

Laboratório Nacional de Computação Científica
Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

**Aspectos Básicos da Modelagem Multiescala de Tecidos
Biológicos**

Por
Felipe Figueredo Rocha

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

JANEIRO DE 2015

**ASPECTOS BÁSICOS DA MODELAGEM MULTIESCALA DE
TECIDOS BIOLÓGICOS**

Felipe Figueredo Rocha

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO LABORATÓRIO
NACIONAL DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE
EM CIÊNCIAS EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Aprovada por:

Prof. Pablo Javier Blanco, D.Sc
(Presidente)

Prof. Abimael Fernando Dourado Loula, D.Sc

Prof. Santiago Adrián Urquiza, D.Sc.

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL
JANEIRO DE 2015

Rocha, Felipe Figueredo

R672a aspectos básicos da modelagem multiescala de tecidos biológicos / Felipe Figueredo Rocha. Petropolis, RJ. : Laboratório Nacional de Computação Científica, 2015.

XIII, 166 p. : il.; 29 cm

Orientadores: Pablo Javier Blanco e Raúl Antonino Feijóo

Dissertação (Mestrado) – Laboratório Nacional de Computação Científica, 2015.

1.Sistema cardiovascular - Simulação por computador, 2. Teoria constitutiva, 3. Elemento de Volume Representativo, 4. Grandes Deformações, 5. Princípios Variacionais I. Blanco, Pablo Javier. II. Feijóo, Raúl Antonino. III. MCTI/LNCC. .

CDD – 612.118 1

e.pí.gra.fe

Os que se encantam com a prática sem a ciência são como os timoneiros que entram no navio sem timão nem bússola, nunca tendo certeza do seu destino.

Leonardo da Vinci

Dedicatória

Este trabalho é TOTALMENTE dedicado a
Mariluce Figueredo de Souza (1949-2011),
mulher que me deu a vida e dedicou a sua
verdadeiramente aos seus filhos.

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer ao meu orientador Pablo Blanco e co-orientador Raúl Feijóo, pela constante disposição e motivação que me foram inspiradoras, principalmente nos momentos mais difíceis do trabalho.

Expresso minha gratidão aos membros da banca, professores Abimael Loula e Santiago Urquiza, pela paciência com a leitura do texto bem como as valiosas sugestões.

Agradeço também aos meus colegas de Hemolab pelas discussões e ajudas em assuntos práticos, em especial ao Gonzalo Ares e Gonzalo Maso.

Aos meus amigos potiguares que moram no Rio e do LNCC, bem como minha amiga Geórgia Cortez, muito obrigado pelos momentos de desestresse e conversas profundas sobre a vida.

Por último, muito obrigado a minha família por todo apoio, não somente no mestrado, mas em todas as decisões que tomei na vida.

Resumo da Dissertação apresentada ao LNCC/MCT como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

ASPECTOS BÁSICOS DA MODELAGEM MULTIESCALA DE TECIDOS BIOLÓGICOS

Felipe Figueredo Rocha

Janeiro, 2015

Orientador: Pablo Javier Blanco, D.Sc

Co-orientador: Raúl Antonino Feijóo, D.Sc

Sabe-se que o conhecimento do comportamento mecânico da parede arterial é fundamental para a compreensão de diversas doenças cardiovasculares bem como o planejamento adequado do tratamento destas. Contudo a modelagem da resposta constitutiva deste tecido é complexa sendo que a abordagem clássica baseada puramente em leis fenomenológicas é insuficiente para representar fenômenos micromecânicos, os quais, ademais, dominam aspectos tais como remodelagem e ruptura. A modelagem multiescala de tecidos biológicos surge então como uma alternativa mais racional para representar a resposta constitutiva destes materiais levando-se em consideração aspectos microscópicos da organização do tecido como a existência de fibras de colágeno, poros, etc. Neste trabalho revisamos os conceitos fundamentais da mecânica dos sólidos não-linear incluindo a linearização dos princípios variacionais, bem como os aspectos básicos da teoria constitutiva em grandes deformações, passando pelo tratamento da condição de incompressibilidade e a teoria do dano contínuo. Uma teoria constitutiva multiescala baseada na homogenização em um Elemento de Volume Representativo em regime de grandes deformações é apresentada em um contexto de formulações variacionais, sendo assumida a homogeneização do campo de deslocamentos e do gradiente de deformação, além da consistência energética entre escalas baseada no

princípio de Hill-Mandel. Neste contexto, diversas simulações são apresentadas e discutidas. Por fim, como corolário da abordagem da mecânica do contínuo, mostramos uma estratégia para a identificação do campo de dano baseado na análise de sensibilidade de um funcional custo baseado nas diferenças de campos de deslocamentos e energia de deformação.

Abstract of Dissertation presented to LNCC/MCT as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Sciences (M.Sc.)

BASIC ASPECTS IN THE MULTISCALE MODELLING OF BIOLOGICAL TISSUES

Felipe Figueredo Rocha

January, 2015

Advisor: Pablo Javier Blanco, D.Sc

Co-advisor: Raúl Antonino Feijóo, D.Sc

A detailed mechanical behaviour of the arterial wall is required to gain insight on the onset and progress of some cardiovascular diseases as well as to propose adequate treatments. The classical constitutive modelling approach based purely on phenomenological laws fails in representing the micromechanical phenomena which dominates important aspects of these tissues such as remodelling and rupture. In turn, the multi-scale constitutive modelling raises as a more rational alternative that allows to consider the microscopic features and interactions of the basic unit blocks of the biological tissues such as the existence of the collagen fibres, pores, etc. In this work we review the non-linear solid mechanics fundamental concepts, the linearisation of the variational principles, numerical treatment of incompressibility constraint as well the continuum damage theory. A constitutive multi-scale theory based on the existence of Representative Volume Element in the finite strain regime is presented in a variational formulation framework, where homogenization for the displacement and deformation gradient are assumed as well the energetic coupling between scales through a extended version of the Hill-Mandel principle. In this context, a number of simulations are discussed. Finally, as corollary of the continuum mechanics framework, we derive a strategy for the damage field identification which is based on the sensibility analysis of a cost

functional which takes account the displacement and energies differences.

Sumário

Introdução	1
Motivação Médica	1
Constituição da Parede Arterial	2
Modelagem constitutiva multiescala e tecidos biológicos	4
Objetivos	6
Organização da dissertação	7
1 Mecânica das grandes deformações	11
1.1 Aspectos cinemáticos	12
1.2 Formulação variacional abstrata	20
1.3 Princípio de Potências Virtuais	23
1.4 Linearização das equações de equilíbrio	31
1.5 Forma linearizada na descrição espacial	40
1.6 Formulação de elementos finitos	41
2 Modelos constitutivos para tecidos moles	44
2.1 Teoria constitutiva fenomenológica	44
2.1.1 Inclusão da variável interna de dano	49
2.1.2 Extensão para materiais com isotropia transversal	51
2.2 Modelos de hiperelasticidade	53
2.2.1 Modelos quase incompressíveis	55
2.3 Tensores de Piola-Kirchhoff e Tangente	57

2.3.1	Materiais transversalmente isotrópicos	60
2.4	Modelos de dano	62
3	Tratamento da incompressibilidade	64
3.1	Modelagem da incompressibilidade	64
3.2	Inclusão de compressibilidade artificial	70
3.3	Formulação de elementos finitos	71
4	Experimentos Numéricos	74
4.1	Cilindro pressurizado com pré- <i>stretch</i>	74
4.2	Cilindro danificado por carregamento cíclico	82
5	Modelagem constitutiva multiescala	85
5.1	Aspectos cinemáticos	87
5.1.1	Conjunto de deslocamentos admissíveis	87
5.1.2	Espaço de flutuações admissíveis	90
5.2	Princípio de Potências Virtuais	91
5.2.1	Dualidade	92
5.2.2	Princípio variacional do equilíbrio	94
5.2.3	Princípio de Hill-Mandel	95
5.3	Modelos multiescala específicos	99
5.3.1	Modelo de deslocamento linear na fronteira	100
5.3.2	Modelos de flutuações periódicas na fronteira	101
5.4	Formulação de elementos finitos	103
5.5	Experimentos computacionais	105
5.5.1	Exemplo 1 - Distribuição estruturada de poros com porosidade de 10%	108
5.5.2	Exemplo 2 - Distribuição estruturada de poros com porosidade de 50%	111
5.5.3	Exemplo 3 - Distribuição aleatória de poros com porosidade de 10%	114

5.6	Considerações finais	119
6	Identificação do campo de dano pela geometria deformada	121
6.1	Descrição do problema de identificação	122
6.2	Formulação variacional do problema de identificação	124
6.3	Algoritmo de minimização	132
6.3.1	Processo iterativo de minimização	134
6.4	Exemplo Numérico	135
	Considerações Finais	142
	Perspectivas Futuras)	144
	Referências Bibliográficas	146
	Apêndice	
A	Referência Rápida de Notações	155
B	Identities úteis	158
C	Derivadas analíticas	160
D	Dedução da solução semialítica para um cilindro incompressível com simetria de revolução	163

Lista de Figuras

Figura

1	Imagens da parede arterial.	4
2	Fenômenos relacionado à falha de material de tecido.	5
3	Estrutura esquemática da dissertação.	10
1.1	Diagrama de dualidade do Princípio de Potências Virtuais.	22
1.2	Corpo genérico em configurações material e espacial.	25
2.1	Exemplo de cilindro (artéria) reforçada por duas famílias de fibras.	52
3.1	Espaços de aproximação.	72
4.1	Validação da implementação semianalítica.	76
4.2	Vista da seção transversal do modelo de um quarto de cilindro.	77
4.3	Módulo do campo de deslocamentos com $\lambda_z = 1,2$ e pressão interna 25 kPa.	79
4.4	Comparação da solução numéricas por elementos finitos e solução semianalítica.	79
4.5	Campos de pressão para $\lambda_z = 1$ e pressão interna 25 kPa.	80
4.6	Campos de pressão para $\lambda_z = 1,2$ e pressão interna 25 kPa.	81
4.7	Comparação da solução numéricas por elementos finitos e solução semianalítica.	84
4.8	Imagem do campo de dano no último passo de carga.	84
5.1	Domínios da macroescala e microescala.	88
5.2	Diagrama de dualidade para o problema multiescala.	93

5.3	Exemplo de célula hexagonal com 3 pares de fronteiras opostas. . .	101
5.4	Imagens de microscopia de artérias cerebrais humana (Robertson et al. (2012)) (barra = 50 μm)	105
5.5	Algumas malhas de EVR com distribuição estruturada de poros. . .	108
5.6	Comparação de diferentes malhas para poros estruturados com 10% de porosidade.	109
5.7	Comparação de EVRs com diferentes 1, 4 e 9 poros cada um considerado na malha mais fina e porosidade de 10%.	110
5.8	Visualização do campo de dano para o EVR de 9 poros circulares com 10% de porosidade.	110
5.9	Comparação de diferentes malhas para 9 poros estruturados com 50% de porosidade.	112
5.10	Comparação de RVEs com diferentes 1, 4 e 9 poros cada um considerado na malha mais fina e porosidade de 50%.	112
5.11	Visualização do campo de dano para o EVR de 9 poros circulares com 50% de porosidade para diferentes malhas.	113
5.12	Algumas malhas de EVR com distribuição aleatórias de poros com porosidade de 10%.	115
5.13	Comparação de três diferentes configurações de EVRs aleatórios e poros elípticos com um EVR estruturado (todos com 9 poros, 10% de porosidade).	116
5.14	Comparação da segunda configuração aleatória de EVR com poros elípticos e circulares e o EVR estruturado, todos com 9 poros e 10% de porosidade.	117
5.15	Configuração 1 de poros elípticos em malha fina (ou C).	117
5.16	Configuração 3 de poros elípticos em malha fina (ou C).	118
5.17	Algumas malhas de EVR com distribuição aleatória de poros com porosidade de 10%.	118

6.1	Esquema das configurações a ser identificada e do passo atual de identificação.	123
6.2	Esquema da identificação da configuração de referência a partir do <i>parent vessel</i> e da configuração danificada.	124
6.3	Imagens da placa danificada.	137
6.4	Comparação da processo de minimização.	138
6.5	Erro no campo de dano na última iteração.	140
6.6	Comparação das geometrias deformadas com o dano identificado na ultima iteração com a geometria danificada de referência (em <i>wireframe</i>).	141

Introdução

Este capítulo introdutório tem o objetivo de expor a importância do tema estudado, seja no sentido médico mas também do ponto de vista teórico da mecânica computacional, e ainda os objetivos que desejamos alcançar ao longo do trabalho. Serão ainda abordados de forma sucinta temas de índole mais biológica indispensáveis ao entendimento da dissertação para um público não especialista na área de biomecânica de tecidos moles, como por exemplo a constituição da parede arterial e as principais doenças relacionadas a esta. Ao final do capítulo discutiremos a estrutura da dissertação como forma de guiar melhor a leitura do material.

Motivação Médica

Enquanto as doenças cardiovasculares continuarem sendo a maior causa de morte no mundo Mendis (2011); Heidenreich et al. (2011), os esforços da comunidade científica tenderão a crescer no sentido da maior compreensão deste tema. Como não poderia deixar de ser verdade, nestes últimos anos, pesquisadores das áreas de engenharia, computação e medicina começaram a introduzir ferramentas computacionais dentro da prática da medicina. O atual grau de desenvolvimento alcançado pelas técnicas de modelagem computacional, conjuntamente com o rápido crescimento do poder de cálculo dos computadores, tem permitido o estudo, desenvolvimento e solução de modelos computacionais altamente sofisticados capazes de antecipar, com grau aceitável de precisão, os resultados de importantes procedimentos médicos.

A modelagem e a simulação computacional, aliadas à aquisição de imagens

médicas de pacientes específicos, permitem fornecer imagens tridimensionais de alta resolução representando os fenômenos que estão acontecendo em determinada parte do organismo de um dado paciente. Estas tecnologias estão sendo aplicadas com sucesso no planejamento terapêutico e cirúrgico das mais variadas doenças, no desenvolvimento de modelos (e sua simulação computacional) para a dinâmica do sistema cardiovascular, dinâmica do sistema respiratório, crescimento de tumores, transporte, difusão e absorção de fármacos, no desenvolvimento de métodos para análise empregando reconstrução tridimensional de imagens obtidas por tomografia computadorizada e de ressonância magnética, entre outros.

Em particular, as doenças cardiovasculares, são e continuarão a ser a principal causa de morte na população nos países desenvolvidos e em desenvolvimento como o Brasil. Em especial, a cardiopatia isquêmica em conjunto com a doença vascular cerebral continuarão a ser as principais causas de morte no mundo, sendo consideradas responsáveis por 35% das mortes nos países desenvolvidos e 25% nos países em desenvolvimento. No entanto devido a maior população dos países em desenvolvimento, o número de mortes por estas doenças será quase três vezes maior nos países em desenvolvimento do que nos desenvolvidos.

Constituição da Parede Arterial

O corpo humano é um sistema altamente complexo, em particular a parede arterial apresenta uma estrutura muito rica do ponto de vista mecânico. Dentre os componentes básicos mecânicamente relevantes, estão a elastina, o colágeno e as fibras de músculo liso. Podemos ver na Fig. 1(a) um corte da parede arterial com suas diversas camadas. Do interior para o exterior temos uma divisão simplificada em 3 camadas mecanicamente relevantes, são elas:

Intima: É formado basicamente por elastina, e tem comportamento aproximadamente elástico linear e isotrópico, visto a predominância quase total deste componente. Por vezes o endotélio não é considerado

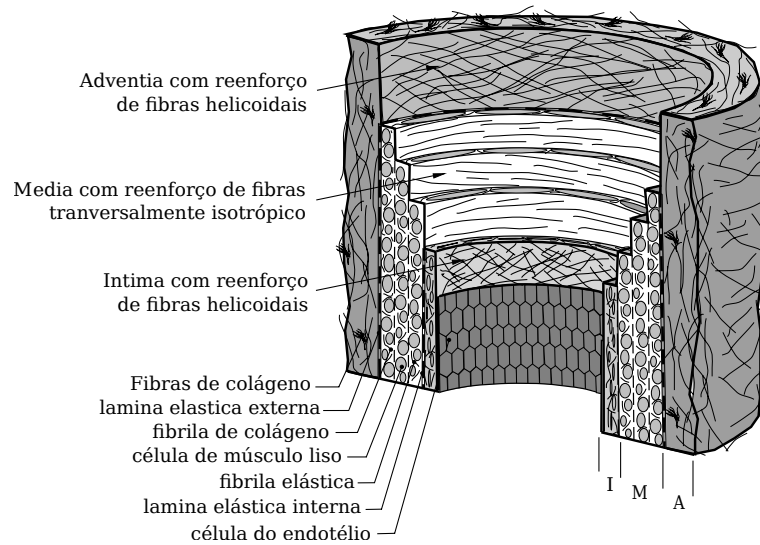
parte desta camada, visto a pequena espessura e pouca relevância mecânica

Media: É a parte intermediária que compõe maior parte da artéria sendo formada por uma matriz elástica e músculo liso, reforçada com fibras de colágeno. O comportamento aqui é não-linear e anisotrópico dada a presença do músculo liso e colágeno.

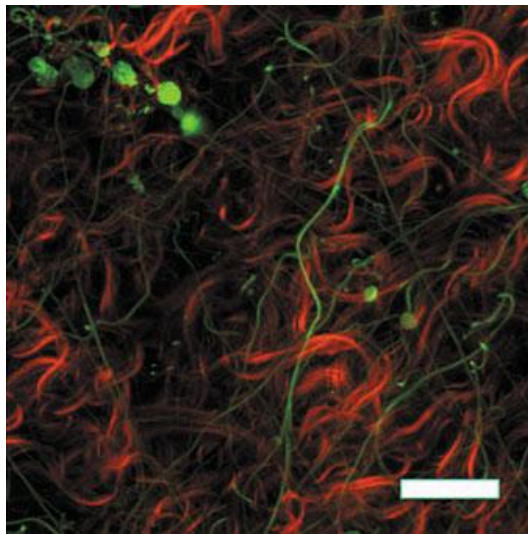
Adventícia (ou Adventia): É a parte externa, sendo a mais rígida do ponto de vista mecânico, pois é formada por uma concentração maior de fibras de colágeno imersas em elastina.

A primeira, denominada *intima*, é de espessura reduzida e compõe-se das células de endotélio cobertas por uma lâmina elástica que é a interface com a segunda camada. Esta segunda camada, denominada *media*, possui por sua vez diversas camadas cada uma com uma estrutura helicoidal própria. Em cada subcamada a composição é principalmente de músculo liso e caracteriza-se por ter um comportamento principalmente elástico. Uma lâmina elástica realiza a interface entre esta e a terceira camada, a qual se denomina *adventícia*, que é um complexo arranjo, também helicoidal, de fibras de colágeno que fornece o maior suporte estrutural a fim de manter a estabilidade frente à solicitação produzida pelo escoamento do sangue.

Como mencionado anteriormente, a camada *media* e *adventícia* tem caráter anisotrópico, e uma medida experimental importante é a ângulo preferencial no qual as fibras de colágeno estão distribuídas, bem como seus estiramentos. Tais características podem ser adquiridas experimentalmente via análise microscópica de imagens médicas como visto em Fig. 1(b). Vale salientar que a modelagem do músculo liso até o presente momento não é bem compreendida na literatura e seu efeito é frequentemente desprezado nos modelos existentes.



(a) Camadas da parede arterial (obtida de Holzapfel et al. (2000)).

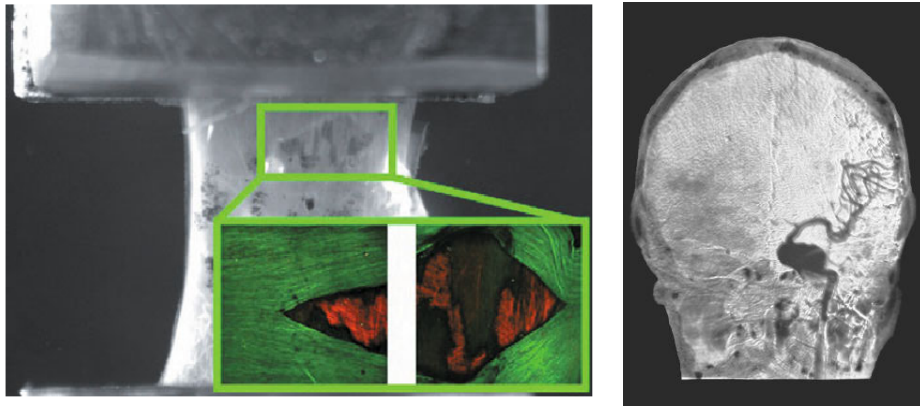


(b) Imagem microscópica (Multi-Photon Microscopy System) da *adventícia*, em verde elastina e em vermelho fibras de colágeno (obtida de Robertson et al. (2012)).

Figura 1: Imagens da parede arterial.

Modelagem constitutiva multiescala e tecidos biológicos

Do exposto na seção anterior, observa-se que os tecidos biológicos da parede arterial têm uma constituição altamente complexa e exibem um comportamento não linear devido à complexidade constitutiva. Isto coloca a necessidade de estender os modelos constitutivos existentes na atualidade, baseados puramente em fenomenologia, para modelos que considerem informações da constituição



(a) Rompimento de um tecido arterial (obtida de Robertson et al. (2012)). (b) Aneurisma cerebral.

Figura 2: Fenômenos relacionado à falha de material de tecido.

microscópica do tecido Speirs et al. (2008). Uma forma mecanicamente racional de estender estes modelos é introduzir o conceito de modelagem multiescala, e este é o caminho escolhido na parte final do presente trabalho para modelar o comportamento dos tecidos arteriais.

Um ponto de grande relevância prática em que a teoria multiescala pode ser útil é o de se estudar os mecanismos de degradação e falha dos tecidos biológicos. Esta abordagem permite estudar a formação de trincas no material a nível microscópico, que é realmente onde elas se originam, e a partir daí obter a representação final desta através de uma descontinuidade a nível macroscópico Sánchez et al. (2013). A importância deste estudo está relacionada com diversos males como por exemplo o rompimento e crescimento de aneurismas (ver Fig. 2(b)), assim como a ruptura de placa aterosclerótica.

Outro aspecto que justifica este estudo, em favor da abordagem multiescala, é a dificuldade da obtenção de parâmetros para os modelos fenomenológicos neste tipo de tecidos, visto que os testes mecânicos são realizados *ex vivo*¹. Isto vai de encontro ao refino dos modelos fenomenológicos, pois estes quanto mais complexos, mais parâmetros são necessários.

¹ Existem testes que são realizados em animais *in vivo*, mas há sérias questões éticas envolvidas.

Além do ingrediente constitutivo não-linear e de natureza multiescala, há ainda várias outras dificuldades relacionadas com a modelagem de tecidos biológicos. Por um lado tais tecidos, que são classificados como moles, permitem grandes deformações, de forma que o problema ganha uma não-linearidade adicional conhecida como não-linearidade geométrica. Por outro lado, diferentemente dos materiais de engenharia, há diversos outros processos de caráter biológico como o crescimento e remodelamento (*Growth and Remodelling*), que modificam profundamente, dentre outras coisas, a geometria e parâmetros dos materiais em questão.

Objetivos

Assim sendo, o objetivo geral colocado para o presente trabalho é o desenvolvimento de modelos constitutivos multiescala para simular o comportamento da parede arterial, com ênfase na modelagem de fenômenos de falha e degradação de materiais.

De forma específica, visto que os materiais em questão são tecidos moles, é primeiro necessário implementar e validar modelos da mecânica do contínuo para corpos hiperelásticos em regime de grandes deformações. Em um segundo momento é necessário incluir no modelo mecanismos de dano destes materiais.

Em seguida, após o desenvolvimento de uma teoria multiescala baseada em EVR, incorporaremos modelos de degradação do material para então estudarmos fenômenos de localização na escala microscópica de EVR poroso. Vale salientar, que ainda não é objetivo deste trabalho a resolução dos problemas macroscópico e microscópico acoplados, mas sim separadamente.

Como um corolário da descrição do dano, é ainda objetivo deste trabalho o desenvolvimento de um algoritmo de identificação do campo de dano sofrido pelo material através de uma geometria conhecida de equilíbrio do corpo.

Organização da dissertação

O texto está dividido em 6 capítulos excluindo-se o capítulo de introdução e conclusão, como pode ser visto na Fig. 3. Os primeiros 4 capítulos têm um enfoque de revisar conceitos básicos da mecânica do contínuo, em especial aqueles usados no estudo de tecidos biológicos. Na segunda parte que é constituída por 2 capítulos independentes, estendemos e aplicamos a teoria aprendida na primeira parte, em situações que não são tão clássicas na literatura. Vejamos a descrição de cada um dos capítulos:

Parte I

Capítulo 1 Este capítulo começa apresentando os aspectos básicos da cinemática em grandes deformações. Em seguida, após uma breve introdução ao princípio de potência virtual em uma forma abstrata, é estabelecida a formulação variacional para o problema de equilíbrio de elasticidade bem como a linearização desta última, que será base para a implementação em elementos finitos. Vale salientar que todas as equações foram passadas para configuração de referência (ou material).

Capítulo 2 Neste capítulo discutimos alguns princípios da teoria constitutiva dos materiais (de maneira fenomenológica) para materiais hiperelásticos. Na sequência a teoria é estendida para incluir inelasticidade através da variável de dano contínuo. É dada uma atenção especial à derivação analítica dos tensores de tensão e tangente constitutiva através de leis hiperelásticas isotrópicas baseadas nos 3 invariantes do tensor de Green-Lagrange, necessários para implementação das equações vistas no primeiro capítulo. É discutida ainda a extensão para leis hiperelásticas anisotrópicas da classe transversalmente isotrópicas com até duas direções preferenciais, caso que modela a parede arterial reforçada

por fibras de colágeno. Por fim, apresentamos as formas particulares das energias de deformação e de evolução de dano que utilizamos durante o trabalho.

Capítulo 3 Este capítulo é devotado ao tratamento da incorporação da condição de incompressibilidade do campo de deslocamentos, visto que grande parte dos tecidos biológicos satisfazem essa condição. A imposição da incompressibilidade no espaço dos deslocamento é relaxada através da incorporação do multiplicador de Lagrange de pressão, conduzindo a formulações mistas no contexto de elementos finitos. Por fim, são discutidas as opções de escolha dos espaços de aproximação bem como uma estratégia de melhoria de condicionamento do sistema linear.

Capítulo 4 Neste capítulo são mostrados os estudos numéricos da implementação de elementos finitos realizada, buscando aplicar todos os aspectos teóricos discutidos nos capítulos anteriores. Foi escolhido um caso clássico da literatura que é o do cilindro incompressível com simetria de revolução pressurizado aonde temos solução analítica de referência.

Parte II

Capítulo 5 Neste capítulo, que dá o nome a dissertação, é desenvolvida em formato variacional uma teoria constitutiva multiescala em grandes deformações baseada na homogeneização de um EVR (Elemento de Volume Representativo). Vale observar que desenvolvimento está apoiado em recentes trabalhos (Blanco et al., 2014a; de Souza Neto e Feijóo, 2006; Sánchez et al., 2013; Blanco et al., 2014b; de Souza Neto et al., 2014) . Em seguida, motivado por imagens microscópicas, aplicamos esta teoria à uma microcélula porosa de elastina localizada no interior da *intima* sob várias

configurações de poros. Obtemos dessa forma bandas de localização de deformação entre os poros e pontos de instabilidade (mudança no sinal da derivada) nos gráficos de tensão-deformação.

Capítulo 6 Desenvolvemos neste capítulo uma estratégia de identificação do campo de dano baseado na minimização de um funcional custo adequadamente proposto. É usado um funcional Lagrangiano para relaxar a condição subsidiária que vem do problema de equilíbrio mecânico, e através da solução do problema adjunto se faz possível calcular analiticamente através de um simples pós-processamento a sensibilidade do funcional em questão à variável de dano que queremos identificar, a sensibilidade é então usada como critério para a direção de descida do nosso algoritmo. As geometrias alvos (placa circular) para os exemplos numéricos são construídas a partir da resolução do problema de equilíbrio mecânico para um campo de dano conhecido.

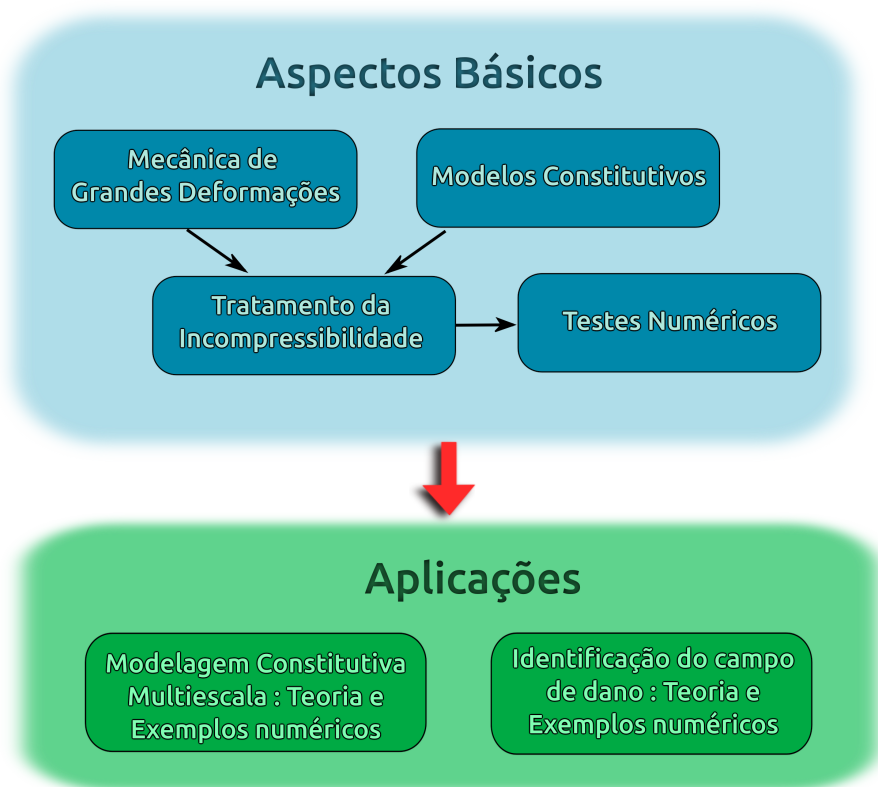


Figura 3: Estrutura esquemática da dissertação.

Capítulo 1

Mecânica das grandes deformações

Neste capítulo apresentaremos as equações básicas da mecânica do contínuo, desde a definição do mapeamento entre configuração material e espacial, até a linearização do princípio variacional utilizado na formulação do problema. Nos deteremos às equações e definições mais genéricas no sentido de não serem particularizadas para pequenas deformações, já que o foco do nosso estudo são materiais que em nenhuma situação admitem essa aproximação.

Durante todo o capítulo admitiremos a existência de uma função de potencial hiperelástico, sem no entanto dar nenhuma forma explícita para o mesmo. Este tema será tratado de forma aprofundada no capítulo posterior, onde discutiremos todos os modelos de materiais que usaremos neste trabalho.

Por concisão, alguns operadores matemáticos e notações utilizados que são usuais em mecânica do contínuo não estão definidos no texto. Para isto, sugerimos fortemente ao leitor que visite os Apêndices A e B sempre que se sentir desconfortável com alguma notação. Estas notações não são de longe universais, nem mesmo no campo da mecânica.

Sem ser exaustivos, as referências clássicas sobre este tema são Holzapfel (2000); Ogden (1984). Para conceitos mais fundamentais de mecânica do contínuo Gurtin (1981) fornece uma exposição precisa. Em relação aos aspectos relacionados ao método dos elementos finitos para problemas não-lineares sugerimos Wriggers (2008); Bonet e Wood (1997); de Souza Neto et al. (2008). Para um leitor mais

interessado em aspectos matemáticos do tema Marsden e Hughes (1983); Ciarlet (1988) possuem exposição mais rigorosa e Ball (1976) demonstra condições de existência de solução do problema de elasticidade não-linear.

Ao longo deste capítulo, assim como nos subseqüentes, a ferramenta básica de modelagem será o princípio de potências virtuais (formulação variacional) formulado modernamente na mecânica por Germain (1972); Maugin (1980)¹. Ressaltamos aqui que a escolha desta abordagem é justificada por se tratar de uma metodologia das mais sistemáticas e seguras de modelagem, senão a mais, além de permitir a derivação direta de métodos numéricos robustos (elementos finitos) e de ter sólida base matemática fundada na análise funcional.

Serão analisados primeiramente aspectos cinemáticos que conduzem a uma medida de deformação e aos espaços funcionais de variações relacionados, depois procederemos por argumentos de dualidade segundo as caracterizações das potências internas e externas através das quais identificaremos medidas de tensão e esforços externos respectivamente, postulando finalmente o equilíbrio mecânico variacionalmente. Este procedimento está melhor descrito em Feijóo e Taroco (1982, 1983); Taroco et al. (2014).

1.1 Aspectos cinemáticos

Seja $\Omega_m \subset \mathbb{R}^{\text{nd}}$ e $\Omega_s \subset \mathbb{R}^{\text{nd}}$ abertos, onde $\text{nd} \in \{2, 3\}$. Tais domínios estão relacionados por um mapeamento $\chi : \Omega_m \rightarrow \Omega_s$, onde χ é um difeomorfismo², de tal forma que $\Omega_s = \chi(\Omega_m)$. Aos domínios Ω_m e Ω_s nos referiremos como configuração material (ou Lagrangiana ou de referência) e espacial (ou Euleriana ou atual), respectivamente.

Fisicamente, Ω_m representa o conjunto de partículas \mathbf{X} pertencentes a um corpo em estado livre de deformações³. Por outro lado Ω_s representa a

¹ Nos referimos modernamente pois as ideias por trás deste princípio já eram utilizadas por Lagrange, Euler e Bernoulli.

² É um isomorfismo e é diferenciável.

³ Em nosso contexto, corpo representa um sólido, mas mais genericamente corpo se refere a uma porção de matéria, seja ela fluida ou sólida. No lugar de livre leia-se uma configuração de referência por onde começaremos o estudo, podendo haver deformações ou tensões residuais que

configuração em que o corpo se encontra em equilíbrio quando submetido a um processo de carregamento conhecido. Desta forma:

$$\Omega_s = \{\mathbf{x}; \mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}), \mathbf{X} \in \Omega_m\} \quad (1.1)$$

Reciprocamente, dado que $\boldsymbol{\chi}$ admite inversa ($\boldsymbol{\chi}^{-1}$) por ser um isomorfismo, temos ainda:

$$\Omega_m = \{\mathbf{X}; \mathbf{X} = \boldsymbol{\chi}^{-1}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega_s\} \quad (1.2)$$

Definimos agora o campo de deslocamento $\mathbf{u} : \Omega_m \rightarrow \mathbb{R}^{\text{nd}}$ como:

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}) = \mathbf{x} - \mathbf{X} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}) - \mathbf{X} \quad (1.3)$$

Por outro lado temos a descrição espacial do deslocamento, denotado por \mathbf{u}_s , tal que $\mathbf{u}_s : \Omega_s \rightarrow \mathbb{R}^{\text{nd}}$ dado por:

$$\mathbf{u}_s(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{X} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\chi}^{-1}(\mathbf{x}) \quad (1.4)$$

Dado que o mapeamento é diferenciável, faz sentido definir o gradiente desta transformação ⁴, comumente denominado de \mathbf{F} , segue:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = (\mathbf{F})_m = \nabla \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}) = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u} \quad (1.5)$$

Daqui para frente quando omitido a referência à configuração material, admitiremos \mathbf{F} sempre material. Fixando uma base ortonormal (cartesiana) temos em componentes:

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} = \frac{\partial (\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}))_i}{\partial X_j} \quad (1.6)$$

à princípio não são considerados neste estudo.

⁴ Uma prática comum, porém errônea, é chamar \mathbf{F} como o gradiente da deformação. Quando for preciso chamá-lo pelo nome, preferiremos gradiente da transformação

Analogamente temos o gradiente inverso dado por:

$$\mathbf{F}^{-1}(\mathbf{x}) = (\mathbf{F}^{-1})_s = \text{grad}\boldsymbol{\chi}^{-1}(\mathbf{x}) = \mathbf{I} - \text{grad}\mathbf{u}_s \quad (1.7)$$

Assim introduzido, a inversa do gradiente da transformação é uma quantidade espacial. Novamente, sobre uma base cartesiana, temos em componentes:

$$F_{ij}^{-1} = \frac{\partial X_i}{\partial x_j} = \frac{\partial(\boldsymbol{\chi}^{-1}(\mathbf{x}))_i}{\partial x_j} \quad (1.8)$$

Fisicamente o tensor \mathbf{F} mede o desvio de um vetor $\Delta\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X}_0$ na configuração de referência a um outro correspondente na configuração atual $\Delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}_0)$. De tal forma que no limite quando $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}_0, \Delta\mathbf{X} \rightarrow d\mathbf{X}$ e $\Delta\mathbf{x} \rightarrow d\mathbf{x}$ temos:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X} \quad (1.9)$$

O tensor \mathbf{F} também traz importantes informações sobre a variação do volume de uma partícula sólida. Isto é, sejam $d\mathbf{X}_i, d\mathbf{x}_i, i \in 1, 2, 3$ de tal forma que:

$$d\Omega_m = d\mathbf{X}_1 \cdot (d\mathbf{X}_2 \times d\mathbf{X}_3), \quad d\Omega_s = d\mathbf{x}_1 \cdot (d\mathbf{x}_2 \times d\mathbf{x}_3) \quad (1.10)$$

Da interpretação geométrica do determinante temos:

$$\det \mathbf{F} = \frac{\mathbf{F}d\mathbf{X}_1 \cdot (\mathbf{F}d\mathbf{X}_2 \times \mathbf{F}d\mathbf{X}_3)}{d\mathbf{X}_1 \cdot (d\mathbf{X}_2 \times d\mathbf{X}_3)} = \frac{d\mathbf{x}_1 \cdot (d\mathbf{x}_2 \times d\mathbf{x}_3)}{d\mathbf{X}_1 \cdot (d\mathbf{X}_2 \times d\mathbf{X}_3)}$$

Sendo assim:

$$d\Omega_s = \det \mathbf{F} d\Omega_m \quad (1.11)$$

Perceba que a relação acima motiva uma restrição sobre o mapeamento $\boldsymbol{\chi}$ que postulamos existir. Esta condição, que na verdade é um axioma fundamental da mecânica é conhecido como impenetrabilidade da matéria, diz que o mapeamento

χ é tal que:

$$\det \mathbf{F} > 0 \quad (1.12)$$

Dado a constante utilização deste termo, definimos a variável J como:

$$J = \det \mathbf{F} \quad (1.13)$$

Ainda, é natural imaginar que o gradiente da transformação também tem relação com a mudança das normais dos dois domínios. De fato, sejam dois elementos infinitesimais de volume, um em Ω_m e outro em Ω_s , onde uma das faces esteja localizada na fronteira do corpo, com áreas $d\Gamma_m$ e $d\Gamma_s$ e normais unitárias \mathbf{N} e \mathbf{n} respectivamente. Da propriedade do produto vetorial e utilizando as equações (1.11),(1.9) e (1.10) temos:

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_1 \cdot (d\mathbf{x}_2 \times d\mathbf{x}_3) &= J d\mathbf{X}_1 \cdot (d\mathbf{X}_2 \times d\mathbf{X}_3) \\ \mathbf{F} d\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{n} d\Gamma_s &= J d\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{N} d\Gamma_m \\ d\mathbf{X}_1 \cdot (\mathbf{F}^T \mathbf{n} d\Gamma_s) &= d\mathbf{X}_1 \cdot (J \mathbf{N} d\Gamma_m) \end{aligned}$$

Como $d\mathbf{X}_1$ é genérico temos portanto a seguinte relação conhecida na literatura como fórmula de Nanson.

$$\mathbf{n} d\Gamma_s = J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} d\Gamma_m \quad (1.14)$$

Tomando o módulo temos ainda:

$$d\Gamma_s = J |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}| d\Gamma_m \quad (1.15)$$

Outra aplicação do tensor \mathbf{F} é transformar derivadas de campos expressos em configurações distintas. Para um leitor familiarizado com conceitos de geometria

diferencial, estas transformações são conhecidas como *Pull-Back* (da configuração espacial para material) e *Push-Forward* (no sentido inverso). Como exemplo, vejamos como se dá o *Pull-Back* de um campo vetorial, em particular o campo de deslocamentos:

$$[(\text{grad}\mathbf{u}_s)_m]_{ij} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)_m = \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_k} \right)_m \left(\frac{\partial X_k}{\partial x_j} \right)_m = \frac{\partial U_i}{\partial X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_j}$$

Da definição do gradiente da transformação inversa em (1.8) temos que:

$$(\text{grad}\mathbf{u}_s)_m = (\nabla\mathbf{u})(\mathbf{F}^{-1})_m \quad (1.16)$$

No sentido inverso temos:

$$(\nabla\mathbf{u})_s = (\text{grad}\mathbf{u}_s)(\mathbf{F})_s \quad (1.17)$$

Expressões semelhantes para outros campos tensoriais são igualmente possíveis, no entanto adiaremos os exemplos à medida que houver necessidade.

