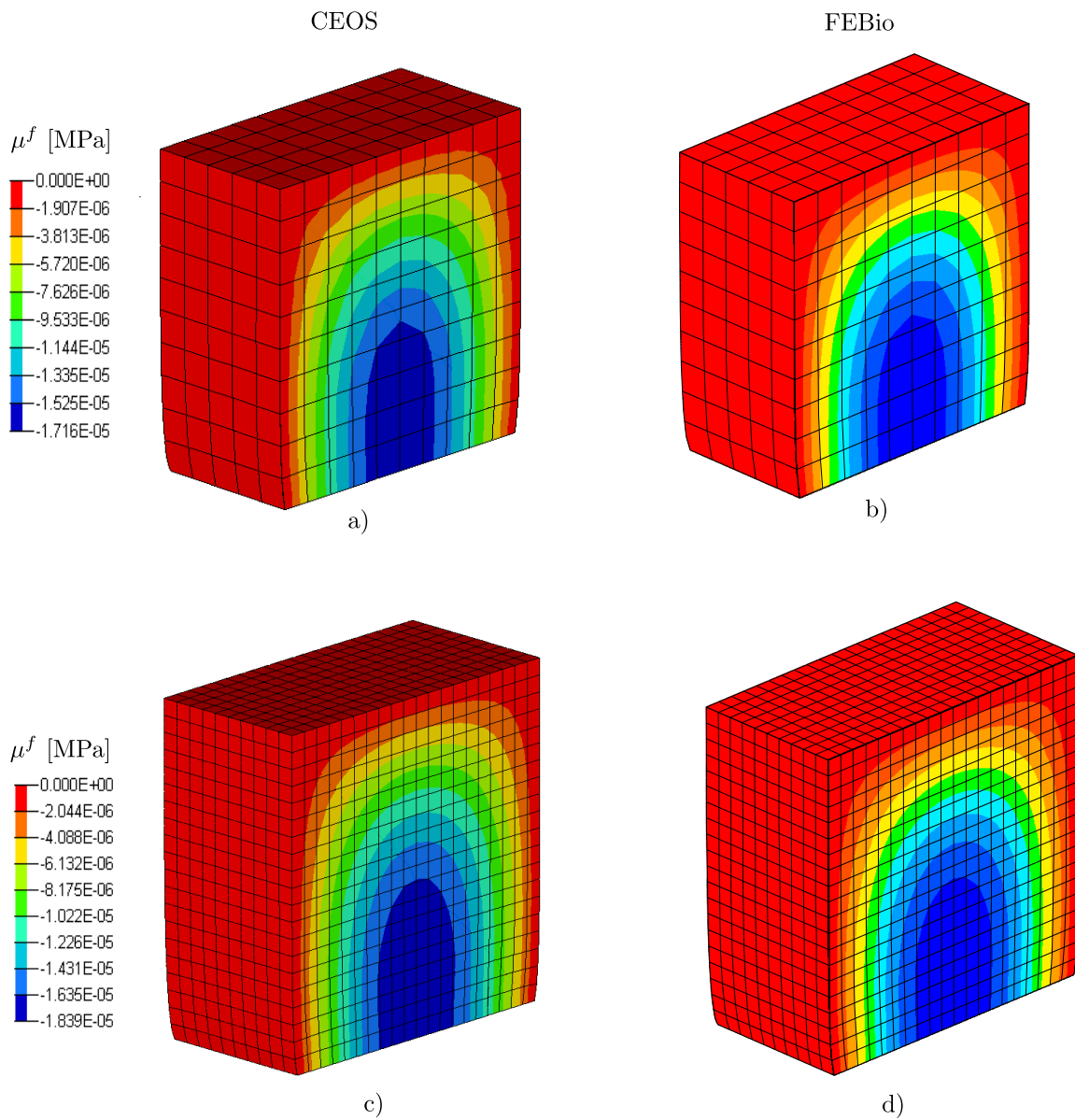
Figura 12 – Campos da magnitude de deslocamento a) CEOS - Malha 1; b) FEBio - Malha 1; c) CEOS - Malha 2; d) FEBio - Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

curvas de magnitude de deslocamento (Ponto A e B) nota-se que a formulação proposta adequa-se de forma mais assertiva aos resultados do programa numérico FEBio com a Malha 2 (de maior refinamento). Em relação ao potencial químico, ou seja, pontos C e D, percebe-se que a malha de maior refinamento também apresenta resultados com menor diferença entre ambos os métodos de solução. Conforme demonstrado previamente, o refinamento de malha influencia diretamente na precisão dos valores obtidos pela formulação proposta, aproximando os resultados do código laboratorial (CEOS) e do programa FEBio. Para explicar a divergência entre resultados nos casos onde utiliza-se uma malha de

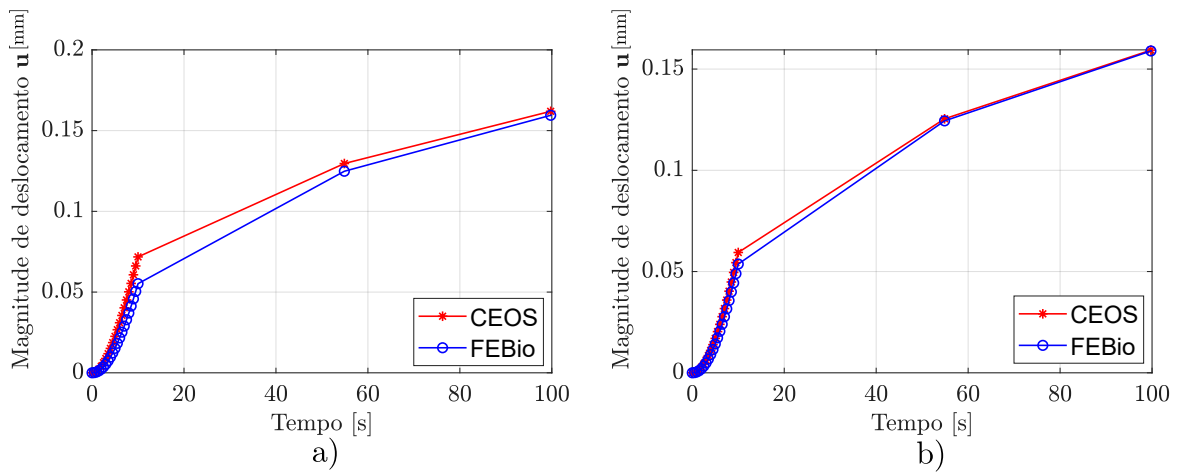
Figura 13 – Campos de potencial químico a) CEOS - Malha 1; b) FEBio - Malha 1; c) CEOS - Malha 2; d) FEBio - Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

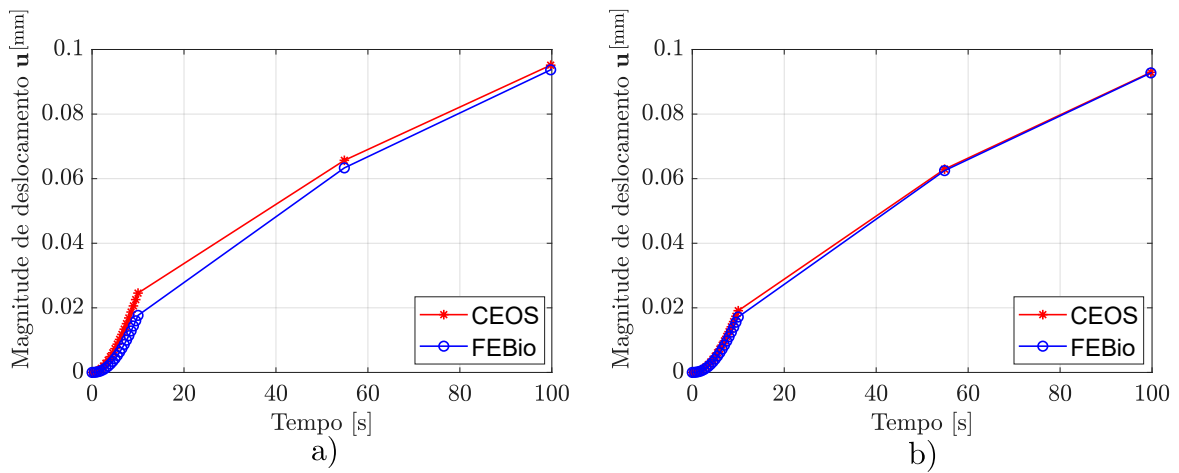
menor refinamento, levanta-se a hipótese de que a discretização temporal (que difere em cada um dos códigos), exerce influência nos valores calculados. Adicionalmente, questões numéricas inerentes à cada código (e.g., erros de truncamento e o número de pontos de Gauss aplicados ao potencial químico) também aparecem como potenciais contribuidores para estas divergências. Sendo assim, levando em consideração a influência das diferentes estratégias utilizadas em cada um dos métodos de solução (CEOS e FEBio), pode-se considerar que o erro relativo entre os resultados apresentados torna-se aceitável, já que a formulação desenvolvida e implementada mostrou-se capaz de representar o fenômeno de inchaço de forma análoga ao programa referência nos casos onde o refinamento da malha

Figura 14 – Curvas de magnitude de deslocamento nos 100 segundos iniciais - Nó A a) Malha 1; b) Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

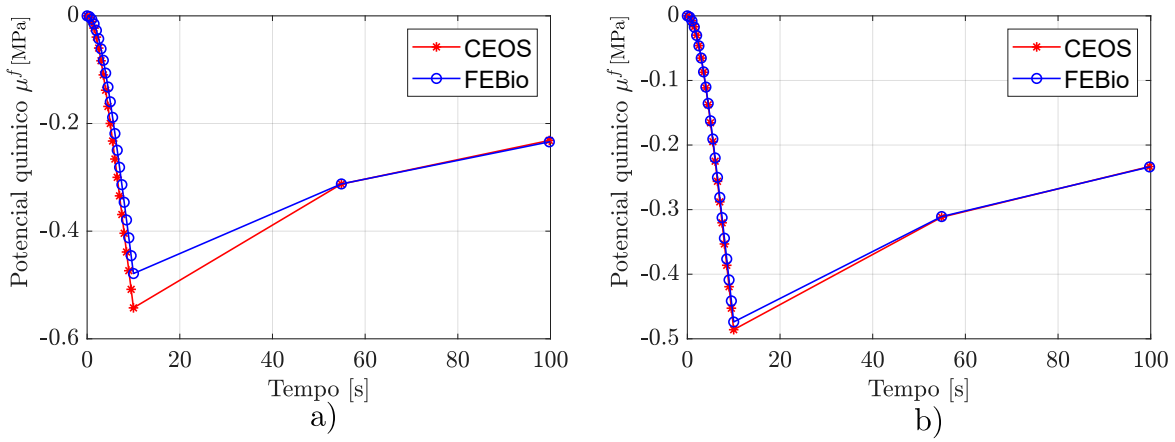
Figura 15 – Curvas de magnitude de deslocamento nos 100 segundos iniciais - Nó B a) Malha 1; b) Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

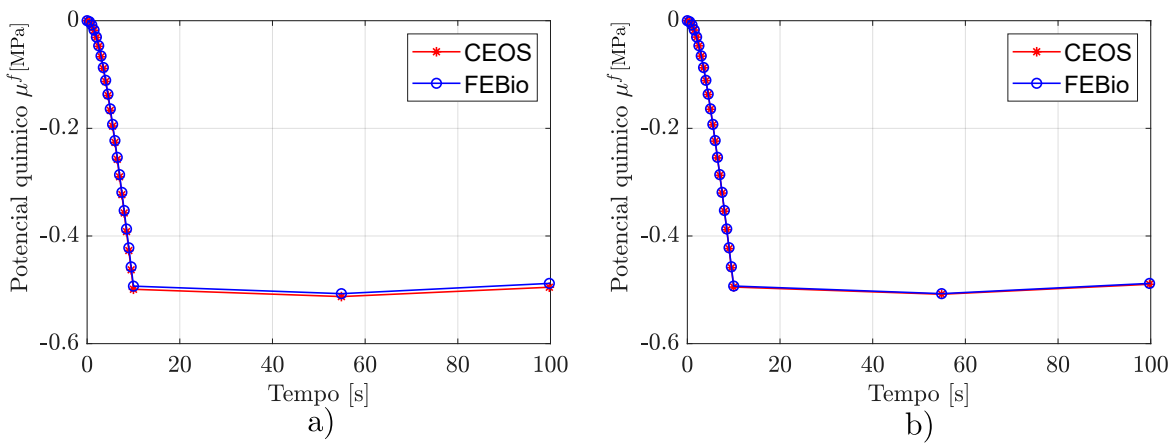
foi realizado de forma adequada.

Figura 16 – Curvas de potencial químico nos 100 segundos iniciais - Nó C a) Malha 1; b) Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

Figura 17 – Curvas de potencial químico nos 100 segundos iniciais - Nó D a) Malha 1; b) Malha 2.



Fonte: Autoria própria.

5 Estudo de caso: Inchaço em tendões

Nesta seção um estudo de caso envolvendo o fenômeno de inchaço em tendões é investigado. Como embasamento para essa investigação, utilizou-se os resultados experimentais de osmose livre semiconfinada em amostras de tendão bovino, realizados no trabalho de [Carniel et al. \(2023\)](#), em parceria com a Universidade Comunitária da Região de Chapecó - Unochapecó. Contudo, como os experimentos não fazem parte do escopo dessa dissertação, o detalhamento experimental se limita apenas na descrição dos procedimentos e materiais, bem como a utilização dos resultados para ajuste da curva de deformação volumétrica sofrida pela amostra e análise de sensibilidade dos parâmetros constitutivos utilizados no modelo numérico.

5.1 Descrição do experimento laboratorial

Para a execução dos experimentos foram utilizadas amostras de tendão flexor bovino coletadas logo após o abate do animal, dissecadas e conservadas a uma temperatura de -20 °C. No dia anterior ao ensaio de inchaço, as amostras foram submetidas a temperatura de 20 °C, mantida constante durante todo o experimento. A Figura 18 apresenta um tendão flexor bovino e uma amostra retirada com 10 mm de comprimento longitudinalmente à seção.

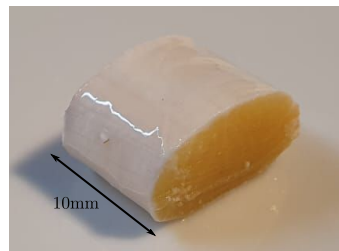
O dispositivo utilizado no experimento consiste em uma caixa de acrílico (polimetilmetacrilato - PMMA) composta por placas com 10mm de espessura. Em relação à construção, utilizou-se a operação de corte a laser para confecção de cada componente e cola acrílica como método de fixação. O dispositivo final é capaz de comportar a amostra supracitada submersa em uma solução tampão Tris-HCl com Polietileno Glicol 8%, permitindo apenas deslocamentos transversais ao eixo do tendão, ou seja, restringindo o movimento da face frontal e traseira da amostra. A Figura 19 apresenta o *setup* experimental utilizado, com a amostra já dentro do dispositivo e submersa no banho.

Para realizar o ensaio de inchaço livre, uma câmera industrial foi posicionada em frente ao dispositivo capturando imagens da amostra a cada 60 segundos por aproximadamente 24 horas. Como a densidade de carga interna do tecido é maior que a concentração de cargas presente no banho externo, surge uma pressão osmótica que determina o fluxo de fluido para o interior do tecido. Após as 24 horas de experimento, observou-se um aumento volumétrico na amostra. No entanto, o procedimento não apresentou estabilização quanto à deformação volumétrica sofrida pelo tecido.

Figura 18 – a) Tendão flexor bovino inteiro b) Amostra retirada para experimentação.



a)



b)

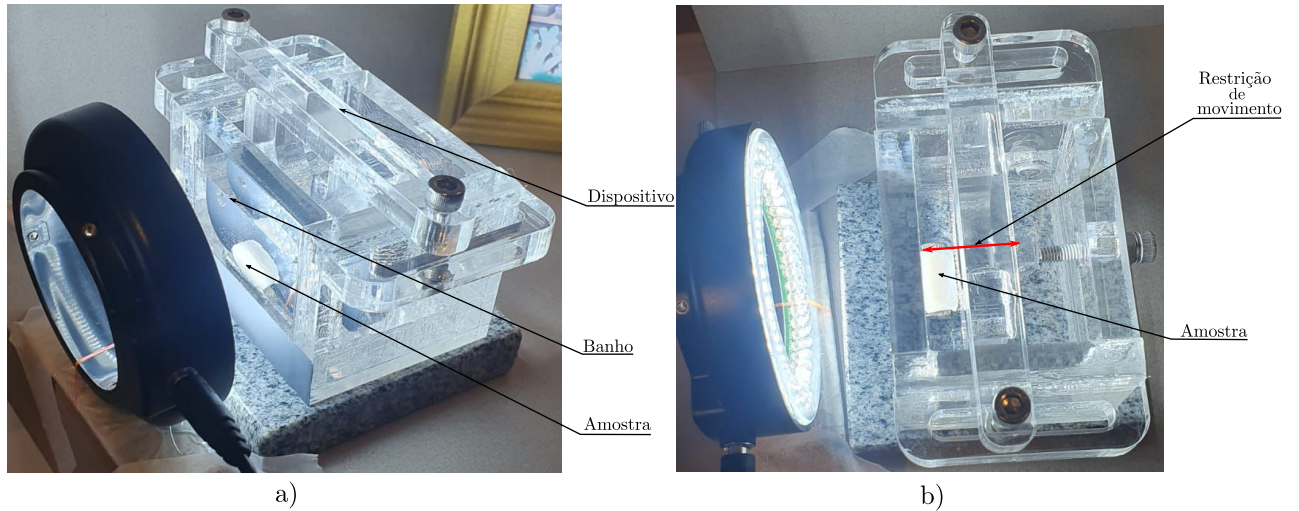
Fonte: Autoria própria.