Uma outra medida de deformação pode ser introduzida tomando o produto interno de (1.9) por ele mesmo, assim:

$$d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X} \cdot \mathbf{F}d\mathbf{X} = \mathbf{F}^T\mathbf{F}d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X}$$

Ao tensor que aparece no segundo termo damos o nome de tensor de Cauchy-Green (esquerdo), isto é:

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F} \quad (1.18)$$

Analogamente pode ser útil em algumas circunstâncias definir o tensor de Cauchy-Green (direito) como segue:

$$\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T \quad (1.19)$$

A medida de deformação dada pelo desvio do tensor de Cauchy-Green (esquerdo) da identidade é chamada de tensor de Green-Lagrange, e é definido como:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (1.20)$$

Ou em forma expandida em função de $\nabla \mathbf{u}$:

$$\mathbf{E}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T + (\nabla \mathbf{u})^T \nabla \mathbf{u}) \quad (1.21)$$

Desprezando o termo de segunda ordem temos o tensor de deformações $\boldsymbol{\varepsilon}$ dito infinitesimal (perceba que não se faz diferença entre a configuração material e espacial). Abaixo segue a definição:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\text{grad} \mathbf{u} + (\text{grad} \mathbf{u})^T) = \text{grad}^s \mathbf{u} \quad (1.22)$$

É muito usual ao se trabalhar com o tensor de Cauchy-Green (ou qualquer outro tensor) definir números característicos chamados de invariantes. Estes são:

$$I_1 = \text{tr} \mathbf{C} \quad (1.23)$$

$$I_2 = \frac{1}{2}((\text{tr} \mathbf{C})^2 - \text{tr} \mathbf{C}^2) \quad (1.24)$$

$$I_3 = \det \mathbf{C} \quad (1.25)$$

Os invariantes de um tensor nada mais são do que os coeficientes do polinômio característico do mesmo. Sendo assim, possuem relação direta com os autovalores (raízes do polinômio) dado pelas relações de Girard. A interpretação dos autovalores de \mathbf{F} é mais simples, representando fisicamente os estiramentos (ou *stretches*) em direções principais. Dado que $\lambda(\mathbf{C}) = \lambda(\mathbf{F})^2$, e sendo $\sigma(\mathbf{F}) =$

$\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ o espectro de \mathbf{F} , então:

$$I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 \quad (1.26)$$

$$I_2 = \lambda_1^2 \lambda_2^2 + \lambda_2^2 \lambda_3^2 + \lambda_3^2 \lambda_1^2 \quad (1.27)$$

$$I_3 = \lambda_1^2 \lambda_2^2 \lambda_3^2 \quad (1.28)$$

Como veremos no próximo capítulo as leis constitutivas geralmente são dadas ou como função dos invariantes ou como função dos autovalores, sendo que a primeira forma é a mais comum. Sendo assim, nos será útil a derivada dos invariantes em relação ao tensor \mathbf{C} , pode-se mostrar então que:

$$\frac{\partial I_1}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{I} \quad (1.29)$$

$$\frac{\partial I_2}{\partial \mathbf{C}} = I_1 \mathbf{I} - \mathbf{C} \quad (1.30)$$

$$\frac{\partial I_3}{\partial \mathbf{C}} = I_3 \mathbf{C}^{-1} \quad (1.31)$$

Para algumas aplicações é útil definir as partes isocóricas dos tensores \mathbf{F} e \mathbf{C} , denotados de $\bar{\mathbf{F}}$ e $\bar{\mathbf{C}}$ respectivamente (representaremos com barra quantidades relacionadas a estes tensores). Segue então:

$$\bar{\mathbf{F}} = J^{-1/3} \mathbf{F} \quad (1.32)$$

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}} = J^{-2/3} \mathbf{C} \quad (1.33)$$

Perceba através de (1.13) que a definição foi construída de tal forma $\det \bar{\mathbf{F}} =$

1. É fácil ver que a relação entre os dois primeiros invariantes é:

$$\bar{I}_1 = J^{-2/3} I_1 \quad (1.34)$$

$$\bar{I}_2 = J^{-4/3} I_2 \quad (1.35)$$

Será útil para os desenvolvimentos seguintes definir os espaços em que se

encontram os campos de deslocamentos. Para isto é preciso levar em conta as restrições que estes campos devem obedecer para serem compatíveis com o modelo. Exemplos de restrições são valores prescritos na fronteira, condições de incompressibilidade, condições de contato, etc.

Além de restrições é preciso caracterizar a regularidade desses campos, definimos então um espaço de Hilbert \mathcal{U} de deslocamentos genérico como sendo um espaço suficientemente regular aonde todas as operações (próxima seção) a serem realizadas façam sentido. Sendo assim, definimos o subconjunto de deslocamentos cinematicamente admissíveis $\text{Kin}_{\mathcal{U}} \subset \mathcal{U}$ como sendo :

$$\text{Kin}_{\mathcal{U}} = \{ \mathbf{u} \in \mathcal{U} ; \text{sujeito à restrições cinemáticas} \} \quad (1.36)$$

Como exemplo, suponha a partição da fronteira $\Gamma_m = \partial\Omega_m = \Gamma_m^D \cup \Gamma_m^N$ e $\Gamma_m^D \cap \Gamma_m^N = \emptyset$ aonde é prescrito o deslocamento em Γ_m^D , isto é:

$$\text{Kin}_{\mathcal{U}} = \{ \mathbf{u} \in \mathcal{U} ; \mathbf{u}|_{\Gamma_m^D} = \bar{\mathbf{u}}, \det \mathbf{F} > 0 \text{ em } \Omega_m \} \quad (1.37)$$

Este é um conjunto de campos cinematicamente admissíveis onde se encontram as possíveis soluções de um problema. É fácil ver que nem toda combinação linear de dois elementos deste conjunto não se encontra nele, logo não é um espaço vetorial ⁵ . A seguir definimos um espaço de variações admissíveis relacionadas, como sendo:

$$\text{Var}_{\mathcal{U}} = \{ \hat{\mathbf{u}} \in \mathcal{U} ; \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2, \text{onde: } \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in \text{Kin}_{\mathcal{U}} \} \quad (1.38)$$

Onde é fácil ver que $\text{Kin}_{\mathcal{U}}$ é uma variedade linear de $\text{Var}_{\mathcal{U}}$, isto é, $\text{Kin}_{\mathcal{U}} = \mathbf{u}_0 + \text{Var}_{\mathcal{U}}$, onde $\mathbf{u}_0 \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$ é arbitrário. No caso de um deslocamento prescrito na fronteira,

⁵ As únicas combinações que conduzem à elementos no conjunto são as convexas. Portanto apesar de não ser espaço vetorial, este conjunto é convexo

as variações são dadas por:

$$\text{Var}_{\mathcal{U}} = \{\hat{\mathbf{u}} \in \mathcal{U}; \mathbf{u}|_{\Gamma_m^D} = \mathbf{0}\} \quad (1.39)$$

O espaço de variações $\text{Var}_{\mathcal{U}}$ é composto por campos admissíveis de “velocidades” (ações de movimentos) nas quais se submetidas a uma configuração admissível esta última continuará em $\text{Kin}_{\mathcal{U}}$. Vale ressaltar que um desses elementos é de fato uma ação de movimento real, os demais são ditos virtuais.

Dado que já temos os elementos básicos necessários da cinemática, discutiremos um pouco sobre os elementos de uma formulação variacional abstrata e só então em seguida passaremos para o princípio de potências virtuais que define o equilíbrio mecânico.

1.2 Formulação variacional abstrata

A seção anterior foi dedicada à descrição dos aspectos cinemáticos do modelo, isto é, campos de deslocamentos e deformações no caso de sólidos. Outro ingrediente restante a inserir é quantificar o quanto é necessário consumir (energia ou potência) a fim de realizar mudanças neste estado cinemático em que o corpo se encontra.

É possível então distinguir dois tipos de potências relacionadas a esta mudança, chamemos de interna e externa. A primeira é relacionada com as mudanças ocorridas sob forma de deformação do corpo, sendo nula em um movimento de corpo rígido. Não obstante, a segunda é necessariamente função dos campos de deslocamentos, visto que alguma energia é consumida mesmo em movimentos rígidos. Formalizemos estas ideias: ⁶

- Dado um espaço \mathcal{V} de deslocamentos com suficiente regularidade, defina um espaço vetorial $\text{Var}_{\mathcal{V}} \subset \mathcal{V}$ e uma variedade linear $\text{Kin}_{\mathcal{V}}$ tal que $\text{Kin}_{\mathcal{V}} =$

⁶ As notações usadas nesta seção são preferivelmente genéricas com o objetivo de não confundir com as notações empregadas ainda neste capítulo para o caso específico do problema de equilíbrio mecânico. Embora os nomes dos espaços e operadores sejam inspirados na mecânica dos sólidos, eles devem ser entendidos em um sentido generalizado.

$v_0 + \text{Var}_{\mathcal{V}}$, com $v_0 \in \text{Kin}_{\mathcal{V}}$ arbitrário, tal que todas as restrições cinemáticas são consideradas em $\text{Kin}_{\mathcal{V}}$.

- Defina um espaço \mathcal{W} de medidas de deformação (D) através da definição do operador tangente $\mathcal{D} : \mathcal{V} \mapsto \mathcal{W}$, também chamado de operador de deformação. Desta forma, temos também implicitamente definido o espaço vetorial do núcleo do operador dado por $\mathcal{N}(\mathcal{D}) = \{v \in \mathcal{V}; \mathcal{D}v = 0\}$. Se um elemento $v \in \mathcal{N}(\mathcal{D})$ ele é chamado de movimento rígido.
- Defina um funcional linear e contínuo $\mathcal{P}^i \in \mathcal{W}'$ de potência interna no qual pelo teorema de representação de Riesz possui única representação da forma:

$$\mathcal{P}^i(D) = \mathcal{P}^i(\mathcal{D}v) = -\langle T, \mathcal{D}v \rangle_{\mathcal{W}' \times \mathcal{W}} \quad (1.40)$$

onde o uso do símbolo do menos é devido à convenção usual da mecânica. Note que por argumentos de dualidade temos implicitamente introduzido um novo elemento $T \in \mathcal{W}'$, o qual é chamado de tensão. Posteriormente veremos que este novo elemento coincide com o conceito clássico de tensão da mecânica do contínuo, só que introduzido de maneira muito mais natural.

- Defina o funcional linear e contínuo $\mathcal{P}^e \in \mathcal{V}'$ de potência externa no qual pelo teorema de representação de Riesz possui única representação da forma:

$$\mathcal{P}^e(v) = \langle f, v \rangle_{\mathcal{V}' \times \mathcal{V}} \quad (1.41)$$

Novamente, por argumentos de dualidade temos implicitamente definido um novo elemento $f \in \mathcal{V}'$, chamado de esforço externo. Veremos mais adiante que $f \in \mathcal{V}'$ tem correspondência direta com conceitos de forças de superfície e corpo, clássicos da mecânica do contínuo.

- Dizemos que o esforço externo é compatível com o modelo, se este não produz potência virtual externa com as ações de movimentos rígidas, isto é:

$$\mathcal{P}^e(\hat{v}) = \langle f, \hat{v} \rangle = 0, \quad \forall \hat{v} \in \text{Var}_\gamma \cap \mathcal{N}(\mathcal{D}) \quad (1.42)$$

Note ainda que ao se trabalhar com o produto de dualidade $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{W}' \times \mathcal{W}}$, temos a definição do operador adjunto \mathcal{D}^* desta forma:

$$\langle T, \mathcal{D}v \rangle_{\mathcal{W}' \times \mathcal{W}} = \langle \mathcal{D}^*T, v \rangle_{\mathcal{V}' \times \mathcal{V}} \quad (1.43)$$

Este operador, também chamado de equilíbrio, é determinado geralmente com sucessivas integrações por partes como veremos mais adiante. Vale destacar que os esforços externos admissíveis pelo modelo cinemático surgem naturalmente da análise de \mathcal{D}^* .

Todos os ingredientes básicos necessários ao Princípio de Potências Virtuais foram comentados e podem ser resumidos no diagrama da Fig. 1.1. Segue abaixo o enunciado do princípio.

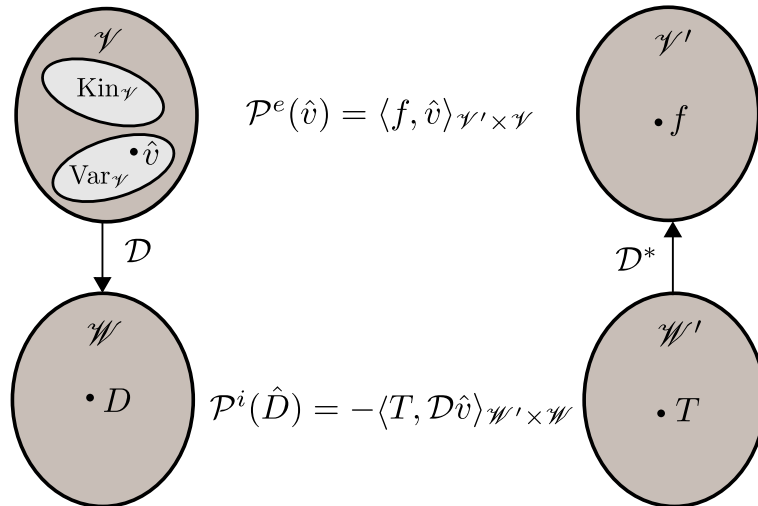


Figura 1.1: Diagrama de dualidade do Princípio de Potências Virtuais.

Princípio 1. *Um sistema mecânico está em equilíbrio com um sistemas de forças*

$f \in \mathcal{V}'$ compatível se :

$$\mathcal{P}^i(\mathcal{D}\hat{v}) + \mathcal{P}^e(\hat{v}) = -\langle T, \mathcal{D}\hat{v} \rangle + \langle f, \hat{v} \rangle = 0 \quad \forall \hat{v} \in \text{Var}_{\mathcal{V}} \quad (1.44)$$

Apesar de estarmos nos referindo constantemente ao termo “equilíbrio”, que pode ser interpretado muitas vezes errôneamente como “equilíbrio estático”, estamos tratando de fato de um “equilíbrio dinâmico”. Isto quer dizer que em problemas dinâmicos, onde aparece a potência inercial, estes podem ser tratados no arcabouço do modelo apresentado bastando tomar $f = f^* - \rho\ddot{v}$, onde $v \in \text{Kin}_{\mathcal{V}}$ e ρ é a propriedade de massa específica do corpo ⁷.

Por fim, o Princípio de Potências Virtuais apresentado nesta seção, que em um primeiro momento foi colocado em formato abstrato, é uma ferramenta que nos permite uma sistematização na construção de modelos. Sendo esta abordagem uma das mais “seguras”, se não a mais, no sentido de deixar claro quais as hipóteses necessárias e quais esforços são compatíveis com o modelo Germain (1972); Maugin (1980); Feijóo e Taroco (1982, 1983); Taroco et al. (2014). Este aspecto é primordial ao se trabalhar com modelos mais complexos. Outro aspecto importante das formulações variacionais, está na construção e utilização de métodos numéricos para resolução do modelo, tal como o método de elementos finitos. Inclusive com análise numérica e estimativas de erro obtidas com auxílio de ferramentas matemáticas bem fundadas da Análise Funcional.

1.3 Princípio de Potências Virtuais

Postularemos agora o Princípio de Potências Virtuais na configuração atual para um problema de equilíbrio mecânico no espaço (ver Fig. 1.2), que é sua forma mais natural. Na sequência serão derivados como consequência os equivalentes tensores de tensão e princípios de potências em configuração material, que é aonde

⁷ A forma colocada deve ser modificada de \ddot{v} para \dot{v} em problemas aonde o campo de trabalho seja velocidades e não deslocamento. Novamente preferimos trabalhar com a notação v ao invés de \mathbf{u} neste contexto inicial mais abstrato. Massa específica pode ser entendida em um contexto generalizado dependendo do problema, por exemplo em eletromagnetismo.

focaremos daí em diante. Admita que o espaço \mathcal{U}_s tenha regularidade suficiente para as operações envolvidas ⁸.

Princípio 2 (Princípio de Potências Virtuais). *Seja $\mathbf{t} \in [\mathcal{L}^2(\Gamma_s^N)]^{\text{nd}}$, $\mathbf{b} \in [\mathcal{L}^2(\Omega_s)]^{\text{nd}}$ tal que o sistema de forças $\mathbf{f} = \{\mathbf{b}, \mathbf{t}\} \in (\mathcal{U}_s)'$ seja compatível com o modelo. O sistema se encontra em equilíbrio se o campo de deslocamentos $\mathbf{u}_s \in \text{Kin}_{\mathcal{U}_s}$ é tal que:*

$$\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_s) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) \, d\Omega_s = \int_{\Omega_s} \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s \, d\Omega_s + \int_{\Gamma_s^N} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s \, d\Gamma_s^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_s \in \text{Var}_{\mathcal{U}_s} \quad (1.45)$$

onde:

- $\text{Kin}_{\mathcal{U}_s} = \{\mathbf{u}_s \in \mathcal{U}_s; \mathbf{u}_s|_{\Gamma_s^D} = \bar{\mathbf{u}}_s, \det(\mathbf{F})_s > 0 \text{ em } \Omega_s\}$.
- $\text{Var}_{\mathcal{U}_s} = \{\hat{\mathbf{u}}_s \in \mathcal{U}_s; \hat{\mathbf{u}}_s|_{\Gamma_s^D} = \mathbf{0}\}$.
- $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensão de Cauchy dado como função dos deslocamentos por meio de uma lei constitutiva tal que $\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{F}(\mathbf{u}_s)$ ⁹.
- $\boldsymbol{\varepsilon}(\cdot) = \frac{1}{2}(\text{grad}(\cdot) + \text{grad}^T(\cdot))$.

No contexto abstrato apresentado anteriormente a formulação expressa na configuração espacial consiste simplesmente em tomar $\mathcal{D}(\cdot) = \text{grad}^s(\cdot) = \boldsymbol{\varepsilon}(\cdot)$ e o produto de dualidade da potência interna ser definido como $\mathcal{P}^i(\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s)) = -\langle \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) \rangle = -\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) \, d\Omega_s$.

Salientamos que da forma como foi definido \mathcal{D} a formulação só permite identificar tensores simétricos de tensões no espaço \mathcal{W}' , sendo uma consequência natural da dualidade que os tensores de Cauchy pertencem ao espaço dos tensores de segunda ordem simétricos. Os sistemas de forças condizentes com o modelo foram tomados como o par $\mathbf{f} = \{\mathbf{b}, \mathbf{t}\}$, sendo o primeiro elemento uma força de corpo e o segundo elemento uma tração na superfície. De fato, integrando por

⁸ Note que a escolha de $\mathcal{U}_s = [\mathcal{H}^1(\Omega_s)]^{\text{nd}}$ é em geral só válida para o caso de elasticidade linear infinitesimal.

⁹ Discutiremos melhor este assunto no capítulo posterior, por enquanto é somente necessário postular a existência de uma lei

partes temos $-\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) d\Omega_s = \int_{\Omega_s} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s d\Omega_s - \int_{\Gamma_s^N} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s d\Gamma_s^N = \langle \mathcal{D}^* \boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathbf{u}}_s \rangle$, ou seja, aparecem dois tipos de termos, integrais no domínio e na superfície. Este é o carregamento mais genérico permitido pelo modelo, nada impede de se considera nulo algum dos elementos de \mathbf{f} .

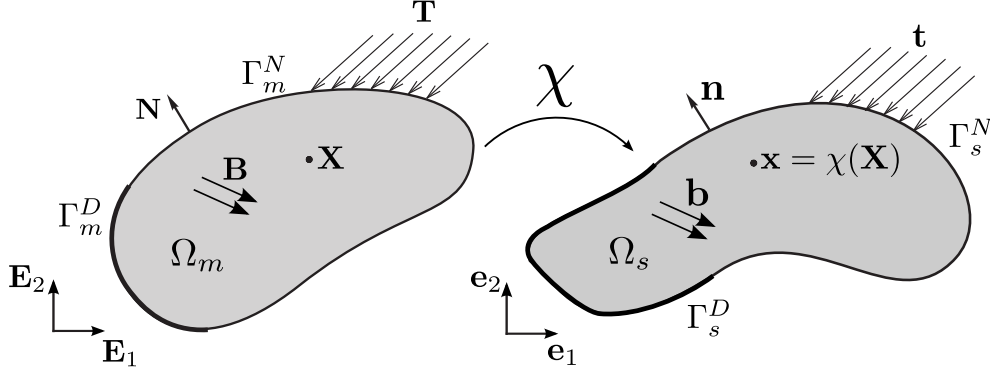


Figura 1.2: Corpo genérico em configurações material e espacial.

Note que o conceito de equilíbrio está associado à configuração atual, pois é nesta configuração que o corpo se encontra em equilíbrio. Portanto o Princípio de Potências Virtuais é formulado na configuração espacial, embora os cálculos possam também serem realizados na configuração de referência. Por se tratar de uma consequência do princípio acima, apresentamos o resultado da mudança dos domínios de integração na forma da seguinte proposição.

Proposição 1 (Princípio de Potências Virtuais (versão material)). *Seja $\mathbf{T} \in [\mathcal{L}^2(\Gamma_m^N)]^{\text{nd}}$, $\mathbf{B} \in [\mathcal{L}^2(\Omega_m)]^{\text{nd}}$ as descrições materiais de \mathbf{t}, \mathbf{b} dados no Princípio 2. O sistema está em equilíbrio se o campo de deslocamentos $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$ é tal que:*

$$\int_{\Omega_m} \mathbf{S}(\mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) d\Omega_m = \int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m + \int_{\Gamma_m^N} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma_m^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (1.46)$$

ou alternativamente,

$$\int_{\Omega_m} \mathbf{P}(\mathbf{u}) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m = \int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m + \int_{\Gamma_m^N} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma_m^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (1.47)$$

onde:

•

$$\text{Kin}_{\mathcal{U}} = \{\mathbf{u} \in \mathcal{U}; \mathbf{u}|_{\Gamma_m^D} = \bar{\mathbf{u}}, \det \mathbf{F} > 0 \text{ em } \Omega_m\} \quad (1.48)$$

•

$$\text{Var}_{\mathcal{U}} = \{\hat{\mathbf{u}} \in \mathcal{U}; \mathbf{u}|_{\Gamma_m^D} = \mathbf{0}\} \quad (1.49)$$

- \mathbf{S} é o tensor de Piola-Kirchhoff de segunda espécie que em termos do tensor de tensão de Cauchy é:

$$\mathbf{S} = J\mathbf{F}^{-1}(\boldsymbol{\sigma})_m \mathbf{F}^{-T} \quad (1.50)$$

onde J é dado por (1.13).

- \mathbf{P} é o tensor de Piola-Kirchhoff de primeira espécie, definido como:

$$\mathbf{P} = \mathbf{F}\mathbf{S} = J(\boldsymbol{\sigma})_m \mathbf{F}^{-T} \quad (1.51)$$

- $\delta\mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}})$ é a derivada direcional do tensor de Green-Lagrange (definido em (1.20)) na direção da ação virtual $\hat{\mathbf{u}}$ cuja expressão aberta é:

$$\delta\mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2}((\mathbf{F}(\mathbf{u}))^T \nabla \hat{\mathbf{u}} + (\nabla \hat{\mathbf{u}})^T \mathbf{F}(\mathbf{u})) = (\mathbf{F}^T \nabla \hat{\mathbf{u}})^S \quad (1.52)$$

- A força de corpo modificada é:

$$\tilde{\mathbf{B}} = J(\mathbf{b})_m = J\mathbf{B} \quad (1.53)$$

- Sendo \mathbf{N} a normal unitária à superfície Γ_m^N , o vetor tração modificado é:

$$\tilde{\mathbf{T}} = J|\mathbf{F}^{-T}\mathbf{N}|(\mathbf{t})_m = J|\mathbf{F}^{-T}\mathbf{N}|\mathbf{T} \quad (1.54)$$

E ainda, se a tração é do tipo pressão, isto é $\mathbf{t} = -p_s \mathbf{n}$, onde \mathbf{n} é normal

unitária à $\Gamma_s^N = \chi(\Gamma_m^N)$, a expressão acima é simplificada para:

$$\tilde{\mathbf{T}} = -Jp_m \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \quad (1.55)$$

Demonstração. Queremos transformar integrais definidas em Ω_s para uma integral equivalente em Ω_m , para isso procederemos em transformar um a um os termos de maneira adequada. Note que a transformação de termos que não envolvem derivadas é trivial, pois se trata em simplesmente exprimir o campo através da transformação χ . Quando há derivadas, deverá aparecer o tensor \mathbf{F} (de maneira adequada), que justamente é o gradiente de χ . Todas estas transformações elementares foram vistas no começo do capítulo, apenas às aplicaremos de maneira sistemática. Começemos pelo tensor $\boldsymbol{\varepsilon}$.

- Transformação do tensor $\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}})$:

Utilizando as equações (1.22) e (1.16) temos:

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s))_m &= \frac{1}{2}((\text{grad} \hat{\mathbf{u}}_s)_m + (\text{grad} \hat{\mathbf{u}}_s)_m^T) \\ &= \frac{1}{2}((\nabla \hat{\mathbf{u}}) \mathbf{F}^{-1} + \mathbf{F}^{-T} (\nabla \hat{\mathbf{u}})^T) \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{F}^{-T} (\mathbf{F}^T \nabla \hat{\mathbf{u}} + (\nabla \hat{\mathbf{u}})^T \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-1} \end{aligned}$$

Perceba que o termo central é a derivada de Gatêaux do tensor de Green-Lagrange, de fato:

$$\delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = \delta \left(\frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \right) (\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2} ((\delta \mathbf{F}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}))^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \delta \mathbf{F}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}))$$

É fácil ver que $\delta \mathbf{F}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = \nabla \hat{\mathbf{u}}$. Logo, temos unindo as duas relações anteriores

$$(\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s))_m = \mathbf{F}^{-T} \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) \mathbf{F}^{-1} \quad (1.56)$$

- Termo da potência virtual interna:

Usando as equações (1.56), (1.11), (B.1) e (B.2) temos:

$$\begin{aligned}
\left(\int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) d\Omega_s \right)_m &= \int_{\Omega_m} (\boldsymbol{\sigma})_m \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s))_m (d\Omega_s)_m = \\
&= \int_{\Omega_m} (\boldsymbol{\sigma})_m \cdot \mathbf{F}^{-T}(\delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}})) \mathbf{F}^{-1} J d\Omega_m \\
&= \int_{\Omega_m} \underbrace{(J \mathbf{F}^{-1} (\boldsymbol{\sigma})_m \mathbf{F}^{-T})}_{=\mathbf{S}} \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) d\Omega_m
\end{aligned}$$

- Termo da potência virtual interna com expressão alternativa usando \mathbf{P} :

É fácil ver que o tensor \mathbf{S} herda a propriedade de simetria de $\boldsymbol{\sigma}$. Sendo assim, da relação (B.3) e (1.52) temos que:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S} \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) &= \mathbf{S} \cdot \left(\frac{1}{2} ((\mathbf{F}(\mathbf{u}))^T \nabla \hat{\mathbf{u}} + (\nabla \hat{\mathbf{u}})^T \mathbf{F}(\mathbf{u})) \right) \\
&= \mathbf{S} \cdot (\mathbf{F}^T \nabla \hat{\mathbf{u}})^S = \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T \nabla \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{P} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}}
\end{aligned}$$

- Termo de força de corpo:

A transformação é direta, segue abaixo:

$$\begin{aligned}
\left(\int_{\Omega_s} \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s d\Omega_s \right)_m &= \int_{\Omega_m} (\mathbf{b})_m \cdot (\hat{\mathbf{u}}_s)_m (d\Omega_s)_m = \\
&= \int_{\Omega_m} \underbrace{J(\mathbf{b})_m}_{=\hat{\mathbf{B}}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m
\end{aligned}$$

- Termo da tração na fronteira de Neumann:

A transformação é direta, basta usar a relação (1.15):

$$\begin{aligned}
\left(\int_{\Gamma_s^N} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s d\Gamma_s^N \right)_m &= \int_{\Gamma_m^N} (\mathbf{t})_m \cdot (\hat{\mathbf{u}}_s)_m (d\Gamma_s^N)_m = \\
&= \int_{\Gamma_m^N} \underbrace{J |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}| (\mathbf{t})_m}_{=\hat{\mathbf{T}}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma_m^N
\end{aligned}$$

- Termo de tração do tipo pressão:

Neste caso a derivação é um pouco mais simples, considere também (1.14):

$$\begin{aligned} \left(\int_{\Gamma_s^N} (-p_s \mathbf{n}) \cdot \hat{\mathbf{u}}_s \, d\Gamma_s^N \right)_m &= \int_{\Gamma_m^N} -p_m (\hat{\mathbf{u}}_s)_m \cdot (\mathbf{nd}\Gamma_s^N)_m = \\ &= \int_{\Gamma_m^N} \underbrace{-Jp_m \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}}_{=\tilde{\mathbf{T}}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N \end{aligned}$$

Desta maneira, temos coberto todos os itens da proposição. ■

Comentários

- Através do teorema mostrado, vimos a definição dos dois tensores de Piola-Kirchhoff, fundamentais em grandes deformações. Da maneira que conduzimos as demonstrações o tensor \mathbf{P} surgiu como um rearranjo do produto interno no termo de potências virtuais. Uma interpretação interessante para este tensor é obtida quando utilizamos (B.8) no termo de potência interna da equação variacional dada em (1.47). Vejamos:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_m} \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m &= \int_{\Gamma_m} \mathbf{PN} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m - \int_{\Omega_m} \text{Div } \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m \\ &= \int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m + \int_{\Gamma_m^N} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \end{aligned}$$

Da definição de $\text{Var}_{\mathcal{U}}$, $\hat{\mathbf{u}}$ é não nulo somente em Γ_m^N , assim rearranjando:

$$\int_{\Gamma_m^N} (\mathbf{PN} - \tilde{\mathbf{T}}) \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N - \int_{\Omega_m} (\text{Div } \mathbf{P} + \tilde{\mathbf{B}}) \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (1.57)$$

ou no sentido das distribuições:

$$\text{Div } \mathbf{P} + \tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{0}, \quad \text{em } \Omega_m \quad (1.58)$$

$$\mathbf{PN} = \tilde{\mathbf{T}}, \quad \text{em } \Gamma_m^N \quad (1.59)$$

A primeira equação é uma equação de equilíbrio em configuração de referência e a segunda dá a condição de contorno natural da formulação.

A contrapartida espacial, bem mais familiar da mecânica do contínuo, são dadas por:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad \text{em } \Omega_s \quad (1.60)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{t}, \quad \text{em } \Gamma_s^N \quad (1.61)$$

Onde o procedimento para se chegar às equações acima é completamente análogo ao da versão material mas tomando (1.45) como ponto de partida.

- A definição do tensor \mathbf{S} em (1.50) surgiu a partir de mudanças do domínio de integração, resultando em uma transformação governada pelo tensor \mathbf{F} (que carrega a informação da mudança domínio) aplicado à descrição material do tensor $\boldsymbol{\sigma}$, que é uma medida de tensão na configuração atual. A transformação inversa é então:

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T \right)_s \quad (1.62)$$

Chegamos dessa forma a transformações classicamente chamadas de *push-forward* e *pull-back* para tensores de segunda ordem, correspondentes às (1.50) e (1.62), respectivamente. Note que estas transformações deveriam ser conhecidas *a priori* no caso quando se trabalha de forma local (EDPs), contrariamente, com formulações variacionais estas relações emergem de forma natural.

Agora que já temos os problemas variacionais para serem resolvidos, dados em (1.46) e em sua versão alternativa (1.47), precisamos derivar uma estratégia para que possamos resolvê-los. Visto que se tratam de problemas não-lineares precisamos de linearizá-los. Este será o assunto da próxima seção.

1.4 Linearização das equações de equilíbrio

O problema variacional que temos é do tipo não-linear, precisamos portanto de um método para achar raízes em equações não-lineares.

Um método bastante utilizado para a resolução deste tipo de problema é o de *Newton-Raphson*, que de uma forma mais elementar acha raízes de uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Este método consiste em usar uma aproximação de primeira ordem de Taylor para obter incrementos do ponto de avaliação da função na direção da raiz sucessivas vezes. De forma mais clara, expandimos $f(x + \delta x)$ em torno do ponto x :

$$f(x + \delta x) = f(x) + f'(x)\delta x + \frac{1}{2}f''(x)(\delta x)^2 + \dots$$

Truncando a série até o termo linear achamos o incremento δx que anula f , isto é:

$$0 = f(x + \delta x) \approx f(x) + f'(x)\delta x \Rightarrow \delta x = -[f'(x)]^{-1}f(x)$$

Procede-se então de forma iterativa da seguinte maneira:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{dado } x^{(0)} \text{ para } k = 0, 1 \dots \text{ fazer} \\ \delta x^{(k)} = -[f'(x^{(k)})]^{-1}f(x^{(k)}) \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta x^{(k)} \\ \text{até que } |\delta x^{(k)}|/|x^{(k)}| \text{ for menor que uma tolerância especificada} \end{array} \right.$$

No entanto a função na qual queremos encontrar as “raízes” é na verdade uma equação variacional, e o conceito de derivada utilizada é no sentido de Gâteaux. A este processo damos o nome de linearização, pois estamos aproximando um problema variacional não-linear por uma série de problemas lineares.

Antes de apresentar explicitamente as equações a serem resolvidas é útil enxergar as equações encontradas até então de uma óptica um pouco mais geral, para então aplicar ideias análogas às desenvolvidas acima. Vejamos:

Problema 1 (Equação variacional de equilíbrio em forma abstrata).

Seja $\text{Var}_{\mathcal{U}}$ e $\text{Kin}_{\mathcal{U}}$ definidos em (1.48) e (1.49) respectivamente. Seja agora um operador não-linear $\mathcal{R} : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}'$ e um produto de dualidade $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{U}' \times \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$. O Problema (1.46) pode ser reescrito como, dado \mathcal{R} encontrar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$ tal que:

$$\langle \mathcal{R}(\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (1.63)$$

Onde \mathcal{R} no caso que nos interessa é tal que:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{R}(\mathbf{u}), \cdot \rangle &= \int_{\Omega_m} \mathbf{S}(\mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \cdot) \, d\Omega_m \\ &\quad - \int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{B}} \cdot (\cdot) \, d\Omega_m - \int_{\Gamma_m^N} \tilde{\mathbf{T}} \cdot (\cdot) \, d\Gamma_m^N \end{aligned} \quad (1.64)$$

Sob a mesma óptica segue abaixo o método de Newton-Raphson na forma que utilizaremos:

Problema 2 (Método de Newton-Raphson). *Seja o Problema (1), considerando a derivada de Gâteaux de \mathcal{R} definida como:*

$$\delta \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \left. \frac{d}{d\tau} \mathcal{R}(\mathbf{u} + \tau \delta \mathbf{u}) \right|_{\tau=0} \quad (1.65)$$

Dado $\mathbf{u}^{(0)} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$, achamos a sequência convergente $(\mathbf{u}^{(0)}, \mathbf{u}^{(1)}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) \rightarrow \mathbf{u}^*$, onde \mathbf{u}^* é solução de (1.63), resolvendo a cada passo para $\delta \mathbf{u}^{(k)} \in \text{Var}_{\mathcal{U}}$:

$$\langle \delta \mathcal{R}(\mathbf{u}^{(k)}, \delta \mathbf{u}^{(k)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = -\langle \mathcal{R}(\mathbf{u}^{(k)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (1.66)$$

$$\text{com } \mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{u}^{(k)} + \delta \mathbf{u}^{(k)}$$

Ou, equivalentemente, achar $\mathbf{u}^{(k+1)} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$ dado $\mathbf{u}^{(k)} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$:

$$\langle \delta \mathcal{R}(\mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k+1)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = -\langle \mathcal{R}(\mathbf{u}^{(k)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle + \langle \delta \mathcal{R}(\mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (1.67)$$

Ao termo $\delta\mathcal{R}$ nos referimos por vezes como tangente de \mathcal{R} . A sua forma explícita para o problema variacional (1.46) será pelo resultado na sequência (Proposição 2).

Antes disso, porém, vale comentar a dependência constitutiva que o tensor \mathbf{S} tem com as medidas de deformação \mathbf{C} ou \mathbf{E} , pois nos será necessário na demonstração da tangente. Este assunto será o tema central principal do próximo capítulo, para o momento é necessário apenas saber que $\exists \hat{\mathbf{S}} : \text{Sym} \rightarrow \text{Sym}$ e $\tilde{\mathbf{S}} : \text{Sym} \rightarrow \text{Sym}$ tais que:

$$\mathbf{S} = \hat{\mathbf{S}}(\mathbf{C}) = \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{E}) \quad (1.68)$$

E ainda para os modelos constitutivos de materiais biológicos abordados neste trabalho, chamados de hiperelásticos, existem funções $\hat{\Psi} : \text{Sym} \rightarrow \mathbb{R}$ e $\tilde{\Psi} : \text{Sym} \rightarrow \mathbb{R}$ denominadas energias de deformações tais que:

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial \mathbf{E}} \quad (1.69)$$

Na prática, quando não houver chance de dúvida, não faremos distinção entre $(\hat{\cdot})$ e $(\tilde{\cdot})$. Usaremos por exemplo $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\mathbf{E})$, $\mathbf{S} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}}$.