5.1.1 Descrição do experimento numérico

A simulação numérica do fenômeno investigado é ilustrada na Figura 20. A amostra de tecido submetida ao banho teve deslocamento prescrito nulo ($\mathbf{u} = 0$) no eixo X_3 . Já em relação à condição de contorno da fase do fluido, devido a baixa velocidade do fenômeno de osmose, a condição de fluxo livre ($\mu^f = 0$) foi imposta em todas as direções nos contornos da amostra. Simultaneamente o banho externo impõe uma diferença de concentração em relação à densidade de carga fixa interna ao tecido, originando o fenômeno de osmose e, conseqüentemente, o surgimento da pressão osmótica e deformação volumétrica no tecido.

A malha numérica desenvolvida para o ajuste de parâmetros e investigação do estudo de caso é constituída por 1096 elementos quadráticos hexaédricos, idênticos ao elemento ilustrado na Figura 6. A malha foi construída com um tamanho de elemento de 1 mm, conforme demonstrado na Figura 21. Os modelos constitutivos utilizados para simular o fenômeno de osmose investigado consistem respectivamente, no modelo elástico de Neo Hookean (matriz sólida) descrito pela Eq. (3.12). O modelo de permeabilidade que governa o fluxo de fluido juntamente com a lei de Darcy (Eq. 3.13) consiste no equacionamento isotrópico constante descrito na Eq. (3.14). Finalmente, em relação à pressão osmótica, utilizou-se o modelo constitutivo ideal de Donnan descrito na Eq. (2.31). Os parâmetros constitutivos aplicados em cada um destes modelos podem ser divididos em dois conjuntos: (i) medidos ou impostos experimentalmente e (ii) definidos por ajuste de curva para otimização do modelo numérico. O primeiro destes conjuntos contempla a grandezas

Figura 19 – a) Dispositivo para o experimento de inchaço b) Restrições de deformação aplicadas pelo dispositivo.



Fonte: Autoria própria.

fixas $\{\nu_0^f = 0,8; \bar{c} = 111 \text{ [mM]}; \phi = 1; R = 8,3145 \cdot 10^{-6} \text{ [mJ/nmolK]}; T = 293 \text{ [K]}\}$, onde o parâmetro de osmolaridade do banho \bar{c} foi medido experimentalmente utilizando um osmômetro em parceria com o Departamento de Bioquímica do Programa de Pós Graduação da Universidade Federal de Santa Catarina. Já o conjunto de parâmetros ajustados é constituído por $\{E; \nu; cF_0; k_0; t_{est}\}$, onde o parâmetro t_{est} representa o tempo de simulação em que cF_0 (que cresce linearmente a partir do início do experimento numérico) atinge o seu valor nominal.

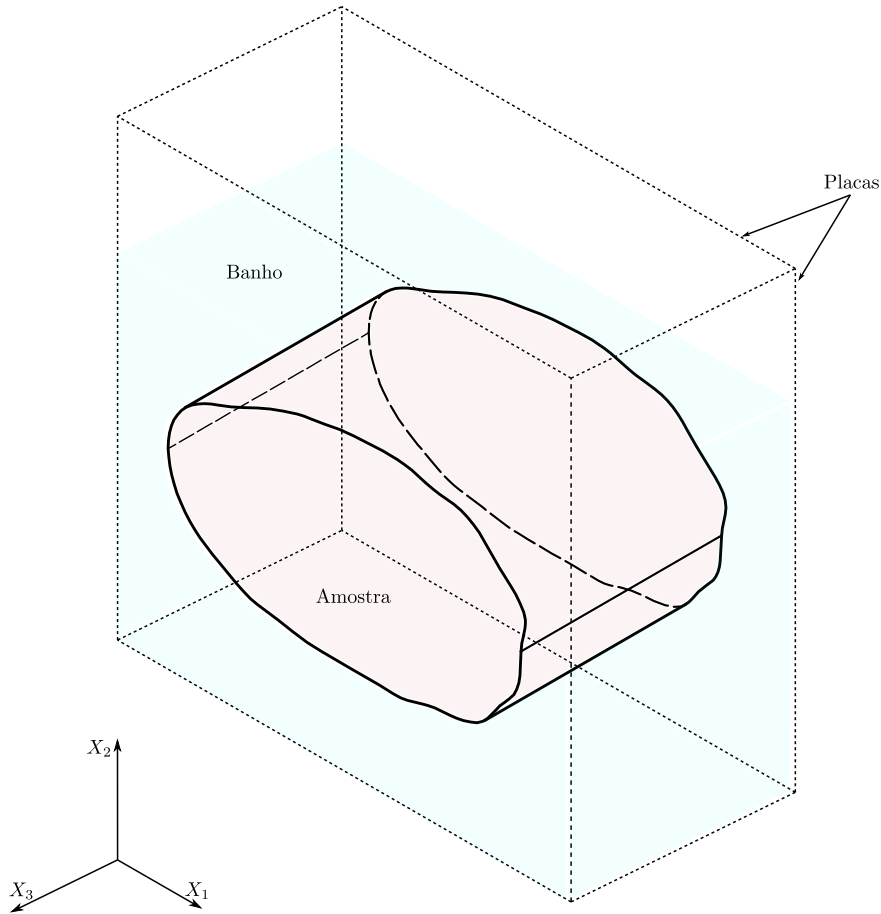
5.2 Ajuste de parâmetros

Após modelar a geometria e malha do problema numérico, utilizou-se a curva volumétrica obtida no experimento laboratorial para aplicar o método de otimização de ajuste de curva (*curve fitting*) visando aproximar o modelo numérico do resultado experimental. A identificação dos parâmetros do conjunto $\{E, \nu, cF_0, k_0, t_{est}\}$ foi realizada por meio da utilização de um código em *Matlab* desenvolvido na pesquisa de Lanzendorf (2023), que promove uma interface entre a simulação numérica efetuada no programa FEBio e o algoritmo de ajuste de curva. A identificação destes parâmetros seguiu o modelo clássico não linear de ajuste de curva entre os dados experimentais e numéricos, podendo ser descrito pelo seguinte problema de otimização:

$$\mathbf{p}^{opt} = \arg \min f(\mathbf{p}), \text{ onde } \mathbf{p} \in \mathcal{S}^i \ (i = 1, 2), \quad (5.1)$$

sendo \mathbf{p} o conjunto de parâmetros supramencionados e \mathcal{S}^i espaços definidos, que impõe a cada um dos conjuntos de parâmetros as restrições demonstradas na Tabela 3 para cada

Figura 20 – Ilustração do procedimento numérico.



Fonte: Autoria própria.

conjunto \mathcal{S}^i . As restrições impostas para cada um dos conjuntos foram definidas com base

Tabela 3 – Conjuntos de restrições impostas aos parâmetros constitutivos no problema de ajuste de curva.

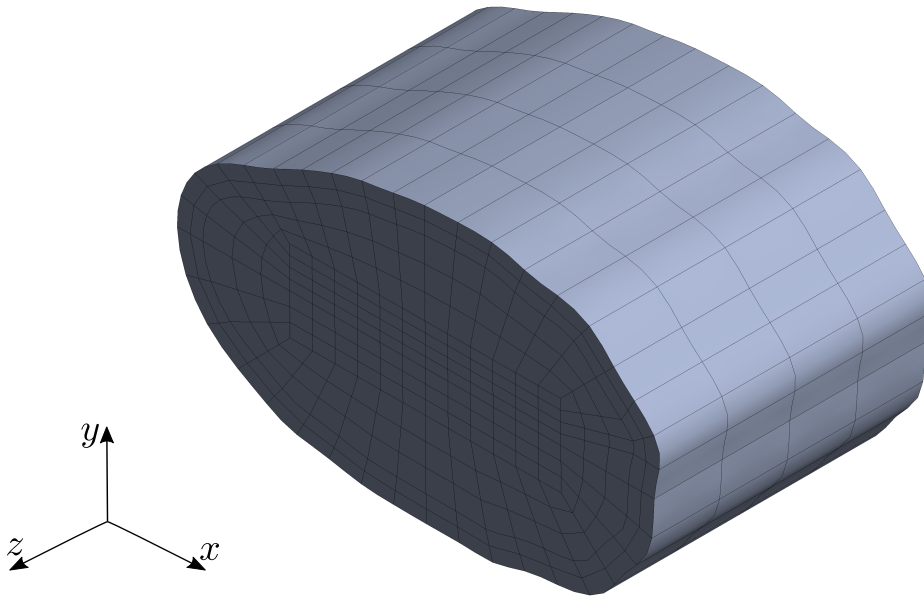
\mathcal{S}^i	\mathcal{S}^1	\mathcal{S}^2
E [MPa]	$0 < E < 0.2$	$0 < E < 0.3$
ν	$0 < \nu < 0.40$	$0 < \nu < 0.49$
cF_0 [mM]	$cF_0 > 111$	$cF_0 > 111$
k_0 [mm ⁴ /Ns]	$0.000001 < k_0 < 0.001$	$0.000001 < k_0 < 0.001$
t_{est} [s]	$t_{est} > 0$	$t_{est} > 0$

Fonte: Autoria própria.

em medições experimentais da osmolaridade do banho \bar{c} e nas investigações de [Lanzendorf \(2023\)](#) e [Safa et al. \(2020\)](#).

O ajuste de curva possui como objetivo identificar conjuntos de parâmetros que

Figura 21 – Malha do modelo numérico do estudo de caso.



Fonte: Autoria própria.

permitem ao modelo adequar-se ao resultado experimental da curva volumétrica. Para tal, foram utilizadas duas estratégias de otimização numérica, primeiramente o algoritmo de *Particle swarm optimization* (PSO) foi utilizado aplicando as restrições do espaço \mathcal{S}^i , este procedimento permitiu a obtenção de valores iniciais dos parâmetros constitutivos para aplicação do próximo método de otimização, aproximando a função objetivo do algoritmo a um mínimo local. Posteriormente, a segunda estratégia de otimização numérica utilizada consistiu na aplicação do algoritmo *Nelder-Mead*, permitindo a obtenção dos valores otimizados dispostos na Tabela 4.

5.3 Resultados e discussão

5.3.1 Conjuntos ajustados

Os parâmetros otimizados supracitados consistem nos dois conjuntos dispostos na Tabela 4, onde \mathbf{p}^{opt} representa um conjunto de parâmetros otimizados que aproximam o modelo numérico do fenômeno de inchaço observado experimentalmente.

A Figura 22 apresenta a curva volumétrica experimental juntamente com os resultados numéricos obtidos utilizando o conjunto de parâmetros \mathbf{p}^1 . Nesse caso, observa-se que o método de otimização utilizado proporcionou um ajuste adequado entre as duas curvas, permitindo ao modelo numérico reproduzir o fenômeno observado durante o ensaio experimental. Entretanto, observam-se algumas divergências entre as curvas, especialmente

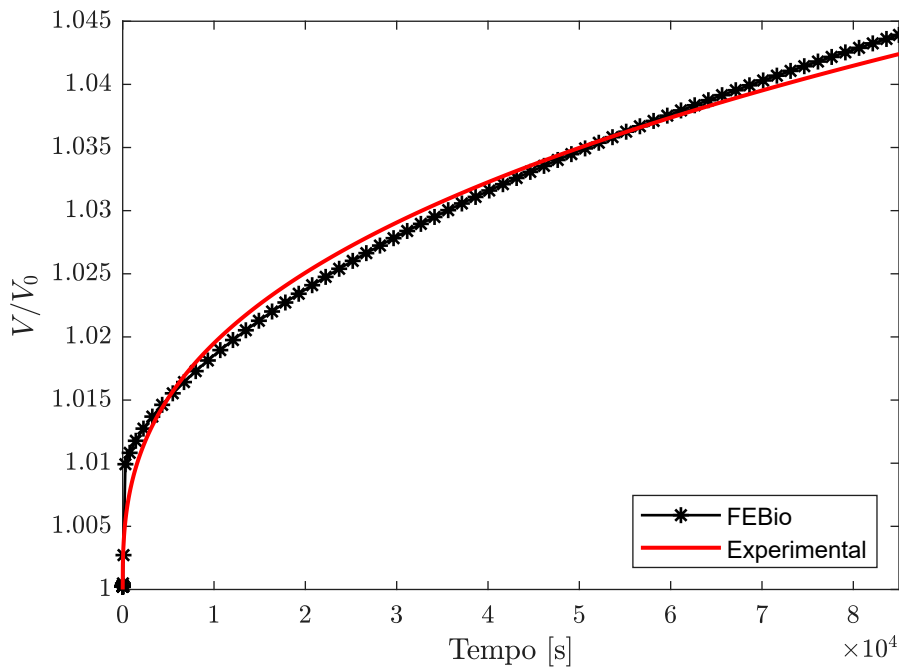
Tabela 4 – Parâmetros constitutivos do estudo de caso.

\mathbf{p}^{opt}	E	ν	cF_0	k_0	t_{est}
-	[MPa]	-	[mM]	[mm ⁴ /Ns]	[s]
1	0.151	0.395	123.595	1.869e-6	207.099
2	0.276	0.484	130.725	1.956e-5	35.416

Fonte: Autoria própria.

durante a fase inicial da simulação, onde a curva numérica apresenta um crescimento sensivelmente maior que o registrado experimentalmente durante a fase de crescimento da variável densidade de carga fixa inicial cF_0 . Apesar disso, durante o prosseguimento do experimento numérico, os resultados tornam-se próximos, apresentando pouca variação.

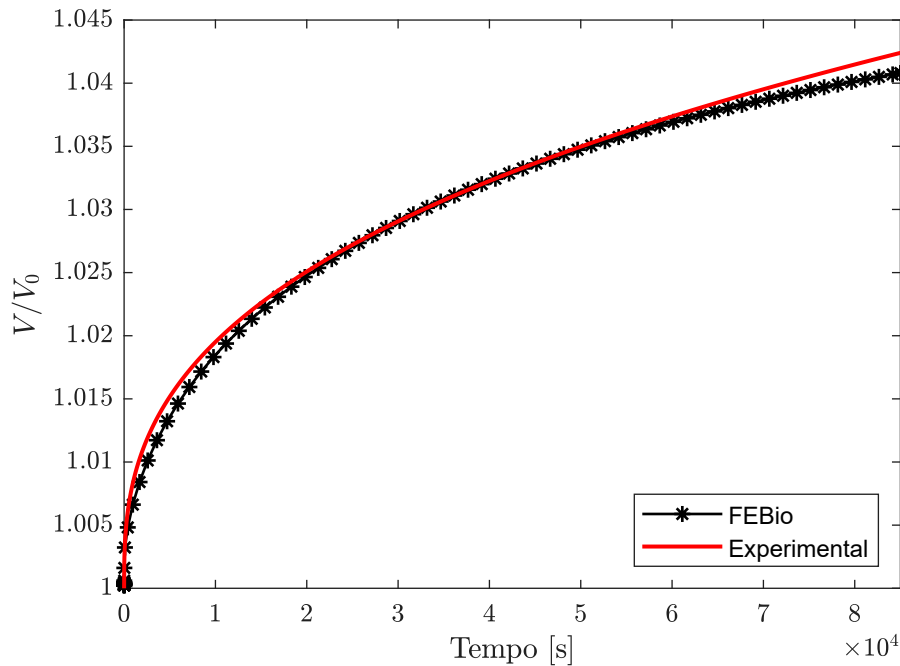
Figura 22 – Curva volumétrica experimental e numérica \mathbf{p}^1 .



Fonte: Autoria própria.

Analogamente, a Figura 23 apresenta a curva volumétrica experimental juntamente com os resultados numéricos obtidos utilizando o conjunto de parâmetros \mathbf{p}^2 . Neste outro caso, observou-se um ajuste mais preciso entre o procedimento numérico e experimental, descrevendo um comportamento semelhante durante toda a simulação.

Apesar disso, ambos os conjuntos foram capazes de descrever o experimento de forma adequada. Sendo assim, evidencia-se uma não unicidade de solução decorrente do fato de que alguns parâmetros de material para o tendão flexor bovino, como por exemplo,

Figura 23 – Curva volumétrica experimental e numérica \mathbf{p}^2 .