Proposição 2. *Considere \mathcal{R} definido por (1.64), a decomposição aditiva da tangente, que segue abaixo, é válida:*

$$\begin{aligned} \langle \delta\mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle &= \langle (\delta^i + \delta^b + \delta^t)\mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \\ &= \langle \delta^i\mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle + \langle \delta^b\mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle + \langle \delta^t\mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \end{aligned} \quad (1.70)$$

onde cada um dos termos é dado por:

$$\langle \delta^i \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = \int_{\Omega_m} \left[\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{S} \cdot \nabla^T \delta \mathbf{u} \nabla \hat{\mathbf{u}} \right] d\Omega_m \quad (1.71)$$

$$\langle \delta^b \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = - \int_{\Omega_m} (\mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m \quad (1.72)$$

$$\langle \delta^t \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = - \int_{\Gamma_m^N} \beta \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma_m^N \quad (1.73)$$

$$\text{onde } \beta = - \frac{(\nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{N}) \cdot \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}}{|\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|^2} + \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u} \quad (1.74)$$

ou, sendo um carregamento do tipo pressão:

$$\langle \delta^t \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = \int_{\Gamma_m^N} p_m J [(\mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) \mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} (\nabla \delta \mathbf{u})^T] \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma_m^N \quad (1.75)$$

Demonstração.

i) Parcela $\delta^i \mathcal{R}$:

Partindo de (1.46) temos:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_m} \mathbf{S} \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) d\Omega_m &\Rightarrow \delta \left(\int_{\Omega_m} \mathbf{S} \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) d\Omega_m \right) [\delta \mathbf{u}] = \\ &\int_{\Omega_m} (\delta \mathbf{S}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{S} \cdot \delta^2 \mathbf{E}(\mathbf{u}; \hat{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u})) d\Omega_m \end{aligned}$$

Temos então utilizando a regra da cadeia que $\delta \mathbf{S}(\mathbf{E})(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \delta \mathbf{S}(\mathbf{E}, \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u})) = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u})$, onde $\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}}$ é definido como:

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \mathbf{V} = \delta \mathbf{S}(\mathbf{E}, \mathbf{V}) \quad \mathbf{V} \in \text{Sym} \quad (1.76)$$

Utilizando a equação (1.52) temos que a derivada segunda de \mathbf{E} é dada

por:

$$\begin{aligned}
\delta^2 \mathbf{E}(\mathbf{u}; \hat{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}) &= \delta(\delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}), \delta \mathbf{u}) = \\
&= \frac{1}{2} \delta((\mathbf{F}(\mathbf{u}))^T \nabla \hat{\mathbf{u}} + (\nabla \hat{\mathbf{u}})^T \mathbf{F}(\mathbf{u}), \delta \mathbf{u}) = \\
&= \frac{1}{2} ((\nabla \delta \mathbf{u})^T \nabla \hat{\mathbf{u}} + (\nabla \hat{\mathbf{u}})^T \nabla \delta \mathbf{u}) \quad (1.77)
\end{aligned}$$

Como o tensor \mathbf{S} é simétrico, consideremos somente uma parcela $\nabla^T \delta \mathbf{u} \nabla \hat{\mathbf{u}}$, temos:

$$\langle \delta^i \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = \int_{\Omega_m} \left[\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{S} \cdot (\nabla \delta \mathbf{u})^T \nabla \hat{\mathbf{u}} \right] d\Omega_m \quad (1.78)$$

(1) Parcela $\delta^b \mathcal{R}$:

Partindo de (1.46) temos:

$$\int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m \Rightarrow \delta \left(\int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m \right) (\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \int_{\Omega_m} \delta \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m$$

Utilizando (B.10) temos:

$$\begin{aligned}
\delta \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) &= \delta(\det \mathbf{F}(\mathbf{b})_m)(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \\
&= \left[\frac{\partial \det \mathbf{F}}{\partial \mathbf{F}} \cdot \delta \mathbf{F}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \right] (\mathbf{b})_m = [(\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}] (\mathbf{b})_m
\end{aligned}$$

portanto:

$$\langle \delta^b \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = - \int_{\Omega_m} (\mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}) \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m$$

(2) Parcela $\delta^t \mathcal{R}$:

Partindo de (1.46) temos:

$$\int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m \Rightarrow \delta \left(\int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m \right) (\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \int_{\Omega_m} \delta \tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m$$

Daí:

$$\begin{aligned} \delta \tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) &= \delta(\det \mathbf{F} |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}| \mathbf{t}_m)(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \\ &= (\delta \det \mathbf{F}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}| + \det \mathbf{F} \delta |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u})) \mathbf{t}_m \end{aligned}$$

O primeiro termo é idêntico ao feito na parcela δ^b , vejamos o segundo:

$$\begin{aligned} \delta |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) &= \delta \left(\sqrt{\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \cdot \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}} \right) (\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \\ &= \frac{1}{2 |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|} \delta (\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \cdot \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}) (\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \\ &= \frac{1}{|\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \cdot \delta(\mathbf{F}^{-T})(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \mathbf{N} \end{aligned}$$

Usando (B.13) temos finalmente que:

$$\delta |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = - \frac{1}{|\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \cdot \mathbf{F}^{-T} \nabla^T \delta \mathbf{u} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \quad (1.79)$$

$$= \left(- \frac{(\nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{N}) \cdot \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}}{|\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|^2} \right) |\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}| \quad (1.80)$$

Usando o resultado anterior obtido em δ^b e juntando os termos da notação de $\tilde{\mathbf{T}}$, temos definindo $\beta = - \frac{(\nabla \delta \mathbf{u} \mathbf{C}^{-1} \mathbf{N}) \cdot \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}}{|\mathbf{F}^{-T} \mathbf{N}|^2} + \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u}$ que:

$$\langle \delta^t \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = - \int_{\Gamma_m^N} \beta \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N$$

(3) Parcela $\delta^t \mathcal{R}$ sendo carregamento do tipo pressão:

Particularizando para o caso de pressão:

$$\begin{aligned}\delta\tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) &= \delta(-p_m J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N})(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) \\ &= -p_m \delta \det \mathbf{F}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} - p_m \det \mathbf{F} \delta \mathbf{F}^{-T}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) \mathbf{N}\end{aligned}$$

O primeiro termo é idêntico ao feito na parcela δ^b , vejamos o segundo. Sabemos de (B.13) que:

$$\delta \mathbf{F}^{-T}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) = -\mathbf{F}^{-T} \delta \mathbf{F}^T(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}) \mathbf{F}^{-T} = -\mathbf{F}^{-T} (\nabla \delta\mathbf{u})^T \mathbf{F}^{-T}$$

Segue então que:

$$\langle \delta^t \mathcal{R}(\mathbf{u}, \delta\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle = \int_{\Gamma_m^N} p_m J [(\mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta\mathbf{u}) \mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} (\nabla \delta\mathbf{u})^T] \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N$$

■

Alguns comentários práticos

- Uma prática comum é negligenciar os termos da tangente relacionados ao carregamento externo de superfície, nos casos em que as não-linearidades não estejam dominadas por tais termos. Isto é conhecido como método de Newton inexato. Vale observar que a convergência quadrática, típica dos métodos de Newton (exato), é perdida.
- Buscamos nas equações acima não particularizar para componentes, no entanto, um tratamento mais prático computacionalmente será inevitável no momento da implementação. Por exemplo, o tensor $\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}}$ trata-se de um tensor de quarta ordem, que em coordenadas cartesianas é calculado como segue:

$$\left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \right) = \frac{\partial S_{ij}}{\partial E_{kl}} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \quad (1.81)$$

Denotaremos como $\mathbb{D}^c = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}}$, muitas vezes chamado de tangente constitutiva. Note que da simetria de \mathbf{E} e da natureza da comutatividade das derivadas temos as simetrias:

$$(\mathbb{D}^c)_{ijkl} = (\mathbb{D}^c)_{jikl} = (\mathbb{D}^c)_{ijlk} = (\mathbb{D}^c)_{klij} \quad (1.82)$$

Sendo assim, é fácil ver que temos somente 21 componentes independentes, ao invés de 81 se não houvesse simetrias.

- É conveniente computacionalmente definir um outro tensor de quarta ordem \mathbb{D} auxiliar de tal forma que:

$$(\mathbb{D} \nabla \delta \mathbf{u}) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{S} \cdot \nabla^T \delta \mathbf{u} \nabla \hat{\mathbf{u}} \quad (1.83)$$

Dadas as simetrias de \mathbb{D}^c iremos substituir $\delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u})$ e $\delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}})$ por $\mathbf{F}^T \nabla \delta \mathbf{u}$ e $\mathbf{F}^T \nabla \hat{\mathbf{u}}$ respectivamente ficando:

$$(\mathbb{D} \nabla \delta \mathbf{u}) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \mathbf{F}^T \nabla \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{F}^T \nabla \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{S} \cdot \nabla^T \delta \mathbf{u} \nabla \hat{\mathbf{u}} \quad (1.84)$$

Em componentes pode-se verificar que \mathbb{D} é dado por:

$$(\mathbb{D})_{ijkl} = (\mathbb{D}^c)_{njml} F_{km} F_{in} + S_{lj} \delta_{ki} \quad (1.85)$$

Podemos interpretar este tensor como uma parte relativa à tangente constitutiva e outra parte que chamaremos tangente geométrica. Foi verificado em nossa implementação que o cálculo deste tensor em uma rotina separada além de deixar o código mais elegante, contribui para a diminuição do número de operações.

- Como veremos no capítulo seguinte, as expressões para Ψ comumente são dadas por funções dos invariantes de \mathbf{C} (ou equivalentemente de \mathbf{E}) ou mesmo dos seus autovalores. Desta maneira o cálculo de \mathbf{S} e \mathbb{D}^c é não-

trivial analiticamente, e é por muitos evitado, pois muda substancialmente para cada lei constitutiva. No capítulo seguinte, mostraremos uma forma de calculá-lo analiticamente para algumas classes de problemas. Por enquanto, nos limitaremos a aproximações numéricas destas derivadas. Uma abordagem consistente é aproximar por diferenças finitas através de uma perturbação simétrica no tensor \mathbf{E} Urquiza et al. (2012); Miehe (1996). Considerando a notação $\Delta_{ij}^{s,\varepsilon} = \varepsilon \mathbf{e}_i \otimes^s \mathbf{e}_j$, seguem as expressões facilmente conferíveis:

$$(\mathbf{S})_{ij} = \frac{\partial \Psi}{\partial E_{ij}} \approx \frac{\Psi(\mathbf{E} + \Delta_{ij}^{s,\varepsilon}) - \Psi(\mathbf{E} - \Delta_{ij}^{s,\varepsilon})}{2\varepsilon} \quad (1.86)$$

$$(\mathbb{D}^c)_{ijij} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial E_{ij}^2} \approx \frac{\Psi(\mathbf{E} + \Delta_{ij}^{s,\varepsilon}) - 2\Psi(\mathbf{E}) + \Psi(\mathbf{E} - \Delta_{ij}^{s,\varepsilon})}{\varepsilon^2} \quad (1.87)$$

$$\begin{aligned} (\mathbb{D}^c)_{ijkl} &= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} \\ &\approx \frac{\Psi(\mathbf{E} + \Delta_{ij}^{s,\varepsilon} + \Delta_{kl}^{s,\varepsilon}) - \Psi(\mathbf{E} + \Delta_{ij}^{s,\varepsilon} - \Delta_{kl}^{s,\varepsilon})}{4\varepsilon^2} \\ &\quad - \frac{\Psi(\mathbf{E} - \Delta_{ij}^{s,\varepsilon} + \Delta_{kl}^{s,\varepsilon}) - \Psi(\mathbf{E} - \Delta_{ij}^{s,\varepsilon} - \Delta_{kl}^{s,\varepsilon})}{4\varepsilon^2} \end{aligned} \quad (1.88)$$

Onde todas estas expressões fornecem aproximações da ordem de $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$. Apesar de neste caso a escolha de ε ser livre, não acarretando custos computacionais extras, é verificada grande sensibilidade a este parâmetro e até mesmo uma piora de precisão quando ε é demasiadamente pequeno. Uma solução que vem sendo abordada na literatura para contornar este problema é baseada na expansão de Taylor em variáveis complexas Tanaka et al. (2014). No entanto, a mudança estrutural no programa para se trabalhar com variáveis do tipo complexa pode não compensar a utilização, sendo restrita a casos onde um procedimento analítico não é disponível ou que a aproximação por diferenças finitas conduza a erros inaceitáveis.

A formulação apresentada até o momento é adequada para materiais que exibem fenômenos de compressibilidade e é baseada somente em um campo (o de

deslocamentos). Por simplicidade, chamaremos esta de formulação compressível.

Sabe-se no entanto que problemas na área de biomecânica onde se modela tecidos moles, os materiais são geralmente incompressíveis. Razões físicas para esta hipótese é por exemplo a grande parcela de água nesses tecidos.

Uma das formas para se tratar a incompressibilidade se encaixa na formulação compressível através de um parâmetro de penalização na lei constitutiva (quase incompressibilidade), assunto que veremos em mais detalhes no capítulo seguinte. Note que aqui a modificação se faz na lei constitutiva “encarecendo” a parcela de energia responsável pela deformação puramente volumétrica, não havendo mudança no espaço de deslocamentos cinematicamente admissíveis.

No entanto, a forma variacionalmente exata corresponde a impor a incompressibilidade como restrição no espaço de deslocamentos cinematicamente admissíveis. Como forma de relaxar esta condição pode ser utilizada uma estratégia de multiplicadores de Lagrange, surgindo então uma nova formulação variacional, que chamaremos de incompressível (ou ainda de dois campos ou mista) aonde um campo, que posteriormente é identificado como o campo de pressão, é adicionado ao problema. Isto será assunto Capítulo 3.

1.5 Forma linearizada na descrição espacial

Até então foram apresentadas as formas linearizadas somente na configuração de referência, conhecido como *Total-Lagrangean*, que é a que de fato implementaremos neste trabalho. Contudo é perfeitamente possível passar todas as integrais anteriores para configuração atual, formulação também chamada de *Updated-Lagrangean*.

Apresentamos então a forma linearizada das equações do Princípio de Potências Virtuais no domínio espacial (relembrar (1.45)), baseando-se no trabalho de Urquiza et al. (2012). Vale observar que será somente considerada a parte relativa à linearização da potência interna.

Proposição 3. *Considere o Princípio 2, associado o resíduo $\mathcal{R}_s : \mathcal{U}_s \rightarrow (\mathcal{U}_s)'$*

dado abaixo:

$$\langle \mathcal{R}_s(\mathbf{u}_s), \hat{\mathbf{u}}_s \rangle = \int_{\Omega_s} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_s) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) d\Omega_s - \int_{\Omega_s} \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s d\Omega_s - \int_{\Gamma_s^N} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{u}}_s d\Gamma_s^N \quad (1.89)$$

Temos então que a tangente é dada por:

$$\begin{aligned} \langle \delta_s \mathcal{R}_s(\mathbf{u}_s, \delta \mathbf{u}_s), \hat{\mathbf{u}}_s \rangle &= \int_{\Omega_s} \left[\frac{1}{J_s} \mathbf{F}_s \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \right)_s \mathbf{F}_s^T \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}_s) \mathbf{F}_s \mathbf{F}_s^T \right] \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) d\Omega_s + \\ &\int_{\Omega_s} \text{grad} \delta \mathbf{u}_s \boldsymbol{\sigma} \cdot \text{grad} \hat{\mathbf{u}}_s d\Omega_s \end{aligned} \quad (1.90)$$

Onde $J_s = \det \mathbf{F}_s$. Reescrevendo através do operador \mathbb{D}_s^c definido em componentes por:

$$(\mathbb{D}_s^c)_{ijkl} = \frac{1}{J_s} [\mathbf{F}_s]_{ia} [\mathbf{F}_s]_{jb} [\mathbf{F}_s]_{kc} [\mathbf{F}_s]_{ld} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \right)_s \right]_{abcd} \quad (1.91)$$

Temos a forma alternativa:

$$\langle \delta_s \mathcal{R}_s(\mathbf{u}_s, \delta \mathbf{u}_s), \hat{\mathbf{u}}_s \rangle = \int_{\Omega_s} \mathbb{D}_s^c \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}_s) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}_s) d\Omega_s + \int_{\Omega_s} \text{grad} \delta \mathbf{u}_s \boldsymbol{\sigma} \cdot \text{grad} \hat{\mathbf{u}}_s d\Omega_s \quad (1.92)$$

Demonstração. A demonstração consiste em passar para configuração espacial os termos materiais deduzidos na Proposição 2. Para detalhes consulte Urquiza et al. (2012). ■

1.6 Formulação de elementos finitos

Para finalizar o capítulo, nesta seção apresentamos a discretização por elementos finitos para a formulação de Galerkin para o problema de mecânica dos sólidos não-linear. A apresentação neste ponto tem dois objetivos: primeiro mostrar que a passagem para a forma discretizada uma vez possuída a formulação variacional é automática bastando subespaços de dimensão finita para os espaços já definidos anteriormente, e em segundo lugar resumir todos os resultados obtidos

que serão na implementação em uma só equação que sirva de referência rápida para o leitor.

Por simplicidade, a formulação apresentada é para o caso de forças de corpo nulas, com carregamento de pressão e sem a parte da tangente relativa a integral na fronteira de Neumann (método de Newton-Inexato), que são de fato suficientes para todos os exemplos apresentados no trabalho.

Considere então uma partição \mathcal{T}^h do domínio Ω_m formada por tetraedros (ou triângulos) denotados de K . Considerando um espaço de polinômios de ordem P denotado por \mathbb{P}_P definimos a seguinte subvariedade e subespaços de dimensão finita:

$$\mathcal{U}_P^h = \{ \mathbf{u}_h \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}; (\mathbf{E}_i \cdot \mathbf{u}_h)|_K \in \mathbb{P}_P \forall K \in \mathcal{T}^h, i \in \{1, 2, \dots, \text{nd}\} \} \quad (1.93)$$

$$\mathcal{V}_P^h = \{ \hat{\mathbf{u}}_h \in \text{Var}_{\mathcal{U}}; (\mathbf{E}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_h)|_K \in \mathbb{P}_P \forall K \in \mathcal{T}^h, i \in \{1, 2, \dots, \text{nd}\} \} \quad (1.94)$$

Nos exemplos deste texto $P = 1$ ou $P = 2$, aproximação linear ou quadrática, referida como simplesmente \mathbb{P}_1 ou \mathbb{P}_2 . Quando a informação do grau do polinômio nos referiremos a estes simplesmente como \mathcal{U}^h e \mathcal{V}^h . O método de Galerkin consiste em simplesmente tomar os a subvariedade \mathcal{U}^h e subespaço \mathcal{V}^h no lugar de $\text{Kin}_{\mathcal{U}}$ e $\text{Var}_{\mathcal{U}}$ respectivamente no Problema 2. Sendo assim considere o problema abaixo:

Problema 3 (Formulação de Galerkin para o problema de mecânica dos sólidos não-linear em configuração material). *Dados $\mathbf{u}_h^{(n)} \in \mathcal{U}^h$ e p_m um valor de pressão constante, encontrar $\mathbf{u}_h^{(n+1)} \in \mathcal{U}^h$ tal que:*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_m} \mathbb{D}^{(n)} \nabla \mathbf{u}_h^{(n+1)} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}}_h \, d\Omega_m &= \int_{\Omega_m} \left(\mathbb{D}^{(n)} \nabla \mathbf{u}_h^{(n)} - \mathbf{F}^{(n)} \mathbf{S}^{(n)} \right) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}}_h \, d\Omega_m \\ &\quad - \int_{\Gamma_m^N} J^{(n)} p_m (\mathbf{F}^{(n)})^{-T} \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}}_h \, d\Gamma_m^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_h \in \mathcal{V}^h \end{aligned} \quad (1.95)$$

onde a notação $(\cdot)^{(n)}$ significa $(\cdot)(\mathbf{u}_h^{(n)})$ e ainda:

$$[\mathbb{D}^{(n)}]_{ijkl} = \frac{\partial^2 \Psi^{(n)}}{\partial E_{bj}^{(n)} \partial E_{al}^{(n)}} F_{ka}^{(n)} F_{ib}^{(n)} + S_{lj}^{(n)} \delta_{ki}$$

Vale ressaltar que o problema acima é apenas uma iteração do método de Newton devendo ser executado até a convergência. Uma outra observação é quanto a restrição $J = \det \mathbf{F} > 0$ (impenetrabilidade da matéria) que o espaço \mathcal{U}^h herda de $\text{Kin}_{\mathcal{U}}$ que formalmente¹⁰ não está sendo considerada na implementação. Veremos no capítulo seguinte diversas formas de energia de deformação, dentre elas as que quantificam a energia relativas às mudanças de volume, nas quais são funções exclusivas de J . Nestas funções é geralmente atribuída uma energia tendendo ao infinito quando J se aproxima do valor nulo, sendo assim como J é naturalmente 1 para a configuração não-deformada, a condição de positividade de J é automaticamente satisfeita por penalização. No caso de interesse onde $J = 1$ (incompressibilidade), veremos no Capítulo 3 formas de se impor esta última restrição via mudança de formulação (formulação mista).

¹⁰ No sentido de não ser rigoroso matematicamente.

Capítulo 2

Modelos constitutivos para tecidos moles

Este capítulo tem como finalidade discutir um ingrediente básico da modelagem de tecidos moles, que foi simplesmente admitido existir no capítulo anterior, a função energia de deformação em suas mais variadas formas.

Por fim, dentro deste contexto constitutivo, introduziremos ainda a modelagem do dano através da inclusão de uma variável interna que degrada a resistência do tecido, isto é, reduz a capacidade de armazenar energia de deformação.

Em geral, as referências teóricas para este capítulo são as mesmas do capítulo anterior, com destaque para Holzapfel (2000). Uma revisão bibliográfica abrangente no contexto da modelagem constitutiva de artérias pode ser vista em Holzapfel e Ogden (2010). As demais referências serão introduzidas ao longo do capítulo.

2.1 Teoria constitutiva fenomenológica

A derivação de modelos constitutivos fenomenológicos está intimamente ligada com aspectos termodinâmicos dos materiais. Enunciaremos então os dois princípios básicos da termodinâmica, conhecidos como primeira e segunda lei da termodinâmica.

Princípio 3 (Primeira Lei da Termodinâmica). *Seja $I = [0, T] \subset \mathbb{R}$ um intervalo de tempo e sejam os campos materiais $E : \Omega_m \times I \rightarrow \mathbb{R}$ a energia interna*

de um corpo, $\mathbf{Q} : \Gamma_m^N \times I \rightarrow \mathbb{R}^{\text{nd}}$ o vetor fluxo de calor e $R : \Omega_m \times I \rightarrow \mathbb{R}$ a taxa de geração interna de energia térmica. A seguinte identidade vale para todo fenômeno da natureza:¹

$$\dot{\mathcal{E}} = \mathcal{P}^e(\dot{\mathbf{u}}) + \dot{\mathcal{Q}} \quad (2.1)$$

ou equivalentemente

$$\dot{\mathcal{E}} = -\mathcal{P}^i(\dot{\mathbf{u}}) + \dot{\mathcal{Q}} \quad (2.2)$$

Onde:

$$\mathcal{E} = \int_{\Omega_m} E \, d\Omega_m \quad (2.3)$$

$$\dot{\mathcal{Q}} = - \int_{\Gamma_m^N} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \, d\Gamma_m^N + \int_{\Omega_m} R \, d\Omega_m \quad (2.4)$$

Esta lei fornece uma condição a ser satisfeita por todo tipo de movimento ou processo existente na natureza, afirmando que a energia deve ser conservada. Perceba que as expressões das potências \mathcal{P}^i e \mathcal{P}^e são as mesmas das potências virtuais utilizadas no capítulo anterior, mas avaliadas utilizando as taxas dos campos reais. Sendo, a fórmula equivalente mostrada em (2.2), consequência do Princípio de Potências Virtuais dado em (1.44).

Note que a potência externa já contém a parcela de inércia (bastando modificar as forças de corpo com a inclusão de $-\rho\ddot{\mathbf{u}}$), que em muitos textos é denotada de \mathcal{P}^a , que nada mais é do que a taxa de variação da energia cinética de um corpo, isto é $\mathcal{P}^a(\dot{\mathbf{u}}) = \int_{\Omega_m} \rho\ddot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, d\Omega_m = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega_m} \rho\dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} \, d\Omega_m \right)$. Perceba também que na ausência de trocas de calor e energia interna constante o Princípio de Potências Virtuais avaliado com velocidade reais é a clássica conservação da energia mecânica.

¹ A terminologia parece ser demasiadamente geral, mas de fato o primeiro e segundo princípio governam todos os fenômenos imagináveis da natureza dentro do contexto da mecânica do contínuo clássica.

Considere agora o segundo princípio fundamental:

Princípio 4 (Segunda Lei da Termodinâmica). *Seja $I = [0, T] \subset \mathbb{R}$ um intervalo de tempo e sejam os campos materiais: $\eta : \Omega_m \times I \rightarrow \mathbb{R}$ a entropia interna de um corpo, e $\Theta : \Omega_m \times I \rightarrow \mathbb{R}^+$ um campo de temperatura. A seguinte desigualdade vale para todo fenômeno da natureza:*

$$\dot{\mathcal{S}} - \dot{\mathcal{Q}} \geq 0 \quad (2.5)$$

Onde:

$$\mathcal{S} = \int_{\Omega_m} \eta \, d\Omega_m \quad (2.6)$$

$$\dot{\mathcal{Q}} = - \int_{\Gamma_m^N} \frac{1}{\Theta} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} \, d\Gamma_m^N + \int_{\Omega_m} \frac{R}{\Theta} \, d\Omega_m \quad (2.7)$$

Se a primeira lei nos dá um condição necessária para os fenômenos da natureza, a segunda lei informa um sentido preferencial no qual eles ocorrem.

Utilizando o teorema da divergência de Gauss nas equações (2.2) e (2.5), e a identidade (B.4) somente na última equação, além de perceber que os domínios de integração não variam no tempo, temos que:

$$\mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{F}} - \dot{E} + \Theta \dot{\eta} - \frac{1}{\Theta} \mathbf{Q} \cdot \nabla \Theta \geq 0 \quad (2.8)$$

Onde foi eliminada a dependência de R . A relação acima é conhecida como equação de *Clausius-Duhem* e possui papel fundamental na teoria constitutiva dos materiais. A equação de Clausius-Duhem nos sugere a definição de uma nova função conhecida como *Energia livre de Helmholtz* ou simplesmente energia livre, dada abaixo:

$$\Psi = E - \Theta \eta \quad (2.9)$$

Veremos mais adiante que a energia livre definida dessa forma é o mesmo potencial

usado na derivação do tensor de Piola-Kirchhoff e de elasticidade usado no capítulo, sendo neste contexto mais conhecido como energia de deformação. Usando (2.9), reescrevemos (2.8) como:

$$\mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{F}} - \dot{\Psi} - \eta \dot{\Theta} - \frac{1}{\Theta} \mathbf{Q} \cdot \nabla \Theta \geq 0 \quad (2.10)$$

Daqui em diante assumiremos uma teoria puramente mecânica, isto é, termos dependentes de Θ e de suas derivadas serão desprezados ², o que nos dá uma função conhecida como dissipação interna:

$$\mathcal{D}_{int} = \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{F}} - \dot{\Psi} \geq 0 \quad (2.11)$$

Até o momento não foi discutida a dependência funcional de Ψ , nem que condições a mesma deve satisfazer, além é claro dos dois princípios da termodinâmica. Em uma teoria puramente mecânica, assumimos que $\exists \mathcal{F} : \text{Lin} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\Psi = \mathcal{F}(\mathbf{F})$, onde:

- É objetivo, isto é: ³

$$\mathcal{F}(\mathbf{F}) = \mathcal{F}(\mathbf{G}\mathbf{F}) \quad \forall \mathbf{G} \in \text{Orth} \quad (2.12)$$

- Respeita simetrias da estrutura do material:

$$\mathcal{F}(\mathbf{F}) = \mathcal{F}(\mathbf{F}\mathbf{G}) \quad \forall \mathbf{G} \in \mathcal{G} \quad (2.13)$$

Onde \mathcal{G} é um grupo de simetrias do material, se $\mathcal{G} = \text{Orth}$, a lei constitutiva é dita isotrópica.

² Na realidade não é necessário assumir $\dot{\Theta} = 0$, pois com alguns argumentos termodinâmicos é possível estabelecer a lei constitutiva $\eta = -\frac{\partial \Psi}{\partial \Theta}$ (no caso geral termomecânico Ψ também é função de Θ), anulando-se com contribuição da derivada parcial de $\dot{\Psi}$.

³ No caso $\mathcal{F} : \text{Lin} \rightarrow \text{Lin}$, objetividade significa $\mathcal{F}(\mathbf{G}\mathbf{F}) = \mathbf{G}\mathcal{F}(\mathbf{F})\mathbf{G}^T \quad \forall \mathbf{G} \in \text{Orth}$, e no caso $\mathcal{F} : \text{Lin} \rightarrow \mathcal{V}$, $\mathcal{F}(\mathbf{G}\mathbf{F}) = \mathbf{G}\mathcal{F}(\mathbf{F}) \quad \forall \mathbf{G} \in \text{Orth}$

- Se temos objetividade e isotropia, então:

$$\mathcal{F}(\mathbf{F}) = \mathcal{F}(\mathbf{G}\mathbf{F}\mathbf{H}) \quad \forall \mathbf{G}, \mathbf{H} \in \text{Orth} \quad (2.14)$$

Em particular é possível escolher \mathbf{G}, \mathbf{H} como uma base de autovetores de tal forma que diagonalize \mathbf{F} . Em outras palavras \mathcal{F} dependerá apenas dos autovalores de \mathbf{F} , ou ainda de seus invariantes. Isto é:

$$\mathcal{F}(\mathbf{F}) = \mathcal{F}(\lambda_1(\mathbf{F}), \lambda_2(\mathbf{F}), \lambda_3(\mathbf{F})) \quad , \text{ ou} \quad (2.15)$$

$$= \mathcal{F}(I_1(\mathbf{F}), I_2(\mathbf{F}), I_3(\mathbf{F})) \quad (2.16)$$

onde λ_i são autovalores e I_i são os invariantes definidos em (1.23),(1.24) e (1.25).

Estamos assumindo até aqui, sem devidos comentários, que a resposta constitutiva não depende da história do estado do material e que valores em um ponto só depende dos argumentos neste ponto (hipótese da localidade). Foi também assumido que as leis que estamos trabalhando não dependem de taxas $\dot{\mathbf{F}}$. Leis mais genéricas podem ser pensadas, contrariando qualquer uma das três hipóteses deste parágrafo.

Por exemplo $\mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathbf{F}^t)$ onde \mathbf{F}^t é o histórico de deformações até um tempo t é um tipo de lei bastante usual em mecânica. É fácil ver que é uma lei deste tipo que rege fenômenos de dano em materiais, que é de nosso interesse. Uma abordagem alternativa para representar fenômenos como este, é de ao invés de se trabalhar com todo o histórico, introduzir variáveis adicionais, conhecidas como variáveis de estado ou internas, que carreguem as informações desejadas. Vale salientar que ao usar esta abordagem estamos assumindo que um estado termodinâmico pode ser unicamente determinado por um conjunto finito de variáveis, prática esta que é bastante usada em termodinâmica. Desta maneira:

$$\Psi = \Psi(\mathbf{F}, \boldsymbol{\alpha}), \quad \boldsymbol{\alpha} = [\alpha_1, \dots, \alpha_n] \quad (2.17)$$

onde n é o número de variáveis internas. Retomaremos modelos desse tipo na Seção 2.4. Por enquanto consideremos $n = 0$.

Uma decomposição bastante conhecida da mecânica do contínuo é $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$, onde $\mathbf{R} \in \text{Orth}^+$ e $\mathbf{U} \in \text{Sym}$, isto é podemos decompor multiplicativamente o tensor \mathbf{F} em uma rotação e uma deformação pura. Usando a propriedade de objetividade dada em (2.12), escolhendo $\mathbf{G} = \mathbf{R}^T$ temos que:

$$\Psi(\mathbf{F}) = \Psi(\mathbf{R}^T \mathbf{R} \mathbf{U}) = \tilde{\Psi}(\mathbf{U}^2) = \tilde{\Psi}(\mathbf{C}) \quad (2.18)$$

Onde é facilmente verificado que $\mathbf{C} = \mathbf{U}^2$. Usaremos indiscriminadamente as notações $\Psi(\mathbf{F})$, $\Psi(\mathbf{C})$ e até mesmo $\Psi(\mathbf{E})$ onde não houver chance de confusão, sendo que a segunda forma é a mais usual na literatura.

Logo, podemos definir formalmente o que é um material hiperelástico, segue:

Definição 1. *Um material é dito hiperelástico se $\Psi(\mathbf{F})$ é tal que a dissipação é nula, isto é da equação (2.11):*

$$\mathcal{D}_{int} = 0 = \left(\mathbf{P} - \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} \right) \cdot \dot{\mathbf{F}} = 0 \quad \forall \dot{\mathbf{F}} \quad (2.19)$$

Isto é equivalente à dizer que :

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} \quad (2.20)$$

Não resulta difícil mostrar que a relação acima é equivalente a considerar:

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} \quad (2.21)$$

2.1.1 Inclusão da variável interna de dano

Vimos nesta seção que a inclusão das variáveis internas com leis da forma (2.17) permite a modelagem de fenômenos dependentes do histórico de deformação do material. Um exemplo típico dessa situação, é a evolução do dano ou degradação

de um tecido arterial (ou qualquer outro material), onde o mesmo perde aos poucos resistência mecânica apresentando por exemplo uma deformação mais acentuada quando sujeita ao mesmo carregamento. Vê-se portanto que a resposta do material é diferente dependendo do seu passado de carga.

Considere $\alpha = [d]$ onde d uma variável interna que definimos ser encarregada de modelar toda irreversibilidade (dissipação interna) do material. Temos então $\Psi = \Psi(\mathbf{F}, d)$, tomando a taxa temporal usando a regra da cadeia e substituindo em (2.11) fica:

$$\mathcal{D}_{int} = \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} \cdot \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial \Psi}{\partial d} \dot{d} = \left(\mathbf{P} - \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} \right) \cdot \dot{\mathbf{F}} - \frac{\partial \Psi}{\partial d} \dot{d} \geq 0$$

Ora, se d é encarregado por toda dissipação se $\dot{d} = 0$ então $\mathcal{D}_{int} = 0$ e a relação (2.20) continua válida. Sendo assim

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial d} \dot{d} \geq 0 \tag{2.22}$$

Deste modo, supondo que $\dot{d} \geq 0$ temos que $\frac{\partial \Psi}{\partial d} \leq 0$. Tendo em mente que a energia de deformação é sempre não-negativa, e ainda que:

$$\Psi(\mathbf{F}, 0) = \Psi_0(\mathbf{F})$$

$$\Psi(\mathbf{F}, 1) = 0$$

onde Ψ_0 é a energia do material virgem. Logo, propõe-se então a seguinte dependência com d de maneira simples Kachanov (1986):

$$\Psi(\mathbf{F}, d) = (1 - d)\Psi_0(\mathbf{F}) \quad \text{ou} \tag{2.23}$$

$$\Psi(\mathbf{C}, d) = (1 - d)\Psi_0(\mathbf{C}) \tag{2.24}$$

Vale salientar que a dependência da energia de deformação com o dano foi escolhida ser a mais simples possível, mas ainda falta especificar como vai ser a

evolução deste (\dot{d}). Neste ponto é que entram em cena leis mais complexas baseadas em empirismo. Isto será discutido mais adiante na Seção 2.4.

2.1.2 Extensão para materiais com isotropia transversal

Diversos materiais de interesse em biomecânica e em demais áreas de engenharia não possuem as mesmas propriedades em todas as direções, isto é são anisotrópicos.

Uma classe especial destes materiais são compostos por uma matriz isotrópica reforçada por uma família de fibras, estes são chamados de transversalmente isotrópicos. Esta classe de materiais modela bem a parede arterial, sendo composta como uma matriz de elastina reforçada por fibras orientadas de colágeno.

Sendo \mathbf{M} um vetor unitário na configuração material alinhado com a direção das fibras, é razoável pensar que a energia de deformação será do tipo $\Psi = \Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M})$. Em verdade, se $\Psi = \Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M} \otimes \mathbf{M})$ não resulta difícil de provar que uma lei deste tipo é isotrópica nos dois tensores, isto é, é satisfeito:

$$\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M} \otimes \mathbf{M}) = \Psi(\mathbf{GCG}^T, \mathbf{GM} \otimes \mathbf{MG}^T) \quad \forall \mathbf{G} \in \text{Orth} \quad (2.25)$$

Sendo assim, admite-se uma representação por invariantes que é provada ser do tipo:

$$\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M} \otimes \mathbf{M}) = \Psi(I_1(\mathbf{C}), I_2(\mathbf{C}), I_3(\mathbf{C}), I_4(\mathbf{C}, \mathbf{M}), I_5(\mathbf{C}, \mathbf{M})) \quad (2.26)$$

Onde I_1, I_2 e I_3 são os invariantes tradicionais dados por (1.23), (1.24) e (1.25) respectivamente. Por sua vez, I_4 e I_5 , também chamados de pseudo-invariantes, são dados por:

$$I_4(\mathbf{C}, \mathbf{M}) = \mathbf{M} \cdot \mathbf{CM} = \mathbf{FM} \cdot \mathbf{FM} = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{M} \otimes \mathbf{M}) \quad (2.27)$$

$$I_5(\mathbf{C}, \mathbf{M}) = \mathbf{M} \cdot \mathbf{C}^2\mathbf{M} = \mathbf{CM} \cdot \mathbf{CM} \quad (2.28)$$

Para o sentido físico de I_4 considere o vetor $\tilde{\mathbf{m}} = \mathbf{F}\mathbf{M}$, sendo assim $I_4 = \tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}}$. Considere agora que $\tilde{\mathbf{m}} = \lambda \mathbf{m}$, onde \mathbf{m} é um vetor unitário alinhado com as fibras na configuração espacial, sendo assim $I_4 = \lambda^2$, que é o quadrado do alongamento da fibra (*stretch*) em sua direção. A interpretação de I_5 está relacionada com deformações que não variam o comprimento da fibra.

Extensões para leis com duas ou mais famílias de fibras são possíveis, mas não são tão simples. Por exemplo, para o caso de duas famílias de fibras, é acrescido 4 invariantes ao invés de 2. Destes, 2 são análogos à I_4 e I_5 (geralmente chamados de I_6 e I_7), e 2 levam em conta a interação de uma família com a outra (geralmente chamados de I_8 e I_9).

Neste trabalho, consideraremos a presença de duas famílias, mas a apresentação é simplificada pois geralmente uma família é espacialmente posicionada de maneira simétrica à outra. Mesmo que a hipótese anterior não seja verdade, nenhuma das leis que trabalhamos leva em consideração efeitos de interação entre as mesmas (invariantes I_8 e I_9 são negligenciados), simplificando a teoria para uma simples extensão do caso transversalmente isotrópico (1 família).

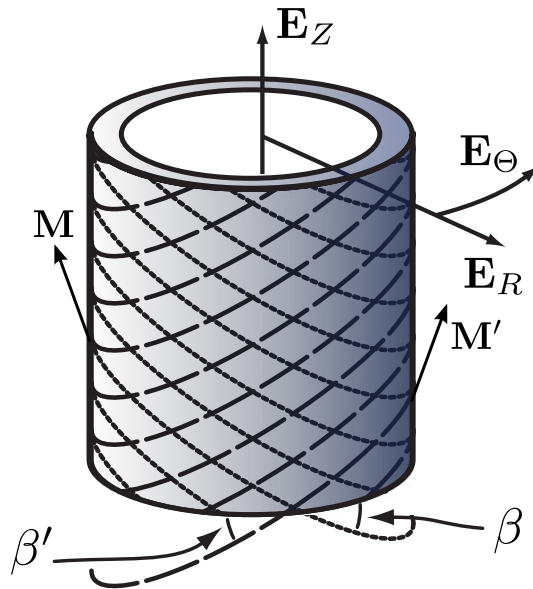


Figura 2.1: Exemplo de cilindro (artéria) reforçada por duas famílias de fibras.

2.2 Modelos de hiperelasticidade

É conhecido na literatura grandes números de tipos de energias de deformação, que em sua maioria são modelos empíricos ⁴ adequados à alguma classe de material específico.

Considerando as nomenclaturas da seção anterior, sendo Ψ a densidade de energia de deformação para um material, citemos algumas funções mais utilizadas supondo isotropia do meio:

(1) Modelo Neo-Hookeano:

$$\Psi(\mathbf{C}) = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3) \quad (2.29)$$

(2) Modelo de Mooney-Rivlin:

$$\Psi(\mathbf{C}) = c_1(I_1 - 3) + c_2(I_2 - 3) \quad (2.30)$$

(3) Modelo de Delfino (Delfino et al. (1997)):

$$\Psi(\mathbf{C}) = \frac{k_1}{2k_2}(e^{k_2(I_1-3)} - 1) \quad (2.31)$$

(4) Modelo de Ogden (Ogden (1972)):

$$\Psi(\mathbf{F}) = \sum_{p=1}^N \frac{\mu_p}{\alpha_p} (\lambda_1^{\alpha_p} + \lambda_2^{\alpha_p} + \lambda_3^{\alpha_p} - 3) \quad (2.32)$$

Onde:

- $\mu, c_1, c_2, k_1, k_2, \mu_p, \alpha_p$ são constantes dependentes do material.
- λ_i são autovalores de \mathbf{F} e I_i invariantes de \mathbf{C} , $i = 1, 2, 3$.

⁴ Nem todos, são puramente empíricos. A lei Neo-Hookeana pode ser formulada à partir de mecânica estatística.

- Todos os modelos acima, com exceção do de Ogden, são aplicáveis somente a materiais isotrópicos incompressíveis. Como incompressibilidade considere $\sqrt{I_3} = J = \det \mathbf{F} = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$.

Observe que o modelo Neo-Hookeano é o mais simples de todos, sendo considerado um caso particular do modelo Mooney-Rivlin, anulando-se a parcela dependente de I_2 , ou mesmo do de Delfino, considerando apenas os termos lineares da expansão de Taylor da função exponencial.

Para materiais anisotrópicos do tipo transversalmente isotrópicos, postula-se a seguinte função de energia de deformação ⁵ (ver Holzapfel et al. (2000)).

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}) &= \Psi^{\text{iso}}(\mathbf{C}) + \Psi^{\text{aniso}}(\mathbf{C}, \mathbf{M}) \\ &= \Psi^{\text{iso}}(\mathbf{C}) + \frac{k_3}{2k_4} \left(e^{k_4(I_4-1)^2} - 1 \right)\end{aligned}\quad (2.33)$$

Onde I_4 é dado por (2.27), k_3 e k_4 constantes do material da fibra, Ψ_{iso} é uma lei isotrópica que modela o material da matriz.

A direção característica da fibra geralmente é determinada através de um parâmetro β sendo definido como o ângulo das fibras medido à partir de um corte circunferencial (ver Fig. 2.1). Tem-se então:

$$\mathbf{M} = \cos\beta \mathbf{E}_\Theta + \sin\beta \mathbf{E}_Z \quad (2.34)$$

Onde $\mathbf{E}_\Theta, \mathbf{E}_Z$ é um sistema de eixos ortonormais sobre a parede da artéria, sendo \mathbf{E}_Θ tangente à parede e \mathbf{E}_Z tangente à linha de centro.

Para duas famílias orientadas em \mathbf{M} e \mathbf{M}' a expressão (2.33) é estendida supondo resposta independente da interação entre as fibras, ficando:

$$\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}, \mathbf{M}') = \Psi^{\text{iso}}(\mathbf{C}) + \frac{k_3}{2k_4} (e^{k_4(I_4-1)^2} - 1) + \frac{k_5}{2k_6} (e^{k_6(I_6-1)^2} - 1) \quad (2.35)$$

⁵ O superíndice $(\cdot)^{\text{iso}}$ para designar a parte isotrópica foi introduzido para diferenciar de $(\cdot)^{\text{iso}}$ que é reservado para denotar a parte isocórica.

onde k_3, k_4, k_5, k_6 são parâmetros das fibras, $I_4 = \mathbf{M} \cdot \mathbf{C}\mathbf{M}$ e $I_6 = \mathbf{M}' \cdot \mathbf{C}\mathbf{M}'$.

Caso as fibras sejam simétricas e mesmo material, isto é $k_5 = k_3, k_6 = k_4$ e $\mathbf{M}' = \cos \beta \mathbf{E}_\Theta - \sin \beta \mathbf{E}_Z$, tem-se:

$$\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}, \mathbf{M}') = \Psi^{\text{iso}}(\mathbf{C}) + \frac{k_3}{k_4} (e^{k_4(I_4-1)^2} - 1)$$

Além da lei constitutiva apresentada anteriormente para a modelagem das famílias de fibras de colágeno, uma outra abordagem bastante comum na literatura leva em consideração a arranjo das fibras de colágeno como um parâmetro distribuído ao longo de uma direção principal. Para uma abordagem completa deste tema ver Gasser et al. (2006).

2.2.1 Modelos quase incompressíveis

As energias de deformações que vimos até agora, salvo a de Ogden, não são função de I_3 (ou J) que é o invariante que mede a deformação volumétrica. Isto acontece pois se está assumindo material incompressível, hipótese aplicada na maioria dos tecidos moles na biomecânica.

No entanto, como vimos no capítulo anterior, em nenhum momento do desenvolvimento das equações (chamadas de formulação compressível) foi inserida a hipótese de incompressibilidade. É necessário então uma modificação na energia de deformação para incluir este comportamento.

É geralmente aceito que a energia de deformação admite uma forma desacoplada entre a parte volumétrica e a isocórica (Holzapfel (2000)), isto é:

$$\Psi(\mathbf{C}) = \Psi^{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) + \Psi^{\text{vol}}(J) = \Psi^{\text{iso}}(\bar{I}_1, \bar{I}_2) + \kappa U(J) \quad (2.36)$$

Onde a função $U : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ é tal que:

- $U(1) = 0$
- U é estritamente convexa.

Dentre as várias possibilidades de escolha segue abaixo as opções mais usuais utilizadas:

(1) Tipo quadrático:

$$U(J) = \frac{1}{2}(J - 1)^2 \quad (2.37)$$

(2) Tipo logaritmo quadrático:

$$U(J) = (\ln J)^2 \quad (2.38)$$

(3) Tipo misto:

$$U(J) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}(J - 1) - \ln J \right) \quad (2.39)$$

Cada energia volumétrica acima penaliza de uma forma ligeiramente diferente o desvio de J da unidade. O tipo quadrático penaliza pouco os casos onde $0 < J < 1$ se comparado com o tipo logaritmo quadrático que é o mais penaliza nesta faixa de valores, sendo que a situação se inverte quando $J > 1$. A opção mista é a opção mais equilibrada das três.

Em termos de limite, ao se tomar $\kappa \rightarrow \infty$ todas estas três leis forçam o comportamento da incompressibilidade. Contudo por razões de condicionamento de problema, existem casos que uma estratégia prejudique menos a solução do sistema, visto que para valores muito altos de κ o número de condicionamento do sistema algébrico associado começa a se degenerar. Além disso, a incompressibilidade também pode ser imposta diretamente na formulação variacional, veremos isto com mais detalhe no Capítulo 3.

2.3 Tensores de Piola-Kirchhoff e Tangente

No capítulo anterior nos deparamos com a necessidade de calcular derivadas da energia de deformação com relação ao tensor \mathbf{C} . Devido à diversidade de expressões para energia de deformação, e pelo fato de que quase nunca estão dadas de maneira simples em relação às componentes de \mathbf{C} , estando sob forma de seus autovalores ou invariantes, este cálculo não é trivial. Dificuldade adicional surge ainda quando introduzimos a decomposição entre partes isocóricas e volumétricas.

Este é um dos motivos das aproximações numéricas dessas derivadas serem populares no meio da hiperelasticidade. No entanto para casos simplificados, como isotropia ou isotropia transversal, temos a possibilidade de possuímos fórmulas analíticas com complexidades de implementação não muito restritivas. Uma vantagem de utilizar essa abordagem é a possível melhoria da eficiência computacional do código, tanto no tempo de montagem dos tensores constitutivos, quanto em uma possível melhora de convergência do método de Newton-Raphson, além de não estar sujeito à calibração de parâmetros numéricos recorrentes do cálculo das derivadas por diferenças finitas.

Antes de mostrarmos as expressões analíticas, considere a definição da operação tensorial \odot que nos será útil

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \odot (\mathbf{c} \otimes \mathbf{d}) = \frac{1}{2} (\mathbf{a} \otimes \mathbf{c} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{d} + \mathbf{a} \otimes \mathbf{d} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c}) \quad (2.40)$$

onde $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^{\text{nd}}$. Particularizando para uma base cartesiana em termos de índices para os tensores $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \text{Lin}$ fica:

$$(\mathbf{A} \odot \mathbf{B})_{ijkl} = \frac{1}{2} (A_{ik}B_{jl} + A_{il}B_{jk}) \quad (2.41)$$

Esta operação surge da derivação da inversa de um tensor simétrico em relação à ele mesmo como em (B.12).

Temos finalmente as expressões analítica resumidas através da seguinte proposição:

Proposição 4. *Considere uma energia de isotrópica da forma $\Psi(\mathbf{C}) = \Psi(I_1(\mathbf{C}), I_2(\mathbf{C}), I_3(\mathbf{C}))$ temos então:*

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}} = \gamma_1 \mathbf{I} + \gamma_2 \mathbf{C} + \gamma_3 \mathbf{C}^{-1} \quad (2.42)$$

onde:

$$\begin{cases} \gamma_1 &= 2 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial I_1} + I_1 \frac{\partial \Psi}{\partial I_2} \right) \\ \gamma_2 &= -2 \frac{\partial \Psi}{\partial I_2} \\ \gamma_3 &= 2 I_3 \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} \end{cases} \quad (2.43)$$

e ainda,

$$\begin{aligned} \mathbb{D}^c &= 4 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{C}^2} = \alpha_1 \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \alpha_2 (\mathbf{C} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{I} \otimes \mathbf{C}) \\ &+ \alpha_3 (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{I} \otimes \mathbf{C}^{-1}) + \alpha_4 \mathbf{C} \otimes \mathbf{C} \\ &+ \alpha_5 (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} + \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1}) + \alpha_6 \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} + \\ &\alpha_7 \mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1} + \alpha_8 \mathbb{I}^s \end{aligned} \quad (2.44)$$

onde :

$$\left\{ \begin{array}{l}
\alpha_1 = 4 \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_1^2} + 2I_1 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_1 \partial I_2} + \frac{\partial \Psi}{\partial I_2} + I_1^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_2^2} \right) \\
\alpha_2 = -4 \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_1 \partial I_2} + I_1 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_2^2} \right) \\
\alpha_3 = 4 \left(I_3 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_1 \partial I_3} + I_1 I_3 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_2 \partial I_3} \right) \\
\alpha_4 = 4 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_2^2} \\
\alpha_5 = -4 I_3 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_2 \partial I_3} \\
\alpha_6 = 4 \left(I_3 \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} + I_3^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3^2} \right) \\
\alpha_7 = -4 I_3 \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} \\
\alpha_8 = -4 \frac{\partial \Psi}{\partial I_2}
\end{array} \right. \quad (2.45)$$

Demonstração. A demonstração é simples, porém longa. Consiste basicamente na aplicação sistemática da regra da cadeia e das relações (1.29), (1.30), (1.31) e (B.12). Por esta razão nos limitaremos à prova da primeira parte, logo:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S} &= 2 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}} = 2 \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \Psi}{\partial I_i} \frac{\partial I_i}{\partial \mathbf{C}} = \\
&= 2 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial I_1} + I_1 \frac{\partial \Psi}{\partial I_2} \right) \mathbf{I} - 2 \frac{\partial \Psi}{\partial I_2} \mathbf{C} + 2 I_3 \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} \mathbf{C}^{-1}
\end{aligned}$$

■

Vemos aqui, que mesmo para um comportamento simplificado de material (isotrópico), a forma explícita dos tensores de Piola-Kirchhoff e da tangente constitutiva é relativamente longa.

Para leis desacopladas como as mostradas anteriormente, a derivada em relação aos invariantes é dada novamente pela regra da cadeia pois a energia isotrópica depende dos invariantes isotrópicos, e a forma genérica mostrada acima é em relação aos invariantes de fato. Para diminuir a chance de erros de cálculos,

fazemos uso da computação simbólica para cada lei constitutiva que desejamos implementar, as fórmulas explícitas para as derivadas são dadas no Anexo C.

2.3.1 Materiais transversalmente isotrópicos

Vimos que materiais deste tipo possuem uma lei da forma $\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}) = \Psi(I_1(\mathbf{C}), I_2(\mathbf{C}), I_3(\mathbf{C}), I_4(\mathbf{C}, \mathbf{M}), I_5(\mathbf{C}, \mathbf{M}))$ para uma família de fibras. No entanto, nos limitaremos a desconsiderar I_5 , e a considerar o desacoplamento do tipo:

$$\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}) = \Psi^{\text{iso}}(I_1, I_2, I_3) + \Psi^{\text{aniso}}(I_3, I_4) \quad (2.46)$$

onde assumiremos a anisotropia dependente funcionalmente de I_3 , pois para materiais compressíveis é considerado a parte isocórica do tensor de Cauchy-Green ($\bar{\mathbf{C}}$) no cálculo de \bar{I}_4 .

As considerações acima realizadas não nos causarão algum problema, dado que são hipóteses razoáveis para a maioria das equações constitutivas utilizadas em biomecânica. Isto implicará de sobremaneira na simplificação dos cálculos e da implementação. Segue abaixo o resultado:

Proposição 5. *Para uma lei do tipo (2.46), temos:*

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{\text{iso}} + \gamma_4 \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \quad (2.47)$$

Onde \mathbf{S}^{iso} é dado por (2.42) e :

$$\gamma_4 = 2 \frac{\partial \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_4} \quad (2.48)$$

e ainda:

$$\mathbb{D}^c = \mathbb{D}_{\text{iso}}^c + \alpha_9 (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{M} + \mathbf{M} \otimes \mathbf{C}^{-1}) + \alpha_{10} \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \quad (2.49)$$

onde $\mathbb{D}_{\text{iso}}^c$ é dado por (2.44) e :

$$\begin{cases} \alpha_9 &= 4I_3 \frac{\partial^2 \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_3 \partial I_4} \\ \alpha_{10} &= 4 \frac{\partial^2 \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_4^2} \end{cases} \quad (2.50)$$

Demonstração. Primeiro observe que $I_4 := \mathbf{M} \cdot \mathbf{C}\mathbf{M} = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{M} \otimes \mathbf{M})$, sendo assim:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^{\text{iso}} + 2 \frac{\partial \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{S}^{\text{iso}} + 2 \underbrace{\frac{\partial \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_4}}_{\gamma_4} \mathbf{M} \otimes \mathbf{M}$$

Observe agora que dada a decomposição (2.46) e as expressões de γ_i , $i = 1, 2, 3$, em (2.43) temos que $\frac{\partial \gamma_1}{\partial I_4} = \frac{\partial \gamma_2}{\partial I_4} = \frac{\partial \gamma_3}{\partial I_1} = \frac{\partial \gamma_4}{\partial I_2} = 0$, sendo assim:

$$\mathbb{D}^c = \mathbb{D}_{\text{iso}}^c + 2\mathbf{C}^{-1} \otimes \left(\frac{\partial \gamma_3}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{C}} \right) + 2\mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \otimes \left(\frac{\partial \gamma_4}{\partial I_3} \frac{\partial I_3}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial \gamma_4}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{C}} \right)$$

Notando que $\frac{\partial \gamma_3}{\partial I_4} = 2I_3 \frac{\partial^2 \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_4 \partial I_3}$, $\frac{\partial \gamma_4}{\partial I_3} = 2 \frac{\partial^2 \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_3 \partial I_4}$, $\frac{\partial \gamma_4}{\partial I_4} = 2 \frac{\partial^2 \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_4^2}$, lembrando que $\frac{\partial I_3}{\partial \mathbf{C}} = I_3 \mathbf{C}^{-1}$, coletando os termos e admitindo regularidade para comutação das derivadas, temos que:

$$\begin{aligned} \mathbb{D}^c &= \mathbb{D}_{\text{iso}}^c + 4I_3 \underbrace{\frac{\partial^2 \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_3 \partial I_4}}_{\alpha_9} (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} + \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \otimes \mathbf{C}^{-1}) \\ &\quad + 4 \underbrace{\frac{\partial^2 \Psi^{\text{aniso}}}{\partial I_4^2}}_{\alpha_{10}} \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \end{aligned}$$

O que completa a demonstração. ■

A extensão para duas ou mais famílias de fibras com leis do tipo $\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2) = \Psi^{\text{iso}}(I_1, I_2, I_3) + \Psi_1^{\text{aniso}}(I_3, I_4) + \Psi_2^{\text{aniso}}(I_3, I_6)$, onde I_6 é análogo a I_4 , é trivialmente feita adicionando um termo a mais em \mathbf{S} e dois termos em \mathbb{D}^c , e assim por diante.

2.4 Modelos de dano

Vimos em seções anteriores que a dependência da energia interna de deformação é dada por (2.23). Contudo, ainda não foi comentado nada a respeito de como o dano evolui. O modelo apresentado abaixo que usa o histórico da energia de deformação do material virgem como variável para evolução do dano é devido principalmente ao trabalho de Simo (1987), que posteriormente é estendido por Miehe (1995) aonde são introduzidos os conceitos de danos contínuo e descontínuo.

Considere que a variável (interna) d de dano é dada pela composição de dois mecanismos de dano, chamados de dano descontínuo (d_1) e dano contínuo (d_2), combinados da forma $d = d_1 + d_2$

O estado de dano do material depende do histórico de deformações experimentado pelo mesmo. Para capturar esta informação definem-se duas variáveis auxiliares α_1 e α_2 para dano descontínuo e contínuo respectivamente, da seguinte forma:

(1) Dano descontínuo:

$$\alpha_1(t) = \sup_{s \in [0, t]} \Psi_0(\mathbf{C}(s)) \quad (2.51)$$

(2) Dano contínuo:

$$\alpha_2(t) = \int_0^t \left| \frac{d\Psi_0(\mathbf{C}(s))}{ds} \right| ds \quad (2.52)$$

Daí faz-se evoluir o dano através de uma lei exponencial:

$$d_i(\alpha_i) = d_i^\infty \left(1 - \exp\left(\frac{-\alpha_i}{\beta_i}\right) \right) \quad i = 1, 2 \quad (2.53)$$

Onde $\beta_i, d_i^\infty \in [0, 1]$ ($d_1^\infty + d_2^\infty = 1$) são constantes que controlam a velocidade de evolução e importância de um mecanismo de dano sobre outro. Na prática, a variável d nunca chega a 1 pois isto implicaria em uma deformação infinita.

Uma boa comparação entre os dois modelos de dano (contínuo e descontínuo) pode ser encontrada em Peña et al. (2009). Um uso particular do dano contínuo

é na modelagem de fenômenos de carregamentos cíclicos em materiais biológicos, como visto em Martin e Sun (2014, 2013).

Apesar de neste trabalho termos apenas implementado a forma de evolução do dano como descrito acima, existem inúmeras outras abordagens comuns na literatura de biomecânica. Uma delas é conhecida como *Pseudoelasticidade* (Ogden e Roxburgh (1999)), aonde uma função adicional dependente apenas do parâmetro de dano é incorporada na energia de deformação. Utilizadores desta abordagem argumentam vantagens na calibração dos danos experimentais pois os parâmetros dos materiais e de dano podem ser identificados independentemente (Weisbecker et al., 2012; Dorfmann e Ogden, 2004; Peña e Doblaré, 2009). Esta abordagem é, no entanto, por construção limitada à descrição do dano descontínuo (ou efeito Mullins). Uma comparação da modelagem do efeito Mullins segundo a abordagem da pseudoelasticidade e a de modelos de danos tradicionais é dada em Gracia et al. (2009).

Outros esforços têm sido especialmente para modelagem do dano no tecido colagenoso Balzani et al. (2012). Utilizando-se deste último modelo e ainda incorporando um tratamento estatístico do rompimento das fibras de colágeno é considerado em Schmidt et al. (2014). Abordagens multiescalas para este tema específico vêm sendo desenvolvidas, em especial através dos trabalho de Hadi et al. (2012).

Capítulo 3

Tratamento da incompressibilidade

Neste capítulo discutiremos formulações alternativas à formulação compressível (de apenas um campo, o de deslocamentos) já vista. Estas formulações surgem como formas de impor a incompressibilidade, hipótese amplamente assumida em biomecânica, de maneira variacional, deixando de ser aproximada por um parâmetro de penalização na parcela de energia de deformação volumétrica. A formulação considerada é uma formulação mista nos campos de pressão e deslocamento, também conhecida como formulação de dois campos. Discutiremos também as possíveis escolhas estáveis dos espaços de aproximação, no sentido da condição de inf-sup (Ladyzhenskaya, 1969; Brezzi e Fortin, 1991).

3.1 Modelagem da incompressibilidade

Em certos casos, o parâmetro de penalização da formulação compressível pode ser necessariamente tão alto que comprometa o condicionamento do sistema linear a ser resolvido. Nestes casos pode ser vantajoso uma segunda abordagem, chamada de formulação incompressível, que é baseada em dois campos, sendo um de pressão (multiplicador de Lagrange) e outro de deslocamentos. A hipótese de incompressibilidade é inserida de forma fraca.

Estes tipos de formulações geralmente conduzem a sistemas algébricos não-positivos definidos, com dificuldades em sua solução através de métodos iterativos. Uma formulação levemente modificada chamada de *Lagrangiano Perturbado*

(também chamado de formulação de compressibilidade artificial) será apresentada como uma forma de condicionamento do método.

Formulações com mais de um campo são conhecidas na literatura de elementos finitos como aproximações mistas. A escolha dos espaços de aproximação, não é um tema trivial, existindo uma vasta literatura sobre este tema (Brezzi e Fortin (1991)). No entanto, na presente seção nos limitaremos a apresentar a formulação variacional (em dimensão infinita) sem nos preocupar com espaços de aproximação, que será tema da Seção 3.3.

Se consideramos a solução do problema de equilíbrio como a solução do problema de minimização de um funcional, em nosso caso o funcional sendo o de energia de deformação menos o trabalho das forças externas, temos um problema de otimização com restrição, formulado como segue:

Problema 4. *Encontre $\mathbf{u}^* \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}^{\text{inc}} = \{\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}; \det \mathbf{F} = 1 \text{ em } \Omega_m\}$ tal que:*

$$\mathbf{u}^* = \arg \min_{\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}^{\text{inc}}} \Pi(\mathbf{u}) \quad (3.1)$$

onde $\text{Kin}_{\mathcal{U}}$ é definido por exemplo em (1.48) e o funcional a ser minimizado é dado por ¹ :

$$\Pi(\mathbf{u}) = \int_{\Omega_m} \Psi(\mathbf{u}) \, d\Omega_m - \Pi^{\text{ext}}(\mathbf{u}) \quad (3.2)$$

Perceba que a agora o conjunto aonde encontramos soluções ainda é mais restrito, isto é, por definição $\text{Kin}_{\mathcal{U}}^{\text{inc}} \subset \text{Kin}_{\mathcal{U}}$. Tratemos deste problema através da introdução de um multiplicador de Lagrange, como forma de imposição da restrição cinemática relacionada à incompressibilidade. Considere uma decomposição da

¹ A parcela do trabalho externo em configuração material não é simplesmente substituindo $\hat{\mathbf{u}}$ por \mathbf{u} da equação (1.46), pois se trata de uma relação não linear em \mathbf{u} . No entanto, o que é importante para nós é a derivada direcional que é dada por $\delta \Pi^{\text{ext}}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = \int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m + \int_{\Gamma_m^N} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N$, onde $\tilde{\mathbf{B}}$ e $\tilde{\mathbf{T}}$ são dados por (1.53) e (1.54)

energia de deformação dada da seguinte forma:

$$\Psi(\mathbf{u}) = p(J - 1) + \Psi^{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) \quad (3.3)$$

onde $\bar{\mathbf{C}} = J^{-1/3}\mathbf{C}$.

Desta forma temos o seguinte problema.

Problema 5. *Encontre $(\mathbf{u}^*, p^*) \in \text{Kin}_{\mathcal{U}} \times \mathcal{P}$ tal que:*

$$(\mathbf{u}^*, p^*) = \arg \min_{\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}} \max_{p \in \mathcal{P}} \tilde{\Pi}(\mathbf{u}, p) \quad (3.4)$$

onde $\mathcal{P} = \mathcal{L}^2(\Omega_m)$ e $\tilde{\Pi}$ é o funcional Lagrangiano dado por:

$$\tilde{\Pi}(\mathbf{u}, p) = \int_{\Omega_m} p(J - 1) + \Psi^{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) \, d\Omega_m - \Pi^{\text{ext}}(\mathbf{u}) \quad (3.5)$$

$$(3.6)$$

Temos agora um problema de ponto estacionário. Este problema gera duas equações variacionais correspondentes a cada uma das derivadas direcionais em cada argumento. Resumimos isto na seguinte proposição:

Proposição 6. *O Problema 5 é equivalente a encontrar $(\mathbf{u}, p) \in \text{Kin}_{\mathcal{U}} \times \mathcal{P}$ satisfazendo as seguintes equações variacionais:*

$$\int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{u}, p) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) \, d\Omega_m - \delta \Pi^{\text{ext}}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (3.7)$$

$$\int_{\Omega_m} \hat{p}(J(\mathbf{u}) - 1) \, d\Omega_m = 0 \quad \forall \hat{p} \in \mathcal{P} \quad (3.8)$$

onde $\text{Var}_{\mathcal{U}}$ é definido em (1.49) e $\tilde{\mathbf{S}}$ é dado por:

$$\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{u}, p) = pJ\mathbf{C}^{-1} + 2\frac{\partial \Psi^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{C}} \quad (3.9)$$

Demonstração. Aplicando a derivada direcional na direção de $\hat{\mathbf{u}}$ e se

utilizando das equações (B.11) e (1.69) e o fato que $\delta\mathbf{C}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = 2\delta\mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}})$ temos:

$$\begin{aligned} & \delta \left(\int_{\Omega_m} p(J-1) + \Psi^{\text{iso}} d\Omega_m \right) (\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) = \\ & \int_{\Omega_m} \left(p \frac{dJ}{d\mathbf{C}} + \frac{\partial \Psi^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{C}} \right) \cdot \delta\mathbf{C}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) d\Omega_m = \\ & \int_{\Omega_m} \underbrace{\left(2 \left(\frac{1}{2} p \mathbf{C}^{-1} \right) + 2 \frac{\partial \Psi^{\text{iso}}}{\partial \mathbf{C}} \right)}_{:=\tilde{\mathbf{S}}} \cdot \delta\mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) d\Omega_m \end{aligned}$$

A derivada do trabalho externo é já conhecida da formulação compressível. A segunda equação variacional segue trivialmente visto que a equação é linear em p , logo $\delta p(p, \hat{p}) = \hat{p}$. ■

Agora iremos linearizar as duas equações do princípio variacional. Isto está resumido através da seguinte proposição que estende o método de Newton-Raphson visto no Problema 2.

Proposição 7. *Considere as aplicações $\mathcal{R}^u : \mathcal{U} \times \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{V}'$ e $\mathcal{R}^p : \mathcal{U} \times \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{P}'$ tais que as equações (3.7) e (3.8) sejam dadas da forma abstrata:*

$$\langle \mathcal{R}^u(\mathbf{u}, p), \hat{\mathbf{u}} \rangle_u = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (3.10)$$

$$\langle \mathcal{R}^p(\mathbf{u}, p), \hat{p} \rangle_p = 0 \quad \forall \hat{p} \in \mathcal{P} \quad (3.11)$$

$$(3.12)$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle_u : \mathcal{U}' \times \mathcal{U} \mapsto \mathbb{R}$ e $\langle \cdot, \cdot \rangle_p : \mathcal{P}' \times \mathcal{P} \mapsto \mathbb{R}$ produtos de dualidade. Dados $(\mathbf{u}^{(0)}, p^{(0)}) \in \text{Kin}_{\mathcal{U}} \times \mathcal{P}$ o método de Newton-Raphson consiste em achar duas seqüências convergentes $(\mathbf{u}^{(0)}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) \rightarrow \mathbf{u}^*$ e $(p^{(0)}, \dots, p^{(n)}) \rightarrow p^*$ resolvendo para

os incrementos $(\delta \mathbf{u}^{(k)}, \delta p^{(k)}) \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \times \mathcal{P}$ as equações variacionais:

$$\begin{aligned} \langle \delta \mathcal{R}^u(\mathbf{u}^{(k)}, p^{(k)}; \delta \mathbf{u}^{(k)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle_u + \langle \delta \mathcal{R}^u(\mathbf{u}^{(k)}, p^{(k)}; \delta p^{(k)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle_u \\ = -\langle \mathcal{R}^u(\mathbf{u}^{(k)}, p^{(k)}), \hat{\mathbf{u}} \rangle_u \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \langle \delta \mathcal{R}^p(\mathbf{u}^{(k)}, p^{(k)}; \delta \mathbf{u}^{(k)}), \hat{p} \rangle_p + \langle \delta \mathcal{R}^p(\mathbf{u}^{(k)}, p^{(k)}; \delta p^{(k)}), \hat{p} \rangle_p \\ = -\langle \mathcal{R}^p(\mathbf{u}^{(k)}, p^{(k)}), \hat{p} \rangle_p \quad \forall \hat{p} \in \mathcal{P} \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{u}^{(k)} + \delta \mathbf{u}^{(k)}$$

$$p^{(k+1)} = p^{(k)} + \delta p^{(k)}$$

Onde:

- Convencionando $\mathcal{R}(\mathbf{u}) = \mathcal{R}^u(\mathbf{u}, p)|_{p=0}$ e ainda $\delta^b \mathcal{R}$ e $\delta^t \mathcal{R}$ dados pelas fórmulas (1.72) e (1.73) temos:

$$\begin{aligned} \langle \delta \mathcal{R}^u(\mathbf{u}, p; \delta \mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle_u = \langle \delta^b \mathcal{R}(\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle + \langle \delta^t \mathcal{R}(\mathbf{u}), \hat{\mathbf{u}} \rangle \\ + \int_{\Omega_m} \left[\tilde{\mathbb{D}}^c \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) + \tilde{\mathbf{S}} \cdot \nabla^T \delta \mathbf{u} \nabla \hat{\mathbf{u}} \right] d\Omega_m \end{aligned} \quad (3.15)$$

com:

$$\tilde{\mathbb{D}}^c = \mathbb{D}^c + Jp\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - 2pJ\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1} \quad (3.16)$$

- Temos os termos simétricos:

$$\langle \delta \mathcal{R}^u(\mathbf{u}, p; \delta p), \hat{\mathbf{u}} \rangle_u = \int_{\Omega_m} \delta p J \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} d\Omega_m \quad (3.17)$$

$$\langle \delta \mathcal{R}^p(\mathbf{u}, p; \delta \mathbf{u}), \hat{p} \rangle_p = \int_{\Omega_m} \hat{p} J \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u} d\Omega_m \quad (3.18)$$

- E finalmente:

$$\langle \delta \mathcal{R}^p(\mathbf{u}, p; \delta p), \hat{p} \rangle_p = 0 \quad (3.19)$$

Demonstração. A prova do termo (3.15) segue as mesmas ideias da Proposição 2, bastando notar que os termos adicionais são dados por (onde utilizamos (B.12) e (B.11)):

$$\begin{aligned}\frac{\partial pJ\mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} &= p\frac{\partial J}{\partial \mathbf{C}} \otimes \mathbf{C}^{-1} + pJ\frac{\partial pJ\mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \\ &= \frac{1}{2}pJ\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - Jp\mathbf{C}^{-1} \odot \mathbf{C}^{-1}\end{aligned}$$

Temos então a equação (3.16), duplicando a equação acima por razões idênticas às vistas na prova da Proposição 6 .

Para o termo $\langle \delta \mathcal{R}^u(\mathbf{u}, p; \delta p), \hat{\mathbf{u}} \rangle_u$ temos após a eliminação dos termos não dependentes de p em (3.7) que:

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_m} \delta(pJ\mathbf{C}^{-1})(\mathbf{u}, p; \delta p) \cdot \delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}) \, d\Omega_m &= \\ \int_{\Omega_m} \delta p J \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{F}^T \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m &= \int_{\Omega_m} \delta p J \underbrace{\mathbf{F} \mathbf{F}^{-1}}_{=\mathbf{I}} \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m\end{aligned}$$

Para o termo $\langle \delta \mathcal{R}^p(\mathbf{u}, p; \delta \mathbf{u}), \hat{p} \rangle_p$, usando (B.10) temos:

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_m} \delta(\hat{p}(J-1))(\mathbf{u}, p; \delta \mathbf{u}) \, d\Omega_m &= \\ \int_{\Omega_m} \frac{1}{2} \hat{p} J \mathbf{C}^{-1} \cdot 2\delta \mathbf{E}(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) \, d\Omega_m &= \\ \int_{\Omega_m} \hat{p} J \mathbf{C}^{-1} \cdot \mathbf{F}^T \nabla \delta \mathbf{u} \, d\Omega_m &= \int_{\Omega_m} \hat{p} J \mathbf{F}^{-T} \cdot \nabla \delta \mathbf{u} \, d\Omega_m\end{aligned}$$

O termo restante $\langle \delta \mathcal{R}^p(\mathbf{u}, p; \delta p), \hat{p} \rangle_p$ é trivialmente zero já que a dependência é sempre linear em p , logo não há derivada segunda.

■

Podemos observar que esta formulação produz um sistema do tipo:

$$\begin{cases} \mathbf{A} \delta \mathbf{u} + \mathbf{B} \delta \mathbf{p} = \mathbf{F}^u \\ \mathbf{B}^T \delta \mathbf{u} + \mathbf{O} \delta \mathbf{p} = \mathbf{F}^p \end{cases} \quad (3.20)$$

Tais sistemas são conhecidos na literatura (ver Brezzi e Fortin (1991); Ern e Guermond (2002)) por serem de difícil resolução, visto que não são diagonais dominantes pois possuem um bloco de zeros na diagonal, embora não são singulares se escolhidos espaços de aproximações compatíveis.

Discutiremos a seguir um método simples de melhoria do condicionamento conhecido como compressibilidade artificial. Este sistema pode ser resolvido ainda por blocos como por exemplo no método de Uzawa. Nos limitaremos no entanto ao primeiro método.

3.2 Inclusão de compressibilidade artificial

Este método, que também é conhecido como *Lagrangiano Perturbado* Chang et al. (1991), consiste em modificar a forma da energia de deformação adicionando um termo quadrático em p , multiplicado por um fator pequeno, como forma de melhorar o condicionamento do sistema. Considere a seguinte energia de deformação:

$$\Psi_\kappa(\mathbf{u}) = p(J - 1) + \Psi^{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) - \frac{1}{\kappa} p^2 \quad (3.21)$$

A mudança na formulação só vai afetar alguns termos, que resumimos através da seguinte proposição:

Proposição 8. *Considere a energia de deformação Ψ_κ dada por (3.21) e os termos definidos na Proposição 7. Seguem abaixo os termos modificados pela inclusão da nova parcela.*

$$\langle \mathcal{R}_\kappa^p(\mathbf{u}, p), \hat{p} \rangle_p = \langle \mathcal{R}^p(\mathbf{u}, p), \hat{p} \rangle_p - \int_{\Omega_m} \frac{1}{\kappa} \hat{p} p \, d\Omega_m \quad (3.22)$$

$$\langle \delta \mathcal{R}_\kappa^p(\mathbf{u}, p; \delta p), \hat{p} \rangle_p = - \int_{\Omega_m} \frac{1}{\kappa} \hat{p} \delta p \, d\Omega_m \quad (3.23)$$

$$(3.24)$$

Os demais termos permanecem os mesmos.

Demonstração. A demonstração é trivial tomando a primeira e segunda derivada direcional em p . Observe que o termo adicional não contribui com nenhuma derivada direcional em \mathbf{u} . ■

3.3 Formulação de elementos finitos

Semelhante ao que foi feito no Capítulo 1, finalizamos com a apresentação da discretização por elementos finitos do problema da mecânica dos sólidos não-linear incompressível. Ao invés de apenas um espaço de aproximação, neste problema temos um par de espaços. A escolha destes espaços não é qualquer e como já comentado anteriormente esbarra na condição de compatibilidade entre espaços conhecida como condição inf-sup ou LBB. (Ladyzhenskaya, 1969; Brezzi e Fortin, 1991).

Dada uma partição \mathcal{T}^h do domínio Ω_m formada por tetraedros (ou triângulos) denotados de K . Considere então o espaços de aproximação para pressão (mesmo da variação virtual) dado por:

$$\mathcal{P}_P^h = \{p_h \in \mathcal{P}; p_h|_K \in \mathbb{P}_P \forall K \in \mathcal{T}^h\} \quad (3.25)$$

Alguns espaços para o deslocamentos já foram vistos em (1.93) e (1.94), considere agora uma variação destes enriquecido com funções bolhas para isto considere:

$$\mathbb{B}_K = \{b \in \mathbb{P}_4; b|_{\partial K} = 0, b(\mathbf{g}_K) = 1, \mathbf{g}_K \text{ é baricentro de } K\} \quad (3.26)$$

$$= \{b \in \mathbb{P}_4; b = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4, \lambda_i \text{ coordenadas baricênticas de } K\} \quad (3.27)$$

onde K foi particularizado tetraedro. Desta forma temos ainda:

$$\mathcal{W}_{1,b}^h = \{\mathbf{u}_h \in \text{Kin}_{\mathcal{W}}; (\mathbf{E}_i \cdot \mathbf{u}_h)|_K \in \mathbb{P}_1 \oplus \mathbb{B}_K \forall K \in \mathcal{T}^h, i = 1, 2, 3\} \quad (3.28)$$

$$\mathcal{V}_{1,b}^h = \{\hat{\mathbf{u}}_h \in \text{Var}_{\mathcal{W}}; (\mathbf{E}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_h)|_K \in \mathbb{P}_1 \oplus \mathbb{B}_K \forall K \in \mathcal{T}^h, i = 1, 2, 3\} \quad (3.29)$$

Com todos os espaços definidos nos interessa duas combinações de espaços a saber:

- $\mathbb{P}_{1,b}/\mathbb{P}_1$ - Polinômios lineares enriquecidos com uma função bolha para os deslocamentos e polinômios lineares para pressão (elemento *mini* Arnold et al. (1984)), que no contexto deste trabalho significa que $(\mathbf{u}_h, p_h) \in \mathcal{U}_{1,b}^h \times \mathcal{P}_1^h$ e $(\hat{\mathbf{u}}_h, \hat{p}_h) \in \mathcal{V}_{1,b}^h \times \mathcal{P}_1^h$.
- $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ - Polinômios quadráticos para os deslocamentos e polinômios lineares para pressão (elemento de Taylor-Hood), que no contexto deste trabalho significa que $(\mathbf{u}_h, p_h) \in \mathcal{U}_2^h \times \mathcal{P}_1^h$ e $(\hat{\mathbf{u}}_h, \hat{p}_h) \in \mathcal{V}_2^h \times \mathcal{P}_1^h$.

Os espaços de aproximação utilizados até então estão esquematizados na Fig. 3.1.

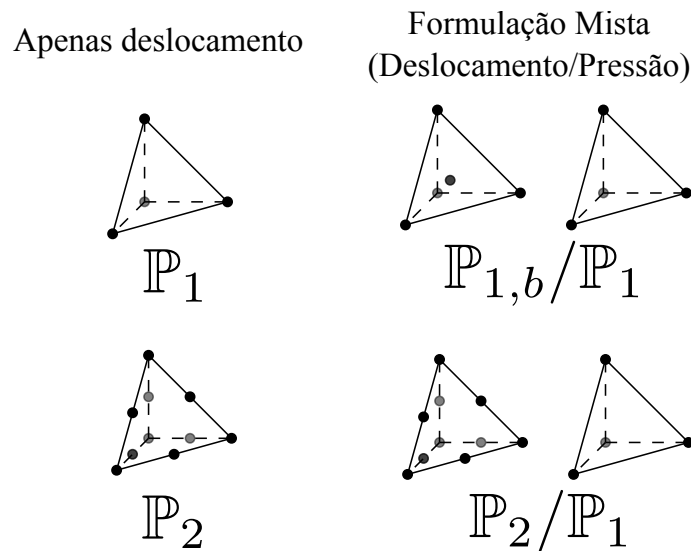


Figura 3.1: Espaços de aproximação.