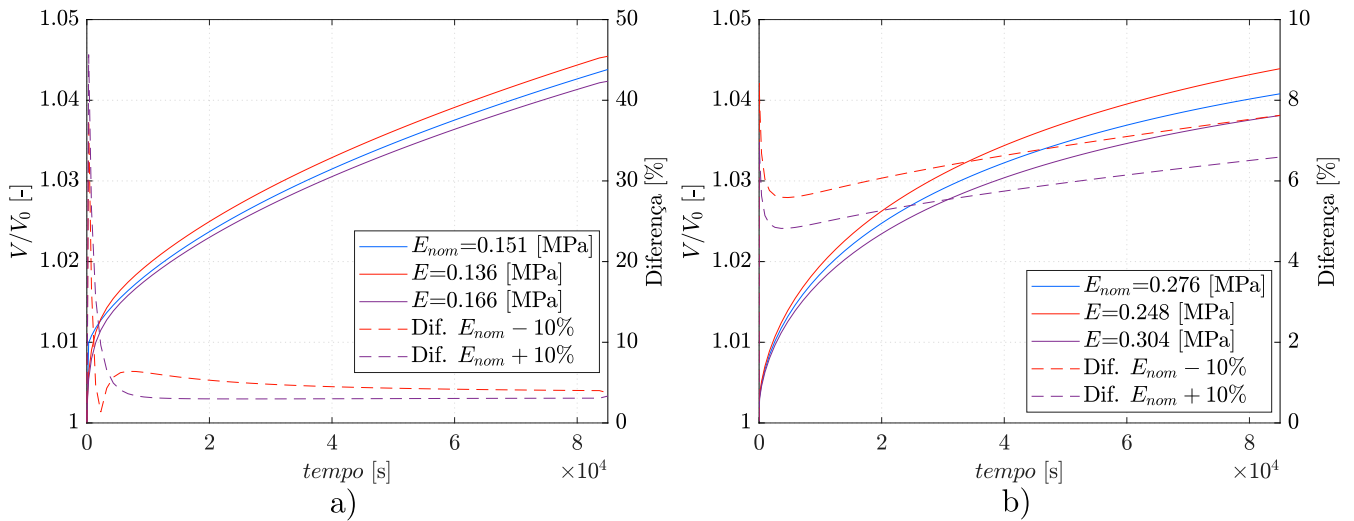
Fonte: Autoria própria.

o módulo de elasticidade E e o coeficiente de Poisson ν possuem uma ampla faixa de valores possíveis, dependendo da aplicação e fenômeno investigado. Ademais, a densidade de carga fixa inicial cF_0 e a permeabilidade do tecido k_0 no experimento investigado também compõem propriedades materiais ainda não bem estabelecidas na literatura. Adicionalmente, não obteve-se estabilização em relação à deformação volumétrica sofrida pela amostra durante o experimento laboratorial. Esses os fatores apresentam-se como potenciais contribuidores para a não unicidade de solução do procedimento de otimização, tornando possível a obtenção de diversos conjuntos de parâmetros capazes de ajustar às curvas experimental e numérica, e representar o fenômeno observado.

5.3.2 Análise de sensibilidade de parâmetros

As Figuras 24 a) e b) apresentam a curva de volume obtida nos experimentos numéricos, variando o módulo de elasticidade E de cada um dos conjuntos \mathbf{p}^{opt} em 10% e mantendo fixos os demais parâmetros dispostos na Tabela 4.

Conforme evidenciado, os gráficos demonstram que a diminuição do módulo de elasticidade provoca uma maior deformação no tecido, deslocando a curva volumétrica para cima. Simultaneamente, valores maiores de E aumentam a rigidez do tecido, reduzindo a deformação sofrida. Adicionalmente, percebe-se que a sensibilidade fenomenológica do parâmetro investigado aumenta para maiores valores de E , onde a variação de 10% do

Figura 24 – Variação de módulo de Elasticidade em 10% para o conjunto a) \mathbf{p}^1 e b) \mathbf{p}^2 .

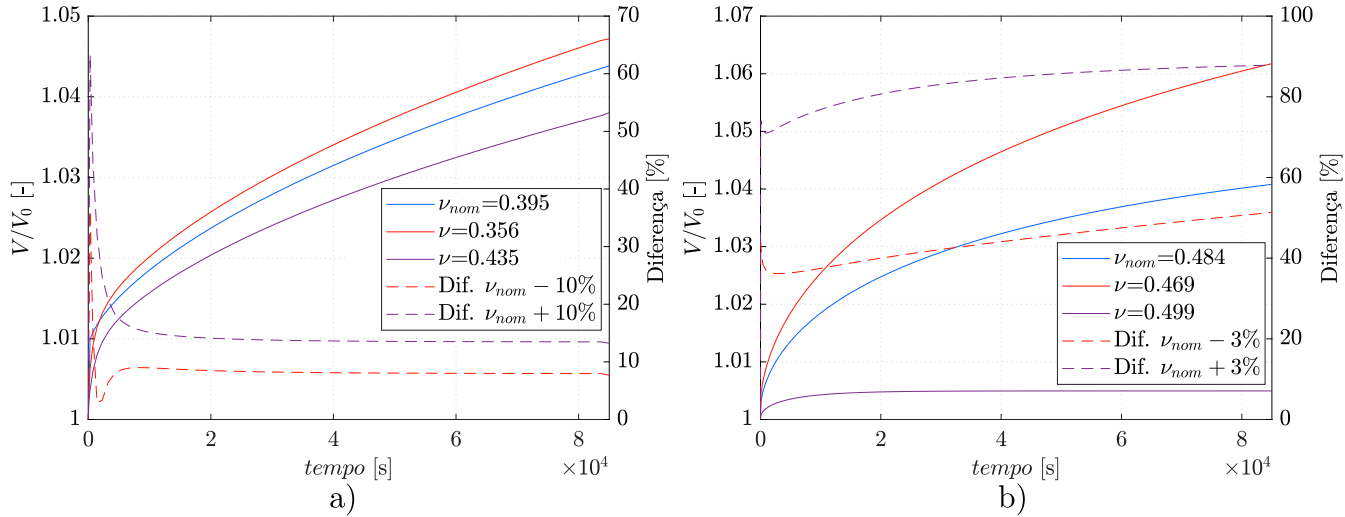
Fonte: Autoria própria.

parâmetro no conjunto \mathbf{p}^2 ocasiona uma diferença maior que 6% das curvas volumétricas modificadas em relação a curva numérica otimizada. Apesar da maior sensibilidade do módulo de elasticidade no conjunto \mathbf{p}^2 ao final da simulação, notou-se uma maior estabilidade no início do experimento numérico, fato que pode ser observado comparando as curvas de diferença percentual supracitadas, onde o conjunto \mathbf{p}^1 apresentou uma diferença superior a 40% entre as curvas nos instantes iniciais da simulação.

Em relação ao coeficiente de Poisson ν , percebeu-se que valores maiores deste parâmetro diminuem o efeito poroelástico, reduzindo a entrada de fluido no tecido e, conseqüentemente, sua deformação volumétrica. A Figura 25 a) apresenta uma variação de 10% deste parâmetro enquanto mantém os demais fixos no conjunto \mathbf{p}^1 . Neste caso, nota-se que valores menores do parâmetro deslocam a curva para cima (aumentando a deformação), enquanto valores mais baixos ocasionam o efeito oposto. Em relação a sensibilidade deste parâmetro, percebe-se que valores mais altos exercem uma grande influência na deformação volumétrica do tecido, conforme demonstrado na Figura 25 b). Neste último caso, uma variação de apenas 3% do parâmetro desloca a nova curva numérica em relação à ajustada para uma diferença de aproximadamente 90%. Ademais, de forma análoga à análise de sensibilidade do módulo de elasticidade, o conjunto \mathbf{p}^2 mostrou-se mais estável no início da simulação, não apresentando picos na diferença percentual calculada entre as curvas durante o início das simulações numéricas.

Tratando-se da densidade de carga fixa inicial cF_0 , destaca-se a relação direta deste parâmetro com a solicitação de pressão osmótica estabelecida no tecido. Nos casos de banho externo hipertônico ou densidade de carga fixa nula, a pressão osmótica também assume

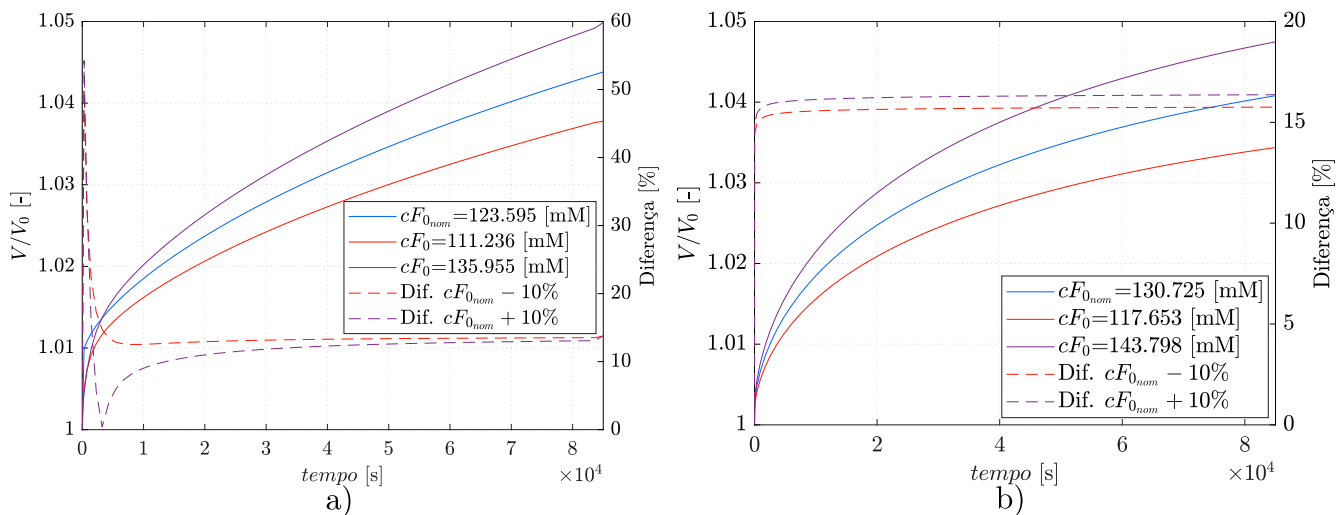
Figura 25 – Variação de coeficiente de Poisson em a) 10% para o conjunto \mathbf{p}^1 e b) 3% para o conjunto \mathbf{p}^2 .



Fonte: Autoria própria.

valor nulo. Entretanto, conforme ilustrado pela Figura 26, quando a densidade de carga fixa assume valores superiores à osmolaridade do banho, uma solicitação de pressão osmótica é gerada, provocando o fenômeno de inchaço no tecido. Em relação à sensibilidade deste

Figura 26 – Variação da densidade de carga fixa inicial em 10% para o conjunto a) \mathbf{p}^1 e b) \mathbf{p}^2 .



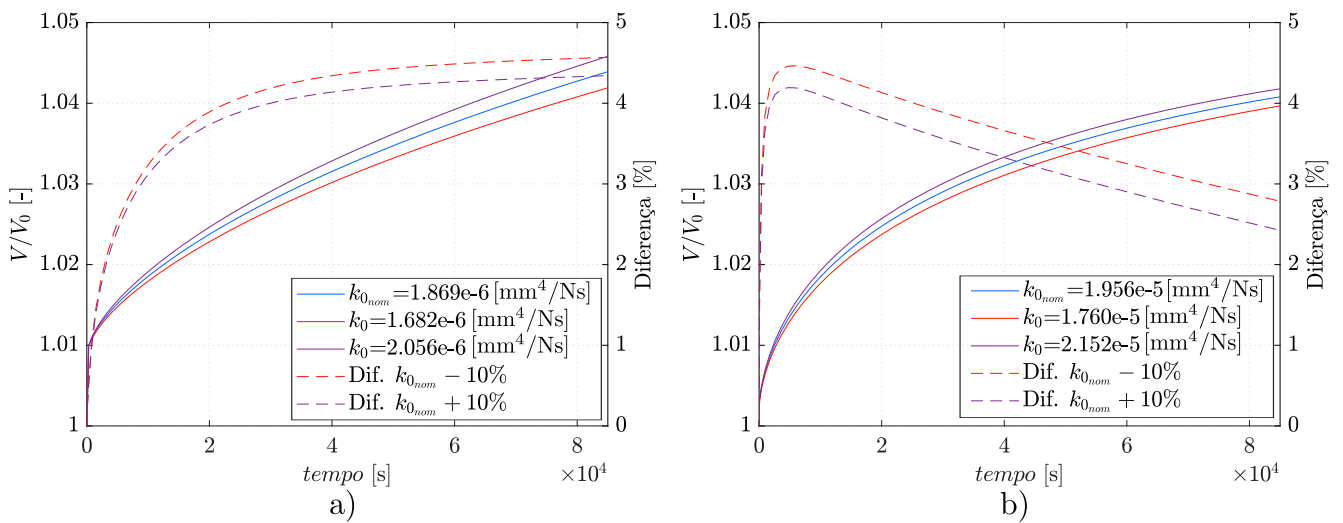
Fonte: Autoria própria.

parâmetro, ambos os conjuntos demonstram proporções semelhantes ao aumentar o cF_0 ,

ocasionando uma maior deformação volumétrica e deslocando a curva para cima em uma diferença entre 13 a 17%. Em contrapartida, diminuir este parâmetro faz com que o inchaço tenha menor magnitude, deslocando a curva volumétrica para baixo e produzindo uma diferença semelhante nas curvas, variando entre 13 e 16% para os conjuntos investigados. Adicionalmente, na análise de sensibilidade deste parâmetro, nota-se novamente uma maior instabilidade do conjunto de parâmetros \mathbf{p}^1 , onde observaram-se valores de diferença percentual superiores a 50% nos instantes iniciais da simulação.

O parâmetro de permeabilidade também relaciona-se diretamente com o fenômeno de inchaço ocasionado no tendão. Maiores valores de k_0 desencadeiam um fluxo maior de fluido para dentro do tecido, aumentando sua deformação e deslocando a curva numérica de volume para cima. De forma oposta, diminuir a permeabilidade altera diretamente o fluxo de fluido para o interior do tecido, resultando em um inchaço de menor magnitude. Conforme pode ser observado nas curvas demonstradas pela Figura 27 a) e b), uma variação

Figura 27 – Variação da permeabilidade hidráulica em 10% para o conjunto a) \mathbf{p}^1 e b) \mathbf{p}^2 .



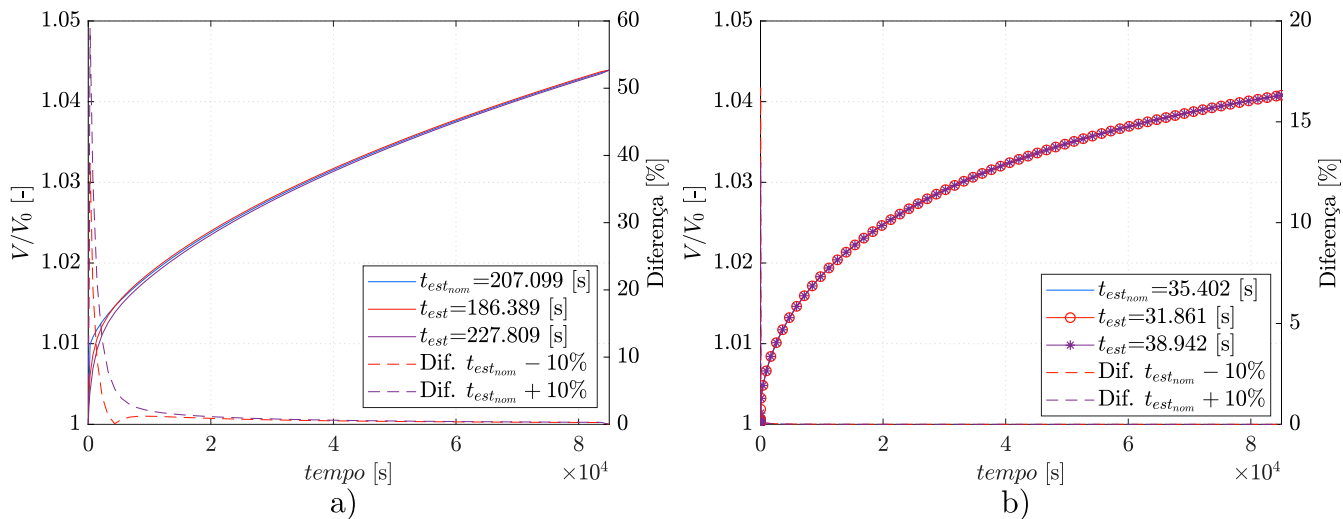
Fonte: Autoria própria.

de 10% do parâmetro otimizado de permeabilidade exerce pouca alteração da nova curva volumétrica em relação a curva otimizada para ambos os conjuntos \mathbf{p}^1 e \mathbf{p}^2 , ocasionando uma diferença percentual inferior a 5% para o primeiro caso e 3% no segundo. Isso ocorre devido à baixa magnitude dos valores de permeabilidade hidrostática otimizados para este experimento. No entanto, comparando a variação em ambos os conjuntos, nota-se que os valores mais altos de permeabilidade utilizados no conjunto \mathbf{p}^2 apresentam maior sensibilidade, ocasionando uma diferença percentual mais súbita entre as curvas. Apesar disso, a diferença percentual da variação do conjunto \mathbf{p}^2 apresentou menor magnitude em comparação à diferença calculada para este parâmetro no conjunto \mathbf{p}^1 , demonstrando

novamente uma maior adequação numérica para o fenômeno experimental investigado.

Finalmente, analisando o parâmetro de tempo de estabilização t_{est} da densidade de carga fixa inicial, verificou-se uma baixa sensibilidade para ambos os conjuntos. As Figuras 28 a) e b) apresentam, respectivamente, as curvas numéricas obtidas para os conjuntos \mathbf{p}^1 e \mathbf{p}^2 , variando o parâmetro t_{est} em mais ou menos 10% e mantendo os demais fixos. Devido à maior magnitude do parâmetro no primeiro conjunto, a Figura 28 a) apresentou uma maior sensibilidade no início da simulação, resultando em uma diferença percentual entre as curvas próxima a 60% nos instantes iniciais da simulação. No caso do segundo conjunto, representado pela Figura 28 b), o parâmetro mostrou-se pouco sensível à variação aplicada, ocasionando uma diferença percentual praticamente nula entre as simulações.

Figura 28 – Variação do tempo de crescimento de cF_0 em 10% para o conjunto a) \mathbf{p}^1 e b) \mathbf{p}^2 .



Fonte: Autoria própria.