Em situações onde é indiferente conhecer os espaços eliminaremos os índices dos espaços e variedades de dimensão finita denotando-os apenas como \mathcal{U}^h , \mathcal{V}^h e \mathcal{P}^h . Segue abaixo a aproximação de elementos para o método misto sem termos adicionais de regularização:

Problema 6 (Aproximação para o problema misto de mecânica dos sólidos não-linear incompressível). Dados $(\mathbf{u}_h^{(n)}, p_h^{(n)}) \in \mathcal{U}^h \times \mathcal{P}^h$ e P_m um

valor de pressão constante, encontrar $(\mathbf{u}_h^{(n+1)}, p_h^{(n+1)}) \in \mathcal{U}^h \times \mathcal{P}^h$ tal que:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_m} \left(\tilde{\mathbb{D}}^{(n)} \nabla \mathbf{u}_h^{(n+1)} + p_h^{(n+1)} J^{(n)} (\mathbf{F}^{(n)})^{-T} \right) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}}_h \, d\Omega_m = \\ & \int_{\Omega_m} \left(\tilde{\mathbb{D}}^{(n)} \nabla \mathbf{u}_h^{(n)} + p_h^{(n)} J^{(n)} (\mathbf{F}^{(n)})^{-T} - \mathbf{F}^{(n)} \tilde{\mathbf{S}}^{(n)} \right) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}}_h \, d\Omega_m \\ & - \int_{\Gamma_m^N} J^{(n)} P_m (\mathbf{F}^{(n)})^{-T} \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}}_h \, d\Gamma_m^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_h \in \mathcal{V}^h \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_m} \hat{p}_h J^{(n)} (\mathbf{F}^{(n)})^{-T} \cdot \nabla \mathbf{u}_h^{(n+1)} \, d\Omega_m = \\ & + \int_{\Omega_m} \hat{p}_h \left(1 - J^{(n)} + J^{(n)} (\mathbf{F}^{(n)})^{-T} \cdot \nabla \mathbf{u}_h^{(n)} \right) \, d\Omega_m \quad \hat{p}_h \in \mathcal{P}^h \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde a notação $(\cdot)^{(n)}$ significa $(\cdot)(\mathbf{u}_h^{(n)}, p_h^{(n)})$ e ainda:

$$\left[\tilde{\mathbb{D}}^{(n)} \right]_{ijkl} = \left[(\tilde{\mathbb{D}}^c)^{(n)} \right]_{bjal} F_{ka}^{(n)} F_{ib}^{(n)} + \tilde{S}_{lj}^{(n)} \delta_{ki}$$

onde os tensores $\tilde{\mathbf{S}}$ e $\tilde{\mathbb{D}}^c$ são dados por (3.9) e (3.16) respectivamente.

Vale ressaltar que o problema acima é apenas uma iteração do método de Newton devendo ser executado até a convergência. Variações na formulação são facilmente incorporadas ao modelo de iteração acima. Um outro detalhe importante é que esta formulação é simétrica.

Capítulo 4

Experimentos Numéricos

Este capítulo é constituído por dois exemplos numéricos que utilizam e validam a teoria dos capítulos anteriores. Maiores detalhes dos exemplos se encontram em suas respectivas sessões.

4.1 Cilindro pressurizado com pré-*stretch*

Para validar nossa implementação em elementos finitos do problema de grandes deformações, foi escolhido o caso do cilindro com simetria de revolução e incompressível, sujeito a um carregamento de pressão e submetido a pré-*stretch*, visto que temos solução semianalítica para este problema ¹. A dedução detalhada desta solução para um leitor interessado pode ser encontrada no Apêndice D.

Considere então um cilindro em configuração material de raio interno R_i e externo R_e com comprimento L , sendo $R \in [R_i, R_e]$ a variável radial. Denotando $\lambda = r/R$, $\lambda_{r_i} = r_i/R_i$, $\lambda_{r_e} = r_e/R_e$ e $\lambda_z = \ell/L$ (pré-*stretch*), onde as letras minúsculas se referem a configuração espacial das variáveis em letras maiúsculas anteriores, temos que para uma pressão interna p o equilíbrio mecânico se dá mediante a solução da seguinte equação não-linear unidimensional para a incógnita λ_{r_i} (mesma Eq. D.13):

$$p = \int_{\lambda_{r_e}}^{\lambda_{r_i}} (\lambda_z \lambda^2 - 1)^{-1} \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} d\lambda \quad (4.1)$$

¹ O termo semianalítico aqui designa uma solução que é obtida mediante a solução de uma equação algébrica não-linear unidimensional.

onde da condição de incompressibilidade $\lambda = \lambda(\lambda_{r_i})$ (em especial λ_{r_e}) para um dado R é possível mostrar que (mesma Eq. D.2):

$$\lambda(\lambda_{r_i}) = \sqrt{\lambda_z^{-1}(1 - q_R) + \lambda_{r_i}^2 q_R}, \quad \text{onde } q_R = \frac{R_i^2}{R^2}, \lambda_z \text{ fixo} \quad (4.2)$$

Dada uma energia de deformação é possível reduzi-la a uma expressão do tipo $\Psi = \Psi(\lambda)$, na qual podemos avaliar sua derivada analiticamente. Dado um valor de p achamos então o valor de λ_{r_i} solução da equação (4.1). Dado que é uma equação não-linear utiliza-se algum método numérico de solução de equações algébricas não-lineares, que em nosso caso foi o secante onde não é preciso avaliar derivadas. A integral também é avaliada numericamente por algum método de integração, que em nosso caso foi o dos trapézios. O particionamento do domínio de integração é escolhido extremamente fino, visto que o problema é computacionalmente barato, de forma a garantir que a integral seja bem avaliada.

O caso de teste utiliza dados de uma artéria carótida humana obtido de Holzapfel et al. (2000). Foi utilizada a lei constitutiva de Delfino com parâmetros $k_1 = 44,2$ kPa e $k_2 = 8,35$ (ver Eq. 2.31), para um cilindro de raio $R_i = 3,1$ mm e $R_e = 4,0$ mm para pré-*stretches* de $\lambda_z \in \{1,00, 1,05, 1,10, 1,15, 1,20\}$ e pressão interna p variando no intervalo $[0, 25]$ kPa. Podemos ver estes resultados na Fig. 4.1 onde as curvas simuladas semianalíticas são confrontadas com as apresentadas em Holzapfel et al. (2000).

Em todos casos obtemos um ajuste perfeito dos dados ², comprovando que somos capazes reproduzir os resultados da literatura e que agora podemos cruzar nossos resultados em elementos finitos diretamente com solução semianalítica, inclusive para diferentes leis constitutivas e inclusão de dano.

A simulação em elementos finitos é feita em um quarto de cilindro utilizando uma espessura H de um décimo de R_e , isto é $H = 0,4$ mm. Utilizamos condições de contorno de deslocamento normal nulo nas faces que cortam o cilindro radialmente.

² A pequena diferença é devido a curva do artigo ser reproduzida por captura manual dos pontos.

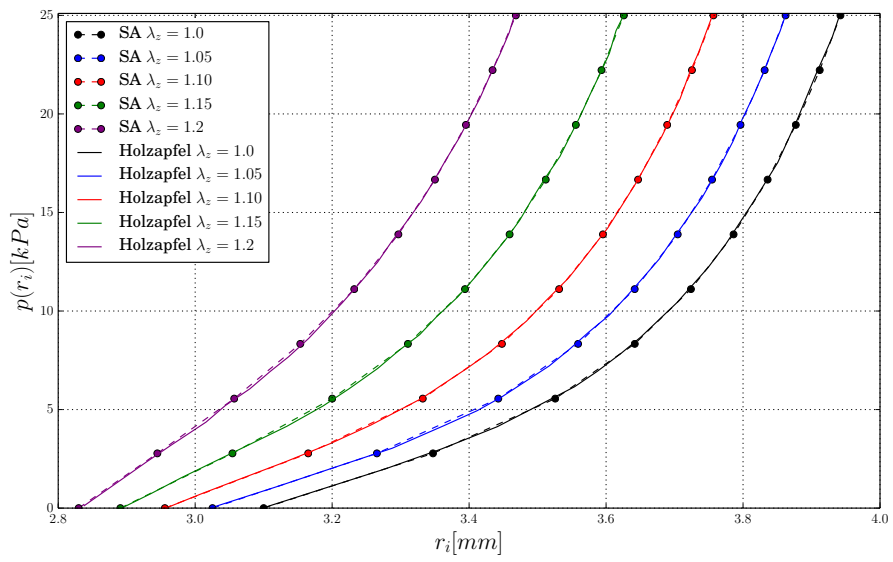


Figura 4.1: Validação da implementação semianalítica.

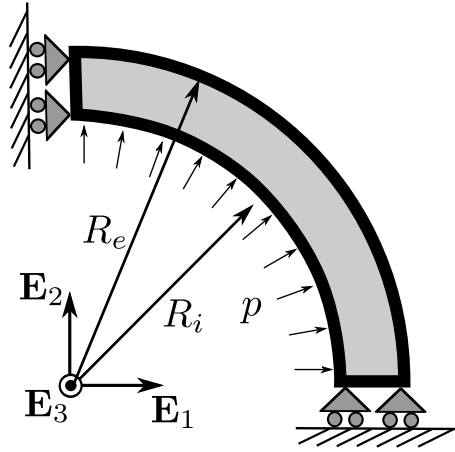


Figura 4.2: Vista da seção transversal do modelo de um quarto de cilindro.

Nas outras duas faces planas, que cortam o cilindro axialmente, é imposto deslocamento normal iguais em magnitude mas com sentidos opostos, de forma a se obter o *pré-stretch* desejado. O modelo pode ser visto na Fig. 4.2

Usaremos a formulação compressível (de um campo) com espaços de aproximações do tipo \mathbb{P}_1 e \mathbb{P}_2 , bem como a formulação incompressível com espaços de aproximação do tipo $\mathbb{P}_{1,b}/\mathbb{P}_1$ e $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$. Para o caso compressível foi utilizado $\kappa = 10^5$ kPa com função de penalização volumétrica do tipo quadrática (ver Eq. (2.37)). Para o caso incompressível não foi usado o termo adicional do tipo lagrangiano perturbado, visto que utilizamos métodos diretos nestes casos.

Foi utilizada uma malha de com 10 elementos (tetraedros) na direção radial, 36 na circunferencial e 6 na direção longitudinal (terceira dimensão do problema) quando a interpolação foi linear no deslocamento, isto é, \mathbb{P}_1 e $\mathbb{P}_{1,b}/\mathbb{P}_1$, totalizando 8640 tetraedros e 2035 nós. Para interpolações quadráticas no deslocamento, isto é \mathbb{P}_2 e $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$, o número de elementos é metade do caso anterior em cada direção (ver Fig. 4.3 para visualizar as malhas), totalizando 1080 elementos e 2035 nós.

Vemos então na Fig. 4.3 a solução para o último passo de carga o campo de deslocamentos (magnitude) para o caso sem *pré-stretch*, sendo que os demais casos de *pré-stretches* obtemos comportamento muito semelhante qualitativamente. Percebemos que as magnitudes dos deslocamentos, tanto máximo quanto mínimo, são semelhantes em todos os casos, mas com valores levemente mais elevados nas

formulações compressíveis.

Na Fig. 4.4 vemos as curvas de pressão contra o raio interno de equilíbrio para os diferentes pré-*stretches*, formulações e combinações de espaços. Foram feitos em geral 10 incrementos de carga (pressão) igualmente espaçados, com exceção ao caso com pré-*stretch* $\lambda_z = 1,15$ aonde foram feitas 15 iterações pois caso contrário não havia convergência do método de Newton-Raphson. Podemos ver que as curvas foram satisfatórias nas aproximações incompressíveis, porém na compressível há uma pequena translação para a direita, como já previsto através da imagem 4.3.

Por fim, mostramos nas Figuras 4.5 e 4.6 os campos de pressão com os pré-*stretches* $\lambda_z = 1$ e $\lambda_z = 1,2$ respectivamente. Constatamos que a $\mathbb{P}_{1,b}/\mathbb{P}_1$ possui modos espúrios na pressão, apesar de termos obtido uma aparente boa aproximação para o deslocamento. Em contrapartida, o espaço de aproximação $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ (espaço de Taylor-Hood) se demonstrou estável, com variação suave na pressão, sendo de maior magnitude na superfície interna do cilindro, como esperado.

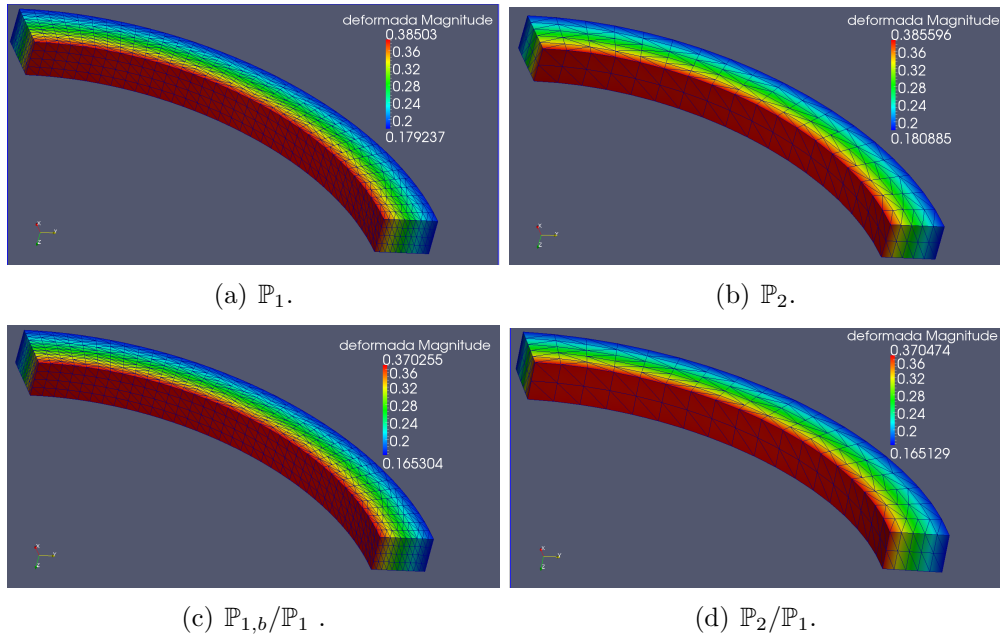


Figura 4.3: Módulo do campo de deslocamentos com $\lambda_z = 1,2$ e pressão interna 25 kPa.

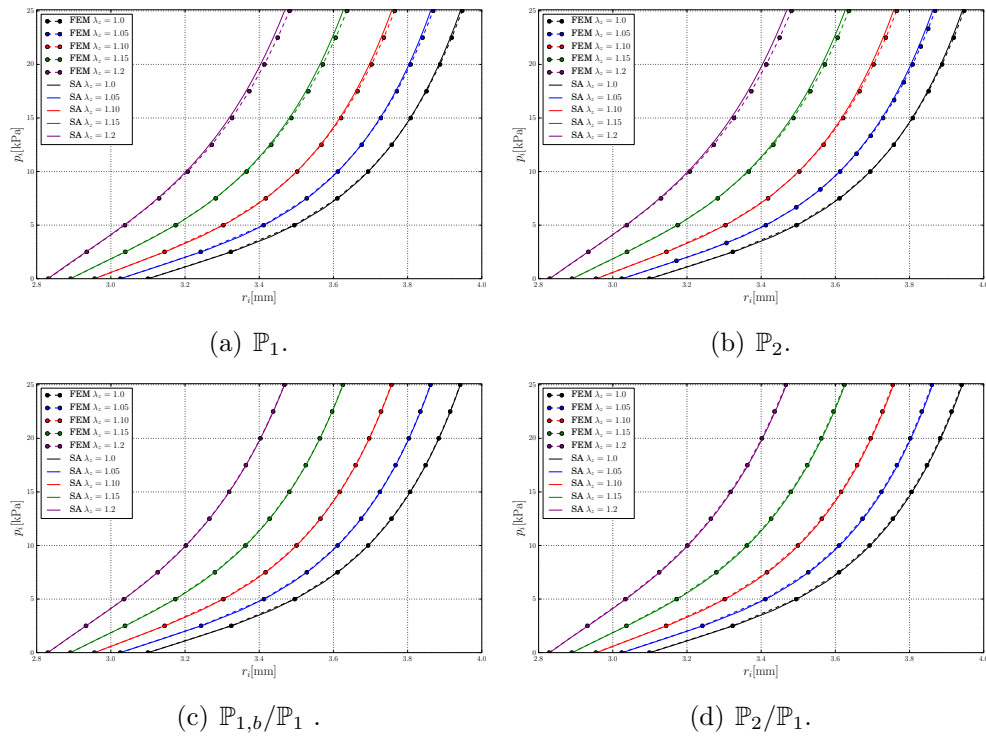
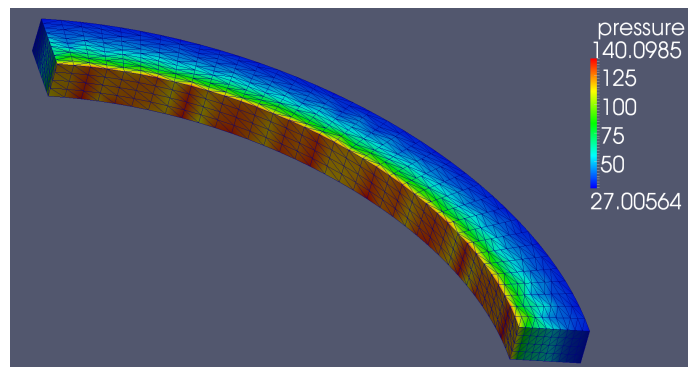
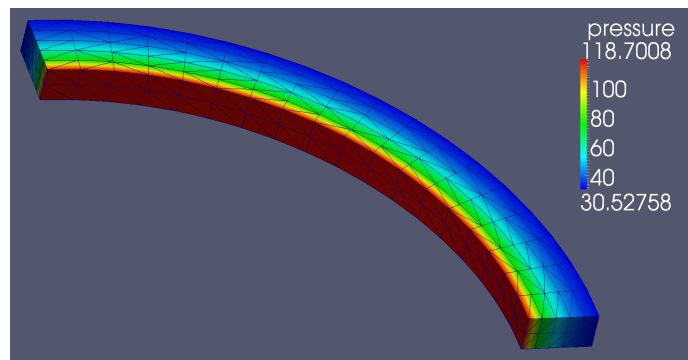


Figura 4.4: Comparação da solução numéricas por elementos finitos e solução semianalítica.

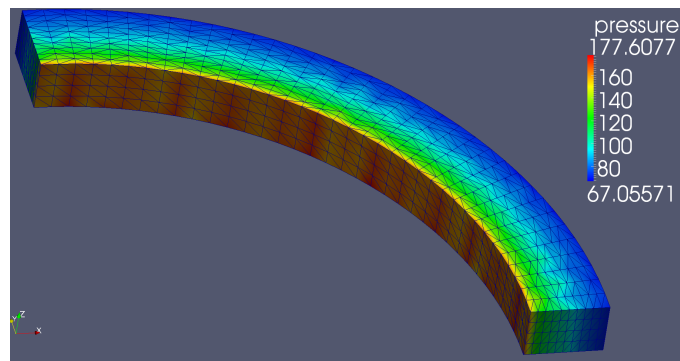


(a) $\mathbb{P}_{1,b}/\mathbb{P}_1$.

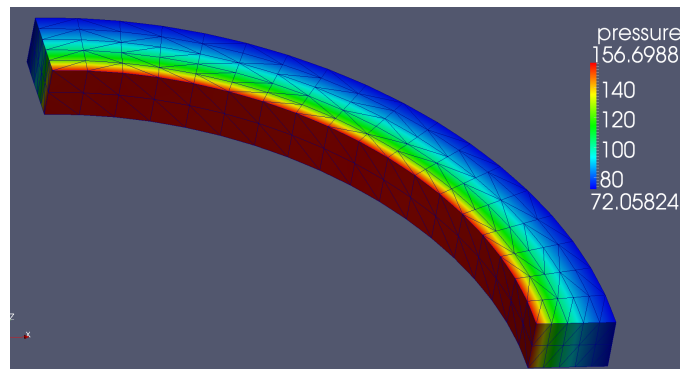


(b) $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$.

Figura 4.5: Campos de pressão para $\lambda_z = 1$ e pressão interna 25 kPa.



(a) $\mathbb{P}_{1,b}/\mathbb{P}_1$.



(b) $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$.

Figura 4.6: Campos de pressão para $\lambda_z = 1,2$ e pressão interna 25 kPa.

4.2 Cilindro danificado por carregamento cíclico

No Exercício 4.1 vemos que conseguimos resolver por um procedimento semianalítico o equilíbrio em um cilindro incompressível com simetria de revolução sujeito a pressão interna. No caso anterior validamos nossos resultados com os encontrados em Holzapfel et al. (2000) para uma carótida humana virgem, isto é sem dano. Desejamos então estudar os efeitos dos mecanismos de dano introduzidos na Seção 2.4 visando a validar a implementação em elementos finitos dos mesmos.

Para este estudo usamos novamente a energia de deformação de Delfino com $k_1 = 44,2 \text{ kPa}$ e $k_2 = 8,35$, e com os parâmetros de evolução de dano $d_1^\infty = 0,5$, $d_2^\infty = 0,5$, $\beta_1 = 50 \text{ kPa}$, $\beta_2 = 100 \text{ kPa}$ (ver Eq. (2.53)), sendo o dano final a soma dos dois mecanismos descontínuo e contínuo.

A formulação de elementos finitos utilizado foi a aproximação mista com elementos de Taylor-Hood $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$. Foi utilizada novamente o modelo de um quarto do cilindro com mesma dimensão e malha do exemplo anterior que pode ser visualizado na Fig. 4.3(d), aonde temos 1080 tetraedros e 2035 nós. Vale observar que a variável de dano foi armazenada em 4 pontos de integração de Gauss, sendo que quando nos referimos no dano em um elemento estamos na verdade tomando uma média aritmética entre os valores destes pontos.

Foi aplicado então dois ciclos de carregamento senoidal com pico de pressão de $p = 25 \text{ kPa}$ como pode ser visto na Fig. 4.7(a). Ao final dos dois ciclos foram realizados ao todo 81 incrementos de carga.

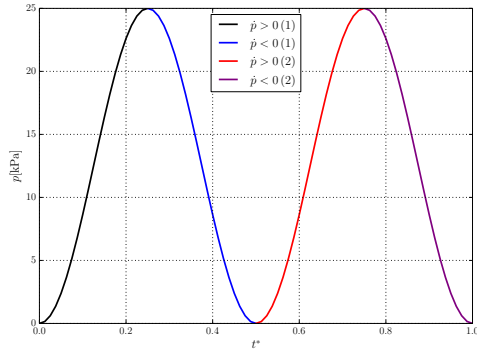
Podemos ver na Fig. 4.7(b), através da curva pressão contra estiramento, que a degradação do material age diminuindo a energia necessária a ser absorvida pelo material até uma certo nível de deformação. Isso pode ser visto se traçarmos uma linha reta paralela ao eixo das ordenadas, as curvas interceptarão esta reta em pontos cada vez mais inferiores de pressão a medida que o pseudotempo avança (verificar cores do gráfico em paralelo com a Fig. 4.7(a)). Equivalentemente, a diminuição da resistência mecânica pode ser vista se fixamos um valor de pressão. O estiramento no equilíbrio é cada vez maior a medida que o pseudotempo avança.

Por fim, observamos uma boa concordância entre as curvas semianalíticas e as obtidas por elementos finitos.

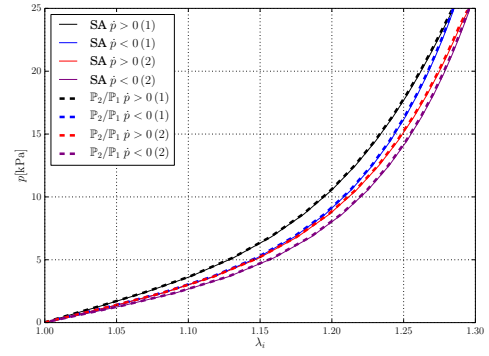
Na Fig. 4.7(c) vemos a evolução do dano total e suas parcelas descontínuas (d_1) e contínua (d_2) ao longo do tempo. Os dados foram tomados a uma distância de 0,045 mm da parede interna ³. Observamos que a curva do dano contínuo é estritamente crescente, enquanto a do dano descontínuo alterna momentos de crescimento e constância, sendo que o segundo ponto de crescimento é relativo ao segundo pico de carregamento onde o cilindro atinge *stretches* maiores que anteriormente devido já estar degradado. Vemos novamente boa concordância entre as curvas semianalítica e simuladas por elementos finitos.

Finalmente na Fig. 4.7(d) e na Fig. 4.8 vemos a distribuição do dano ao longo da espessura da parede arterial no último passo de carga, em forma de gráfico e cores respectivamente. Podemos observar que a degradação é máxima na superfície interna da parede arterial significando que o processo de ruptura de um vaso sanguíneo geralmente se inicia internamente. O gradiente do dano é tão maior quanto mais próximo é o ponto da superfície interna, o que significa indiretamente que a energia associada a deformação também varia mais nesta região. A semelhança entre as curvas semianalíticas e as obtidas por elementos finitos é boa na maior parte das regiões exceto na parte vizinha à parede interna. Isto se dá devido a falta de informação nesta região visto que o valor mais próximo do dano que temos é o valor médio deste em um tetraedro de fronteira, sendo assim o valor na parede interna é subestimado. Nas demais regiões os valores mostrados são interpolações lineares entre elementos vizinhos, que foi capaz de garantir uma boa semelhança com a solução de referência. Um pós-processamento poderia ser realizado para ter os valores exatos do dano nodalmente a partir do histórico de deformação, mas isto é fora de nosso interesse de estudo pelo momento.

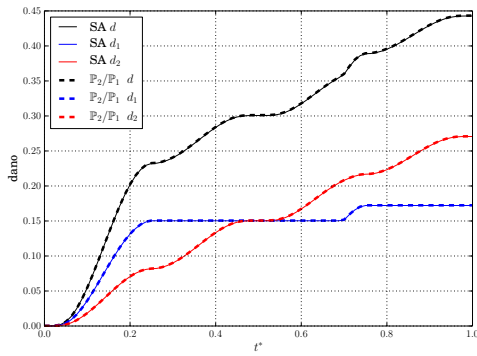
³ Esta distância corresponde ao ponto médio da primeira fileira de elementos finitos, visto que não possuímos valores nodais na fronteira mas sim no centro de cada elemento. O valor mostrado se refere a uma média tomada em todos o elementos desta fileira.



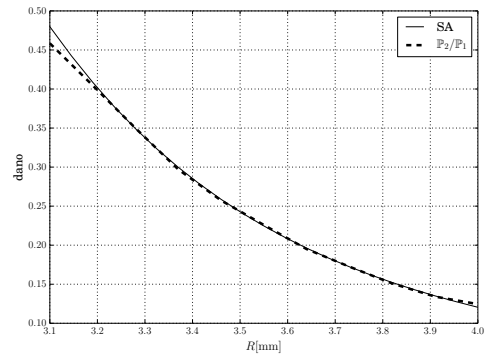
(a) Carramento de pressão aplicado na superfície interna do cilindro ao longo de um pseudotempo.



(b) Comparação da curva pressão contra estiramento das soluções semianalíticas (SA) e resolvido por elementos finitos.



(c) Comparação da evolução do dano no elemento mais interno do cilindro calculado semianaliticamente (SA) ou por elementos finitos.



(d) Variação do dano ao longo da parede arterial no último passo de carregamento.

Figura 4.7: Comparação da solução numéricas por elementos finitos e solução semianalítica.

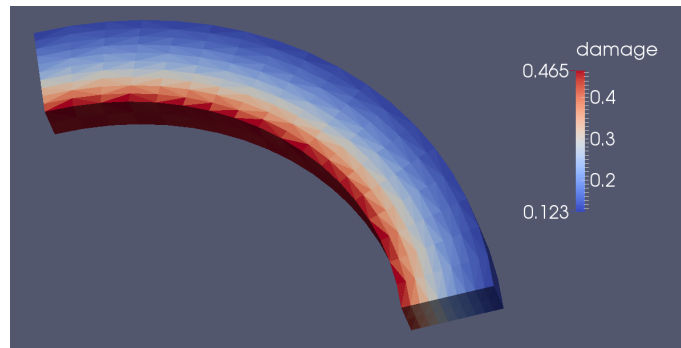


Figura 4.8: Imagem do campo de dano no último passo de carga.

Capítulo 5

Modelagem constitutiva multiescala

De um ponto de vista microscópico a maior parte dos materiais são por natureza heterogêneos. Estas heterogeneidades, como por exemplo diferentes componentes ou vazios, regem o comportamento mecânico do material à nível macroscópico. Neste contexto, abordagens com base em formulações variacionais multiescala surge como uma poderosa ferramenta de modelagem para descrever um comportamento constitutivo mais complexo, tais como material em falha Sánchez et al. (2013) ou tecidos arteriais Speirs et al. (2008). Formular o problema multiescala para a modelagem de tecidos biológicos é o objetivo deste capítulo. Entretanto, abordaremos o problema com uma generalidade maior de forma a colocar os conceitos de forma clara e precisa.

Várias metodologias multiescala a modelagem constitutiva de materiais tem sido propostas nas últimas décadas. Uma delas é baseada na existência de um elemento de volume estatisticamente representativo (EVR), que está associado à escala onde as heterogeneidades são observáveis. Quando em um problema apenas duas escalas são identificadas (“macro” e “micro” (EVR)), o processo de inserção das quantidades macroscópicas no domínio microscópico é geralmente chamado de *localização*. O processo inverso é chamado de *homogeneização*.

Esta técnica, com base na EVR, foi colocada em uma estrutura variacional por de Souza Neto e Feijóo (2006, 2008) em pequenas e grandes deformações. Tal abordagem será adotada neste texto, no entanto com algumas modificações

importantes. Uma dessas modificações (generalização) está na afirmação do princípio de Hill-Mandel de macrohomogeneidade, originalmente proposto por Hill (1965), aonde será incorporada não apenas a potência interna, mas também a potência externa no balanço de potências entre a macroescala e a microescala. Isto é importante para a modelagem de forças de corpo variando à nível microscópico. Tal extensão é baseada no trabalho recente de (Blanco et al., 2014a,b; de Souza Neto et al., 2014).

Para a formulação do princípio variacional multiescala iremos primeiro definir a cinemática adequadamente através da definição de espaços funcionais (ou conjuntos) de acordo com duas hipóteses de homogeneização assumidas: uma para o deslocamento microscópico e outra para o gradiente de deformação microscópica. Destas suposições identificaremos três objetos cinemáticos importantes: o deslocamento e gradiente de deformação macroscópicos, bem como o deslocamento microscópico.

Com a descrição cinemática estabelecida postularemos um funcional de energia interna virtual e seguindo um procedimento sistemático para derivar formulações variacionais Feijóo e Taroco (1982, 1983); Taroco et al. (2014), chegaremos a uma formulação variacional multiescala, em princípio bastante genérica. Para impor o acoplamento físico entre escalas, vamos estender o Princípio Hill-Mandel, que permitirá identificar cargas externas admissíveis para o modelo e, finalmente, ter um princípio variacional adequado para o problema multiescala.

Finalmente, por razões computacionais práticas particularizaremos o espaço de mínima de restrição cinemática (aquele que satisfaz nada além das duas hipóteses de homogeneização) ao tomar subespaços do mesmo: o periódico e o de deslocamento linear. Para cada caso, vamos analisar as cargas externas suportadas pelo modelo bem como a forma local da equação de equilíbrio.

5.1 Aspectos cinemáticos

Nesta seção, vamos caracterizar os espaços funcionais relacionadas com problema na microescala a fim de satisfazer algumas condições cinemáticas impostas pela relação com os campos macroscópicos. Observamos que, como é comumente feito em formulações variacionais as hipóteses deste acoplamento serão introduzidas sempre sobre a descrição cinemática via a definição dos respectivos espaços.

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^{\text{nd}}$ uma região aberta representando um corpo na configuração do material ¹ onde o nosso problema macroscópico está definido. Em torno de cada ponto $\mathbf{x} \in \Omega$ associamos um micro-domínio Ω_μ chamado EVR (Elemento de Volume Representativo) tal que $\ell_\mu/\ell \ll 1$, onde ℓ_μ e ℓ são comprimentos característicos relacionados à microescala e macroescala respectivamente. O tamanho ℓ_μ é escolhido tal que Ω_μ seja um volume que represente as heterogeneidades do material, sejam estas espaços vazios ou inclusões (veja a Fig. 5.1).

Os pontos microscópicos $\mathbf{y} \in \Omega_\mu$ são indicados por um sistema de coordenadas local com origem no centro geométrico do microcélula. Assim, por definição de centro geométrico sempre temos $\int_{\Omega_\mu} \mathbf{y} d\Omega_\mu = \mathbf{0}$. Por convenção nos referimos simplesmente $\nabla = \nabla_{\mathbf{y}}$ ao gradiente no domínio microscópico e quando necessário $\nabla_{\mathbf{x}}$ é o gradiente no domínio macroscópico.

Para simplificar, não trataremos explicitamente de vazios ou inclusões neste texto porque a maioria dos resultados enunciados aqui podem ser facilmente adaptados para considerar tais características.

5.1.1 Conjunto de deslocamentos admissíveis

Queremos descrever o deslocamento microscópico, isto é $\mathbf{u}_\mu = \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y})$ sujeito a duas hipóteses:

¹ Neste capítulo como nunca será misturado configurações materiais e espaciais (trabalharemos inteiramente na material) utilizaremos notações simplificadas como por exemplo \mathbf{x} ao invés de \mathbf{X} para pontos materiais, div ao invés de Div , etc.

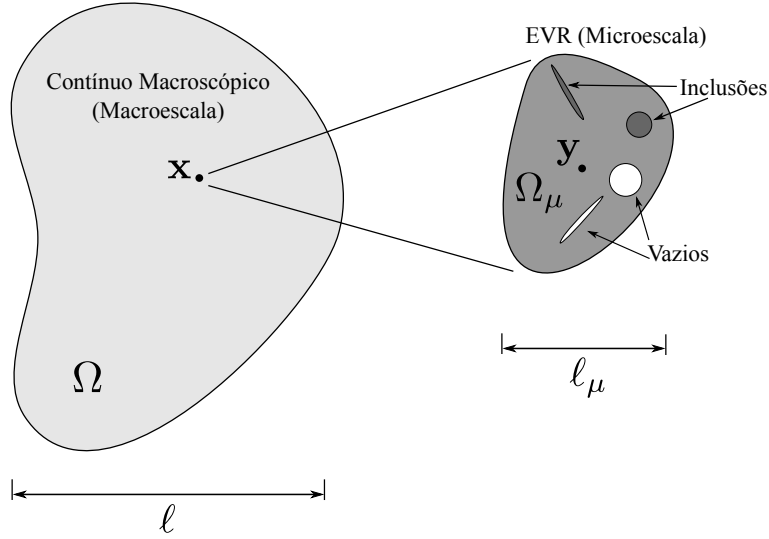


Figura 5.1: Domínios da macroescala e microescala.

- (1) O campo de deslocamento macroscópico $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$ é dado pela média volumétrica (homogeneização) do campo de deslocamentos microscópico:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) \, d\Omega_\mu \quad (5.1)$$

- (2) O gradiente macroscópico de deformação $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{x})$ é dado pela média volumétrica (homogeneização) do campo gradiente de deformação microscópico:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{F}_\mu(\mathbf{y}) \, d\Omega_\mu \quad (5.2)$$

onde $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u}(\mathbf{x})$, $\mathbf{F}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{I} + \nabla\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y})$.

Note que acima nós denotamos explicitamente a dependência com a variável \mathbf{x} dos campos macroscópicos. Ao longo do texto iremos omitir esta dependência devido ao ponto $\mathbf{x} \in \Omega$ ser fixo, portanto, nós escrevemos \mathbf{u} ou \mathbf{F} e assumimos também que o subscrito μ significa dependência de variável \mathbf{y} .

Seja \mathcal{U}^μ um espaço de Hilbert dotado de regularidade suficiente para as operações matemáticas a serem realizadas. Nós definimos um subconjunto de \mathcal{U}^μ

como \mathcal{K}_u^μ ² sendo o conjunto de deslocamentos microscópicos admissíveis tal que as equações (5.1) e (5.2) são satisfeitas:

$$\mathcal{K}_u^\mu = \left\{ \mathbf{u}_\mu \in \mathcal{U}^\mu; \int_{\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| \mathbf{u}; \int_{\Omega_\mu} \mathbf{F}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| \mathbf{F} \right\} \quad (5.3)$$

Notando que $\int_{\Omega_\mu} \mathbf{F}_\mu \, d\Omega_\mu = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| \mathbf{I} + \int_{\Omega_\mu} \nabla \mathbf{u}_\mu \, d\Omega_\mu$ e usando a clássica relação (B.7) temos as duas seguintes caracterizações equivalentes de \mathcal{K}_u^μ :

$$\mathcal{K}_u^\mu = \left\{ \mathbf{u}_\mu \in \mathcal{U}^\mu; \int_{\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| \mathbf{u}, \int_{\Omega_\mu} \nabla \mathbf{u}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| (\mathbf{F} - \mathbf{I}) \right\} \quad (5.4)$$

$$= \left\{ \mathbf{u}_\mu \in \mathcal{U}^\mu; \int_{\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| \mathbf{u}, \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{u}_\mu \otimes \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu = |\Omega_\mu| (\mathbf{F} - \mathbf{I}) \right\} \quad (5.5)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário que aponta para fora da fronteira Γ_μ . Podemos também exprimir \mathbf{u}_μ por meio da expansão de Taylor³ em função dos campos macroscópicos \mathbf{u} e \mathbf{F} mais uma flutuação um $\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y})$, como segue:

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{u} + (\mathbf{F} - \mathbf{I})\mathbf{y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) \quad (5.6)$$

A relação acima mostra a forma desacoplada do campo de deslocamento em uma constante \mathbf{u} , uma parte linear $(\mathbf{F} - \mathbf{I})\mathbf{y}$ e uma parte de ordem mais elevada $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$. Isto significa que, dada a tripla $(\mathbf{u}, \mathbf{F}, \tilde{\mathbf{u}}_\mu) \in (\mathcal{K}_u^\mu)^* = \mathbb{R}^{\text{nd}} \times \mathbb{R}^{\text{nd} \times \text{nd}} \times \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$ identificamos o elemento $\mathbf{u}_\mu \in \mathcal{K}_u^\mu$. A caracterização do espaço de $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$ será o assunto da próxima seção.

Podemos facilmente ver que o gradiente de deformação microscópica em forma desacoplada é dada por:

$$\mathbf{F}_\mu = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}_\mu = \mathbf{F} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (5.7)$$

² Não propriamente um espaço, mas uma variedade linear.

³ Observe a semelhança com $\mathbf{u}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{u}_\mu(\mathbf{0}) + \nabla \mathbf{u}_\mu(\mathbf{0})\mathbf{y} + \mathcal{O}(\mathbf{y}^2)$.

Com as decomposições apresentadas temos tudo o necessário para caracterizar o espaço de flutuações admissíveis.

5.1.2 Espaço de flutuações admissíveis

Usando a decomposição dada por (5.6) vemos que as condições sobre \mathcal{K}_u^μ (ver (5.3)) podem ser caracterizadas pelo espaço $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$. Integrando (5.6) e (5.7) em Ω_μ e levando em consideração que $\mathbf{u}_\mu \in \mathcal{K}_u^\mu$ e \mathbf{y} é relativo ao centro geométrico do EVR, temos:

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_\mu} \mathbf{u}_\mu \, d\Omega_\mu &= \int_{\Omega_\mu} \mathbf{u} + (\mathbf{F} - \mathbf{I})\mathbf{y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| \mathbf{u} + \underbrace{\int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu}_{\text{deve ser 0}} \\ \int_{\Omega_\mu} \mathbf{F}_\mu \, d\Omega_\mu &= \int_{\Omega_\mu} \mathbf{F} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu = |\Omega_\mu| \mathbf{F} + \underbrace{\int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu}_{\text{deve ser 0}}\end{aligned}$$

Isto leva à definição:

$$\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu = \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu; \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu = \mathbf{0}, \int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu = \mathbf{0} \right\} \quad (5.8)$$

$$= \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu; \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu = \mathbf{0}, \int_{\Gamma_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu = \mathbf{0} \right\} \quad (5.9)$$

O espaço de flutuações admissíveis é idêntico ao espaço de variações admissíveis, isto é:

$$\text{Var}_{\mathcal{V}}^\mu = \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu; \hat{\mathbf{u}}_\mu = \mathbf{u}_\mu^1 - \mathbf{u}_\mu^2, \mathbf{u}_\mu^1 \text{ e } \mathbf{u}_\mu^2 \in \mathcal{K}_u^\mu \right\} \quad (5.10)$$

Como ambos os campos $\mathbf{u}_\mu^1, \mathbf{u}_\mu^2 \in \mathcal{K}_u^\mu$ satisfazem as condições (5.1) e (5.2) então é fácil ver que a diferença está em $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$, tal que $\text{Var}_{\mathcal{V}}^\mu = \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$. Uma outra caracterização muito útil de \mathcal{K}_u^μ é através de uma translação do espaço de variações:

$$\mathcal{K}_u^\mu = \bar{\mathbf{u}}_\mu + \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu = \bar{\mathbf{u}}_\mu + \text{Var}_{\mathcal{V}}^\mu, \quad \text{com } \bar{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{K}_u^\mu \quad (5.11)$$

Antes de partir para a próxima seção, é útil exprimir a variação virtual $\hat{\mathbf{u}}$ como função da variação virtual da tripla $(\mathbf{u}, \mathbf{F}, \tilde{\mathbf{u}}_\mu)$, isto é $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{F}}, \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu)$. Tomando a variação em (5.6) e (5.7) temos:

$$\hat{\mathbf{u}}_\mu = \hat{\mathbf{u}} + \hat{\mathbf{F}}\mathbf{y} + \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \quad (5.12)$$

$$\hat{\mathbf{F}}_\mu = \hat{\mathbf{F}} + \nabla \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \quad (5.13)$$

A utilidade destas expressões ficará clara nas próximas seções.

5.2 Princípio de Potências Virtuais

Nesta seção mostraremos uma metodologia geral para o Princípio de Potências Virtuais no contexto multiescala. Seguiremos uma forma sistemática de derivação de formulações variacionais já descrita no Capítulo 1.

Até agora temos descrito os campos cinematicamente admissíveis e suas variações admissíveis (ou flutuações), isto é $\text{Kin}_{\mathcal{U}} = \mathcal{K}_u^\mu$ e $\text{Var}_\gamma = \text{Var}_{\mathcal{U}}^\mu$ em nosso caso. A definição destes conjuntos é o primeiro passo de qualquer princípio variacional.

A seção é dividida em três partes. Primeiro identificamos outros espaços relacionados por argumentos de dualidade associados pelas definições de potências interna e externa. Em um segundo momento postulamos o Princípio de Potências Virtuais do equilíbrio de uma maneira genérica (ainda sem muitas restrições). Finalmente é postulado o princípio de Hill-Mandel de homogeneidade que acopla fisicamente as duas escalas, fornecendo restrições para a consistência dos carregamentos externos que o princípio anterior permite.

5.2.1 Dualidade

Como operador de deformação microscópico \mathcal{D}_μ é escolhido o gradiente sobre o deslocamento microscópico total, isto é:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_\mu : \mathcal{V}_\mu &\mapsto \mathcal{W}_\mu \\ \hat{\mathbf{u}}_\mu &\mapsto \mathcal{D}_\mu \hat{\mathbf{u}}_\mu = \nabla \hat{\mathbf{u}}_\mu = \hat{\mathbf{F}}_\mu = \hat{\mathbf{F}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}_\mu\end{aligned}\quad (5.14)$$

É fácil ver que a definição de \mathcal{D}_μ leva à definição \mathcal{W}_μ da forma:

$$\mathcal{W}_\mu = \{ \hat{\mathbf{F}}_\mu : \Omega_\mu \mapsto \text{Lin} \} \quad (5.15)$$

A caracterização do núcleo de \mathcal{D}_μ segue da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\mathcal{N}(\mathcal{D}_\mu) &= \{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \text{Var}_{\mathcal{W}}^\mu; \hat{\mathbf{F}} + \nabla \hat{\mathbf{u}}_\mu = 0 \} \\ &= \{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \text{Var}_{\mathcal{W}}^\mu; \hat{\mathbf{u}}_\mu = -\hat{\mathbf{F}}\mathbf{y} + \hat{\mathbf{u}}_0, \hat{\mathbf{u}}_0 \in \mathbb{R}^{\text{nd}} \text{ uniforme} \}\end{aligned}\quad (5.16)$$

Definimos o funcional linear de potência interna como sendo $\mathcal{P}^i \in \mathcal{W}'_\mu$:

$$\mathcal{P}^i(\hat{\mathbf{F}}_\mu) = -\langle \mathbf{P}_\mu, \hat{\mathbf{F}}_\mu \rangle_{\mathcal{W}'_\mu \times \mathcal{W}_\mu} = -\int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \cdot \hat{\mathbf{F}}_\mu \, d\Omega_\mu \quad (5.17)$$

onde o tensor \mathbf{P}_μ surge por argumentos de dualidade. Este é o chamado de primeiro tensor de Piola-Kirchhoff, neste caso, sua versão microscópica. Percebe-se que por construção $\mathcal{P}^i = 0$ para $\hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{N}(\mathcal{D}_\mu)$.

Integrando a expressão da potência interna por partes podemos definir o operador transposto $\mathcal{D}_\mu^* : \mathcal{W}'_\mu \mapsto \mathcal{V}'_\mu$ da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{P}_\mu, \mathcal{D}_\mu \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\mathcal{W}'_\mu \times \mathcal{W}_\mu} &= \langle \mathcal{D}_\mu^* \mathbf{P}_\mu, \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\mathcal{V}'_\mu \times \mathcal{V}_\mu} = \\ &= \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_\mu = - \int_{\Omega_\mu} \text{div } \mathbf{P}_\mu \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_\mu\end{aligned}$$

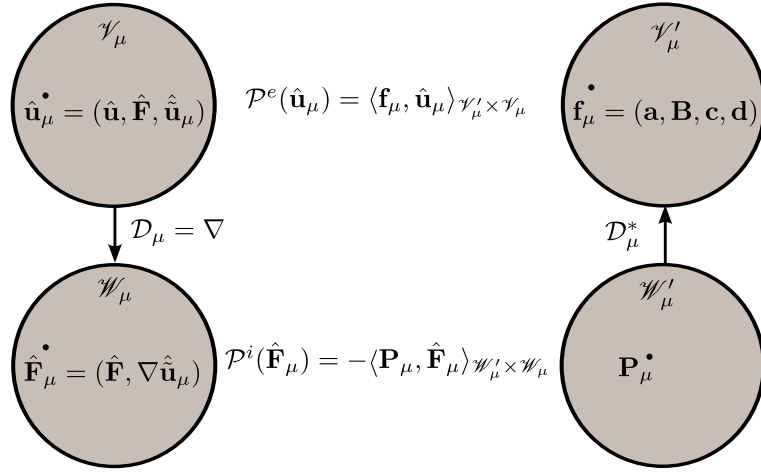


Figura 5.2: Diagrama de dualidade para o problema multiescala.

E usando a decomposição (5.12) temos:

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{D}_\mu^* \mathbf{P}_\mu, \hat{\mathbf{u}} \rangle &= \left(- \int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}_\mu \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Gamma_\mu \right) + \\
&\quad \hat{\mathbf{u}} \cdot \left(- \int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}_\mu \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu \right) + \\
&\quad \hat{\mathbf{F}} \cdot \left(- \int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}_\mu \otimes \mathbf{y} \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \otimes \mathbf{y} \, d\Gamma_\mu \right) \quad (5.18)
\end{aligned}$$

Logo, como consequência, podemos identificar a forma do funcional de potência virtual externa $\mathcal{P}^e \in \mathcal{V}'_\mu$ tal que ele admite um sistema de carregamento externo $\mathbf{f}_\mu \in \mathcal{V}'_\mu$ caracterizado pela quadrupla $(\mathbf{a}, \mathbf{B}, \mathbf{c}, \mathbf{d})$, sendo :

$$\mathcal{P}^e(\hat{\mathbf{u}}) = \langle \mathbf{f}_\mu, \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\mathcal{V}'_\mu \times \mathcal{V}_\mu} = \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{F}} + \int_{\Omega_\mu} \mathbf{c} \cdot \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{d} \cdot \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \, d\Gamma_\mu \quad (5.19)$$

Todo este procedimento pode ser visualizado na Fig. 5.2.

Devemos observar que carregamentos admissíveis geram uma potência virtual externa nula para um movimento rígido (ver definição (5.16)), isto é:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}^e(\hat{\mathbf{u}}) &= 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{Z}}^\mu \cap \mathcal{N}(\mathcal{D}_\mu) \\
\mathcal{P}^e(\hat{\mathbf{u}}) &= \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{u}} \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^{\text{nd}} \\
\Rightarrow \mathbf{a} &= \mathbf{0}
\end{aligned} \tag{5.20}$$

Temos então apenas uma restrição sobre a quadrupla que define \mathbf{f}_μ para fazer o modelo consistente. Vale lembrar que esta não é a única restrição. Restrições adicionais surgem quando inserimos mais entendimento físico do problema multiescala no modelo. Iremos adiar esta discussão até a seção que trata especificamente do princípio de Hill-Mandel.

5.2.2 Princípio variacional do equilíbrio

Dizemos que o sistema se encontra em equilíbrio se:

$$\mathcal{P}^i(\hat{\mathbf{F}}_\mu) + \mathcal{P}^e(\hat{\mathbf{u}}_\mu) = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \text{Var}_{\mathcal{Z}}^\mu \tag{5.21}$$

e para as formas específicas da seção anterior temos:

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \cdot \hat{\mathbf{F}}_\mu \, d\Omega_\mu + \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{F}} \\
& + \int_{\Omega_\mu} \mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Gamma_\mu = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \text{Var}_{\mathcal{Z}}^\mu
\end{aligned} \tag{5.22}$$

onde temos ainda mantido o carregamento de corpo macroscópico \mathbf{a} mesmo sendo zero apenas por completeza. Integrando por partes (já feito em (5.18)) e anulando

alternadamente duas variações da tripla $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{u}}_\mu)$ temos as seguintes três relações:

$$\hat{\mathbf{u}} \cdot \left(\mathbf{a} + \int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}_\mu \, d\Omega_\mu - \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu \right) = \mathbf{0} \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^{\text{nd}} \quad (5.23)$$

$$\hat{\mathbf{F}} \cdot \left(\mathbf{B} + \int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}_\mu \otimes \mathbf{y} \, d\Omega_\mu - \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \otimes \mathbf{y} \, d\Gamma_\mu \right) = \mathbf{0} \quad \forall \hat{\mathbf{F}} \in \mathbb{R}^{\text{nd} \times \text{nd}} \quad (5.24)$$

$$\int_{\Omega_\mu} (\operatorname{div} \mathbf{P}_\mu + \mathbf{c}) \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} (\mathbf{d} - \mathbf{P}_\mu \mathbf{n}) \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Gamma_\mu = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu \quad (5.25)$$

A terceira relação define um condição de ortogonalidade com respeito ao espaço $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$, isto é caracteriza $(\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu)^\perp$, veja (B.14). Além disso fazendo uso das fórmulas (B.5) e (B.7) na primeira e segunda relações acima temos as seguintes equações de Euler-Lagrange:

$$\begin{cases} \mathbf{a} = \mathbf{0} \\ \mathbf{B} = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \, d\Omega_\mu \\ \operatorname{div} \mathbf{P}_\mu + \mathbf{c} = \bar{\mathbf{k}} \quad \text{em } \Omega_\mu, \quad \text{onde } \bar{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}^{\text{nd}} \text{ uniforme} \\ \mathbf{d} - \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} = \bar{\mathbf{T}} \mathbf{n} \quad \text{sobre } \Gamma_\mu, \quad \text{onde } \bar{\mathbf{T}} \in \mathbb{R}^{\text{nd} \times \text{nd}} \text{ uniforme} \end{cases} \quad (5.26)$$

O próximo passo é identificar outras condições físicas que fazem com que o modelo seja consistente com a modelagem constitutiva multiescala. Mais precisamente estas condições implicarão em consequências sobre o tipo de carregamentos externos admissíveis, como veremos a seguir.

5.2.3 Princípio de Hill-Mandel

Até o presente momento temos discutido sobre suposições feitas sobre as variáveis microscópicas cinemáticas (deslocamentos e seus gradientes) tais que quantidades da microescala sejam consistentes quando relacionadas com as suas contrapartidas macroscópicas. Além disso, também foi formulado um Princípio de Potências Virtuais com variáveis cinemáticas microscópicas e seus respectivos duais, como por exemplo o tensor de Piola-Kirchhoff microscópico. A questão que

ainda permanece é sobre o acoplamento físico entre as escalas. Este é o objetivo desta seção.

A versão estendida do princípio de Hill-Mandel da macrohomogeneidade (ver (Blanco et al., 2014a,b; de Souza Neto et al., 2014)) afirma que a potência virtual homogeneizada total (ou mesmo a potência real) na microescala é igual à potência virtual exercida pelas quantidades macroscópicas. Então, afirmamos que o sistema multiescala satisfaz o Princípio de Hill-Mandel estendido se a seguinte equação variacional é satisfeita:

$$\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{F}} - \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{u}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \cdot \hat{\mathbf{F}}_\mu - \mathbf{b}_\mu \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \text{Var}_{\mathcal{H}}^\mu \quad (5.27)$$

Note que a dependência com a tripla $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{u}}_\mu)$ é devida as decomposições (5.6) e (5.7), de forma que $\forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \text{Var}_{\mathcal{H}}^\mu$ significa o mesmo que $\forall (\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{u}}_\mu) \in \mathbb{R}^{\text{nd}} \times \mathbb{R}^{\text{nd} \times \text{nd}} \times \mathcal{H}_u^\mu$. Temos também introduzido \mathbf{b} e \mathbf{b}_μ como forças de corpo macroscópica e microscópica, respectivamente.

Uma observação importante sobre o princípio acima é sobre a ausência de integrais na fronteira do EVR, o que não significa no entanto que a tração na fronteira é nula, mas apenas que a potência realizada por esta última com os deslocamentos admissíveis é nula. Isto é fisicamente consistente devido a estarmos sempre nos referindo a uma microcélula localizada no interior de um corpo Ω . Formas particulares para trações compatíveis serão consideradas posteriormente para cada escolha de espaço de deslocamento admissíveis.

Substituindo (5.6) e (5.7) na equação (5.27) e rearranjando-a para poder identificar os termos admissíveis por comparação com (5.22) temos:

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \cdot \hat{\mathbf{F}}_\mu \, d\Omega_\mu + \underbrace{\left(\int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \, d\Omega_\mu - |\Omega_\mu| \mathbf{b} \right)}_{:=\mathbf{a}} \cdot \hat{\mathbf{u}} + \int_{\Omega_\mu} \underbrace{\mathbf{b}_\mu}_{:=\mathbf{c}} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu \\ & + \underbrace{\left(|\Omega_\mu| \mathbf{P} + \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \otimes \mathbf{y} \, d\Omega_\mu \right)}_{:=\mathbf{B}} \cdot \hat{\mathbf{F}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \text{Var}_{\mathcal{H}}^\mu \quad (5.28) \end{aligned}$$

Usando a primeira equação de Euler-Lagrange de (5.26) temos:

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \, d\Omega_\mu - |\Omega_\mu| \mathbf{b} = \mathbf{0} \\ \Rightarrow \mathbf{b} &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \, d\Omega_\mu\end{aligned}\quad (5.29)$$

Temos derivado um esquema de homogeneização consistente para as forças de corpo. Isto implica que se existem carregamentos de corpo introduzidos na micro e macro escala, a única possibilidade é que eles estejam relacionados através de (5.29). Além disso, reescrevendo $\mathbf{b}_\mu = \mathbf{b} + \tilde{\mathbf{b}}_\mu$ temos:

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_\mu = \mathbf{b} + \tilde{\mathbf{b}}_\mu &\Rightarrow \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{b}}_\mu \, d\Omega_\mu = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{b}_\mu \, d\Omega_\mu - \mathbf{b} |\Omega_\mu| \\ &\Rightarrow \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{b}}_\mu \, d\Omega_\mu = \mathbf{0}\end{aligned}\quad (5.30)$$

Desta forma as flutuações da força de corpo tem valor médio nulo. Uma utilidade importante de decompor o campo \mathbf{b}_μ é reescrever as expressões de \mathbf{B} e \mathbf{c} em (5.28) somente em função de $\tilde{\mathbf{b}}_\mu$ pois a parte constante \mathbf{b} não afeta estas integrais.

Usando a segunda equação de Euler-Lagrange de (5.26) temos:

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= |\Omega_\mu| \mathbf{P} + \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{b}}_\mu \otimes \mathbf{y} \, d\Omega_\mu = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \, d\Omega_\mu \\ \Rightarrow \mathbf{P} &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu \, d\Omega_\mu - \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{b}}_\mu \otimes \mathbf{y} \, d\Omega_\mu \right)\end{aligned}\quad (5.31)$$

Aqui foi identificada uma fórmula de homogeneização para a tensão de Piola-Kirchhoff macroscópica consistente com o princípio de Hill-Mandel estendido. Note que não foi necessário assumir *a priori* a forma de homogeneização.

Pode ser observado que não há integral na fronteira em (5.28), isto significa por comparação com (5.22) que:

$$\int_{\Gamma_\mu} \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Gamma_\mu = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_\mu^u \quad (5.32)$$

Esta é uma consequência da forma assumida do princípio de Hill-Mandel. Trações que são ortogonais aos campos de flutuações do deslocamento no sentido de (5.32) são compatíveis com o modelo.

É facilmente visto que uma condição suficiente é \mathbf{d} seja dado da forma:

$$\mathbf{d} = \bar{\bar{\mathbf{T}}}\mathbf{n} \quad \text{sobre } \Gamma_\mu, \text{ para qualquer } \bar{\bar{\mathbf{T}}} \in \mathbb{R}^{\text{nd} \times \text{nd}} \text{ uniforme} \quad (5.33)$$

Das propriedades de $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$, segue que

$$\int_{\Gamma_\mu} \bar{\bar{\mathbf{T}}}\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Gamma_\mu = \bar{\bar{\mathbf{T}}} \cdot \int_{\Gamma_\mu} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu = 0 \quad \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$$

Substituindo esta forma de \mathbf{d} na última equação de Euler-Lagrange em (5.26) temos:

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\mathbf{T}}}\mathbf{n} - \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} &= \bar{\mathbf{T}}\mathbf{n} \\ \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} = \mathbf{t}_\mu &= (\bar{\mathbf{T}} - \bar{\bar{\mathbf{T}}})\mathbf{n} \quad \text{sobre } \Gamma_\mu \end{aligned}$$

Como conclusão \mathbf{P}_μ é constante sobre a fronteira do EVR.

Finalmente integrando a terceira equação de Euler-Lagrange em (5.26), usando a decomposição das forças de corpo como em (5.30) e utilizando a relação (B.6) (com integrando unitário) temos:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\mu} \text{div } \mathbf{P}_\mu + \mathbf{b} + \tilde{\mathbf{b}}_\mu \, d\Omega_\mu &= \int_{\Omega_\mu} \bar{\mathbf{k}} \, d\Omega_\mu \\ \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu + |\Omega_\mu| \mathbf{b} + \underbrace{\int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{b}}_\mu \, d\Omega}_{{=0}} &= |\Omega_\mu| \bar{\mathbf{k}} \\ \mathbf{P}_\mu \underbrace{\int_{\Gamma_\mu} \mathbf{n} \, d\Gamma}_{{=0}} + |\Omega_\mu| \mathbf{b} &= |\Omega_\mu| \bar{\mathbf{k}} \\ \Rightarrow \mathbf{b} &= \bar{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (5.34)$$

E portanto resulta:

$$\operatorname{div} \mathbf{P}_\mu + \tilde{\mathbf{b}}_\mu = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega_\mu \quad (5.35)$$

Observe que o princípio de Hill-Mandel estendido nos permitiu encontrar equações mais simplificadas do que (5.26) e também identificar duas fórmulas de homogeneização, uma para as forças de corpo e outra para o tensor de tensão de Piola-Kirchhoff.

5.3 Modelos multiescala específicos

Até o presente momento nós trabalhamos apenas com um espaço de flutuações admissíveis ($\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$), este que é o que espaço com menos restrições cinemáticas possíveis, denominado também espaço de mínimas restrições cinemáticas. Procedendo desta maneira foi identificada a forma local do equilíbrio e condições sobre os carregamentos externos.

Podemos também pensar em tomar $\hat{\mathbf{u}}_\mu$ em um subespaço de $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$, isto é um espaço cinematicamente mais restrito. Desta forma pode-se esperar que à medida que as flutuações são mais restritas menos condições são necessárias nos carregamentos externos admissíveis bem como nas equações de equilíbrio

Consideremos apenas dois diferentes subespaços:

- (1) Modelo de deslocamento linear na fronteira:

$$\begin{aligned} {}^L\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu &:= \{\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu; \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu} = \mathbf{0}\} \\ &= \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu; \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Omega_\mu = \mathbf{0}, \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu} = \mathbf{0} \right\} \end{aligned} \quad (5.36)$$

- (2) Modelo de flutuações periódicas na fronteira:

$$\begin{aligned} {}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu &:= \{\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu; \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,+}} = \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,-}} \forall i\} \\ &= \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu; \int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Omega_\mu = \mathbf{0}, \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,+}} = \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,-}} \forall i \right\} \end{aligned} \quad (5.37)$$

onde $\Gamma_\mu^{i,+}$ e $\Gamma_\mu^{i,-}$ são fronteiras opostas tais que $\mathbf{n}_i^- = -\mathbf{n}_i^+$ e $\Gamma_\mu = \bigcup_i (\Gamma_\mu^{i,+} \cup \Gamma_\mu^{i,-})$, ver Fig. 5.3 .

Mais adiante discutiremos melhor sobre cada um destes subespaços que são relacionados pela seguinte hierarquia (como provaremos posteriormente):

$${}^L\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu \subset {}^P\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu \subset \tilde{\mathcal{H}}_u^\mu \quad (5.38)$$

Caracterizaremos as trações e forças de corpo admissíveis para cada caso. Para isto considere as relações (5.32) e (5.25), por conveniência lembradas:

$$\int_{\Gamma_\mu} \mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Gamma_\mu = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in {}^*\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu \quad (5.39)$$

$$\int_{\Omega_\mu} (\operatorname{div} \mathbf{P}_\mu + \tilde{\mathbf{b}}_\mu) \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Omega_\mu + \int_{\Gamma_\mu} (\mathbf{d} - \mathbf{P}_\mu \mathbf{n}) \cdot \hat{\mathbf{u}}_\mu \, d\Gamma_\mu = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in {}^*\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu \quad (5.40)$$

onde modificamos o espaço de flutuações para ${}^*\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu$ que pode ser ${}^L\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu$, ${}^P\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu$ ou $\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu$. Além disso, temos também escrito \mathbf{c} (das equações originais) como simplesmente $\tilde{\mathbf{b}}_\mu$ pois a inclusão da parcela constante \mathbf{b} não altera o resultado da integral.

Observamos que as duas equações acima são as únicas afetadas pela mudança do espaço de flutuações. Em contrapartida, as equações (5.23) e (5.24), implicam nas mesmas fórmulas de homogeneização para forças de corpo e e tensor de tensões.

5.3.1 Modelo de deslocamento linear na fronteira

Neste modelo anula-se a contribuição de termos de alta ordem do campo de deslocamento sobre a fronteira, ou seja, especificando (5.6) por considerar $\tilde{\mathbf{u}}_\mu = \mathbf{0}$ temos:

$$\mathbf{u}_\mu = \mathbf{u} + (\mathbf{F} - \mathbf{I})\mathbf{y} \quad \text{sobre } \Gamma_\mu \quad (5.41)$$

Como $\tilde{\mathbf{u}}_\mu = \mathbf{0}$ em Γ_μ temos $\int_{\Gamma_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu = \mathbf{0}$, então ${}^L\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu$ é um subespaço próprio de $\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu$.

Tomando ${}^*\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu = {}^L\tilde{\mathcal{H}}_u^\mu$ em (5.39) concluímos que não há restrição sobre \mathbf{d} .

Considerando agora (5.40), temos também que a integral para $(\mathbf{d} - \mathbf{P}_\mu \mathbf{n})$ arbitrário a integral do contorno se anula, então:

$$\mathbf{P}_\mu \mathbf{n} = \mathbf{t}_\mu \quad \text{sobre } \Gamma_\mu, \text{ para qualquer } \mathbf{t}_\mu \quad (5.42)$$

Novamente de (5.40), como $L\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$ não adiciona restrições no interior do corpo em relação ao espaço $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$, já sabemos que $\text{div } \mathbf{P}_\mu + \tilde{\mathbf{b}}_\mu = \bar{\mathbf{k}}$, onde $\bar{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}^{\text{nd}}$ é constante. Usando (5.42) e integrando a forma local de equilíbrio temos que $\bar{\mathbf{k}}$ deve satisfazer:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\mu} \bar{\mathbf{k}} \, d\Omega_\mu &= |\Omega_\mu| \bar{\mathbf{k}} = \int_{\Omega_\mu} \text{div } \mathbf{P}_\mu \, d\Omega_\mu + \underbrace{\int_{\Omega_\mu} \tilde{\mathbf{b}}_\mu \, d\Omega_\mu}_{=0} \\ &= \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu = \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{t}_\mu \, d\Gamma_\mu \end{aligned}$$

desta forma:

$$\text{div } \mathbf{P}_\mu + \tilde{\mathbf{b}}_\mu = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{t}_\mu \, d\Gamma_\mu \quad \text{em } \Omega_\mu \quad (5.43)$$

Observe que não temos nenhuma condição que \mathbf{b}_μ e \mathbf{t}_μ devem satisfazer.

5.3.2 Modelos de flutuações periódicas na fronteira

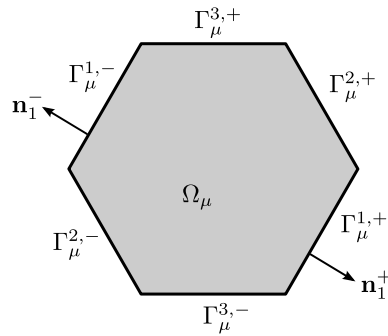


Figura 5.3: Exemplo de célula hexagonal com 3 pares de fronteiras opostas.

Neste modelo impomos periodicidade no comportamento da flutuação no deslocamento, isto é, $\tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,+}} = \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,-}} \forall i$.

Para ver que ${}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$ é de fato um subespaço de $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$ considere:

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n} d\Gamma_\mu &= \sum_i \left(\int_{\Gamma_\mu^{i,+}} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n}_i^+ d\Gamma_\mu + \int_{\Gamma_\mu^{i,-}} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n}_i^- d\Gamma_\mu \right) \\ &= \sum_i \left(\int_{\Gamma_\mu^{i,+}} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n}_i^+ d\Gamma_\mu - \int_{\Gamma_\mu^{i,-}} \tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes \mathbf{n}_i^+ d\Gamma_\mu \right) = \mathbf{0} \quad \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in {}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu\end{aligned}$$

Então ${}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu \subset \tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$. Se tomamos $\tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,+}} = \tilde{\mathbf{u}}_\mu|_{\Gamma_\mu^{i,-}} = \mathbf{0} \forall i$ recaímos no espaço ${}^L\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$, logo ${}^L\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu \subset {}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$ e todas as inclusões em (5.38) são satisfeitas.

Considere agora a equação (5.39) com ${}^*\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu = {}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$, se tomamos a tração \mathbf{d} satisfazendo a condição de antiperiodicidade $\mathbf{d}|_{\Gamma_\mu^{i,-}} = -\mathbf{d}|_{\Gamma_\mu^{i,+}}$ (notação $\mathbf{d}_i^- = -\mathbf{d}_i^+$) temos:

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma_\mu} \mathbf{d} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Gamma_\mu &= \sum_i \left(\int_{\Gamma_\mu^{i,+}} \mathbf{d}_i^+ \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Gamma_\mu + \int_{\Gamma_\mu^{i,-}} \mathbf{d}_i^- \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Gamma_\mu \right) \\ &= \sum_i \left(\int_{\Gamma_\mu^{i,+}} \mathbf{d}_i^+ \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Gamma_\mu - \int_{\Gamma_\mu^{i,-}} \mathbf{d}_i^+ \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Gamma_\mu \right) = \mathbf{0} \quad \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in {}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu\end{aligned}$$

De fato, \mathbf{d} resulta ser antiperiódico. Usando (5.40) as duas integrais devem se anular simultaneamente. Usando o fato da antiperiodicidade de \mathbf{d} e \mathbf{n} na integral do contorno fica:

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma_\mu} (\mathbf{d} - \mathbf{P}_\mu \mathbf{n}) \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Gamma_\mu &= \int_{\Gamma_\mu} (\mathbf{d} - \mathbf{t}_\mu) \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Gamma_\mu = 0 \quad \forall \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in {}^P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu \\ \Rightarrow (\mathbf{d} - \mathbf{t}_\mu)_i^- &= -(\mathbf{d} - \mathbf{t}_\mu)_i^+ \quad \forall i \\ \mathbf{d}_i^- - (\mathbf{t}_\mu)_i^- &= -\mathbf{d}_i^+ + (\mathbf{t}_\mu)_i^+ \quad \forall i\end{aligned}$$

Temos então:

$$(\mathbf{t}_\mu)_i^- = -(\mathbf{t}_\mu)_i^+ \quad \forall i \quad (5.44)$$

Nada mudou na integral com relação aos outros subespaços de tal maneira que

(5.43) também é válida. Observando que:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_\mu} \operatorname{div} \mathbf{P}_\mu \, d\Omega_\mu &= \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{P}_\mu \mathbf{n} \, d\Gamma_\mu = \int_{\Gamma_\mu} \mathbf{t}_\mu \, d\Gamma_\mu \\
&= \sum_i \left(\int_{\Gamma_\mu^{i,+}} (\mathbf{t}_\mu)_i^+ \, d\Gamma_\mu + \int_{\Gamma_\mu^{i,-}} (\mathbf{t}_\mu)_i^- \, d\Gamma_\mu \right) = \\
&= \sum_i \left(\int_{\Gamma_\mu^{i,+}} (\mathbf{t}_\mu)_i^+ \, d\Gamma_\mu - \int_{\Gamma_\mu^{i,-}} (\mathbf{t}_\mu)_i^+ \, d\Gamma_\mu \right) = \mathbf{0}
\end{aligned}$$

Usando (5.43), e tendo em consideração que a integral das trações no contorno do EVR se anula, temos finalmente que:

$$\operatorname{div} \mathbf{P}_\mu + \tilde{\mathbf{b}}_\mu = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega_\mu \quad (5.45)$$

Como esperado, chegamos a que no interior do corpo a equação de Euler-Lagrange é a mesma que no caso do espaço de mínima restrição cinemática. Na fronteira as trações devem ser antiperiódicas, que é um pouco mais geral que impor um tensor de tensão constante sobre a fronteira como acontece no caso $\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu$.

5.4 Formulação de elementos finitos

Nesta seção iremos mostrar a forma aproximada do problema micromecânico que queremos resolver, particularizando para o caso $\tilde{\mathbf{b}}_\mu = \mathbf{0}$ e subespaço de flutuações periódicas na fronteira.

Dada uma partição \mathcal{T}_μ^h da microcélula Ω_μ formada por elementos K (triângulos ou tetraedros). Definindo um espaço de dimensão finita para a flutuação dos deslocamentos temos:

$$\tilde{\mathcal{U}}_\mu^h = \left\{ \tilde{\mathbf{u}}_\mu^h \in P\tilde{\mathcal{K}}_u^\mu; (\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\mu^h)|_K \in \mathbb{P}_1 \, \forall K \in \mathcal{T}_\mu^h, i \in \{1, \dots, \text{nd}\} \right\} \quad (5.46)$$

onde aqui já particularizamos para elementos lineares mas não há alguma restrição em considerar aproximações polinômiais de mais alta ordem. Como já demonstrado nesse texto o espaço de variações virtuais é o mesmo de flutuações admissíveis,

portanto $\hat{\mathbf{u}}_\mu^h \in \tilde{\mathcal{U}}_\mu^h$. Segue abaixo a aproximação por elementos finitos do problema de equilíbrio na microescala (ver (5.45)).

Problema 7 (Formulação em elementos finitos para o problema na microescala). *Dado $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{nd \times nd}$ uma deformação macroscópica conhecida, achar $\tilde{\mathbf{u}}_\mu^h \in \tilde{\mathcal{U}}_\mu^h$ tal que:*

$$\int_{\Omega_\mu} \mathbf{P}_\mu(\mathbf{F} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu^h) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}}_\mu^h = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu^h \in \tilde{\mathcal{U}}_\mu^h \quad (5.47)$$

Visto que o problema é não-linear será necessário a linearização das equações para aplicação do método de Newton-Raphson como já foi feito no Capítulo 1. Para se assemelhar mais com a notação utilizada no Problema 3, usando (1.51) reescrevemos \mathbf{P}_μ como:

$$\mathbf{P}_\mu = \mathbf{F}_\mu \mathbf{S}_\mu \quad (5.48)$$

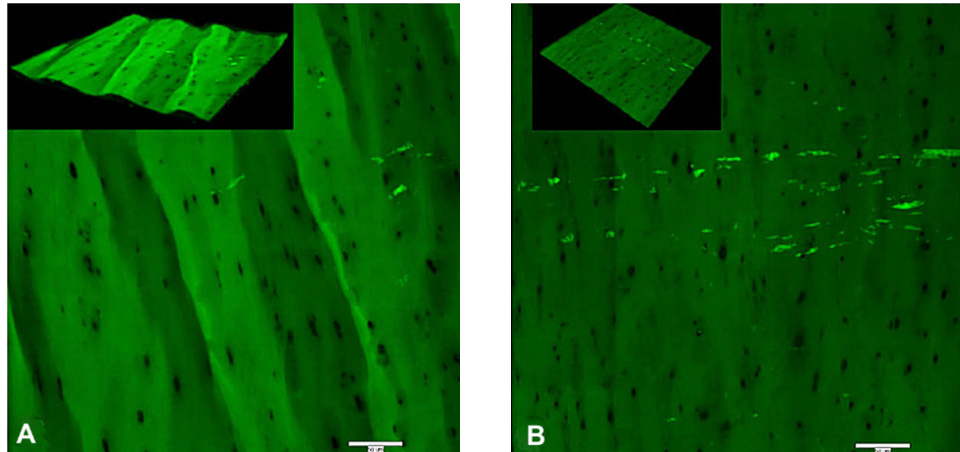
Vale salientar que $\mathbf{S}_\mu = \mathbf{S}_\mu(\mathbf{F} + \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu)$. Seguindo essas considerações o procedimento é o mesmo do Problema 3.

Nos exemplos numéricos da sequência nos focamos em células bidimensionais, no entanto fazemos uso de uma implementação tridimensional do problema, sendo a micrócelula de pequena espessura. As condições de periodicidade são impostas então nas faces ao invés das correspondentes arestas de fronteira. Nas demais faces, será imposto somente deslocamento normal nulo (na direção da terceira dimensão do problema). Estas observações modificam ligeiramente a definição do espaço de flutuações periódicas, mas nada que invalide esta abordagem.

A estratégia utilizada para garantir que as soluções aproximadas satisfaçam condições periódicas é a renumeração do nós de uma borda com a mesma numeração que a borda oposta a essa. Deste modo, para cada par de bordas opostas, apenas resolvermos da resolução do Problema 7 os graus de liberdade de uma das bordas, e em um segundo passo de cálculo é feita a cópia dos valores dos deslocamentos para a outra borda.

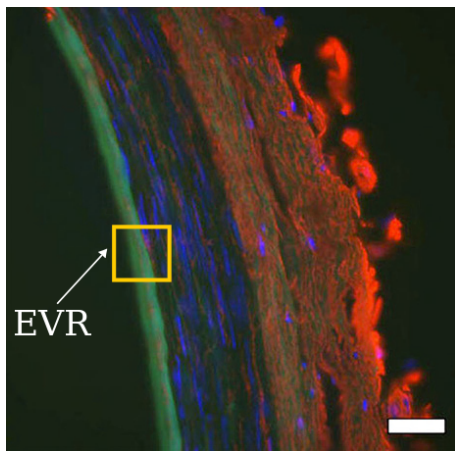
5.5 Experimentos computacionais

Como motivação aos experimentos a serem realizados considere a Fig. 5.4 retiradas de diferentes artérias cerebrais humanas. Podemos constatar a natureza porosa da camada de elastina interna (em verde), na qual tomamos um EVR segundo a Fig. 5.4(c).

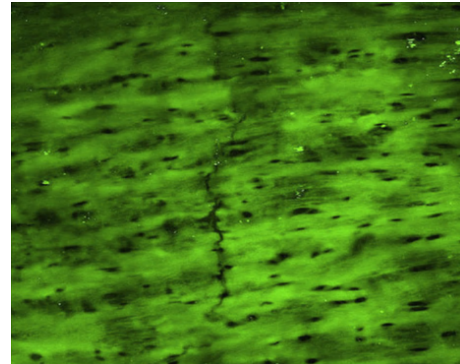


(a) Reconstrução 3D da microscopia da camada de elastina interna, sem *stretch*.

(b) Idêntico ao anterior (Fig. 5.4(a)) mas carregado com 30% de *stretch*.



(c) Microscopia fluorescente da seção transversal onde em verde é a camada de elastina interna, em azul é núcleo de células e em vermelho fibras de colágeno.



(d) Amostra com 30% de *stretch*, com a direção da trinca alinhada com a direção do carregamento.

Figura 5.4: Imagens de microscopia de artérias cerebrais humana (Robertson et al. (2012)) (barra = $50 \mu\text{m}$) .

Como já comentado, um dos motivos para termos escolhido o EVR de estudo na região da camada interna de elastina é a sua importância na formação de aneurismas como discutido em Robertson e Watton (2013). Uma segunda razão

da escolha do estudo é a relativa simplicidade da microestrutura no sentido de ser composta por apenas um material, situação ideal para que possamos testar a abordagem desenvolvida.

Em todos os experimentos computacionais mostrados as simulações serão feitas em uma microcélula bidimensional quadrada ⁴. Baseados na teoria multiescala acima desenvolvida, e utilizando a hipótese de periodicidade do campo de flutuação nas faces opostas da célula, iremos trabalhar no subespaço de flutuações periódicas. Esta postura simplifica a estratégia de implementação por elementos finitos, visto que é suficiente fazer manipulações a nível da malha para se garantir que a solução esteja no subespaço de trabalho.