6 Conclusão

6.1 Considerações finais

A presente dissertação investigou o fenômeno de inchaço observado em tendões quando submetidos à solitação química ocasionada por um desequilíbrio de concentração de soluto do tecido em relação ao banho externo. Para este fim, um modelo poroelástico bifásico foi utilizado, incluindo em sua formulação um equacionamento constitutivo para a pressão osmótica de Donnan. Para solucionar o equacionamento utilizou-se uma discretização em elementos finitos de forma análoga às investigações referências [Wilson, Donkelaar e Huyghe \(2005\)](#) e [Galbusera et al. \(2011\)](#).

Para verificar a representatividade do modelo em relação ao fenômeno investigado, utilizou-se um código numérico laboratorial de elementos finitos desenvolvido na linguagem FORTRAN. No código supramencionado, os modelos constitutivos referentes à matriz sólida, fluxo de fluido e pressão osmótica foram implementados e utilizados para solucionar um problema teste, validado em seguida por meio da utilização de um programa de elementos finitos de simulações biomecânicas (FEBio). Posteriormente, tendo como base os resultados experimentais obtidos em pesquisas prévias ([CARNIEL et al., 2023](#)), um estudo de caso foi proposto e investigado. Para tal, utilizou-se o programa FEBio juntamente com um código em *Matlab* desenvolvido na pesquisa de [Lanzendorf \(2023\)](#), visando reproduzir numericamente o experimento laboratorial e ajustar seus parâmetros constitutivos.

Com as investigações executadas, verificou-se uma concordância entre a formulação implementada no código laboratorial (CEOS) e o programa referência (FEBio) utilizado para comparação direta de resultados. Adicionalmente, o estudo de caso investigado permitiu um maior esclarecimento a respeito dos parâmetros constitutivos e sua relação com o fenômeno observado. Evidenciou-se a influência direta do módulo de elasticidade e do coeficiente de Poisson com a deformação sofrida pelo tecido. A baixa velocidade de fluxo envolvida no fenômeno investigado (evidenciada pelos valores de permeabilidade hidráulica resultantes do modelo de otimização), e também a relação diretamente proporcional entre a densidade de carga fixa interna ao tecido e a magnitude da pressão osmótica gerada.

Ademais, devido ao fato do ensaio experimental não ter atingido um ponto de estabilização na deformação volumétrica da amostra, a curva experimental não foi capaz de descrever o fenômeno completo de inchaço, limitando os dados experimentais utilizados na otimização. Além disso, a ampla faixa de possíveis valores referentes aos parâmetros constitutivos identificados na literatura para o tecido e fenômeno investigado (E , ν , cF_0 , k_0) também contribuem para a falta de unicidade de solução em relação à curva numérica

otimizada e os dados experimentais. Sendo assim, os métodos de otimização aplicados permitiram a obtenção de mais de um conjunto solução para o ajuste entre as curvas volumétricas experimental e numérica. Adicionalmente, observou-se a obtenção de valores de baixa magnitude em relação à permeabilidade e à densidade de carga fixa. De acordo com a literatura investigada, a faixa de valores utilizada para estes parâmetros não possui uma definição precisa, variando de acordo com a amostra utilizada e o fenômeno investigado. Como a amostra experimental trata-se de um tendão flexor bovino, constatou-se que valores mais altos do módulo de elasticidade E e coeficiente de Poisson ν adequam-se melhor na descrição comportamental deste tecido. Em relação à densidade de carga fixa inicial cF_0 , não foram encontrados estudos envolvendo o mesmo tipo de tecido e fenômeno investigado, permanecendo portanto uma incerteza em relação à faixa de valores esperada para este parâmetro constitutivo.

Como conclusão final, embora tenham sido observadas discrepâncias na fase inicial das simulações executadas no em código laboratorial e programa referência, observou-se ampla concordância quando utilizados métodos de refino da malha numérica. Sendo assim, conclui-se que a formulação implementada é capaz de representar o fenômeno investigado de forma satisfatória, permitindo a expansão do código laboratorial (CEOS) e continuidade de investigações que envolvem o fenômeno de inchaço em tecidos moles. Em relação ao estudo de caso, verificou-se que os modelos constitutivos utilizados são capazes de descrever o fenômeno, obtendo uma maior assertividade em conjuntos de parâmetros constitutivos com valores mais altos de rigidez e coeficiente de Poisson para o tecido e fenômeno investigado. Também evidenciou-se uma baixa velocidade do fluxo de fluido envolvida no fenômeno investigado. Esta característica fenomenológica foi constatada (numericamente e experimentalmente) pela baixa magnitude de permeabilidade hidráulica otimizada para a simulação e pela não estabilização do ensaio experimental no período de 24 horas. Finalmente, constatou-se a relação direta entre a densidade de carga fixa cF_0 e a magnitude de pressão osmótica gerada no tecido, evidenciando a importância de investigações deste parâmetro e obtenção de valores mais precisos em próximos estudos.

6.2 Sugestões para trabalhos futuros

Visando dar continuidade às investigações iniciadas na presente dissertação, destacam-se pontos importantes para consideração em trabalhos futuros:

- Expandir a formulação bifásica poroelástica implementada incluindo novas equações constitutivas para a pressão osmótica.
- Realizar ensaios experimentais envolvendo o fenômeno de inchaço em tendões até a obtenção de uma estabilização em relação à deformação volumétrica sofrida pelo tecido, permitindo a realização de um ajuste de curva com unicidade de solução.

-
- Executar investigações relacionadas à bioquímica dos tendões, permitindo uma identificação mais precisa em relação ao parâmetro constitutivo de densidade de carga fixa inicial interna ao tecido (*e.g.*, quantificação de glicosaminoglicanos).
 - Utilizar diferentes modelos constitutivos para obtenção na resposta mecânica da matriz sólida (*e.g.* Holmes-Mow, Mooney-Rivlin, etc.) e avaliar sua influência comportamental no tecido.
 - Utilizar modelos de permeabilidade não linear, a fim de obter uma maior adequação relacionada ao fluxo de fluido na direção interna ao tecido em decorrência da pressão osmótica estabelecida.

Referências

- ATALA, A. Regenerative medicine strategies. *Journal of pediatric surgery*, Elsevier, v. 47, n. 1, p. 17–28, 2012. Citado na página 35.
- ATESHIAN, G. A. et al. Modeling the matrix of articular cartilage using a continuous fiber angular distribution predicts many observed phenomena. 2009. Citado na página 55.
- ATESHIAN, G. A.; WEISS, J. A. Anisotropic hydraulic permeability under finite deformation. *Journal of biomechanical engineering*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 132, n. 11, 2010. Citado na página 137.
- BONET, J.; WOOD, R. D. *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*. 2. ed. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2008. Citado 5 vezes nas páginas 48, 59, 60, 124 e 137.
- CARNIEL, T. A. et al. Is the fluid volume fraction equal to the water content in tendons? insights on biphasic modeling. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, Elsevier, v. 140, p. 105703, 2023. Citado 3 vezes nas páginas 61, 83 e 95.
- CHEN, Y.; CHEN, X.; HISADA, T. Non-linear finite element analysis of mechanical electrochemical phenomena in hydrated soft tissues based on triphasic theory. *International journal for numerical methods in engineering*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 65, n. 2, p. 147–173, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 45.
- CORTES, D. H. et al. Elastic, permeability and swelling properties of human intervertebral disc tissues: A benchmark for tissue engineering. *Journal of biomechanics*, Elsevier, v. 47, n. 9, p. 2088–2094, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 54.
- COUSSY, O. *Poromechanics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004. Citado na página 61.
- DONNAN, F. G. The theory of membrane equilibria. *Chemical reviews*, ACS Publications, v. 1, n. 1, p. 73–90, 1924. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 53.
- EHLERS, W.; KARAJAN, N.; MARKERT, B. An extended biphasic model for charged hydrated tissues with application to the intervertebral disc. *Biomechanics and modeling in mechanobiology*, Springer, v. 8, n. 3, p. 233–251, 2009. Citado na página 46.
- FRIJNS, A. J. H.; HUYGHE, J. M.; JANSSEN, J. D. A validation of the quadriphasic mixture theory for intervertebral disc tissue. *International Journal of Engineering Science*, Elsevier, v. 35, n. 15, p. 1419–1429, 1997. Citado na página 46.
- FUNG, Y. Elasticity of soft tissues in simple elongation. *American Journal of Physiology-Legacy Content*, American Physiological Society, v. 213, n. 6, p. 1532–1544, 1967. Citado na página 41.
- GALBUSERA, F. et al. Comparison of four methods to simulate swelling in poroelastic finite element models of intervertebral discs. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, v. 4, n. 7, p. 1234–1241, 2011. ISSN 1751-6161. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1751616111000816>>. Citado 9 vezes nas páginas 37, 38, 39, 47, 53, 54, 55, 61 e 95.

- GROUND, M. D. Obstacles and challenges for tissue engineering and regenerative medicine: Australian nuances. *Clinical and Experimental Pharmacology and Physiology*, Wiley Online Library, v. 45, n. 4, p. 390–400, 2018. Citado na página 35.
- GU, W. Y.; LAI, W. M.; MOW, V. C. A Mixture Theory for Charged-Hydrated Soft Tissues Containing Multi-electrolytes: Passive Transport and Swelling Behaviors. *Journal of Biomechanical Engineering*, v. 120, n. 2, p. 169–180, 04 1998. ISSN 0148-0731. Disponível em: <<https://doi.org/10.1115/1.2798299>>. Citado na página 38.
- GU, W. Y.; YAO, H. Effects of hydration and fixed charge density on fluid transport in charged hydrated soft tissues. *Annals of biomedical engineering*, Springer, v. 31, n. 10, p. 1162–1170, 2003. Citado na página 37.
- GURTIN, M. E.; FRIED, E.; ANAND, L. *The mechanics and thermodynamics of continua*. Cambridge, England: Cambridge University Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 60.
- HATANO, A. et al. An integrated finite element simulation of cardiomyocyte function based on triphasic theory. *Frontiers in physiology*, Frontiers Media Sa, LAUSANNE, v. 6, p. 287–287, 2015. Citado na página 45.
- HAYES, W.; MOCKROS, L. Viscoelastic properties of human articular cartilage. *Journal of applied physiology*, v. 31, n. 4, p. 562–568, 1971. Citado na página 41.
- HOLMES, M.; MOW, V. C. The nonlinear characteristics of soft gels and hydrated connective tissues in ultrafiltration. *Journal of biomechanics*, Elsevier, v. 23, n. 11, p. 1145–1156, 1990. Citado na página 61.
- HOLZAPFEL, G. A. *Nonlinear solid mechanics: A continuum approach for engineering*. Chichester, England: John Wiley & Sons, 2000. Citado 17 vezes nas páginas 48, 59, 60, 105, 106, 107, 115, 119, 120, 121, 123, 124, 125, 127, 128, 131 e 133.
- HOLZAPFEL, G. A. et al. Biomechanics of soft tissue. *The handbook of materials behavior models*, Academic Press San Diego, USA, v. 3, n. 1, p. 1049–1063, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 136.
- HUYGHE, J. M.; JANSSEN, J. Quadriphasic mechanics of swelling incompressible porous media. *International Journal of Engineering Science*, Elsevier, v. 35, n. 8, p. 793–802, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 54.
- IKADA, Y. Challenges in tissue engineering. *Journal of the Royal Society Interface*, The Royal Society London, v. 3, n. 10, p. 589–601, 2006. Citado na página 35.
- JACOBS, N. T. et al. Validation and application of an intervertebral disc finite element model utilizing independently constructed tissue-level constitutive formulations that are nonlinear, anisotropic, and time-dependent. *Journal of Biomechanics*, v. 47, n. 11, p. 2540–2546, 2014. ISSN 0021-9290. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929014003479>>. Citado na página 47.
- JOG, C.; HUTTER, K. Foundations and applications of mechanics, volume i: Continuum mechanics. *Appl. Mech. Rev.*, v. 56, n. 4, p. B51–B51, 2003. Citado na página 70.

JUNQUEIRA, L.; CARNEIRO, J. *Histologia Básica. 11a Edição*. 12. ed. [S.l.]: Editora Guanabara Koogan, 2013. ISBN 978-85-277-2311-4. Citado na página 36.

KLAHR, B. *Modelo de homogeneização computacional bifásico em grandes deformações: um estudo aplicado a investigações numéricas de tecidos biológicos moles*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2022. Citado na página 63.

LAI, W. M.; HOU, J.; MOW, V. C. A triphasic theory for the swelling and deformation behaviors of articular cartilage. 1991. Citado 6 vezes nas páginas 37, 43, 45, 53, 54 e 55.

LANIR, Y. Biorheology and fluid flux in swelling tissues. i. bicomponent theory for small deformations, including concentration effects. *Biorheology*, IOS Press, v. 24, n. 2, p. 173–187, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 54.

LANZENDORF, J. Z. *O papel do escoamento intersticial no comportamento poroviscoelástico de tendões na compressão transversal às fibras de colágeno*. 2023. Citado 3 vezes nas páginas 85, 86 e 95.

MAAS, S. et al. *Febio: Finite elements for biomechanics*. *Journal of Biomechanical Engineering*, p. 134(1), 2012. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 56.

MAAS, S. et al. *FEBio: Finite elementos for biomechanics: Theory manual version 4.1*. 2023. Disponível em: <<https://febio.org/knowledgebase/>>. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 61.

MAK, A. The apparent viscoelastic behavior of articular cartilage—the contributions from the intrinsic matrix viscoelasticity and interstitial fluid flows. 1986. Citado na página 42.

MAK, A. F. Unconfined compression of hydrated viscoelastic tissues: a biphasic poroviscoelastic analysis. *Biorheology*, IOS Press, v. 23, n. 4, p. 371–383, 1986. Citado na página 42.

MAROUDAS, A.; EVANS, H. A study of ionic equilibria in cartilage. *Connective Tissue Research*, Taylor & Francis, v. 1, n. 1, p. 69–77, 1972. Citado na página 55.

MASIC, A. et al. Osmotic pressure induced tensile forces in tendon collagen. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 1–8, 2015. Citado na página 38.

MESCHER, A. L. *Junqueira's basic histology: text and atlas*. 15. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Medical, 2018. v. 12. ISBN 978-1-26-002618-4. Citado 3 vezes nas páginas 35, 36 e 37.

MOW, V. C. et al. Biphasic creep and stress relaxation of articular cartilage in compression: theory and experiments. *Journal of biomechanical engineering*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 102, n. 1, p. 73–84, 1980. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42 e 46.

MYERS, E.; LAI, W.; MOW, V. A continuum theory and an experiment for the ion-induced swelling behavior of articular cartilage. 1984. Citado na página 42.

OLSEN, S.; OLOYEDE, A. A finite element analysis methodology for representing the articular cartilage functional structure. *Computer Methods in Biomechanics & Biomedical Engineering*, Taylor & Francis, v. 5, n. 6, p. 377–386, 2002. Citado na página 47.

- OVERBEEK, J. T. The donnan equilibrium. *Prog. Biophys. Biophys. Chem*, v. 6, n. 1, p. 57–84, 1956. Citado na página 53.
- SAFA, B. N. et al. Evaluation of transverse poroelastic mechanics of tendon using osmotic loading and biphasic mixture finite element modeling. *Journal of biomechanics*, Elsevier, v. 109, p. 109892, 2020. Citado na página 86.
- SANDLER, S. I. *Chemical, biochemical, and engineering thermodynamics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2017. Citado na página 58.
- SCHMIDT, H. et al. Response analysis of the lumbar spine during regular daily activities—a finite element analysis. *Journal of biomechanics*, Elsevier, v. 43, n. 10, p. 1849–1856, 2010. Citado na página 47.
- SCREEN, H. R. et al. The influence of swelling and matrix degradation on the microstructural integrity of tendon. *Acta biomaterialia*, Elsevier, v. 2, n. 5, p. 505–513, 2006. Citado na página 38.
- SPIPKER, R.; SUH, J.; MOW, V. A finite element formulation of the nonlinear biphasic model for articular cartilage and hydrated soft tissues including strain-dependent permeability. *Computational methods in bioengineering*, ASME New York, p. 81–92, 1988. Citado na página 42.
- SPIPKER, R.; SUH, J.-K. Formulation and evaluation of a finite element model for the biphasic model of hydrated soft tissues. *Computers & Structures*, Elsevier, v. 35, n. 4, p. 425–439, 1990. Citado na página 43.
- SUN, D. N. et al. A mixed finite element formulation of triphasic mechano-electrochemical theory for charged, hydrated biological soft tissues. *International journal for numerical methods in engineering*, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK, v. 45, n. 10, p. 1375–1402, 1999. ISSN 0029-5981. Citado na página 44.
- THIESEN, J. L. M. *Algoritmos e estratégias de solução em poroviscoelasticidade: um estudo aplicado à modelagem de tecidos biológicos moles submetidos a grandes deformações*. 2021. Citado 2 vezes nas páginas 63 e 71.
- WILSON, W.; DONKELAAR, C. C. van; HUYGHE, J. M. A Comparison Between Mechano-Electrochemical and Biphasic Swelling Theories for Soft Hydrated Tissues. *Journal of Biomechanical Engineering*, v. 127, n. 1, p. 158–165, 03 2005. ISSN 0148-0731. Disponível em: <<https://doi.org/10.1115/1.1835361>>. Citado 9 vezes nas páginas 38, 39, 46, 47, 53, 54, 55, 61 e 95.
- WU, H.-C.; YAO, R.-F. Mechanical behavior of the human annulus fibrosus. *Journal of biomechanics*, Elsevier, v. 9, n. 1, p. 1–7, 1976. Citado na página 41.
- YAO, H.; GU, W. Y. Three-dimensional inhomogeneous triphasic finite-element analysis of physical signals and solute transport in human intervertebral disc under axial compression. *Journal of biomechanics*, Elsevier, v. 40, n. 9, p. 2071–2077, 2007. Citado na página 45.
- ZIMMERMAN, B. K. et al. Direct osmotic pressure measurements in articular cartilage demonstrate nonideal and concentration-dependent phenomena. *Journal of Biomechanical Engineering*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 143, n. 4, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 54 e 55.