Consideraremos em todos os exemplos forças de corpos nulas e a imposição de um gradiente macroscópico de deformação definido pelo stretch λ dado por :

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda^{-1} \end{bmatrix} \quad (5.49)$$

Note que automaticamente é satisfeita a condição de incompressibilidade ($\det \mathbf{F} = 1$), e como o problema é bidimensional $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$.

Perceba que da relação de homogeneização do gradiente de deformação (5.2) que nada podemos concluir sobre a incompressibilidade na microescala, isto é, se $\det \mathbf{F}_\mu = 1$ não necessariamente $\det \mathbf{F} = 1$ e vice-versa. De fato, devido a presença de poros, que são claramente compressíveis, a incompressibilidade não será (e não necessita ser) obedecida em todos os pontos da microcélula. Deste modo, consideraremos uma lei constitutiva compressiva do neo-hookeana (ver (2.29)) com termo de energia volumétrico desacoplado do tipo logaritmo (ver (2.38)). Além disso, utilizaremos uma variável de dano modelada pelo dano descontínuo (ver

⁴ Em realidade existe uma espessura na microcélula da ordem de 25 vezes menor em nossos exemplos, no qual foi imposto deslocamento normal nulos nas faces alinhadas com o plano bidimensional.

(2.51)) somente na parcela isocórica, sendo assim:

$$\Psi(\mathbf{C}, d) = \frac{\mu(1-d)}{2} (I_1(\bar{\mathbf{C}}) - 3) + \kappa(\ln J)^2 \quad (5.50)$$

Visto que estamos usando a lei compressiva, e o material é de fato um pouco compressível, a aproximação utilizada será do tipo \mathbb{P}_1 . A lei volumétrica utilizada foi a que se comportou melhor neste caso, no sentido de poder se aumentar mais o valor de κ , mas como já foi comentado, não é de nosso interesse forçar a incompressibilidade, visto que de fato não a temos na matriz porosa.

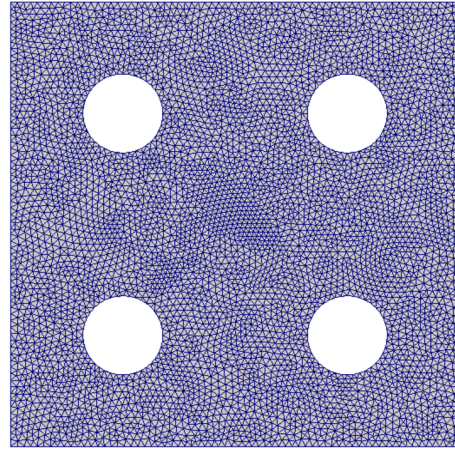
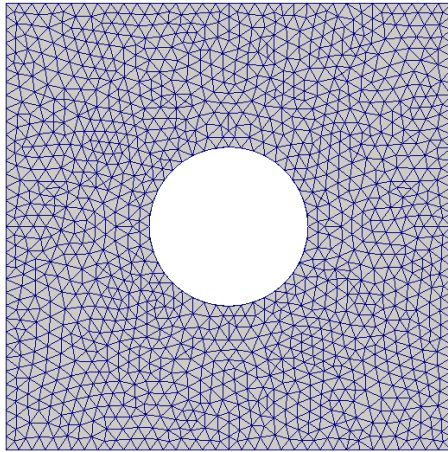
Foram utilizados valores de $\mu = 800 \text{ kPa}$, $\kappa = 5000 \text{ kPa}$, $d^\infty = 0,875$, $\beta = 150 \text{ kPa}$ sendo que os últimos dois parâmetros se referem à (2.53) onde foram omitidos os índices visto que não é considerado o modelo de dano contínuo, devido o incremento de carga ser monotônico. Além disso em (5.49) λ varia entre 1 e 1,35, o que concorda com os níveis de deformações nos quais as amostras da Fig. 5.4 estavam submetidas. Logicamente, para obtermos o fenômeno de localização nessa faixa de deformação, os valores de d^∞ e β foram cuidadosamente calibrados para isto, uma vez arbitrado os valores de μ e κ . Foi observado que o comportamento qualitativo variando-se μ (e variando na mesma proporção β) foi o mesmo, desta forma só apresentamos exemplos para estes valores acima.

Realizaremos as simulações em uma microcélula quadrada unitária 1×1 (correspondente a uma janela real de aproximadamente $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$, ver Fig. 5.4(a))⁵ e com 20 passos de incremento de deformação, apesar que em algumas simulações o material colapsa antes do fim dos incrementos, sendo o ponto plotado e/ou visualização da geometria deformada referente a este instante. Em alguns casos foram utilizados 3 tipos de refinamento de malha, que denominamos genericamente de malha grossa ($h = 0,04$), intermediária ($h = 0,02$) e fina ($h = 0,01$), ou malha A, B e C respectivamente.

⁵ As unidades de comprimento não importam, visto que estes valores serão depois divididos pelo volume (ou área). A dimensão unitária é referente o EVR com 9 poros, sendo que para subdivisões deste é mantido o tamanho do poro e diminuída a dimensão da microcélula, sendo $2/3 \times 2/3$ para o EVR de 4 poros e $1/3 \times 1/3$ para o EVR de 1 poro.

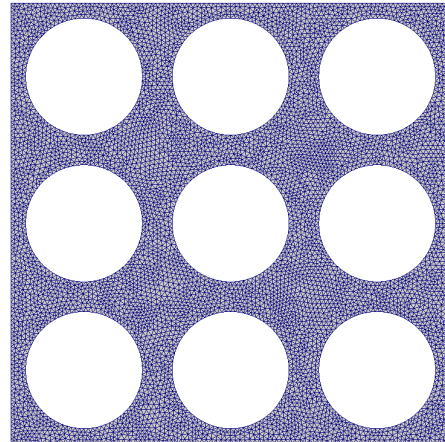
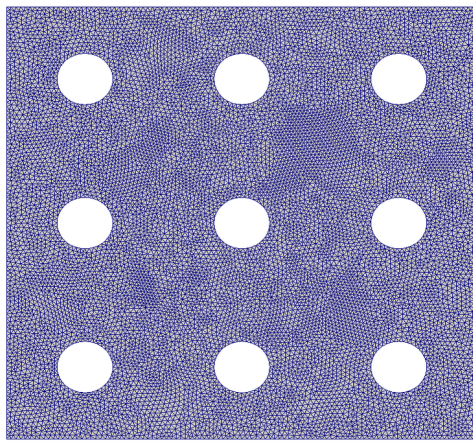
Uma vez colocadas todas estas considerações seguimos abaixo com alguns exemplos.

5.5.1 Exemplo 1 - Distribuição estruturada de poros com porosidade de 10%



(a) Malha fina (ou C) com 1 poro e porosidade 10%.

(b) Malha fina (ou C) com 4 poros e porosidade 10%.

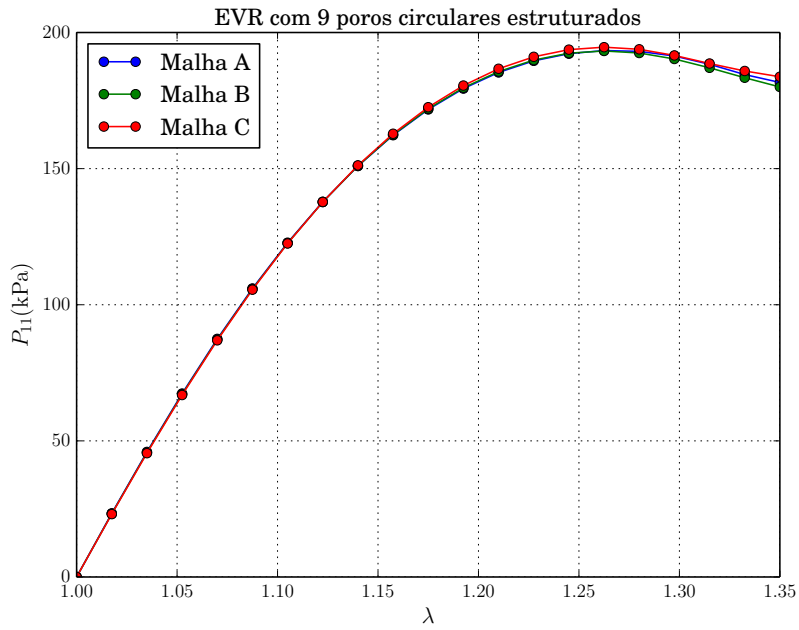


(c) Malha fina (ou C) com 9 poros e porosidade 10%.

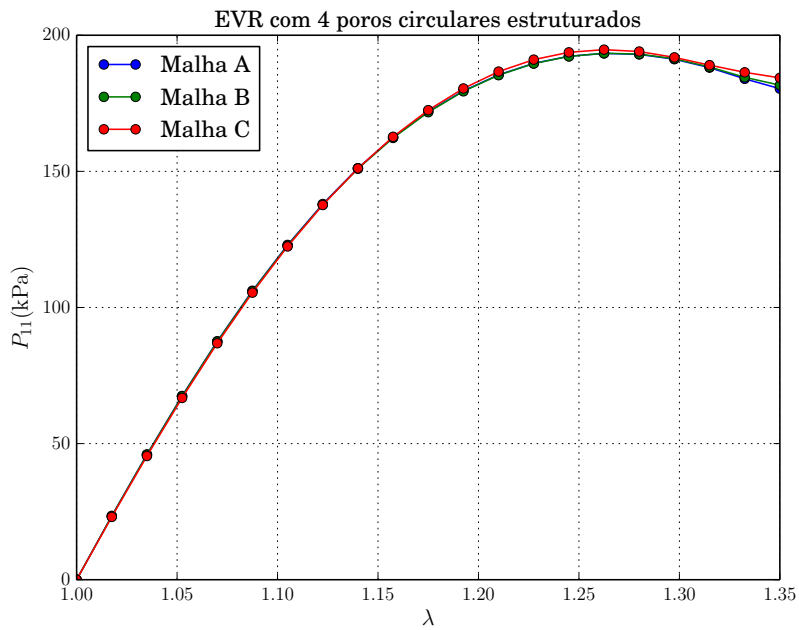
(d) Malha fina (ou C) com 9 poros e porosidade 50%.

Figura 5.5: Algumas malhas de EVR com distribuição estruturada de poros.

Primeiro utilizando um EVR com distribuição estruturada de 9 poros fizemos um estudo de sensibilidade da resposta constitutiva variando o refinamento da malha. A malha mais fina utilizada pode ser vista na Fig. 5.5(c) (Malha C com $h = 0,01$), sendo as outras duas malhas, A e B, quatro e duas vezes mais grossas



(a) 9 poros.



(b) 4 poros.

Figura 5.6: Comparação de diferentes malhas para poros estruturados com 10% de porosidade.

que a C. A curva de resposta resposta Fig. 5.6(a).

Observamos que não houve grandes variações na resposta, tendo uma certa “convergência” em relação ao sentido de resposta constitutiva para este tipo de

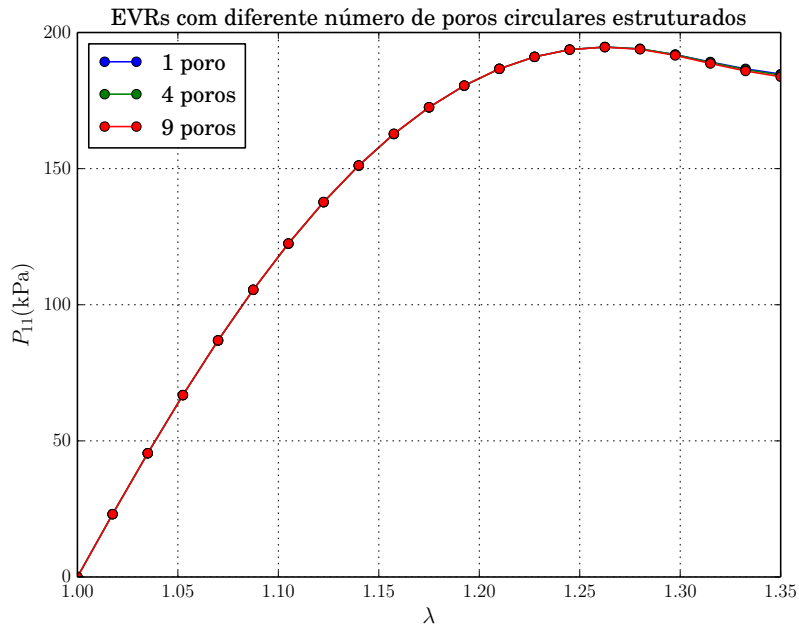


Figura 5.7: Comparação de EVRs com diferentes 1, 4 e 9 poros cada um considerado na malha mais fina e porosidade de 10%.

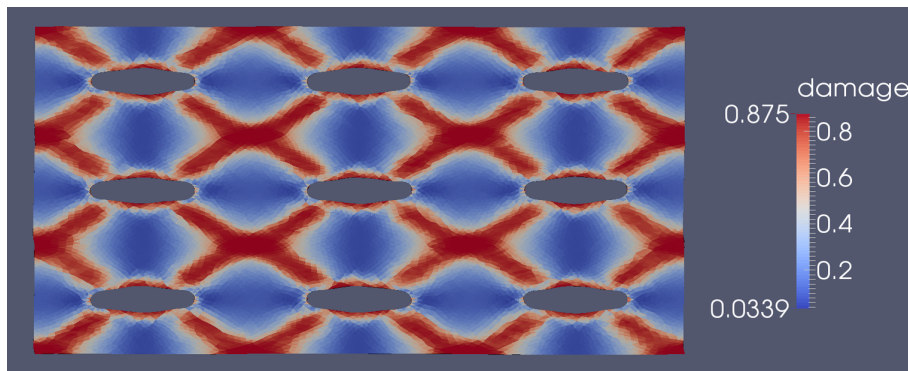


Figura 5.8: Visualização do campo de dano para o EVR de 9 poros circulares com 10% de porosidade.

célula e porosidade. Entretanto, como veremos no exemplo seguinte, isto não foi verdade quando aumentamos a porosidade da microcélula. A malha mais fina (C) permitiu maior deformação da célula e com isso uma localização mais precoce.

Como prova de conceito repetimos o mesmo teste de sensibilidade à malha para a célula de 4 poros (ver Fig. 5.5(b)), resultado semelhante pode ser visto na Fig. 5.6(b).

Um outro teste realizado foi o da sensibilidade ao número de poros do EVR. Este estudo é de extrema importância de tal forma que possamos escolher um EVR ótimo (no sentido de ter menos poros), mas que seja representativo da microestrutura da região macroscópica de interesse. Na Fig. 5.7 vemos a comparação das simulações com 1, 4 e 9 poros, cujas malhas podem ser vistas nas Figuras 5.5(a), 5.5(b) e 5.5(c) respectivamente. Os resultados no entanto, mostraram que há pouca sensibilidade da resposta ao número de poros da microcélula.

Como de maneira geral os resultados foram muito semelhantes, nos limitamos a mostrar graficamente as bandas de localização para o EVR de 9 poros com a malha C, visto na Fig. 5.8. Podemos constatar a presença de bandas de localização nas diagonais, o que nos leva a conjecturar que a distância vertical entre as células, que pela menor seção transversal seriam mais susceptíveis a falha, ainda é grande. Deste modo no próximo exemplo aumentaremos a porosidade para 50% observando este outro comportamento.

5.5.2 Exemplo 2 - Distribuição estruturada de poros com porosidade de 50%

Neste exemplo fazemos testes semelhantes aos feitos no primeiro exemplo, mas com uma porosidade de 50%. A malha para 9 poros mais fina (Malha C) pode ser vista na Fig. 5.5(d), não sendo mostrados os outros EVRs de 1 e 4 poros devido à semelhança ao caso anterior.

Na Fig. 5.9 visualizamos a sensibilidade da resposta constitutiva em relação aos diferentes refinamentos de malha. Vemos agora que houve uma expressiva diferença de resposta entre as malhas, sendo necessário maiores refinamentos até a convergência da resposta constitutiva, mas para o nosso propósito de apenas analisar a sensibilidade das curvas, isto já nos é o bastante.

Vemos na Fig. 5.11 a comparação dos resultados de simulação mostrando a geometria deformada e a visualização do campo de dano para diferentes malhas.

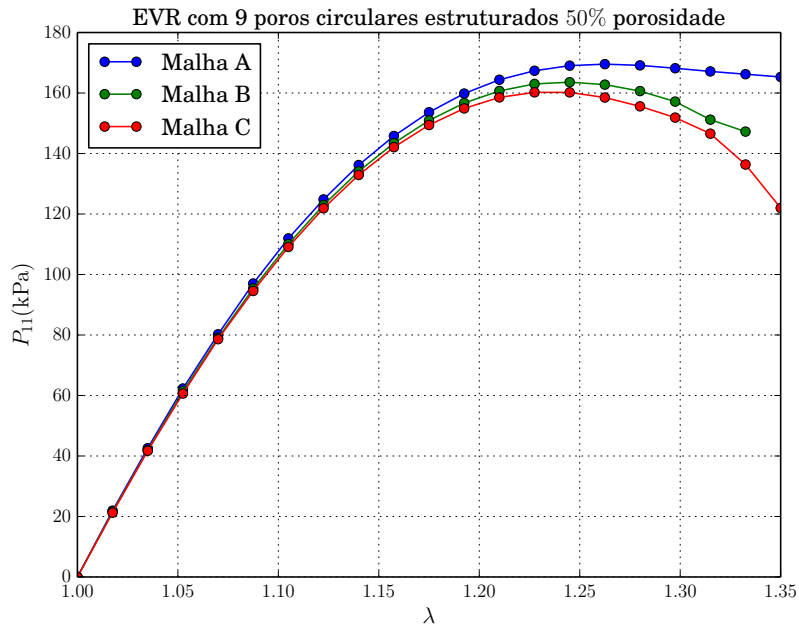


Figura 5.9: Comparação de diferentes malhas para 9 poros estruturados com 50% de porosidade.

Observamos assim a formação de bandas de localização entre os poros no sentido vertical, sendo cada vez mais marcadas a medida que a malha é refinada.

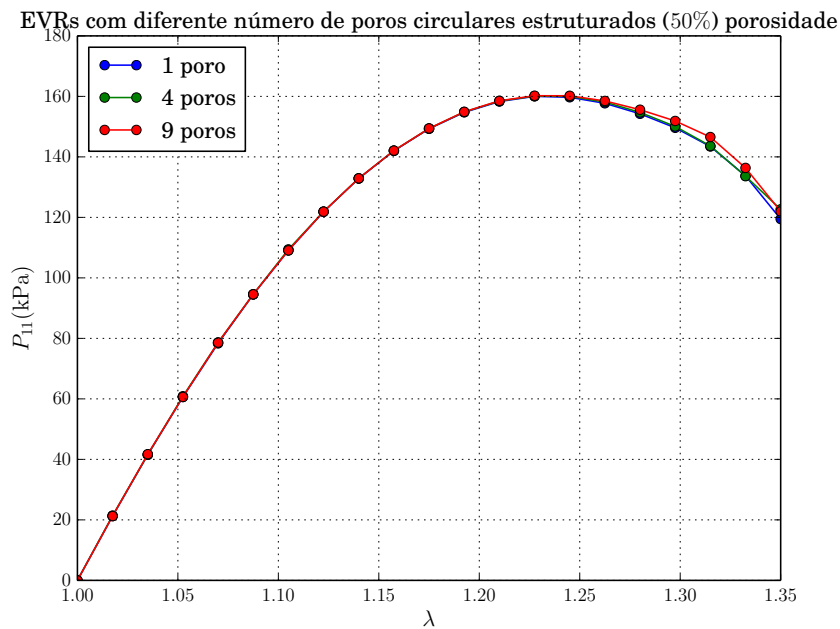
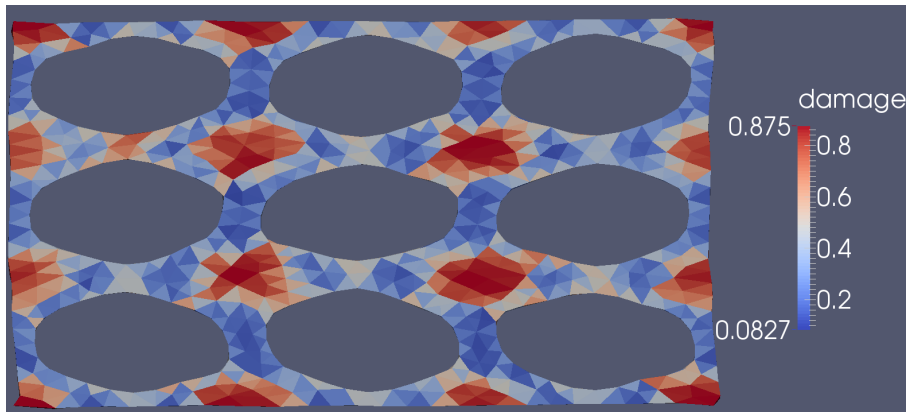
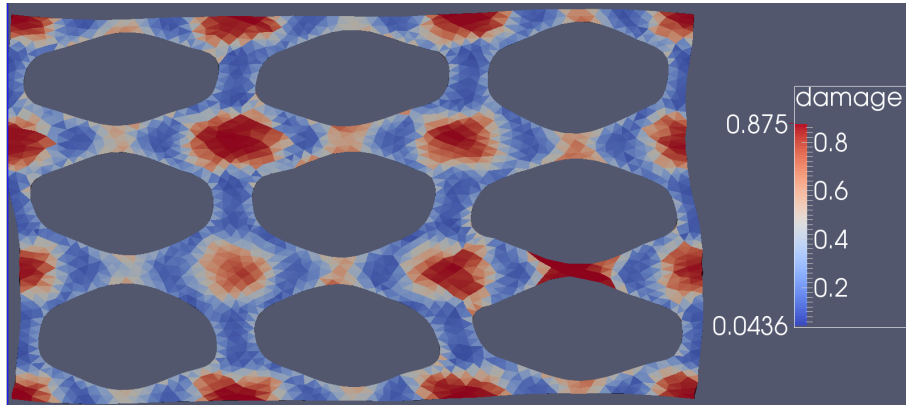


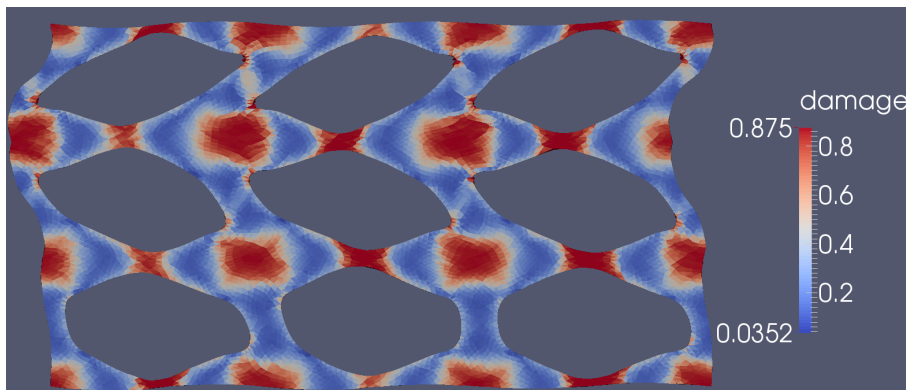
Figura 5.10: Comparação de RVEs com diferentes 1, 4 e 9 poros cada um considerado na malha mais fina e porosidade de 50%.



(a) Malha grossa (ou A).



(b) Malha intermediária (ou B).



(c) Malha fina (ou C).

Figura 5.11: Visualização do campo de dano para o EVR de 9 poros circulares com 50% de porosidade para diferentes malhas.

Para completar a análise, procedemos com a sensibilidade ao tamanho do EVR (quantidade de poros) como pode ser apreciado na Fig. 5.10. Semelhantemente com o caso de porosidade 10%, concluimos que para esta configuração a resposta constitutiva é invariante à quantidade de poros considerada no EVR.

Por fim, podemos fazer um paralelo entre o caso de 10% e 50% em relação ao formato geral das curvas tensão-estiramento. Vemos que no caso de 10% de porosidade a curva atingiu um pico na tensão pouco depois de $\lambda = 1,25$ (ver por exemplo Fig. 5.7), e no caso com porosidade 50% o pico foi adiantado para um pouco antes de $\lambda = 1,25$ (ver 5.10). A magnitude da tensão também variou, sendo que os valores são aproximadamente $P_{11} = 160$ kPa e $P_{11} = 200$ kPa, para o caso de 50% e 10% na porosidade respectivamente. Resumindo, o aumento de porosidade influencia antecipando a localização no sentido do estiramento e de tensão, conforme o esperado.

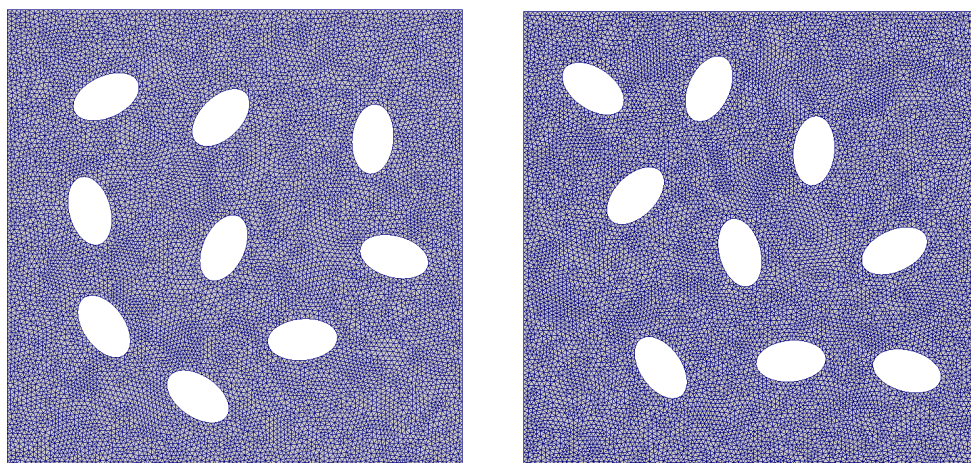
5.5.3 Exemplo 3 - Distribuição aleatória de poros com porosidade de 10%

Até então consideramos apenas EVR com distribuição estruturada de poros (em forma de grade), mas como é visto na Fig. 5.4 os poros parecem ser distribuídos de maneira não estruturada. Além disso alguns destes poros, não são de formato circular, mas sim elípticos, o que deve influenciar bastante na formação das bandas de localização devido à concentração de tensão.

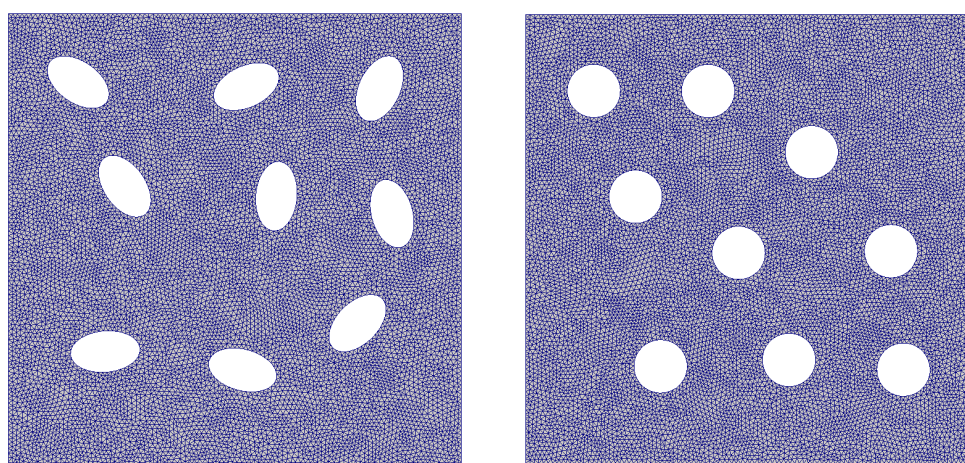
Deste modo, foram geradas 3 organizações aleatórias de poros de formato elípticos vistas nas Figuras 5.12(a), 5.12(b) e 5.12(c). Estes EVRs foram criados de forma que a posição do centro da elipse seja aleatória mas respeitando uma distância mínima de 0,25 para o centro das outras elipses, e uma distância mínima de 0,15 para a borda do EVR. Todas as elipses possuem mesmas dimensões escolhidas de forma a obedecer uma excentricidade ⁶ de 0,8 e porosidade de 10%. A inclinação também foi escolhida aleatoriamente entre 9 valores de ângulos igualmente espaçados $\{5^\circ, 45^\circ, \dots, 325^\circ\}$, de forma que não haja duas elipses com mesma inclinação.

Primeiramente, podemos ver na Fig. 5.13 a comparação das 3 respostas

⁶ A excentricidade de uma elipse é definida como a razão da distância de um dos focos da elipse ao seu centro sobre a metade do comprimento do maior eixo da elipse. Segundo esta definição, o círculo é uma elipse com excentricidade nula.



(a) Configuração 1 de poros elípticos em malha fina (ou C). (b) Configuração 2 de poros elípticos em malha fina (ou C).



(c) Configuração 3 de poros elípticos em malha fina (ou C). (d) Configuração 2 de poros circulares em malha fina (ou C).

Figura 5.12: Algumas malhas de EVR com distribuição aleatórias de poros com porosidade de 10%.

constitutivas dos EVRs aleatórios com a distribuição estruturada de 9 poros também com 10% de porosidade (a mesma do primeiro exemplo). Vemos que a curva referente aos poros estruturados majora todas as outras três, sendo que para pequenos estiramentos todos os comportamentos são semelhantes, mas começam a se distanciar a medida que o ponto do pico da tensão se aproxima (ponto de instabilidade). De maneira geral, o ponto crítico, em que ocorre a localização, também é deslocado para esquerda nos EVRs aleatórios, sendo que a magnitude da tensão máxima também é menor.

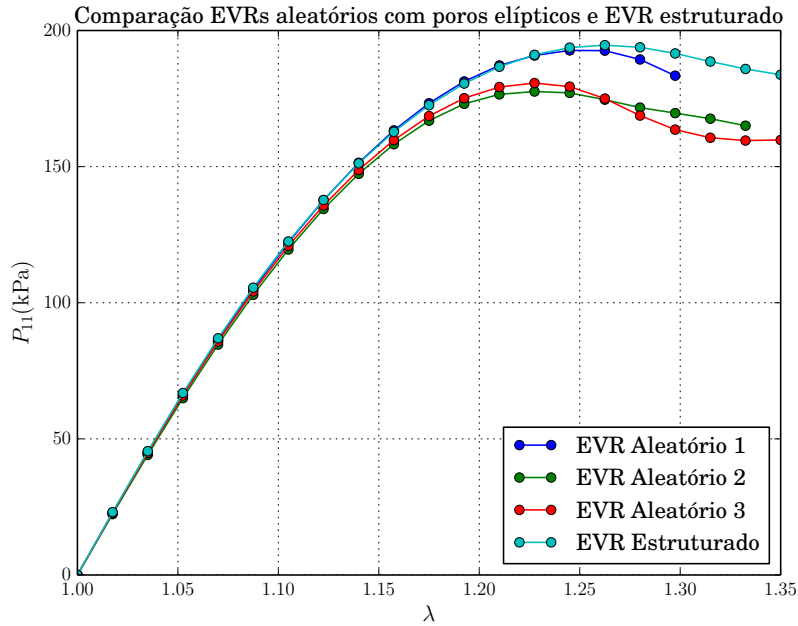


Figura 5.13: Comparação de três diferentes configurações de EVRs aleatórios e poros elípticos com um EVR estruturado (todos com 9 poros, 10% de porosidade).

Um segundo teste foi feito para estudar a sensibilidade da resposta constitutiva em relação ao formato dos poros. Foi escolhida a segunda distribuição aleatória de poros elípticos (ver Fig. 5.12(b)) substituindo elipses por círculos como visto na Fig. 5.12(d). As curvas de respostas constitutivas estão dadas na Fig. 5.14, onde pode ser observado que a curva referente ao EVR aleatório com círculos tem comportamento intermediário entre as curvas do EVR aleatório com elipses (abaixo) e a do EVR estruturado com círculos (acima). Desta maneira, é observado que uma parcela da localização é devido por uma à maior proximidade de alguns poros (se comparado com o EVR estruturado), e por outro lado à concentração de tensão proporcionado pela maior excentricidade da elipse.

Nas Figuras 5.15, 5.17(a), 5.16 e 5.17(b) são vistos os resultados de simulação EVRs de distribuição aleatórias, sendo que a última figura se trata dos poros circulares. Vemos uma clara tendência das bandas de localização iniciarem-se nas extremidades sobre o eixo principal da elipse, alastrando a banda para elipses vizinhas. É visto no EVR de distribuição aleatória tipo 3 que os poros se achatam

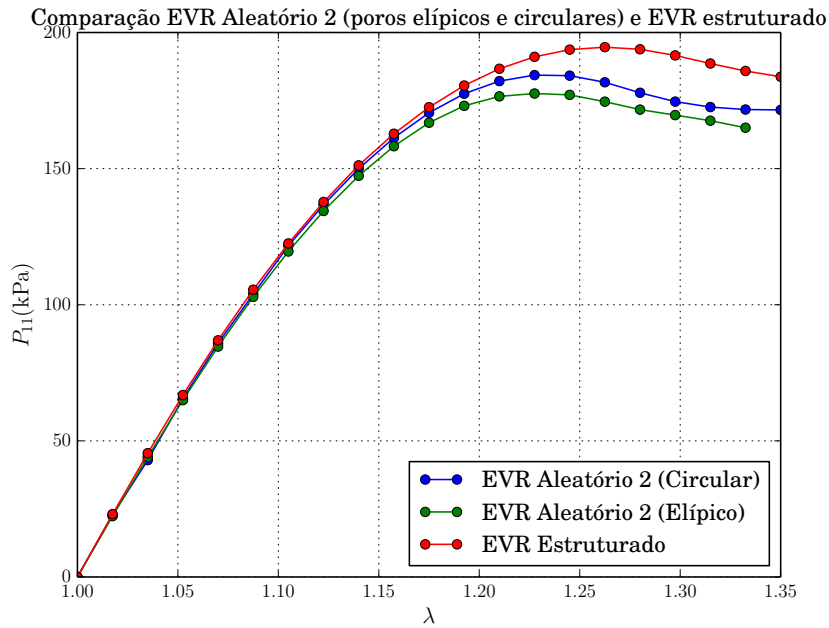


Figura 5.14: Comparação da segunda configuração aleatória de EVR com poros elípticos e circulares e o EVR estruturado, todos com 9 poros e 10% de porosidade.

até quase se tocarem, isto tem reflexo na resposta constitutiva como uma região com tensão quase constante depois de uma zona de queda da mesma (ver novamente Fig. 5.13).

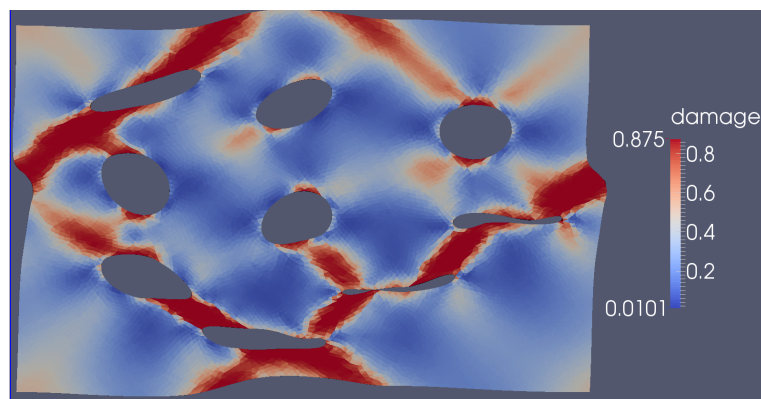


Figura 5.15: Configuração 1 de poros elípticos em malha fina (ou C).

Vale ressaltar ainda, que as análises realizadas ainda são muito simples e não pretenderam ser rigorosas do ponto de vista estatístico, sendo que nosso objetivo foi meramente qualitativo para se ter uma ideia da disparidade da resposta

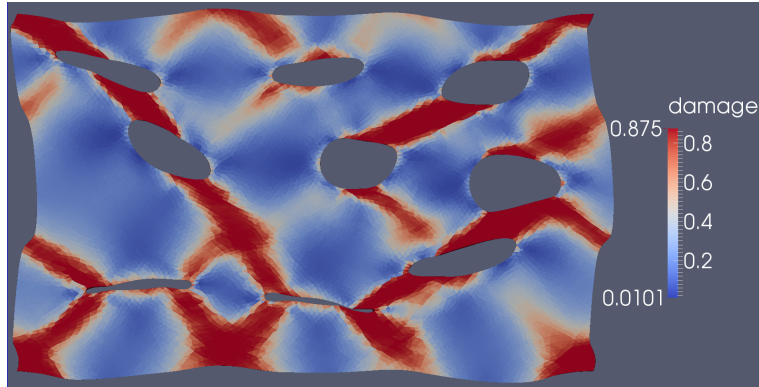
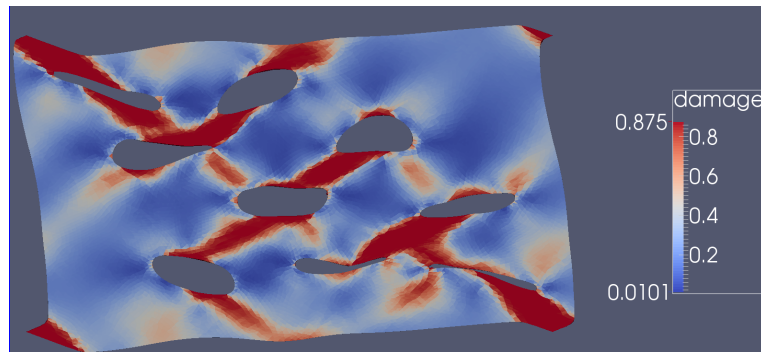
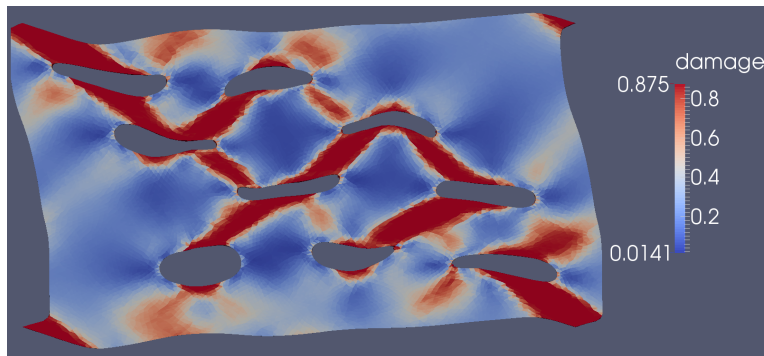


Figura 5.16: Configuração 3 de poros elípticos em malha fina (ou C).



(a) Configuração 2 de poros elípticos em malha fina (ou C).



(b) Configuração 2 de poros circulares em malha fina (ou C).

Figura 5.17: Algumas malhas de EVR com distribuição aleatória de poros com porosidade de 10%.

constitutiva de células com diferentes distribuições de poros. Para uma análise mais detalhada deste problema, mas em um contexto da plasticidade de materiais porosos, ver Bilger et al. (2005).

5.6 Considerações finais

Seguindo um procedimento sistemático de modelagem em um contexto variacional, apresentamos uma formulação para o problema de modelagem multiescala de um ponto de vista da mecânica dos sólidos em deformações finitas. Como axiomas básicos que foram postulados temos a homogeneização do vetor deslocamento e do tensor gradiente de deformação como o volume médio das quantidades microscópicas dentro do EVR, bem como uma versão estendida do princípio de Hill-Mandel para levar em consideração forças de corpo.