Apêndices

APÊNDICE A – Operações auxiliares

Neste apêndice são desenvolvidas operações de derivadas direcionais de algumas grandezas da mecânica do contínuo. Essas operações são úteis para a formulação desenvolvida neste trabalho.

A.1 Derivada direcional do gradiente de deformação

Conforme [Holzapfel \(2000\)](#) o gradiente de deformação \mathbf{F} é definido por,

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \mathcal{X}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}}. \quad (\text{A.1})$$

O gradiente de deformação \mathbf{F} depende do tempo t e da posição material \mathbf{X} . Sendo assim, pode-se relacionar este tensor ao deslocamento \mathbf{u} .

Ainda conforme [Holzapfel \(2000\)](#), primeira variação do gradiente de deformação $\mathbf{F}(\mathbf{u})$ na direção de $\delta\mathbf{u}$ é denominada por $\delta\mathbf{F}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u})$ e é equivalente à diferenciação ordinária de $\mathbf{F}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u})$ em relação ao parâmetro ϵ . Portanto, calcula-se a variação do gradiente de deformação \mathbf{F} na direção do campo de deslocamentos virtuais $\delta\mathbf{u}$ da seguinte maneira:

$$\delta\mathbf{F}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) = \frac{d}{d\epsilon} \mathbf{F}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u})|_{\epsilon=0}, \quad (\text{A.2})$$

considerando a definição do gradiente de deformação demonstrada pela Eq. (2.7) tem-se:

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{F} &= \frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\mathbf{u} + \epsilon\delta\mathbf{u}) \right] \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \frac{d}{d\epsilon} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \epsilon \frac{\partial \delta\mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right] \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \frac{d}{d\epsilon} \left[\nabla_{\mathbf{X}}^T \mathbf{u} + \epsilon \nabla_{\mathbf{X}} \delta\mathbf{u} \right] \Big|_{\epsilon=0} \\ &= \nabla_{\mathbf{X}} \delta\mathbf{u}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde o operador $\nabla(\cdot)$ representa o gradiente da variável argumento e o subscrito \mathbf{X} representa que a operação é realizada em configuração material.

De forma análoga, obtêm-se que a variação do gradiente de deformação \mathbf{F} na direção do incremento de deslocamento virtuais $\Delta\mathbf{u}$, denominada por $\Delta\mathbf{F}$ é definida como:

$$\Delta\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}} \Delta\mathbf{u}. \quad (\text{A.4})$$

A.2 Derivada direcional do Jacobiano volumétrico

A derivada direcional do Jacobiano na direção de $\delta \mathbf{u}$ e $\Delta \mathbf{u}$ é calculada aplicando a regra da cadeia, de forma que:

$$\begin{aligned} \delta J &= \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{F}(\mathbf{u}))}{\partial \mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} \\ &= \frac{\partial J}{\partial \mathbf{F}} : \left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} \right] \\ &= J \mathbf{F}^{-T} : \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} \\ &= J \mathbf{I} : \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

considerando que a relação entre um gradiente espacial e material de um campo vetorial é (HOLZAPFEL, 2000):

$$\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} \mathbf{F}^{-1}, \quad (\text{A.6})$$

reescreve-se a Eq. (A.5) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \delta J &= J \mathbf{I} : \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} \\ &= J \text{tr}(\nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u}) \\ &= J \text{div} \delta \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

De forma análoga, a derivada direcional do Jacobiano na direção do incremento de deslocamento $\Delta \mathbf{u}$ é:

$$\Delta J = \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} = J \text{div} \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{A.8})$$

A.3 Derivada direcional do tensor de deformação de Green-Lagrange

Considerando a definição do tensor de deformação de Green-Lagrange,

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} [\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}], \quad (\text{A.9})$$

e utilizando o operador variacional, obtém-se

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{E} &= \delta \left\{ \frac{1}{2} [\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}] \right\} \\ &= \frac{1}{2} [(\delta \mathbf{F}^T) \mathbf{F} + \mathbf{F}^T (\delta \mathbf{F}) - \delta \mathbf{I}] \\ &= \frac{1}{2} [\nabla_{\mathbf{x}}^T (\delta \mathbf{u}) \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} (\delta \mathbf{u})] \\ &= \text{sym} [\mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} (\delta \mathbf{u})]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

De forma semelhante à utilizada na obtenção das relações demonstradas pela Eq. (A.10), obtém-se a derivada direcional do tensor de deformação de Green-Lagrange na

direção do incremento de deslocamento $\Delta \mathbf{u}$ conforme:

$$\begin{aligned}
\Delta \mathbf{E} &= \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} \\
&= \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\frac{1}{2} [\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}] \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\
&= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\
&= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{F}^T}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} \right) \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} \right) \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[(\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u}) \mathbf{F} + \mathbf{F}^T (\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}) \right] \\
&= \text{sym} \left[\mathbf{F}^T (\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}) \right].
\end{aligned} \tag{A.11}$$

A.4 Derivada direcional do tensor de deformação de Euler-Almansi

Para obter a variação do tensor de deformação de Euler-Almansi $\delta \mathbf{e}$, utiliza-se o resultado demonstrado na Eq. (A.10) juntamente com a operação de *push-forward* do tensor de deformação de Green Lagrange descrita por [Holzapfel \(2000\)](#) conforme:

$$\mathbf{e} = \chi_*(\mathbf{E}) = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1}, \tag{A.12}$$

Sendo assim, tem-se que a variação do tensor de deformação de Euler-Almansi $\delta \mathbf{e}$ é calculada conforme

$$\begin{aligned}
\delta \mathbf{e} &= \mathbf{F}^{-T} (\delta \mathbf{E}) \mathbf{F}^{-1} \\
&= \mathbf{F}^{-T} \text{sym} \left[\mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} (\delta \mathbf{u}) \right] \mathbf{F}^{-1} \\
&= \text{sym} \left[\mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} (\delta \mathbf{u}) \mathbf{F}^{-1} \right] \\
&= \text{sym} \left[\nabla_{\mathbf{x}} (\delta \mathbf{u}) \mathbf{F}^{-1} \right].
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Novamente, aplicando a relação da Eq. (A.6), obtém-se que a variação do tensor de deformação de Euler-Almansi é equivalente à parcela simétrica do gradiente espacial de variação do deslocamento virtual

$$\delta \mathbf{e} = \text{sym} \left[\nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} \right]. \tag{A.14}$$

Analogamente, obtém-se a derivada direcional do tensor de deformação de Euler-Almansi na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}$ conforme:

$$\begin{aligned}
\Delta \mathbf{e} &= \mathbf{F}^{-T} (\Delta \mathbf{E}) \mathbf{F}^{-1} \\
&= \mathbf{F}^{-T} \text{sym} \left[\mathbf{F}^T (\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}) \right] \mathbf{F}^{-1} \\
&= \text{sym} \left[\mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^T (\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}) \mathbf{F}^{-1} \right] \\
&= \text{sym} \left[\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u} \right].
\end{aligned} \tag{A.15}$$

A.5 Derivada direcional dos campos virtuais de deformação

Pode-se também calcular a derivada direcional das variações $\delta\mathbf{E}$ e $\delta\mathbf{e}$ na direção do incremento de deslocamento $\Delta\mathbf{u}$. Sendo assim, obtêm-se as seguintes relações:

$$\begin{aligned}
 \Delta\delta\mathbf{E} &= \frac{\partial\delta\mathbf{E}}{\partial\mathbf{u}} \cdot \Delta\mathbf{u} \\
 &= \frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} \left[\text{sym} \left(\mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{u} \right) \right] \cdot \Delta\mathbf{u} \\
 &= \text{sym} \left[\frac{\partial}{\partial\mathbf{u}} \left(\mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{u} \right) \right] \cdot \Delta\mathbf{u} \\
 &= \text{sym} \left[\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta\mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{u} \right].
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

Novamente, utilizando a operação de *push-forward* (A.12), pode-se obter esta mesma derivada em relação ao campo virtual de deformação de Euler-Almansi,

$$\begin{aligned}
 \Delta\delta\mathbf{e} &= \frac{\partial\delta\mathbf{e}}{\partial\mathbf{u}} \cdot \Delta\mathbf{u} \\
 &= \mathbf{F}^{-T} \left[\frac{\partial\delta\mathbf{E}}{\partial\mathbf{u}} \cdot \Delta\mathbf{u} \right] \mathbf{F}^{-1} \\
 &= \mathbf{F}^{-T} \text{sym} \left[\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta\mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{u} \right] \mathbf{F}^{-1} \\
 &= \text{sym} \left[\mathbf{F}^{-T} \nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta\mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} (\delta\mathbf{u}) \mathbf{F}^{-1} \right] \\
 &= \text{sym} \left[\left(\nabla_{\mathbf{x}} \Delta\mathbf{u} \mathbf{F}^{-1} \right)^T \nabla_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{u} \mathbf{F}^{-1} \right].
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

Aplicando o conceito da Eq. (A.6), obtêm-se que:

$$\Delta\delta\mathbf{e} = \text{sym} \left[\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta\mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{u} \right]. \tag{A.18}$$

A.6 Derivada direcional do segundo tensor de tensões de Piola-Kirchoff

A derivada direcional do segundo tensor de tensões de Piola-Kirchoff referente à fase sólida \mathbf{S}^s na direção ao incremento $\Delta\mathbf{u}$ é obtida conforme:

$$\begin{aligned}
 \Delta\mathbf{S}^s &= \frac{\partial\mathbf{S}^s(\mathbf{E}(\mathbf{u}))}{\partial\mathbf{u}} \cdot \Delta\mathbf{u} \\
 &= \frac{\partial\mathbf{S}^s}{\partial\mathbf{E}} : \frac{\partial\mathbf{E}}{\partial\mathbf{u}} \cdot \Delta\mathbf{u},
 \end{aligned} \tag{A.19}$$

utilizando o resultado da Eq. (A.11), tem-se:

$$\Delta\mathbf{S}^s = \frac{\partial\mathbf{S}^s}{\partial\mathbf{E}} : \text{sym} \left[\mathbf{F}^T (\nabla_{\mathbf{x}} \Delta\mathbf{u}) \right], \tag{A.20}$$

onde a derivada parcial do tensor de tensões \mathbf{S}^s em relação ao tensor de deformação \mathbf{E} é definida como o módulo tangente consistente material $\mathbb{C}_{\mathbf{x}}$ relacionado à fase sólida do

contínuo

$$\mathbb{C}_{\mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{S}^s}{\partial \mathbf{E}}. \quad (\text{A.21})$$

Considerando as propriedades de simetria deste tensor de quarta ordem, obtém-se a seguinte relação para a derivada direcional de \mathbf{S}^s na direção de $\Delta \mathbf{u}$:

$$\Delta \mathbf{S}^s = \mathbb{C}_{\mathbf{x}} : \mathbf{F}^T(\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}). \quad (\text{A.22})$$

APÊNDICE B – Conservação do momento linear

A conservação da quantidade de movimento linear na configuração espacial é descrita conforme,

$$\int_{\Omega_x} \rho \dot{\mathbf{v}} dv = \int_{\Omega_x} \mathbf{b}_x dv + \int_{\partial\Omega_x} \bar{\mathbf{t}} ds, \quad (\text{B.1})$$

onde Ω_x representa o interior do domínio ocupado pelo corpo na configuração espacial, $\partial\Omega_x$ representa a fronteira do domínio supramencionado e dv e ds representam os elementos diferenciais de volume e superfície, também na configuração espacial.

Aplicando o teorema de Cauchy, que relaciona o tensor de tensões com a força por unidade de área $\bar{\mathbf{t}}$, aplicada na fronteira do corpo na direção normal \mathbf{n}

$$\bar{\mathbf{t}} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}, \quad (\text{B.2})$$

pode-se reescrever a Eq. (B.1) como:

$$\int_{\Omega_x} \rho \dot{\mathbf{v}} dv = \int_{\Omega_x} \mathbf{b}_x dv + \int_{\partial\Omega_x} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} ds. \quad (\text{B.3})$$

Aplicando o teorema da divergência na Eq. (B.3), obtém-se:

$$\int_{\Omega_x} \rho \dot{\mathbf{v}} dv = \int_{\Omega_x} \mathbf{b}_x dv + \int_{\Omega_x} \text{div } \boldsymbol{\sigma} dv. \quad (\text{B.4})$$

Unindo as integrais de mesmo domínio da Eq. (B.4), tem-se:

$$\int_{\Omega_x} [\rho \dot{\mathbf{v}} - \mathbf{b}_x - \text{div } \boldsymbol{\sigma}] dv = \mathbf{0}, \quad (\text{B.5})$$

como o elemento diferencial de volume na configuração espacial é necessariamente não nulo, pode-se concluir a partir da Eq. (B.5), que a seguinte relação é válida:

$$\rho \dot{\mathbf{v}} - \mathbf{b}_x - \text{div } \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}. \quad (\text{B.6})$$

Considerando a hipótese 5 descrita na Seção 2.2.1.2, obtém-se a equação de governo da conservação de momento linear da formulação,

$$\text{div } \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (\text{B.7})$$

adicionalmente, considerando a hipótese 3 e 4 da Seção 2.2.1.2, pode-se reescrever a Eq. (B.7) como:

$$\text{div } (\boldsymbol{\sigma}^s + \boldsymbol{\sigma}^f) = \mathbf{0}, \quad (\text{B.8})$$

$$\operatorname{div} (\boldsymbol{\sigma}^s - p\mathbf{I}) = \mathbf{0}. \quad (\text{B.9})$$

Na Eq. (B.9) a tensão efetiva do modelo bifásico é composta por duas parcelas, sendo uma referente à fase sólida (calculada através de modelos constitutivos) e outra referente à fase fluida (obtida por meio da pressão de poro atuante no tecido).

APÊNDICE C – Conservação do momento angular

De forma análoga à conservação do momento linear, pode-se obter o equacionamento relacionado à conservação do momento angular para a descrição espacial do modelo, de forma que:

$$\int_{\Omega_x} \rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{v}}) dv = \int_{\Omega_x} \mathbf{r} \times \mathbf{b}_x dv + \int_{\partial\Omega_x} \mathbf{r} \times \bar{\mathbf{t}} ds, \quad (\text{C.1})$$

onde \mathbf{r} é um vetor definido pela diferença entre a posição atual do ponto analisado com a sua posição em um instante anterior.

Aplicando o teorema de Cauchy demonstrado na Eq. (B.2), pode-se reescrever a Eq. (C.1) conforme:

$$\int_{\Omega_x} \rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{v}}) dv = \int_{\Omega_x} \mathbf{r} \times \mathbf{b}_x dv + \int_{\partial\Omega_x} \mathbf{r} \times \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} ds. \quad (\text{C.2})$$

Pelo teorema da divergência, pode-se reescrever a Eq. (C.2) como:

$$\int_{\Omega_x} \rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{v}}) dv = \int_{\Omega_x} \mathbf{r} \times \mathbf{b}_x dv + \int_{\Omega_x} [\mathbf{r} \times \text{div } \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\epsilon} : (\text{grad } \mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^T] dv, \quad (\text{C.3})$$

onde $\boldsymbol{\epsilon}$ é o tensor de permutação de terceira ordem.

Rearranjando os termos da Eq. (C.3) em uma única integral, tem-se:

$$\int_{\Omega_x} [\mathbf{r} \times (\rho \dot{\mathbf{v}} - \mathbf{b}_x - \text{div } \boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{\epsilon} : (\text{grad } \mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^T] dv = 0. \quad (\text{C.4})$$

Por balanço mecânico (Eq. B.6), tem-se que:

$$(\rho \dot{\mathbf{v}} - \mathbf{b}_x - \text{div } \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{0}, \quad (\text{C.5})$$

logo, a Eq. (C.4) se reduz a

$$\int_{\Omega_x} [\boldsymbol{\epsilon} : (\text{grad } \mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^T] dv = 0. \quad (\text{C.6})$$

Como o elemento diferencial de volume é diferente de zero, a seguinte relação é válida:

$$\boldsymbol{\epsilon} : (\text{grad } \mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^T = 0. \quad (\text{C.7})$$

A relação demonstrada na Eq. (C.7) gera como consequência o resultado final da conservação de momento angular conforme,

$$\boldsymbol{\epsilon} : (\text{grad } \mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^T = 0 \implies \epsilon_{ijk} \sigma_{jk} = 0 \therefore \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T. \quad (\text{C.8})$$

APÊNDICE D – Conservação da massa

Para obter a expressão local de conservação de massa na configuração espacial para cada fase do modelo bifásico, primeiramente considera-se a definição da massa total de cada fase m^i conforme:

$$m^i = \int_{\Omega_x} dm^i = \int_{\Omega_x} \rho^i dv^i. \quad (\text{D.1})$$

Pode-se reescrever a Eq.(D.1) através da relação da densidade aparente com a densidade intrínseca de cada fase como indicado na Eq. (2.17), de maneira que:

$$m^i = \int_{\Omega_x} \rho^i dv^i = \int_{\Omega_x} \rho_\mu^i \nu^i dv^i. \quad (\text{D.2})$$

Utilizando a Eq. (2.9) reescreve-se a Eq. (D.2) na configuração material:

$$m^i = \int_{\Omega_x} \rho_\mu^i \nu^i J^i dV^i. \quad (\text{D.3})$$

Como não existem fontes nem sumidouros, a massa se conserva durante a deformação. Desta forma, sua derivada temporal é obrigatoriamente nula. Logo a seguinte relação é válida:

$$\dot{m}^i = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_x} \rho_\mu^i \nu^i J^i dV^i = 0. \quad (\text{D.4})$$

$$\dot{m}^i = \int_{\Omega_x} \frac{d}{dt} [\rho_\mu^i \nu^i J^i] dV^i = 0. \quad (\text{D.5})$$

O integrando da Eq. (D.5) pode ser escrito como:

$$\frac{d}{dt} [\rho_\mu^i \nu^i J^i] = \dot{\rho}_\mu^i (\nu^i J^i) + \rho_\mu^i [\dot{\nu}^i J^i + \nu^i \dot{J}^i], \quad (\text{D.6})$$

e, dado que (HOLZAPFEL, 2000):

$$\dot{J}^i = J^i \text{div } \mathbf{v}^i, \quad (\text{D.7})$$

a Eq. (D.6) é reescrita como:

$$\frac{d}{dt} [\rho_\mu^i \nu^i J^i] = \dot{\rho}_\mu^i [\nu^i J^i] + \rho_\mu^i [\dot{\nu}^i J^i + \nu^i J^i \text{div } \mathbf{v}^i]. \quad (\text{D.8})$$

Considerando a incompressibilidade) da fase, o primeiro termo da Eq. (D.8) se anula, assim:

$$\frac{d}{dt} [\rho_\mu^i \nu^i J^i] = \rho_\mu^i [\dot{\nu}^i J^i + \nu^i J^i \text{div } \mathbf{v}^i]. \quad (\text{D.9})$$

Substituindo o resultado da Eq. (D.9) no integrando em (D.5) tem-se:

$$\dot{m}^i = \int_{\Omega_X} \frac{d}{dt} [\rho_\mu^i \nu^i J^i] dV^i = \int_{\Omega_X} \rho_\mu^i [\dot{\nu}^i J^i + \nu^i J^i \operatorname{div} \mathbf{v}^i] dV^i = 0. \quad (\text{D.10})$$

Retornando à configuração espacial através da relação (2.9), têm-se que:

$$\dot{m}^i = \int_{\Omega_x} \rho_\mu^i [\dot{\nu}^i + \nu^i \operatorname{div} \mathbf{v}^i] dv^i = 0. \quad (\text{D.11})$$

Tanto o elemento diferencial de volume da configuração espacial dv^i , quanto a densidade da fase na microescala ρ_μ^i são grandezas obrigatoriamente não nulas. Por outro lado, a Eq. (D.11) de ver satisfeita para qualquer domínio Ω_x ou subparte dele. Assim, o integrando deve ser nulo:

$$\dot{\nu}^i + \nu^i \operatorname{div} \mathbf{v}^i = 0. \quad (\text{D.12})$$

A Eq. (D.12) descreve a forma local da conservação de massa para cada fase i presente no modelo bifásico em sua configuração espacial, porém essa relação ainda pode ser escrita de forma geral para o modelo. Para isso, primeiramente aplica-se a seguinte relação algébrica: sendo $\phi(\mathbf{x}, t)$ um campo escalar qualquer na configuração espacial, sua derivada temporal é obtida da seguinte maneira:

$$\dot{\phi}(\mathbf{x}, t) = \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} + \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{grad} \phi \cdot \mathbf{v}, \quad (\text{D.13})$$

$$\dot{\phi}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div}(\phi \mathbf{v}) - \phi \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad (\text{D.14})$$

onde \mathbf{v} representa o vetor velocidade.

Aplicando a propriedade da Eq. (D.14) na Eq. (D.12), tem-se que:

$$\frac{d\nu^i}{dt} + \nu^i \operatorname{div} \mathbf{v}^i = \frac{\partial \nu^i}{\partial t} + \operatorname{div}(\nu^i \mathbf{v}) - \nu^i \operatorname{div} \mathbf{v}^i + \nu^i \operatorname{div} \mathbf{v}^i = 0, \quad (\text{D.15})$$

logo, para cada fase i a equação de conservação de massa na configuração espacial é,

$$\frac{\partial \nu^i}{\partial t} + \operatorname{div}(\nu^i \mathbf{v}^i) = 0. \quad (\text{D.16})$$

Através da segunda hipótese (mistura saturada) da Seção 2.2.1.2, pode-se chegar a seguinte relação:

$$\frac{\partial \nu^s}{\partial t} + \frac{\partial \nu^f}{\partial t} = 0. \quad (\text{D.17})$$

Utilizando a Eq. (D.16) e somando as grandezas de todas as fases referentes ao modelo, obtém-se a seguinte expressão:

$$\frac{\partial \nu^s}{\partial t} + \operatorname{div}(\nu^s \mathbf{v}^s) + \frac{\partial \nu^f}{\partial t} + \operatorname{div}(\nu^f \mathbf{v}^f) = 0. \quad (\text{D.18})$$

Aplicando a Eq. (D.17), a expressão de conservação de massa para o modelo bifásico fica conforme:

$$\operatorname{div}(\nu^s \mathbf{v}^s + \nu^f \mathbf{v}^f) = 0. \quad (\text{D.19})$$

Considerando a seguinte definição da velocidade relativa entre as fases fluida e sólida $\boldsymbol{\omega}$:

$$\boldsymbol{\omega} = \nu^f (\mathbf{v}^f - \mathbf{v}^s), \quad (\text{D.20})$$

e utilizando a hipótese de mistura saturada da Eq. (2.19), pode-se reescrever a Eq. (D.19) na seguinte maneira:

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}^s + \boldsymbol{\omega}) = 0. \quad (\text{D.21})$$

A Eq. (D.21) representa a conservação de massa do modelo bifásico na configuração espacial, incluindo as variáveis de velocidade do sólido e velocidade relativa entre as fases.

APÊNDICE E – Princípio dos trabalhos virtuais

Considerando a relação de equilíbrio espacial definida na Eq. (B.7), pode-se definir um resíduo conforme

$$\mathbf{r}_x = \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}. \quad (\text{E.1})$$

Para garantir o balanço mecânico do sistema, faz-se necessário que o resíduo definido na Eq. (E.1) seja nulo. Sendo assim, utilizando o princípio dos trabalhos virtuais obtém-se uma solução aproximada da formulação forte. Para tal, primeiramente multiplica-se o resíduo por uma função arbitrária $\boldsymbol{\eta}$ definida na configuração espacial e integra-se o produto ao longo do domínio Ω_x

$$\int_{\Omega_x} \mathbf{r}_x \cdot \boldsymbol{\eta} \, dv = \int_{\Omega_x} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\eta} \, dv = 0. \quad (\text{E.2})$$

Como a função vetor $\boldsymbol{\eta}$ é arbitrária, pode-se considerá-la como um campo de deslocamentos virtuais $\delta \mathbf{u}$ definido na configuração atual. Desta maneira, pode-se reescrever a Eq. (E.2) como:

$$\int_{\Omega_x} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \mathbf{u} \, dv = 0, \quad (\text{E.3})$$

onde a arbitrariedade do campo de deslocamentos virtuais $\delta \mathbf{u}$ garante que a solução obtida pela formulação fraca seja equivalente à resposta do sistema diferencial.

Utilizando a seguinte regra do produto interno descrita em [Holzapfel \(2000\)](#)

$$\operatorname{div} \mathbf{A} \cdot \mathbf{a} = \operatorname{div} (\mathbf{A} \mathbf{a}) - \mathbf{A} : \nabla_x \mathbf{a}, \quad (\text{E.4})$$

onde \mathbf{A} e \mathbf{a} representam um tensor de segunda ordem arbitrário e um vetor qualquer, ambos em configuração espacial. A Eq.(E.3) é reescrita conforme

$$\int_{\Omega_x} [\operatorname{div} (\boldsymbol{\sigma} \delta \mathbf{u}) - \boldsymbol{\sigma} : \nabla_x \delta \mathbf{u}] \, dv = 0. \quad (\text{E.5})$$

Para continuar o equacionamento, é necessário utilizar o teorema da divergência conforme descrito em [Holzapfel \(2000\)](#). Para tal, considera-se inicialmente um domínio espacial Ω_x de volume v e contornos $\partial \Omega_x$. Tomando um elemento diferencial interno ao volume, definindo sua normal como o vetor \mathbf{n} e sua região superficial como ds , o teorema da divergência torna válidas as seguintes equivalências:

$$\int_{\partial \Omega_x} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\Omega_x} \operatorname{div} \mathbf{u} \, dv, \quad (\text{E.6})$$

$$\int_{\partial\Omega_x} \mathbf{A}\mathbf{u} \, ds = \int_{\Omega_x} \operatorname{div} \mathbf{A} \, dv. \quad (\text{E.7})$$

Retomando a Eq. (E.5), aplicando o teorema da divergência para vetores e considerando a propriedade de simetria do tensor de tensões de Cauchy, tem-se,

$$\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma} : \operatorname{sym}(\nabla_x \delta \mathbf{u}) \, dv - \int_{\partial\Omega_x} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds = 0. \quad (\text{E.8})$$

Utilizando a relação demonstrada pela Eq. (A.17), pode-se reescrever a expressão da Eq.(E.8) como:

$$\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma} : \delta \mathbf{e} \, dv - \int_{\partial\Omega_x} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds = 0. \quad (\text{E.9})$$

Aplicando o teorema de Cauchy descrito em [Holzapfel \(2000\)](#):

$$\bar{\mathbf{t}} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}, \quad (\text{E.10})$$

onde $\bar{\mathbf{t}}$ representa uma força externa qualquer que age sobre o contínuo. A Eq. (E.9) é reescrita conforme,

$$\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma} : \delta \mathbf{e} \, dv - \int_{\partial\Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds = 0. \quad (\text{E.11})$$

Finalmente, utilizando a decomposição do tensor de Cauchy da Eq. (2.20), onde a tensão de sólido refere-se a um modelo constitutivo (Seção 3.2) e a parcela da fase fluida conforme a Eq. (2.21), sendo a pressão de poro descrita na Eq. (3.1), pode-se abrir o equacionamento demonstrado na Eq. (E.11) conforme,

$$\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv - \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta\pi) \mathbf{I} : \delta \mathbf{e} \, dv - \int_{\partial\Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds = 0. \quad (\text{E.12})$$

Utilizando a propriedade de traço tensorial ([HOLZAPFEL, 2000](#)), tem-se a seguinte equação integral referente a parcela sólida δW^s do modelo bifásico de inchaço:

$$\delta W^s = \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv - \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta\pi) \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv - \int_{\partial\Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u} \in \mathcal{K}^u, \quad (\text{E.13})$$

onde $\in \mathcal{K}^u$ é um espaço de deslocamentos virtuais cinematicamente admissíveis para o modelo.

Para obter a equação integral referente a fase do fluido deve-se considerar a relação de conservação da massa do modelo representada pela Eq. (D.21). Sendo assim, aplicando o mesmo princípio, define-se o resíduo como:

$$r_x = \operatorname{div}(\mathbf{v}^s + \boldsymbol{\omega}) = 0. \quad (\text{E.14})$$

Multiplicando o resíduo por uma função escalar (η) e integrando no domínio do contínuo (Ω_x) tem-se a seguinte relação:

$$\int_{\Omega_x} r_x \eta \, dv = \int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s + \boldsymbol{\omega}) \eta \, dv = 0. \quad (\text{E.15})$$

Assumindo a função arbitrária η como um campo virtual de potencial químico da fase fluida $\delta\mu^f$ reescreve-se a Eq. (E.15) conforme

$$\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s + \boldsymbol{\omega}) \delta\mu^f \, dv = 0. \quad (\text{E.16})$$

Distribuindo o produto presente no integrando da Eq. E.16, tem-se:

$$\int_{\Omega_x} [\operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta\mu^f + \operatorname{div}(\boldsymbol{\omega}) \delta\mu^f] \, dv = 0. \quad (\text{E.17})$$

Considerando a seguinte regra do produto descrita conforme [Holzapfel \(2000\)](#):

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\omega} \delta\mu^f) = \operatorname{div}(\boldsymbol{\omega}) \delta\mu^f + \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x(\delta\mu^f), \quad (\text{E.18})$$

obtem-se o seguinte resultado:

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\omega}) \delta\mu^f = \operatorname{div}(\boldsymbol{\omega} \delta\mu^f) - \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x(\delta\mu^f). \quad (\text{E.19})$$

Sendo assim, aplicando o resultado da Eq. (E.19) pode-se reescrever a Eq. (E.17) como:

$$\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta\mu^f \, dv + \int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\boldsymbol{\omega} \delta\mu^f) \, dv - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x(\delta\mu^f) \, dv = 0. \quad (\text{E.20})$$

Considerando o teorema da divergência para vetores da Eq. (E.6) tem-se que,

$$\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta\mu^f \, dv + \int_{\partial\Omega_x} \delta\mu^f \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} \, ds - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x(\delta\mu^f) \, dv = 0. \quad (\text{E.21})$$

Finalmente, aplicando a condição de contorno de Neumann do fluido apresentada no sistema de Eq. (3.2), obtém-se a equação integral do modelo bifásico de inchaço referente a fase fluida δW^f conforme:

$$\delta W^f = \int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta\mu^f \, dv + \int_{\partial\Omega_x} \delta\mu^f \bar{q} \, ds - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x(\delta\mu^f) \, dv = 0 \quad \forall \delta\mu^f \in \mathcal{K}^{\mu^f}, \quad (\text{E.22})$$

onde $\in \mathcal{K}^{\mu^f}$ é o campo de potenciais químicos virtuais cinematicamente admissíveis para o modelo.

APÊNDICE F – Linearização da formulação fraca

F.1 Linearização da equação do sólido

Considerando a equação relacionada à fase sólida do contínuo δW^s obtida pelo princípio dos trabalhos virtuais,

$$\delta W^s = \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv - \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta\pi) \text{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv - \int_{\partial\Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds = 0, \quad (\text{F.1})$$

tem-se que um procedimento de linearização consiste em calcular a derivada parcial da Eq. (F.1) em relação ao deslocamento \mathbf{u} , na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}$. Sendo assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\delta W^s] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta\pi) \text{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\partial\Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds \right] \cdot \Delta \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

Considerando a primeira derivada da Eq. (F.2):

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.3})$$

deve-se primeiramente reescrever o integrando na configuração material, já que a espacial é função do deslocamento \mathbf{u} . Desta maneira, considerando a Eq. (2.9) e a operação da Eq. (A.12), juntamente com a seguinte definição do segundo tensor de tensões de Piola Kirchoff (HOLZAPFEL, 2000):

$$\mathbf{S} = J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}, \quad (\text{F.4})$$

a Eq. (F.3) é reescrita como,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} J^{-1} \mathbf{F} \mathbf{S}^s \mathbf{F}^T : \mathbf{F}^{-T} (\delta \mathbf{E}) \mathbf{F}^{-1} J \, dV \right] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.5})$$

realizando as operações tensoriais, a Eq. (F.5) se reduz para a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \mathbf{S}^s : \delta \mathbf{E} \, dV \right] \cdot \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.6})$$

Como a configuração material não se altera, pode-se aplicar a derivada no integrando utilizando a regra do produto conforme

$$\int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{S}^s : \delta \mathbf{E}] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV = \int_{\Omega_X} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{S}^s \cdot \Delta \mathbf{u} \right] : \delta \mathbf{E} \, dV + \int_{\Omega_X} \mathbf{S}^s : \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \, dV, \quad (\text{F.7})$$

o tensor \mathbf{S}^s é função do deslocamento \mathbf{u} . Sendo assim, aplicando a regra da cadeia e utilizando o resultado da Eq. (A.20), a Eq. (F.7) pode ser reescrita como

$$\int_{\Omega_X} \left[\mathbf{C}_X : \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] : \delta \mathbf{E} \, dV + \int_{\Omega_X} \mathbf{S}^s : \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \, dV, \quad (\text{F.8})$$

utilizando os resultados das Eq. (A.11) e Eq. (A.16), obtém-se,

$$\int_{\Omega_X} \left[\mathbf{C}_X : \text{sym} \left[\mathbf{F}^T (\nabla_X \Delta \mathbf{u}) \right] \right] : \delta \mathbf{E} \, dV + \int_{\Omega_X} \mathbf{S}^s : \text{sym} \left[\nabla_X^T \Delta \mathbf{u} \nabla_X \delta \mathbf{u} \right] \, dV, \quad (\text{F.9})$$

devido às propriedades de simetria do segundo tensor de tensões de Piola-Kirchhoff (\mathbf{S}^s) e do módulo tangente (\mathbf{C}_X), a Eq. (F.9) é simplificada para,

$$\int_{\Omega_X} \left[\mathbf{C}_X : \left[\mathbf{F}^T (\nabla_X \Delta \mathbf{u}) \right] \right] : \delta \mathbf{E} \, dV + \int_{\Omega_X} \mathbf{S}^s : \left[\nabla_X^T \Delta \mathbf{u} \nabla_X \delta \mathbf{u} \right] \, dV, \quad (\text{F.10})$$

retomando o resultado da Eq. (A.11), obtém-se a equação linearizada do primeiro termo na configuração material conforme,

$$\int_{\Omega_X} \delta \mathbf{E} : \mathbf{C}_X : \Delta \mathbf{E} \, dV + \int_{\Omega_X} \mathbf{S}^s : \left[\nabla_X^T \Delta \mathbf{u} \nabla_X \delta \mathbf{u} \right] \, dV, \quad (\text{F.11})$$

utilizando as operações de *push-forward*, juntamente com a seguinte definição do módulo tangente consistente material (BONET; WOOD, 2008):

$$\mathbf{C}_X = J^{-1} [\mathbf{F} \boxtimes \mathbf{F}] : \mathbf{C}_X : [\mathbf{F} \boxtimes \mathbf{F}]^T, \quad (\text{F.12})$$

$$\therefore \mathbf{C}_{x_{abcd}} = J^{-1} \mathbf{F}_{aA} \mathbf{F}_{bB} \mathbf{F}_{cC} \mathbf{F}_{dD} \mathbf{C}_{X_{ABCD}}, \quad (\text{F.13})$$

o primeiro termo da Eq. (F.2) pode ser reescrito na configuração espacial conforme,

$$\int_{\Omega_x} \delta \mathbf{e} : \mathbf{C}_x : \Delta \mathbf{e} \, dv + \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \left[\nabla_x^T \Delta \mathbf{u} \nabla_x \delta \mathbf{u} \right] \, dv. \quad (\text{F.14})$$

Tomando em consideração a segunda parcela da Eq. (F.2) tem-se a seguinte derivada direcional:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi) \text{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.15})$$

Considerando a definição de traço tensorial como contração dupla de um tensor arbitrário com o tensor identidade \mathbf{I} (HOLZAPFEL, 2000), e utilizando a primeira relação da Eq.(A.13), reescreve-se a Eq. (F.15) na configuração material, conforme:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} p \mathbf{I} : \delta \mathbf{e} \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} = \int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[J(\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{I} : \mathbf{F}^{-T} \delta \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV. \quad (\text{F.16})$$

Realizando as operações tensoriais, a Eq (F.16) é reescrita conforme,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[J(\mu^f + \Delta\pi) \mathbf{I} : \mathbf{F}^{-T} \delta \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV &= \int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[J(\mu^f + \Delta\pi) \mathbf{F}^{-1} \mathbf{I} \mathbf{F}^{-T} : \delta \mathbf{E} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV \\ &= \int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[J(\mu^f + \Delta\pi) \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} : \delta \mathbf{E} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV. \end{aligned} \quad (\text{F.17})$$

Considerando a definição do tensor de Cauchy-Green à direita \mathbf{C} (HOLZAPFEL, 2000),

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \quad , \quad (\text{F.18})$$

verifica-se que,

$$\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} \quad . \quad (\text{F.19})$$

Portanto, pode-se reescrever a Eq. (F.17) da seguinte maneira,

$$\int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[J(\mu^f + \Delta\pi) \mathbf{C}^{-1} : \delta \mathbf{E} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV = \int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\mathbf{S}^f : \delta \mathbf{E} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV \quad , \quad (\text{F.20})$$

onde o tensor \mathbf{S}^f representa o segundo tensor de tensões de Piola-Kirchoff obtido ao aplicar a transformação de Piola (HOLZAPFEL, 2000) na tensão da fase fluida $\boldsymbol{\sigma}^f$ da formulação bifásica,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^f &= J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma}^f \mathbf{F}^{-T} \\ &= J \mathbf{F}^{-1} p \mathbf{I} \mathbf{F}^{-T} \\ &= J p \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} \\ &= J p \left(\mathbf{F}^T \mathbf{F} \right)^{-1} \\ &= J p \mathbf{C}^{-1} \\ &= J(\mu^f + \Delta\pi) \mathbf{C}^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{F.21})$$

Sendo assim, considerando a Eq. (F.15) na configuração material e aplicando a regra do produto, tem-se:

$$\int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\mathbf{S}^f : \delta \mathbf{E} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV = \int_{\Omega_X} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{S}^f \cdot \Delta \mathbf{u} \right] : \delta \mathbf{E} \, dV + \int_{\Omega_X} \mathbf{S}^f : \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \, dV \quad , \quad (\text{F.22})$$

onde as derivadas direcionais do segundo tensor de Piola-Kirchoff da fase fluida \mathbf{S}^f e da variação virtual do tensor de deformação de Green-Lagrange $\delta \mathbf{E}$ na direção do incremento

de deslocamento $\Delta \mathbf{u}$ são, respectivamente,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{S}^f \cdot \Delta \mathbf{u} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[J(\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{C}^{-1} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} J \cdot \Delta \mathbf{u} \right] (\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{C}^{-1} \\ &\quad + J \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} (\mu^f + \Delta \pi) \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \mathbf{C}^{-1} \\ &\quad + J(\mu^f + \Delta \pi) \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{C}^{-1} \cdot \Delta \mathbf{u} \right], \end{aligned} \quad (\text{F.23})$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{u} = \text{sym} \left[\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} \right] . \quad (\text{F.24})$$

Sendo assim, necessita-se calcular as derivadas presentes na Eq. (F.23). Conforme demonstrado anteriormente na Eq. (A.8) a derivada direcional do Jacobiano J na direção do incremento de deslocamento $\Delta \mathbf{u}$ é dada por,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} J \cdot \Delta \mathbf{u} = J \text{div} \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.25})$$

Ademais, com a decomposição da pressão de poro p da formulação bifásica, pode-se simplificar a seguinte operação conforme,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mu^f + \Delta \pi] \cdot \Delta \mathbf{u} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\Delta \pi] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.26})$$

pois o potencial químico da fase fluida independe do deslocamento \mathbf{u} .

Sendo assim utilizando o modelo de pressão osmótica descrito pela Eq. (2.31) e aplicando a regra da cadeia a Eq. (F.26) é calculada como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\Delta \pi] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \frac{\partial \Delta \pi}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &= \frac{\partial}{\partial J} \left[\phi RT \sqrt{c_F^2 + \bar{c}^2} - \bar{c} \right] [J \text{div} \Delta \mathbf{u}] \\ &= -\phi RT \frac{(c_{F0} n_0)^2}{(n_0 - 1 + J)^3} \left[\left(\frac{c_{F0} n_0}{n_0 - 1 + J} \right)^2 + \bar{c}^2 \right]^{-\frac{1}{2}} [J \text{div} \Delta \mathbf{u}] \\ &= \lambda^{op} [\text{div} \Delta \mathbf{u}]. \end{aligned} \quad (\text{F.27})$$

onde λ^{op} é uma constante originada pela derivada da equação constitutiva do modelo ideal de Donnan da pressão osmótica, conforme:

$$\lambda^{op} = -J \phi RT \frac{(c_{F0} n_0)^2}{(n_0 - 1 + J)^3} \left[\left(\frac{c_{F0} n_0}{n_0 - 1 + J} \right)^2 + \bar{c}^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{F.28})$$

Para obter o resultado da Eq. (F.23) ainda é necessário calcular a derivada relacionada à inversa do tensor de Cauchy-Green à direita \mathbf{C}^{-1} . Sendo assim, utilizando a regra da cadeia tem-se,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{C}^{-1} \cdot \Delta \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} . \quad (\text{F.29})$$

Conforme [Holzapfel \(2000\)](#), pode-se definir a primeira derivada parcial da Eq. [F.29](#) como:

$$\frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} = -(\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1}), \quad (\text{F.30})$$

$$\therefore -(\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1})_{abcd} = -\frac{1}{2}(C_{ac}^{-1}C_{bd}^{-1} + C_{ad}^{-1}C_{bc}^{-1}). \quad (\text{F.31})$$

Calculando a derivada direcional do tensor de Cauchy-Green à direita \mathbf{C} na direção do incremento de deslocamento $\Delta \mathbf{u}$, tem-se que,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{C} \cdot \Delta \mathbf{u} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{F}^T \mathbf{F}] \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{F}^T \cdot \Delta \mathbf{u} \right) \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{u} \right) \\ &= \nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u} \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u} \\ &= [\mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}]^T + \mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u} \\ &= 2\text{sym} [\mathbf{F}^T \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}] \\ &= 2 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &= 2\Delta \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (\text{F.32})$$

Sendo assim, a Eq. [\(F.29\)](#) é reescrita da seguinte maneira,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{C}^{-1} \cdot \Delta \mathbf{u} = -2(\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1}) \Delta \mathbf{E}. \quad (\text{F.33})$$

Substituindo os resultados das Eq. [\(F.25\)](#), Eq. [\(F.26\)](#) e Eq. [\(F.33\)](#) na Eq. [\(F.23\)](#), tem-se que a derivada parcial do segundo tensor de Piola-Kirchoff da fase fluida \mathbf{S}^f na configuração material é dada por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{S}^f \cdot \Delta \mathbf{u} &= [J \text{div} \Delta \mathbf{u}] (\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{C}^{-1} \\ &\quad + \lambda^{op} [J \text{div} \Delta \mathbf{u}] \mathbf{C}^{-1} \\ &\quad - 2J(\mu^f + \Delta \pi) (\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1}) \Delta \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (\text{F.34})$$

Utilizando o resultado da Eq. [\(F.34\)](#) e Eq. [\(A.16\)](#), a Eq. [\(F.22\)](#) é reescrita conforme,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_x} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{S}^f : \delta \mathbf{E}] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV &= \int_{\Omega_x} [J \text{div} \Delta \mathbf{u} (\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{C}^{-1}] : \delta \mathbf{E} \, dV \\ &\quad + \int_{\Omega_x} \lambda^{op} [J \text{div} \Delta \mathbf{u}] \mathbf{C}^{-1} : \delta \mathbf{E} \, dV \\ &\quad - \int_{\Omega_x} 2J(\mu^f + \Delta \pi) (\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1}) \Delta \mathbf{E} : \delta \mathbf{E} \, dV \\ &\quad + \int_{\Omega_x} \mathbf{S}^f : \text{sym} [\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u}] \, dV. \end{aligned} \quad (\text{F.35})$$

Utilizando as seguintes relações *pull-back* demonstradas em [Holzapfel \(2000\)](#),

$$\Delta \mathbf{E} = \mathbf{F}^T (\Delta \mathbf{e}) \mathbf{F}, \quad (\text{F.36})$$

$$\delta \mathbf{E} = \mathbf{F}^T (\delta \mathbf{e}) \mathbf{F}, \quad (\text{F.37})$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{u} = \mathbf{F}^T \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \delta \mathbf{e} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \mathbf{F}, \quad (\text{F.38})$$

juntamente com os resultados das Eq. (2.9), Eq.(F.19) e a definição da Eq. (F.31), pode-se reescrever a Eq. (F.35) na configuração espacial como

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_x} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\mathbf{S}^f : \delta \mathbf{E} \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV &= \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi + \lambda^{op}) \operatorname{div} \Delta \mathbf{u} \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \\ &\quad - \int_{\Omega_x} 2(\mu^f + \Delta \pi) (\mathbf{I} \odot \mathbf{I}) \Delta \mathbf{e} : \delta \mathbf{e} \, dv \\ &\quad + \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{I} : \left[\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} \right] \, dv. \end{aligned} \quad (\text{F.39})$$

Portanto, o segundo termo da Eq. (F.2) é escrito na forma espacial como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi) \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \int_{\Omega_x} \operatorname{div} \Delta \mathbf{u} (\mu^f + \Delta \pi + \lambda^{op}) \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \\ &\quad - \int_{\Omega_x} 2(\mu^f + \Delta \pi) [(\mathbf{I} \odot \mathbf{I}) \Delta \mathbf{e}] : \delta \mathbf{e} \, dv \\ &\quad + \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{I} : \left[\nabla_{\mathbf{x}}^T \Delta \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} \right] \, dv \end{aligned} \quad (\text{F.40})$$

A terceira parcela da Eq. (F.2) é nula, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\partial \Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds \right] \cdot \Delta \mathbf{u} = 0, \quad (\text{F.41})$$

pois a formulação utilizada considera que a solitação aplicada $\bar{\mathbf{t}}$ não possui dependência em relação ao deslocamento \mathbf{u} .

Sendo assim, com os resultados dispostos pela Eq. (F.14), Eq. (F.40) e Eq. (F.41), a equação linearizada da fase sólida na configuração espacial, representada pela derivada direcional de δW^s na direção de $\Delta \mathbf{u}$ disposta pela Eq. (F.2), é reescrita na configuração

espacial conforme:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\delta W^s] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \int_{\Omega_x} \delta \mathbf{e} : \mathbb{C}_x : \Delta \mathbf{e} \, dv \\
&+ \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : [\nabla_x^T \Delta \mathbf{u} \nabla_x \delta \mathbf{u}] \, dv \\
&- \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi) \mathbf{I} : [\nabla_x^T \Delta \mathbf{u} \nabla_x \delta \mathbf{u}] \, dv \\
&- \int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi + \lambda^{op}) \operatorname{div} \delta \mathbf{u} \operatorname{div} \Delta \mathbf{u} \, dv \\
&+ \int_{\Omega_x} 2(\mu^f + \Delta \pi) (\mathbf{I} \odot \mathbf{I}) \Delta \mathbf{e} : \delta \mathbf{e} \, dv.
\end{aligned} \tag{F.42}$$

Outro procedimento de linearização da Eq. (F.2) é calcular a sua derivada direcional em relação ao potencial químico do fluido μ^f na direção do incremento $\Delta \mu^f$, conforme

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^s] \cdot \Delta \mu^f &= \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\sigma}^s : \delta \mathbf{e} \, dv \right] \cdot \Delta \mu^f \\
&- \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi) \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \right] \cdot \Delta \mu^f \\
&- \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\partial \Omega_x} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, ds \right] \cdot \Delta \mu^f.
\end{aligned} \tag{F.43}$$

Como as entidades tensoriais e vetoriais $\boldsymbol{\sigma}^s$, $\delta \mathbf{e}$, $\bar{\mathbf{t}}$ e $\delta \mathbf{u}$ presentes no primeiro e terceiro termo da Eq. (F.43) independem da variável de pressão de potencial químico μ^f , as derivadas destes termos assumem o valor nulo. Desta maneira, a Eq. (F.43) é simplificada para a seguinte derivada:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^s] \cdot \Delta \mu^f = - \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\Omega_x} (\mu^f + \Delta \pi) \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \right] \cdot \Delta \mu^f. \tag{F.44}$$

Adicionalmente, o modelo de pressão osmótica também não depende do potencial químico, sendo assim a Eq. (F.44) é reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^s] \cdot \Delta \mu^f = - \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\Omega_x} \mu^f \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \right] \cdot \Delta \mu^f. \tag{F.45}$$

Para calcular a derivada presente na Eq. (F.45), primeiramente deve-se reescrever

a integral no domínio material conforme,

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\Omega_x} \mu^f \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv \right] \cdot \Delta \mu^f &= - \int_{\Omega_x} \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\mu^f \left(\mathbf{I} : \mathbf{F}^{-T}(\delta \mathbf{E}) \mathbf{F}^{-1} \right) \right] J dV \cdot \Delta \mu^f \\ &= - \int_{\Omega_x} \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\mu^f \left(\mathbf{C}^{-1} : \delta \mathbf{E} \right) J dV \right] \cdot \Delta \mu^f, \end{aligned} \quad (\text{F.46})$$

Como as grandezas \mathbf{C}^{-1} , $\delta \mathbf{E}$ e J também independem do potencial químico, a Eq. (F.46) é simplificada para

$$- \int_{\Omega_x} \left[\frac{\partial}{\partial \mu^f} \mu^f \cdot \Delta \mu^f \right] \left(\mathbf{C}^{-1} : \delta \mathbf{E} \right) J dV. \quad (\text{F.47})$$

Calculando a derivada do potencial químico μ^f em relação a si mesmo na direção do incremento $\Delta \mu^f$, a Eq. F.47 simplifica-se para:

$$- \int_{\Omega_x} \Delta \mu^f \left(\mathbf{C}^{-1} : \delta \mathbf{E} \right) J dV. \quad (\text{F.48})$$

Passando o integrando da Eq. (F.48) para configuração espacial, têm-se a linearização da equação do sólido δW^s na direção do incremento Δp como:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^s] \cdot \Delta \mu^f = - \int_{\Omega_x} \Delta \mu^f \operatorname{tr}(\delta \mathbf{e}) \, dv. \quad (\text{F.49})$$

F.2 Linearização da equação do fluido

Considerando a equação integral referente à fase fluida do contínuo δW^f obtida pelo princípio dos trabalhos virtuais tem-se,

$$\delta W^f = \int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f \, dv - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x \delta \mu^f \, dv - \int_{\partial \Omega_x} \bar{q} \delta \mu^f \, ds = 0. \quad (\text{F.50})$$

De forma análoga à linearização do sólido, a linearização da Eq. (F.50) pode ser realizada com duas abordagens distintas. Uma tomando a derivada direcional da equação em relação a variável μ^f na direção do incremento de pressão $\Delta \mu^f$, e outra por meio da derivada direcional em relação ao deslocamento \mathbf{u} na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}$.

Considerando a primeira abordagem, a linearização consiste no cálculo da seguinte derivada:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f = \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f \, dv - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_x \delta \mu^f \, dv - \int_{\partial \Omega_x} \bar{q} \delta \mu^f \, ds \right] \cdot \Delta \mu^f. \quad (\text{F.51})$$

Distribuindo a derivada nos termos da Eq. (F.51), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f &= \frac{\partial}{\partial \mu^f} \int_{\Omega_x} [\operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f] dv \cdot \Delta \mu^f \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \mu^f} \int_{\Omega_x} [\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f] dv \cdot \Delta \mu^f \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \mu^f} \int_{\partial \Omega_x} [\bar{q} \delta \mu^f ds] ds \cdot \Delta \mu^f, \end{aligned} \quad (\text{F.52})$$

como a velocidade relativa do sólido \mathbf{v}^s , o fluxo de fluido \bar{q} e o campo de potenciais químicos virtuais $\delta \mu^f$ independem do potencial químico μ^f , o primeiro e o último termo da Eq. (F.52) assumem valor nulo. Sendo assim, reescreve-se a equação de linearização da seguinte maneira,

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f = - \frac{\partial}{\partial \mu^f} \int_{\Omega_x} [\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f] dv \cdot \Delta \mu^f. \quad (\text{F.53})$$

A lei de Darcy (Eq. 3.13), estabelece uma relação linear entre a velocidade relativa do fluido $\boldsymbol{\omega}$ e o gradiente espacial do potencial químico, ou seja,

$$\boldsymbol{\omega} = -\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f, \quad (\text{F.54})$$

onde $\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}}$ é um tensor de segunda ordem relacionado à permeabilidade do meio na configuração espacial.

Sendo assim, a Eq. (F.53) é reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f = \frac{\partial}{\partial \mu^f} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f dv \right] \cdot \Delta \mu^f. \quad (\text{F.55})$$

Utilizando a seguinte relação de [Holzapfel \(2000\)](#)

$$\nabla_{\mathbf{x}} \phi = \mathbf{F}^{-T} \nabla_{\mathbf{X}} \phi, \quad (\text{F.56})$$

onde ϕ representa um escalar qualquer, pode-se reescrever a Eq. (F.55) no domínio material conforme,

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f = \int_{\Omega_x} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu^f} [\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \mathbf{F}^{-T} \nabla_{\mathbf{X}} \mu^f \cdot \mathbf{F}^{-T} \nabla_{\mathbf{X}} \delta \mu^f] \cdot \Delta \mu^f \right\} J dV. \quad (\text{F.57})$$

Analogamente à operação realizada na Eq. (F.21), pode-se utilizar a transformação de Piola Kirchhoff obter uma relação entre o tensor espacial de permeabilidade do meio e sua configuração material, conforme:

$$\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{X}} = J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \mathbf{F}^{-T}. \quad (\text{F.58})$$

Sendo assim, a Eq. (F.57) é reescrita conforme,:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f = \int_{\Omega_x} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu^f} [\nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f] \cdot \Delta \mu^f \right\} dV. \quad (\text{F.59})$$

Utilizando a regra do produto, a Eq. (F.59) é calculada como,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f &= \int_{\Omega_x} \left(\frac{\partial}{\partial \mu^f} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot \Delta \mu^f \right) \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f dV \\ &+ \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mu^f} \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f \cdot \Delta \mu^f \right) dV, \end{aligned} \quad (\text{F.60})$$

pela arbitrariedade do campo virtual de potencial químico $\delta \mu^f$, a primeira derivada presente na Eq. (F.60) assume valor nulo. Ademais, levando em consideração que o tensor de permeabilidade do meio na configuração material também independe do potencial químico μ^f , para obter o resultado da Eq. (F.60) deve-se calcular a seguinte derivada direcional:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu^f} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f \cdot \Delta \mu^f &= \frac{d}{d\epsilon} [\nabla_{\mathbf{x}} (\mu^f + \epsilon \Delta \mu^f)]_{\epsilon=0} \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \left[\frac{d}{d\epsilon} (\mu^f + \epsilon \Delta \mu^f)_{\epsilon=0} \right] \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mu^f. \end{aligned} \quad (\text{F.61})$$

Aplicando este resultado, a Eq. (F.60) é reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f = \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot (\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mu^f) dV. \quad (\text{F.62})$$

Finalmente, utilizando as relações da Eq. (F.56) e Eq. (F.58), pode-se reescrever a linearização da equação da fase fluida δW^f na direção do incremento de potencial químico $\Delta \mu^f$ na configuração espacial, conforme:

$$\frac{\partial}{\partial \mu^f} [\delta W^f] \cdot \Delta \mu^f = \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot (\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mu^f) dv. \quad (\text{F.63})$$

Outra forma de linearização da fase fluida consiste em obter a derivada direcional de δW^f em relação ao deslocamento \mathbf{u} , na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}$, conforme:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\delta W^f] \cdot \Delta \mathbf{u} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \text{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f dv - \int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f dv - \int_{\partial \Omega_x} \bar{q} \delta \mu^f ds \right] \cdot \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.64})$$

Distribuindo a derivada direcional, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\delta W^f] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\partial \Omega_x} \bar{\mathbf{q}} \delta \mu^f \, ds \right] \cdot \Delta \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (\text{F.65})$$

Para calcular a derivada referente ao primeiro termo da Eq. (F.65)

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta p \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.66})$$

deve-se primeiramente reescrever o integrando na configuração referencial, já que o domínio da integral varia de acordo com a variável \mathbf{u} . Para isso, utiliza-se a relação da Eq. (2.9) juntamente com a seguinte propriedade:

$$\operatorname{div} \mathbf{a} = \operatorname{tr}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{a}), \quad (\text{F.67})$$

onde \mathbf{a} representa uma grandeza vetorial qualquer (HOLZAPFEL, 2000). Sendo assim, a Eq. (F.66) é reescrita como,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \int_{\Omega_x} \operatorname{tr}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s) \delta \mu^f \, J dV \cdot \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.68})$$

Aplicando seguinte relação do gradiente de um vetor qualquer \mathbf{a} na configuração espacial com material conforme Holzapfel (2000):

$$\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{a} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{a} \mathbf{F}^{-1}, \quad (\text{F.69})$$

a Eq. (F.68) é reescrita na forma material como,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \int_{\Omega_x} \operatorname{tr}(\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \delta \mu^f \, J dV \cdot \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.70})$$

Com o resultado da Eq. (F.70), pode-se passar a derivada para dentro do integrando e utilizar a regra do produto, conforme:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_x} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\operatorname{tr}(\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \delta \mu^f \, J dV \right] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \int_{\Omega_x} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\mathbf{I} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \right] \cdot \Delta \mathbf{u} (\delta \mu^f \, J) \, dV \\ &\quad + \int_{\Omega_x} \mathbf{I} : (\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\delta \mu^f \, J \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \, dV. \end{aligned} \quad (\text{F.71})$$

Calculando a derivada contida no primeiro termo da Eq. (F.71), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\mathbf{I} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \right] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \mathbf{I} : \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s] \cdot \Delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{-1} \right] \\ &+ \mathbf{I} : \left[\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{F}^{-1}] \cdot \Delta \mathbf{u} \right]. \end{aligned} \quad (\text{F.72})$$

Para calcular a derivada direcional do gradiente material da velocidade do sólido, é necessário discretizar essa grandeza no tempo. Sendo assim, utilizando a seguinte discretização temporal da velocidade do sólido:

$$\mathbf{v}_{n+1}^s = \frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{\Delta t}, \quad (\text{F.73})$$

onde Δt representa o incremento temporal entre o tempo t_n e t_{n+1} . Tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s] \cdot \Delta \mathbf{u} = \nabla_{\mathbf{x}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} \left[\frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{\Delta t} \right] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} \right\} = \frac{1}{\Delta t} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}. \quad (\text{F.74})$$

Ademais, a derivada da inversa do gradiente de deformação em relação ao deslocamento \mathbf{u} na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}$ é obtida utilizando a seguinte estratégia:

$$\mathbf{F} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{I} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{F} \mathbf{F}^{-1}] \cdot \Delta \mathbf{u} = 0, \quad (\text{F.75})$$

aplicando a regra do produto na Eq. (F.75) obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{F}] \cdot \Delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{-1} + \mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{F}^{-1}] \cdot \Delta \mathbf{u} = 0, \quad (\text{F.76})$$

utilizando o resultado da Eq. (A.4) na Eq. (F.76) tem-se,

$$\mathbf{F} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{F}^{-1}] \cdot \Delta \mathbf{u} = -\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{-1}, \quad (\text{F.77})$$

aplicando a relação da Eq. (F.69), a Eq. (F.77) é reescrita em termos espaciais,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\mathbf{F}^{-1}] \cdot \Delta \mathbf{u} = -\mathbf{F}^{-1} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.78})$$

Desta maneira, com os resultados da Eq. (F.74) e Eq. (F.78) a Eq. (F.72), já discretizada no tempo, torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\mathbf{I} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \right] \cdot \Delta \mathbf{u} (\delta \mu^f J) &= (\delta \mu^f J) \mathbf{I} : \left[\left(\frac{1}{\Delta t} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1} \right) \mathbf{F}_{n+1}^{-1} \right] \\ &+ (\delta \mu^f J) \mathbf{I} : \left[\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}_{n+1}^s \left(-\mathbf{F}_{n+1}^{-1} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{F.79})$$

convertendo as grandezas materiais remanescentes para configuração espacial por meio da relação da Eq. (F.69), a Eq. (F.79) torna-se,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\mathbf{I} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \right] \cdot \Delta \mathbf{u} (\delta \mu^f J) &= (\delta \mu_{n+1}^f J_{n+1}) \mathbf{I} : \left[\frac{1}{\Delta t} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1} \right] \\ &- (\delta \mu_{n+1}^f J_{n+1}) \mathbf{I} : \left[\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}_{n+1}^s \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1} \right]. \end{aligned} \quad (\text{F.80})$$

Calculando a derivada contida no segundo termo da Eq. (F.71), tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\delta \mu^f J] \cdot \Delta \mathbf{u} = \delta \mu^f \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [J] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.81})$$

utilizando o resultado da Eq. (A.8), a Eq. (F.81) torna-se,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\delta \mu^f J] \cdot \Delta \mathbf{u} = \delta \mu^f J \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.82})$$

Aplicando o resultado das derivadas demonstrados na Eq. (F.80) e Eq. (F.82) nos termos da Eq. (F.71), tem-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} [\operatorname{tr}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) \delta \mu^f J dV] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \int_{\Omega_X} (\delta \mu_{n+1}^f J_{n+1}) \mathbf{I} : \left[\frac{1}{\Delta t} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1} \right] dV \\ &\quad - \int_{\Omega_X} (\delta \mu_{n+1}^f J_{n+1}) \mathbf{I} : [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}_{n+1}^s \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}] dV \\ &\quad + \int_{\Omega_X} \mathbf{I} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s \mathbf{F}^{-1}) (\delta \mu_{n+1}^f J_{n+1} \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1}) dV, \end{aligned} \quad (\text{F.83})$$

convertendo os termos materiais remanescentes para a configuração espacial a Eq. (F.83) é reescrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \int_{\Omega_x} (\delta \mu_{n+1}^f) \mathbf{I} : \left[\frac{1}{\Delta t} \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1} \right] dv \\ &\quad - \int_{\Omega_x} (\delta \mu_{n+1}^f) \mathbf{I} : [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}_{n+1}^s \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}] dv \\ &\quad + \int_{\Omega_x} \mathbf{I} : (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^s) (\delta \mu_{n+1}^f \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1}) dv, \end{aligned} \quad (\text{F.84})$$

aplicando a relação da Eq. (F.67), tem-se o primeiro termo da Eq. (F.65), já discretizado no tempo, conforme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} \left[\int_{\Omega_x} \operatorname{div}(\mathbf{v}^s) \delta \mu^f dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} &= \int_{\Omega_x} \frac{\delta \mu_{n+1}^f}{\Delta t} \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1} dv \\ &\quad - \int_{\Omega_x} \delta \mu_{n+1}^f \operatorname{tr} [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}_{n+1}^s \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}] dv \\ &\quad + \int_{\Omega_x} (\operatorname{div} \mathbf{v}_{n+1}^s) (\operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1}) \delta \mu_{n+1}^f dv. \end{aligned} \quad (\text{F.85})$$

Considerando o segundo termo da Eq. (F.65),

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.86})$$

Para calcular a derivada deve-se primeiramente passar o domínio da integral para a configuração material. Para isso, utiliza-se a relação da Eq. (2.9) e da Eq. (F.56) para reescrever a Eq. (F.86) como

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta p \, dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{F}^{-T} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, J dV \right] \cdot \Delta \mathbf{u}. \quad (\text{F.87})$$

Utilizando o mapeamento da velocidade relativa do fluido na descrição material (HOLZAPFEL et al., 2001)

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{x}} = J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\omega}, \quad (\text{F.88})$$

a Eq. (F.87) torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{F}^{-T} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, J dV \right] \cdot \Delta \mathbf{u} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} J \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dV \right] \cdot \Delta \mathbf{u} \\ &= \int_{\Omega_x} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot \Delta \mathbf{u} \right] dV. \end{aligned} \quad (\text{F.89})$$

Aplicando a regra do produto, a Eq. (F.89), é simplificada para,

$$\int_{\Omega_x} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot \Delta \mathbf{u} \right] dV = \int_{\Omega_x} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{x}} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dV, \quad (\text{F.90})$$

pois a derivada parcial de $\nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f$ em relação a \mathbf{u} é nula.

Reescrevendo a lei de Darcy da Eq. (3.13) na configuração material, tem-se

$$\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{x}} = -\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f. \quad (\text{F.91})$$

Desta forma, a Eq. (F.90) pode ser reescrita como,

$$\int_{\Omega_x} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{x}} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dV = - \int_{\Omega_x} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} (\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f) \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dV. \quad (\text{F.92})$$

Aplicando a regra do produto na Eq. (F.92), obtém-se o seguinte resultado:

$$- \int_{\Omega_x} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} (\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f) \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dV = - \int_{\Omega_x} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}} \cdot \Delta \mathbf{u} \right) \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f \right] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dV. \quad (\text{F.93})$$

Como o tensor de permeabilidade $\boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}}$ é função do deslocamento \mathbf{u} utiliza-se a regra da cadeia para reescrever a Eq. (F.93) conforme,

$$- \int_{\Omega_x} \left[\mathbb{K}_{\mathbf{x}} : \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} \right] \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \, dV, \quad (\text{F.94})$$

onde $\mathbb{K}_{\mathbf{x}}$ é o módulo tangente da fase fluida, conforme definido em [Bonet e Wood \(2008\)](#),

$$\mathbb{K}_{\mathbf{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{\kappa}_{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{E}}, \quad (\text{F.95})$$

e a derivada do tensor de deformações de Green-Lagrange em relação ao deslocamento na direção do incremento $\Delta \mathbf{u}$ é o resultado da Eq. (A.11).

Sendo assim, considerando a simetria do tensor $\mathbb{K}_{\mathbf{x}}$ e retomando o resultado da Eq. (A.11), a linearização da segunda parcela da Eq. (F.65) na configuração material consiste na seguinte integral:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} &= - \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f \mathbb{K}_{\mathbf{x}} : [\mathbf{F}^T (\nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u})] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f dV \\ &= - \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f [\mathbb{K}_{\mathbf{x}} : \Delta \mathbf{E}] \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f dV \end{aligned} \quad (\text{F.96})$$

Para, escrever a Eq. (F.96) na configuração espacial, é considerada a seguinte definição de [Ateshian e Weiss \(2010\)](#) referente ao módulo tangente da fase fluida $\mathbb{K}_{\mathbf{x}}$

$$\mathbb{K}_{\mathbf{x}} = J^{-1} [\mathbf{F} \boxtimes \mathbf{F}] : \mathbb{K}_{\mathbf{X}} : [\mathbf{F}^T \boxtimes \mathbf{F}^T], \quad (\text{F.97})$$

que implica em

$$\mathbb{K}_{x_{abcd}} = J^{-1} \mathbf{F}_{aA} \mathbf{F}_{bB} \mathbf{F}_{cC} \mathbf{F}_{dD} \mathbb{K}_{X_{ABCD}}. \quad (\text{F.98})$$

Sendo assim, obtém-se que a linearização do segundo termo da Eq. (F.65) na configuração espacial é,

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\Omega_x} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f dv \right] \cdot \Delta \mathbf{u} = - \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu^f \cdot (\mathbb{K}_{\mathbf{x}} : \Delta \mathbf{e}) \nabla_{\mathbf{x}} \mu^f dv. \quad (\text{F.99})$$

Para finalizar a linearização, deve-se calcular a derivada contida na terceira parcela da Eq. (F.65)

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\partial \Omega_x} \bar{q} \delta \mu^f ds \right] \cdot \Delta \mathbf{u}, \quad (\text{F.100})$$

porém, como o fluxo \bar{q} e o campo de potenciais químicos virtuais $\delta \mu^f$ independem do deslocamento \mathbf{u} , tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left[\int_{\partial \Omega_x} \bar{q} \delta \mu^f ds \right] \cdot \Delta \mathbf{u} = 0. \quad (\text{F.101})$$

Desta forma, com os resultados das Eq. (F.85), Eq. (F.99) e Eq. (F.101), a derivada direcional da formulação integral do fluido δW^f em relação ao deslocamento \mathbf{u} , na direção

do incremento $\Delta \mathbf{u}$ demonstrada pela Eq. (F.65) assume o seguinte resultado (já discretizado no tempo),

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} [\delta W_{n+1}^f] \cdot \Delta \mathbf{u}_{n+1} &= \int_{\Omega_x} \frac{\delta \mu_{n+1}^f}{\Delta t} \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1} \, dv \\
&\quad - \int_{\Omega_x} \delta \mu_{n+1}^f \operatorname{tr} [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}_{n+1}^s \nabla_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}] \, dv \\
&\quad + \int_{\Omega_x} (\operatorname{div} \mathbf{v}_{n+1}^s) (\operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_{n+1}) \delta \mu_{n+1}^f \, dv \\
&\quad + \int_{\Omega_x} \nabla_{\mathbf{x}} \delta \mu_{n+1}^f \cdot (\mathbb{K}_{\mathbf{x}_{n+1}} : \Delta \mathbf{e}_{n+1}) \nabla_{\mathbf{x}} \mu_{n+1}^f \, dv.
\end{aligned} \tag{F.102}$$