Com os axiomas de homogeneização, definimos o espaço de flutuações admissíveis (com mínima restrição cinemática), aonde foi postulada uma decomposição para o campo de deslocamento definido por uma tripla: deslocamento e gradiente de deformação macroscópico, bem como flutuações de deslocamento microscópico.

A versão estendida do princípio de Hill-Mandel, foi utilizada como um princípio físico de acoplamento entre escalas que nos permitiu restringir o Princípio de Potência Virtual genérico anteriormente formulado para um que seja fisicamente consistente com o cenário de multiescala. Como resultado deste pressuposto derivamos fórmulas de homogeneização para as forças do corpo e para o tensor de tensão de Piola-Kirchhoff.

Sob o ponto de vista da implementação computacional, foram discutidos os espaços de deslocamento periódico e linear, que são subespaços próprios do espaço de flutuações minimamente restrito. Como estes subespaços são mais restritos, obtivemos condições mais gerais sobre as cargas externas que resultam consistentes com o modelo cinemático.

Finalmente, nos exemplos numéricos foi feito um estudo do ensaio de tração axial (impondo o estiramento na direção axial) em um EVR da matriz porosa da elastina, sob diferentes arranjos de poros, porosidades e refinamento de malhas. Foi analisada a influência destes tais fatores na formação de bandas de localização induzidas pelo dano. Vimos que poros elípticos distribuídos aleatoriamente tendem

a ter um ponto de localização de bandas mais precoce. Isto é devido a localização de tensão na ponta de elipse bem como a maior proximidade que induzem bandas de localização nestas regiões de ligação.

Capítulo 6

Identificação do campo de dano pela geometria deformada

Neste capítulo usaremos os conceitos desenvolvidos nos capítulos anteriores para uma aplicação de interesse prático que é a inferência de propriedades mecânicas tendo como dados o conhecimento da geometria original (material) e deformada (espacial) bem como os carregamentos envolvidos. Em especial estamos interessados no campo de dano que pode ser visto como diminuição das propriedades mecânicas a partir de uma energia de deformação também assumida conhecida.

A importância do conhecimento do campo de dano no contexto da biomecânica do sistema cardiovascular pode ser notada se visualizarmos o conhecimento deste último como um indicador de risco de ruptura de um tecido (aneurisma por exemplo). Vale salientar que estamos cientes que o dano puro e simples não é o único fator responsável pela diferença da geometria de uma artéria sã para outra doente, visto que aí devem estar envolvidos fenômenos da mecanobiologia por exemplo o crescimento e o remodelamento do tecido em questão.

Contudo, a estimativa do campo de dano, e índices derivados desta informação, podem representar um avanço se comparado aos índices puramente baseados em geometria usados até o momento na prática médica para auxiliar a tomada de decisões. Tais índices que são geralmente obtidos por técnicas

de imagem (angiografia, MRI, etc) desconsideram inteiramente aspectos ligados à mecânica dos sólidos do problema, e devem ser sempre calibrados através de dados estatísticos dos pacientes afetados. Espera-se então, que com a ajuda da modelagem computacional e simulação numérica, estes novos parâmetros baseados em física possam estar melhor correlacionados com as estatísticas, resultando em mais uma informação confiável que possa ser útil à medicina, por exemplo como critério de decisão da realização de procedimentos cirúrgicos.

6.1 Descrição do problema de identificação

Primeiramente vamos descrever o problema de maneira simplificada e logo na seção seguinte (Seção 6.2) formalizaremos melhor estas ideias. Algumas notações serão adiantadas ainda nessa seção mas serão melhor compreendidas no decorrer do capítulo.

Considere um problema onde conhecemos um campo de deslocamentos e também o carregamento em que o corpo está submetido, contudo não sabemos a constituição do material. Em especial podemos até saber a lei constitutiva e coeficientes do material virgem, mas estes últimos são modificados em condições de dano. Supondo esta última forma particular de problema, queremos identificar uma única variável de dano, que chamaremos de d da mesma forma que foi denotada no Capítulo 2.

Desta forma, conhecemos o domínio não deformado (material) denotado por Ω_m que por simplicidade é submetido a um carregamento de pressão p constante. Conhecemos ainda o domínio deformado danificado denotado por Ω_s^d , de maneira que temos um campo de deslocamento \mathbf{u}_d (em descrição material) conhecido associado à esta transformação de domínio. O campo de dano correspondente ao domínio deformado danificado é a incógnita deste problema, e o chamaremos de d^* (em descrição material). O objetivo do algoritmo de identificação que será proposto é gerar uma sequência de campos de dano ($d^{(k)}$) que iterativamente convirja para d^* desconhecido. Desta maneira para cada dano $d^{(k)}$ temos o domínio deformado

$\Omega_s^{(k)}$, e consequentemente deslocamentos $\mathbf{u}^{(k)}$, correspondente ao equilíbrio do corpo submetido ao carregamento de pressão com o estado de dano em questão. Esquemáticamente este processo pode ser visto na Fig. 6.1.

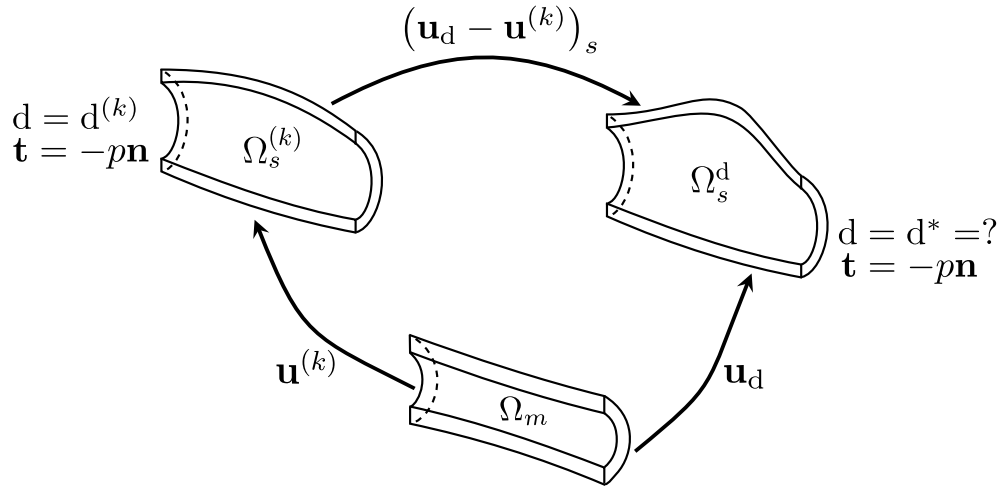


Figura 6.1: Esquema das configurações a ser identificada e do passo atual de identificação.

Vale salientar que em um problema realista a única informação da geometria que dispomos é a da superfície interna da configuração atual danificada, isto é, o contorno do endotélio da configuração com aneurisma no caso de interesse em hemodinâmica. Através de dados da literatura médica sobre a espessura da parede arterial, na região do aneurisma e fora dele, é possível estimar a configuração atual danificada já denominada de Ω_s^d . Através da estimação da linhas de centro é possível recuperar o chamado *parent vessel*, que seria a configuração espacial provável da artéria sem o aneurisma, aqui denominada de Ω_s^p . Finalmente é possível, através de um problema inverso, estimar qual seria a configuração de referência Ω_m que é levada à Ω_s^p supondo um carregamento dado. A título de ilustração mostramos esquemáticamente este processo na Fig. 6.2, lembrando contudo que esta etapa não faz parte do escopo da dissertação, consultar Ares ((em andamento) para mais informações.

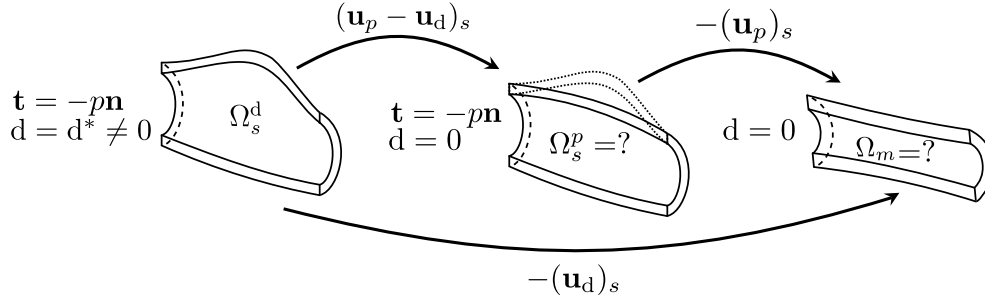


Figura 6.2: Esquema da identificação da configuração de referência a partir do *parent vessel* e da configuração danificada.

6.2 Formulação variacional do problema de identificação

Como forma de definir mais precisamente o conjunto de dano designaremos como \mathcal{D} o espaço vetorial de todas as funções definidas no domínio material e com imagem nos reais suficientemente regulares para que posteriores operações matemáticas façam sentido, isto é:

$$\mathcal{D} = \{d : \Omega_m \rightarrow \mathbb{R}; \text{ suficientemente regulares} \} \quad (6.1)$$

O dano entretanto por definição tem valores limitados de tal forma que definido o conjunto de campos de dano admissíveis ¹ como:

$$\text{Kin}_{\mathcal{D}} = \{d \in \mathcal{D}; d(\mathbf{X}) \in [0, 1] \forall \mathbf{X} \in \Omega_m \} \quad (6.2)$$

Definimos também o espaço de variações admissíveis da variável de dano da forma:

$$\text{Var}_{\mathcal{D}}(d) = \{\hat{d} \in \mathcal{D}; \hat{d} = \tilde{d} - d, \text{ onde } \tilde{d}, d \in \text{Kin}_{\mathcal{D}} \} \quad (6.3)$$

ou ainda

$$\text{Var}_{\mathcal{D}}(d) = \{\hat{d} \in \mathcal{D}; \hat{d}(\mathbf{X}) \in [-d, 1 - d] \forall \mathbf{X} \in \Omega_m \} \quad (6.4)$$

¹ Usamos aqui a mesma notação dos espaços cinematicamente admissíveis ($\text{Kin}_{(\cdot)}$), muito embora esta não seja uma variável cinemática

Perceba que o conjunto $\text{Var}_{\mathcal{D}}(\mathbf{d})$ é definido de forma dependente de um campo $\mathbf{d} \in \text{Kin}_{\mathcal{D}}$, sendo assim não-linear, o que justifica a notação com parênteses utilizada.

Desta maneira revisitamos o problema de equilíbrio mecânico, por simplicidade sem forças de corpo e somente com trações do tipo normais (pressão). Para todos os problema deste capítulo considere a partição da fronteira $\partial\Omega_m = \Gamma_m^D \cup \Gamma_m^N$ aonde são conhecidos $\mathbf{u}|_{\Gamma_m^D} = \bar{\mathbf{u}}$ e um carregamento de pressão $p_m : \Gamma_m^N \rightarrow \mathbb{R}^+$. Considere ainda a variedade linear e o espaço abaixo:

$$\text{Kin}_{\mathcal{U}} = \{\mathbf{u} \in [\mathcal{H}^1(\Omega_m)]^{nd}; \mathbf{u}|_{\Gamma_m^D} = \bar{\mathbf{u}}\} \quad (6.5)$$

$$\text{Var}_{\mathcal{U}} = \{\hat{\mathbf{u}} \in [\mathcal{H}^1(\Omega_m)]^{nd}; \hat{\mathbf{u}}|_{\Gamma_m^D} = \mathbf{0}\} \quad (6.6)$$

Segue o problema mecânico, no qual é referido como problema direto no contexto deste capítulo.

Problema 8 (Problema de equilíbrio direto). *Dados $\mathbf{d} \in \text{Kin}_{\mathcal{D}}$ ² e uma energia de deformação Ψ conhecida do material danificado, encontrar $\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$ tal que:*

$$\int_{\Omega_m} \mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{d}) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m = - \int_{\Gamma_m^N} J p_m \mathbf{F}^{-T}(\mathbf{u}) \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (6.7)$$

Onde \mathbf{P} é o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff derivado de Ψ .

Perceba que usamos a $\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{d})$ para designar :

$$\mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{d}) = \frac{\partial \Psi(\mathbf{F}(\mathbf{u}), \mathbf{d})}{\partial \mathbf{F}} = 2\mathbf{F}(\mathbf{u}) \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}(\mathbf{u}), \mathbf{d})}{\partial \mathbf{C}} \quad (6.8)$$

aonde as equações (1.51), (2.20) e (2.21) justificam a igualdade acima.

Vale lembrar que a variável \mathbf{d} modifica a energia de deformação da forma

$$\Psi(\mathbf{C}, \mathbf{d}) = (1 - \mathbf{d})\Psi_0(\mathbf{C}) \quad (6.9)$$

² É necessário um \mathbf{d} que não torne este problema mal-posto, ver texto abaixo do problema 8 para um esclarecimento melhor do tema.

onde Ψ é a energia de deformação do material com dano e Ψ^0 a energia de deformação do material virgem. É importante também ressaltar que quando se trabalha com materiais compressíveis com energia de deformação desacoplada em parcela isocórica e volumétrica, é assumido que o dano só modifica a parte isocórica, isto é:

$$\Psi(\mathbf{C}, d) = (1 - d)\Psi_0^{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) + \Psi_0^{\text{vol}}(J) \quad (6.10)$$

Sendo que no material virgem a forma desacoplada era simplesmente:

$$\Psi_0(\mathbf{C}) = \Psi_0^{\text{iso}}(\bar{\mathbf{C}}) + \Psi_0^{\text{vol}}(J) \quad (6.11)$$

É conveniente ainda definir um operador $\mathcal{R} : \mathcal{U} \times \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{U}'$ de tal forma que:

$$\langle \mathcal{R}(\mathbf{u}, d), \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\mathcal{U}' \times \mathcal{U}} = \int_{\Omega_m} \mathbf{P} \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m + \int_{\Gamma_m^N} J p_m \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N \quad (6.12)$$

onde foi deixada implícita a dependência de \mathbf{P} e \mathbf{F} com \mathbf{u} e d . Desta maneira definindo um funcional $\mathcal{G} \in (\mathcal{U} \times \mathcal{U} \times \mathcal{D}) \rightarrow \mathbb{R}$ da seguinte forma:

$$\mathcal{G}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}, d) = \langle \mathcal{R}(\mathbf{u}, d), \hat{\mathbf{u}} \rangle_{\mathcal{U}' \times \mathcal{U}} \quad (6.13)$$

temos que a equação variacional (6.7) pode ser reescrita como:

$$\mathcal{G}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}}, d) = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (6.14)$$

Uma observação importante é sobre a colocação do problema, isto é se o problema direto da forma que foi escrito é bem-posto ou não. A resposta depende do campo de dano d , pois existem casos onde o dano acumulado possa ser de tamanha magnitude que não é mais possível obter uma solução para o problema não-linear em questão, caso da ruptura por exemplo. Desta forma, o problema nem sempre é bem-posto, muito embora no escopo deste trabalho admitimos que

campo d seja tal que o Problema 8 é sempre bem-posto.

Vale ressaltar que a razão do problema direto, tal como foi apresentado, ser mal-posto está no fato que este problema, se formulado de maneira mais cuidadosa, seria um problema de evolução onde é conhecida uma história de carregamento e quer se obter a história do campo de dano e deslocamentos. Neste caso teríamos um problema de fato sempre bem posto.

O problema de equilíbrio do tipo direto é o que temos resolvido até então, sendo que a variante que considera a evolução do dano é um encadeamento de problemas diretos de equilíbrio associado às leis de incremento da variável de dano como discutido na Seção 2.4.

Estamos interessados agora em achar o campo de dano dado um campo de deslocamentos conhecido, a este problema damos o nome de problema de equilíbrio do tipo inverso, formulado como segue:

Problema 9 (Problema de equilíbrio inverso). *Dados $\mathbf{u}_d \in \text{Kin}_{\mathcal{D}}$ e uma energia de deformação Ψ conhecida do material danificado, encontrar $d^* \in \text{Kin}_{\mathcal{D}}$ tal que:*

$$\int_{\Omega_m} \mathbf{P}(\mathbf{u}_d, d^*) \cdot \nabla \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega_m = - \int_{\Gamma_m^N} J p_m \mathbf{F}^{-T}(\mathbf{u}_d) \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma_m^N \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \text{Var}_{\mathcal{D}} \quad (6.15)$$

Onde \mathbf{P} é o primeiro tensor de Piola-Kirchhoff derivado de Ψ .

Nos casos tratados neste capítulo temos garantia que o problema inverso está bem-posto pois a configuração objetivo \mathbf{u}_d é construída artificialmente como a solução de um problema direto a partir de um campo de dano conhecido d .

Em um primeiro momento não sabemos como resolver diretamente este problema inverso. Para isso propomos a substituição deste último por um problema supostamente equivalente de minimização sujeito a restrições dadas pelo problema direto. Desta forma, devemos escolher um funcional custo que quando minimizado nos retorne a solução do problema inverso. Propomos a utilização do seguinte

funcional $\mathcal{J} : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\mathcal{J}(\mathbf{u}) = \omega_1^* \frac{\int_{\Omega_m} |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}|^2 d\Omega_m}{\int_{\Omega_m} |\mathbf{u}_d|^2 d\Omega_m} + \omega_2^* \frac{\int_{\Omega_m} \Psi_0(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) d\Omega_m}{\int_{\Omega_m} \Psi_0(\mathbf{u}_d) d\Omega_m} \quad (6.16)$$

que de forma compacta fazendo uso das seguintes notações $\|(\cdot)\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_m)}^2 = \int_{\Omega_m} |(\cdot)|^2 d\Omega_m$, $|\cdot|_{\Psi_0}^2 = \int_{\Omega_m} \Psi_0((\cdot)) d\Omega_m$ ³, $\omega_1 = \frac{\omega_1^*}{\|\mathbf{u}_d\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_m)}^2}$ e $\omega_2 = \frac{\omega_2^*}{|\mathbf{u}_d|_{\Psi_0}}$ é expresso como:

$$\mathcal{J}(\mathbf{u}) = \omega_1 \|\mathbf{u}_d - \mathbf{u}\|_{\mathcal{L}^2(\Omega_m)}^2 + \omega_2 |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}|_{\Psi_0}^2 \quad (6.17)$$

A escolha deste funcional é motivada por dois aspectos. Primeiro, o objetivo final que é de recuperar a geometria de referência através da manipulação da variável de dano, portanto a norma da diferença dos deslocamentos deve ser minimizada. Em segundo lugar, como visto no Capítulo 2, o dano é acima de tudo dependente do histórico da energia de deformação do material virgem, sendo assim é natural inserir uma parcela relacionada.

É fácil ver que $\mathcal{J}(\mathbf{u}) \geq 0$, e além disso dado que $\Psi_0(\mathbf{I}) = 0$ (nulo somente neste caso) e $\mathbf{C}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_d) = (\mathbf{I} + \nabla(\mathbf{u} - \mathbf{u}_d))^T(\mathbf{I} + \nabla(\mathbf{u} - \mathbf{u}_d))$, assim:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{u}_d) &= \omega_1 \int_{\Omega_m} |\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_d|^2 d\Omega_m + \omega_2 \int_{\Omega_m} \Psi_0(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_d) d\Omega_m = \\ &= \omega_2 \int_{\Omega_m} \Psi_0((\mathbf{I} + \nabla \mathbf{0})^T(\mathbf{I} + \nabla \mathbf{0})) d\Omega_m = \omega_2 \int_{\Omega_m} \Psi_0(\mathbf{I}) d\Omega_m = 0 \end{aligned}$$

Por outro lado se $\mathbf{u} \neq \mathbf{u}_d$, $|\mathbf{u}_d - \mathbf{u}| \neq 0$ e $\Psi_0(\mathbf{C}(\mathbf{u}_d - \mathbf{u})) \neq \Psi_0(\mathbf{I}) = 0$, portanto $\mathcal{J}(\mathbf{u}) \neq 0$. Logo $\mathcal{J}(\mathbf{u})$ é nulo se e somente se $\mathbf{u} = \mathbf{u}_d$, sendo este o único ponto de

³ A notação $\Psi_0((\cdot))$ designa sem distinção $\Psi_0(\mathbf{F}((\cdot)))$ ou $\Psi_0(\mathbf{C}((\cdot)))$, de forma que a barra simples ($|\cdot|_{\Psi_0}$) foi utilizada para ressaltar que tal integral em questão não é norma pois em geral $|\cdot|_{\Psi_0} \neq |-(\cdot)|_{\Psi_0}$, muito embora o resultado desta seja sempre positivo e nulo se e somente se $(\cdot) = \mathbf{0}$. Desta maneira é diferente escolher $|\mathbf{u}_d - \mathbf{u}|_{\Psi_0}$ ou $|\mathbf{u} - \mathbf{u}_d|_{\Psi_0}$, sendo que a primeira escolha se mostrou mais estável no sentido da identificação do dano, haja vista que em geral as deformações associadas a \mathbf{u}_d são maiores que \mathbf{u} , portanto a energia de deformação correspondente é de tração ao invés de compressão.

mínimo (absoluto) do funcional, portanto:

$$\mathbf{u}_d = \arg \min_{\mathbf{u} \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}} \mathcal{J}(\mathbf{u}) \quad (6.18)$$

Formalizemos o problema de minimização na variável de dano.

Problema 10 (Problema de minimização). *Achar $d^* \in \text{Kin}_{\mathcal{D}}$ tal que:*

$$d^* = \arg \min_{d \in \text{Kin}_{\mathcal{D}}} \tilde{\mathcal{J}}(d) \quad (6.19)$$

onde $\tilde{\mathcal{J}} : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ é definido da forma $\tilde{\mathcal{J}}(d) = \mathcal{J}(\mathbf{u}(d))$ onde $\mathbf{u}(d)$ é solução do problema direto (Problema 8) com d o dano conhecido.

Temos agora que avaliar a sensibilidade do funcional $\tilde{\mathcal{J}}$ com respeito a perturbações na variável de dano, como forma de achar direções de descida para resolver o problema de minimização. Observe que $\tilde{\mathcal{J}}$ depende implicitamente do dano d através da restrição (condição subsidiária) de $\mathbf{u} = \mathbf{u}(d)$ solução do problema direto para o dano d . Como forma de relaxar esta condição subsidiária utilizaremos um funcional Lagrangiano aumentado definido da seguinte forma:

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, d) = \mathcal{G}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, d) + \mathcal{J}(\mathbf{u}) \quad (6.20)$$

Convém observar que:

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}(d), \boldsymbol{\lambda}, d) = \mathcal{G}(\mathbf{u}(d), \boldsymbol{\lambda}, d) + \mathcal{J}(\mathbf{u}(d)) = \mathcal{J}(\mathbf{u}(d)) = \tilde{\mathcal{J}}(d) \quad (6.21)$$

Note que de acordo com (6.14) \mathcal{G} se anula quando avaliado em $\mathbf{u} = \mathbf{u}(d)$, solução do problema direto de equilíbrio com dano d . Temos ainda que:

$$d\mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, d) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{u}}, \boldsymbol{\eta} \right\rangle_{\mathcal{U}' \times \mathcal{U}} + \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}}, \hat{\boldsymbol{\lambda}} \right\rangle_{\mathcal{U}' \times \mathcal{U}} + \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial d}, \hat{d} \right\rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \quad (6.22)$$

onde as variações $\boldsymbol{\eta} \in \text{Var}_{\mathcal{U}}$, $\hat{\boldsymbol{\lambda}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}}$ e $\hat{d} \in \text{Var}_{\mathcal{D}}(d)$ ⁴.

⁴ Usamos a variação $\boldsymbol{\eta}$ ao invés de $\hat{\mathbf{u}}$ para não haver confusão com as funções testes do

Calculando e anulando-se o termo da derivada na direção $\hat{\boldsymbol{\lambda}}$ temos:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}}, \hat{\boldsymbol{\lambda}} \right\rangle &= \mathcal{G}(\mathbf{u}, \hat{\boldsymbol{\lambda}}, \mathbf{d}) = \\ & \int_{\Omega_m} \mathbf{P}(\mathbf{u}, \mathbf{d}) \cdot \nabla \hat{\boldsymbol{\lambda}} \, d\Omega_m + \int_{\Gamma_m^N} J p_m \mathbf{F}^{-T}(\mathbf{u}) \mathbf{N} \cdot \hat{\boldsymbol{\lambda}} \, d\Gamma_m^N = 0 \quad \forall \hat{\boldsymbol{\lambda}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \end{aligned} \quad (6.23)$$

Ao deslocamento solução do problema acima como já comentado chamaremos de $\mathbf{u}(\mathbf{d})$ de forma que:

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}}, \hat{\boldsymbol{\lambda}} \right\rangle = 0 \quad \forall \hat{\boldsymbol{\lambda}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (6.24)$$

Observe que o cálculo da derivada de Gâteaux foi trivial visto que a equação é linear em $\boldsymbol{\lambda}$. De fato o problema recuperado é o mesmo de equilíbrio do problema direto, e já sabemos como resolvê-lo por exemplo com métodos desenvolvidos no Capítulo 1.

Prosseguindo a análise, calculamos e anulamos o termo da derivada na direção $\boldsymbol{\eta}$, tendo dessa forma uma equação variacional a ser resolvida conhecida como problema adjunto, dado abaixo:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{u}}, \boldsymbol{\eta} \right\rangle &= \int_{\Omega_m} \mathbb{D}(\mathbf{u}, \mathbf{d}) \nabla \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \boldsymbol{\lambda} \, d\Omega_m + \langle \delta^t \mathcal{R}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\eta}), \boldsymbol{\lambda} \rangle - \\ & \int_{\Omega_m} (2\omega_1(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\eta} + \omega_2 \mathbf{P}_0(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) \cdot \nabla \boldsymbol{\eta}) \, d\Omega_m = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \end{aligned} \quad (6.25)$$

$$(6.26)$$

onde o tensor de quarta ordem $\mathbb{D}(\mathbf{u}, \mathbf{d})$ é definido em (1.84) de forma intrínseca e em (1.85) indicialmente, observando que o segundo tensor de Piola-Kirchhoff utilizado é relativo a energia danificada. A expressão para o operador $\delta^t \mathcal{R}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\eta})$ é dada em (1.75) para o caso da pressão. Perceba que estas duas expressões foram desenvolvidas no Capítulo 1 no contexto da linearização das equações de equilíbrio, isto é, na resolução do problema adjunto são reaproveitadas muitas das expressões do problema de equilíbrio. Os demais termos vêm da derivada $\mathcal{J}(\mathbf{u})$ na direção

problema direto

de $\boldsymbol{\eta}$ que são calculados da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{J}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\eta}) &= \left. \frac{d}{d\tau} \mathcal{J}(\mathbf{u} + \tau \boldsymbol{\eta}) \right|_{\tau=0} = \\
& \left. \frac{d}{d\tau} \left(\omega_1 \int_{\Omega_m} (\mathbf{u}_d - \mathbf{u} - \tau \boldsymbol{\eta}, \mathbf{u}_d - \mathbf{u} - \tau \boldsymbol{\eta}) d\Omega_m + \omega_2 \int_{\Omega_m} \Psi_0(\mathbf{F}(\mathbf{u}_d - \mathbf{u} - \tau \boldsymbol{\eta})) d\Omega_m \right) \right|_{\tau=0} = \\
& - 2\omega_1 \int_{\Omega_m} (\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\eta} d\Omega_m + \omega_2 \int_{\Omega_m} \underbrace{\frac{\partial \Psi_0(\mathbf{u}_d - \mathbf{u})}{\partial \mathbf{F}}}_{\mathbf{P}_0(\mathbf{u}_d - \mathbf{u})} \cdot \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} (\mathbf{I} + \nabla(\mathbf{u}_d - \mathbf{u} - \tau \boldsymbol{\eta})) d\Omega_m = \\
& - \int_{\Omega_m} (2\omega_1 (\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\eta} + \omega_2 \mathbf{P}_0(\mathbf{u}_d - \mathbf{u}) \cdot \nabla \boldsymbol{\eta}) d\Omega_m
\end{aligned}$$

Após a resolução do problema adjunto utilizando $\mathbf{u} = \mathbf{u}(d)$ solução do problema de equilíbrio (6.24), obtemos a solução $\boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}}$, de forma que:

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{u}}, \boldsymbol{\eta} \right\rangle \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}(d)} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \text{Var}_{\mathcal{U}} \quad (6.27)$$

Perceba que a equação adjunta define uma variável $\boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}}$ que está associada ao “erro” dado pelo funcional custo. De fato, quando $\mathbf{u} = \mathbf{u}_d$ então $\boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}} = \mathbf{0}$ o que implica que $\tilde{\mathcal{J}}$ (6.16) é nulo, o que por sua vez implica que temos alcançado um mínimo.

Note que o problema adjunto é linear, constituindo portanto um cálculo, comparativamente com a solução do problema de equilíbrio que é não-linear, pouco custoso computacionalmente. Usando as equações (6.21), (6.22), (6.24) e (6.27) temos finalmente que:

$$\delta \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, d) \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}(d), \boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}}} = \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial d}, \hat{d} \right\rangle \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}(d), \boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}}} = \delta \tilde{\mathcal{J}}(d, \hat{d}) \quad (6.28)$$

Temos então analiticamente a sensibilidade do funcional $\tilde{\mathcal{J}}$ com respeito a perturbações \hat{d} , que é dado explicitamente por:

$$\begin{aligned}
\delta \tilde{\mathcal{J}}(d, \hat{d}) &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial d}, \hat{d} \right\rangle \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}(d), \boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}}} = \\
&= - \int_{\Omega_m} \hat{d} \mathbf{P}_0^{\text{iso}}(\mathbf{u}(d)) \cdot \nabla \boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}} d\Omega_m \quad (6.29)
\end{aligned}$$

A fórmula acima é válida se (6.10) é usada. Se ao invés disso, caso (6.9) for válida no lugar de $\mathbf{P}_0^{\text{iso}}$ deve-se modificar para \mathbf{P}_0 , isto é, somente a parcela do tensor de Piola-Kirchhoff derivado da parte isocórica da energia de deformação.

Note que particularmente para a solução numérica por elementos finitos, é possível tomar uma variação $\hat{\mathbf{d}}$ tal que seja não nula somente em um elemento, temos então através de um simples cálculo de pós-processamento uma estimativa da variação de Gâteaux do funcional $\tilde{\mathcal{J}}$ elemento a elemento. Isto tem extrema importância prática que ficará claro quando apresentarmos o algoritmo de minimização na seção seguinte.

6.3 Algoritmo de minimização

Na seção anterior obtemos uma expressão de como se avaliar a sensibilidade de $\tilde{\mathcal{J}}$, funcional este que objetivamos minimizar. Como comentado anteriormente, há uma certa liberdade na escolha $\hat{\mathbf{d}}$ que fica claro ao observar a definição alternativa do conjunto $\text{Var}_{\mathcal{D}}$ dado em (6.4). Esta flexibilidade pode ser usada para controlar a “velocidade” com que a identificação do campo de dano progride, visto que é essencial na convergência do método de Newton-Raphson em um problema de elasticidade não-linear que não ocorram variações bruscas de propriedades mecânicas (ou de carregamentos).

Em problemas onde há regiões extremamente danificadas (dano próximo ao unitário) o controle da “velocidade” da identificação é ainda mais importante pois o material pode estar em uma situação próxima a falha, o que exige um modelo mais sofisticado do ponto de vista da mecânica dos sólidos, sendo o modelo aqui descrito inadequado para representar tais fenômenos.

Visto que temos realizado somente o cálculo da sensibilidade de primeira ordem do funcional $\tilde{\mathcal{J}}$ (primeira variação de Gâteaux) não é possível utilizar métodos do tipo Newton, no qual necessitaríamos alguma estimativa da Hessiana (derivadas segundas). Dado que a avaliação do funcional $\tilde{\mathcal{J}}$ é custosa (envolve o problema não-linear de equilíbrio) não realizaremos estratégias de busca linear.

Analisemos a seguinte expansão de primeira ordem:

$$\tilde{\mathcal{J}}(d + \tau \hat{d}) = \tilde{\mathcal{J}}(d) + \tau \delta \tilde{\mathcal{J}}(d, \hat{d}) + \mathcal{O}(\tau \hat{d}) \quad (6.30)$$

Se temos termos $\tau \hat{d}$ suficientemente pequenos de forma que $\mathcal{O}(\tau \hat{d})$ seja pouco importante, a escolha de um \hat{d} tal que $\delta \tilde{\mathcal{J}}(d, \hat{d}) \leq 0$ garante que \hat{d} é direção de descida de $\tilde{\mathcal{J}}$, isto é, é satisfeita a relação:

$$\tilde{\mathcal{J}}(d + \tau \hat{d}) \leq \tilde{\mathcal{J}}(d) \quad (6.31)$$

Considerando uma malha de elementos finitos \mathcal{T}^h formada com elementos K e definindo a notação,

$$\mathcal{I}|_K = \int_{\Omega_m^K} \mathbf{P}_0^{\text{iso}}(\mathbf{u}(d)) \cdot \nabla \boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}} \, d\Omega_m^K \quad (6.32)$$

reescrevemos (6.29) considerando $\hat{d} \in \text{Var}_{\mathcal{D}}$ constante por elementos onde $\hat{d}|_K$ denota a restrição de \hat{d} em um elemento $K \in \mathcal{T}^h$.

$$\delta \tilde{\mathcal{J}}(d, \hat{d}) \approx - \sum_{K \in \mathcal{T}^h} \hat{d}|_K \mathcal{I}|_K \quad (6.33)$$

Uma condição suficiente para se ter uma direção de descida (além de variações pequenas) é tomar $\hat{d}|_K$ do mesmo sinal que $\mathcal{I}|_K$. Como forma de garantir que $\hat{d} \in \text{Var}_{\mathcal{D}}$, da definição alternativa de $\text{Var}_{\mathcal{D}}$ dada em (6.4) temos que $\hat{d}|_K \in [-d|_K, 1 - d|_K] \forall K \in \mathcal{T}^h$, sendo assim propomos tomar uma ponderação dos extremos deste intervalo da seguinte forma:

$$\hat{d}|_K = \begin{cases} \gamma_K(1 - d) & \text{se } \mathcal{I}|_K > 0 \\ -\gamma_K d & \text{se } \mathcal{I}|_K < 0 \\ 0 & \text{se } \mathcal{I}|_K = 0 \end{cases} \quad (6.34)$$

onde $\gamma_K \in [0, 1]$ é um fator de amortecimento da velocidade da progressão (ou

diminuição) do dano. Pode-se fixar o valor de γ_K igual para todos os elementos ou em um caso geral tomá-lo como uma função de alguma medida de interesse como por exemplo $\gamma_K = \gamma_K(|\mathcal{I}|_K)$. Note que campo de variação do dano é então composto da seguinte forma:

$$\hat{d} = \sum_{K \in \mathcal{T}^h} \hat{d}|_K \quad (6.35)$$

onde a notação $(\cdot)|_K$ é assumida ter extensão nula, isto é $\text{Supp}(\hat{d}|_K) = K$. O incremento na variável de dano em uma iteração n é dado por:

$$\Delta d^{(n)}|_K = \tau^{(n)} \hat{d}^{(n)}|_K \quad (6.36)$$

Vale observar que o valor de $\tau^{(n)}$ é escolhido de forma a ser pequeno perto da convergência, podendo ser por exemplo função do funcional custo.

Este incremento será usado para atualizar a variável de dano no próximo passo de cálculo, de acordo com o Problema 11 a ser mostrado adiante.

6.3.1 Processo iterativo de minimização

Segue abaixo em forma de algoritmo o problema de minimização que se deve resolver.

Problema 11 (Processo iterativo de minimização). *Dados $\mathbf{u}_d \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$ e $d^{(0)} \in \text{Kin}_{\mathcal{D}}$ uma condição inicial, construímos uma sequência $(d^{(n)})$ de tal forma que $\tilde{\mathcal{J}}(d^{(n)}) \rightarrow \tilde{\mathcal{J}}(d^*) = 0$, onde d^* é solução do Problema 10, resolvendo a cada passo $n = 0, 1, \dots$ a seguinte sequência de problemas:*

(1) Achar $\mathbf{u}(d^{(n)}) \in \text{Kin}_{\mathcal{U}}$ tal que

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\lambda}}, \hat{\boldsymbol{\lambda}} \right\rangle = 0 \quad \forall \hat{\boldsymbol{\lambda}} \in \text{Var}_{\mathcal{U}}$$

(2) Achar $\boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}}^{(n)} \in \text{Var}_{\mathcal{U}}$ tal que

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{u}}, \boldsymbol{\eta} \right\rangle \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}(\mathbf{d}^{(n)})} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \text{Var}_{\mathcal{U}}$$

(3) Avaliar $\mathcal{I}_K^{(n)}$ segundo:

$$\mathcal{I}_K^{(n)} = \int_{\Omega_m^K} \mathbf{P}_0^{\text{iso}}(\mathbf{u}(\mathbf{d}^{(n)})) \cdot \nabla \boldsymbol{\lambda}_{\text{adj}}^{(n)} \, d\Omega_m^K$$

(4) Avaliar $\Delta \mathbf{d}^{(n)}|_K$ segundo (6.36) e incrementar o dano:

$$\mathbf{d}^{(n+1)}|_K = \mathbf{d}^{(n)}|_K + \Delta \mathbf{d}^{(n)}|_K \quad \forall K \in \mathcal{T}^h \quad (6.37)$$

Repetir o processo até que $\left| \frac{\tilde{\mathcal{J}}(\mathbf{d}^{(n+1)}) - \tilde{\mathcal{J}}(\mathbf{d}^{(n)})}{\tilde{\mathcal{J}}(\mathbf{d}^{(n+1)})} \right| < \text{tol}$, onde tol é uma tolerância especificada.

Apesar do dano poder ter valores unitários em princípio, para garantir que o problema é bem posto assim como para ter um bom comportamento numérico, é necessário limitá-lo a um certo valor $\text{maxD} < 1$. Acima disto, devido a danos extremamente elevado teríamos deformações excessivas na malha de elementos finitos.

É interessante ainda limitar o incremento máximo do dano elementar $|\Delta \mathbf{d}^{(n)}|_K| < \text{maxDeltaD}$, onde maxDeltaD é em geral menor do 50% de maxD .

6.4 Exemplo Numérico

Considere uma placa circular de raio $R_e = 10$ mm de altura $H = 0,75$ mm danificada de acordo com o gráfico mostrado na Fig. 6.3(a). O modelo do material utilizado foi do tipo Mooney-Rivlin com constantes $c_1 = 100$ kPa, $c_2 = 50$ kPa e com coeficiente da energia volumétrica $\kappa = 1000$ kPa em todo o domínio. O carregamento foi do tipo de pressão em uma das faces circulares, com magnitude de $p = 5$ kPa. A placa é engastada na superfície cilíndrica externa ($r = R_e$).

Devido à simetria do problema, é considerado apenas um quarto da placa, sendo impostas condições de deslocamento normal nulo em cada um dos lados resultantes do corte. Foi assumido um comprimento característico de malha variando de $h = 0,125$ (6 elementos na espessura) no centro da placa até $h = 0,625$ na borda circular. A malha é composta por tetraedros lineares e o espaço de aproximação utilizado foi \mathbb{P}_1 (formulação de um campo). As geometrias das malhas podem ser vistas nas Figuras 6.3(b), 6.3(c) e 6.3(d).

Os parâmetros de controle numérico para a evolução do dano utilizados foram $\max D = 0,965$, $\max \Delta D = 0,1$. Escolheremos $\tau^{(n)}$ da seguinte forma:

$$\tau^{(n)} = \xi \mathcal{J}(\mathbf{u}^{(n-1)}) \quad (6.38)$$

De forma que os incrementos de dano sejam cada vez menores. Faremos dois testes com os parâmetros a seguir:

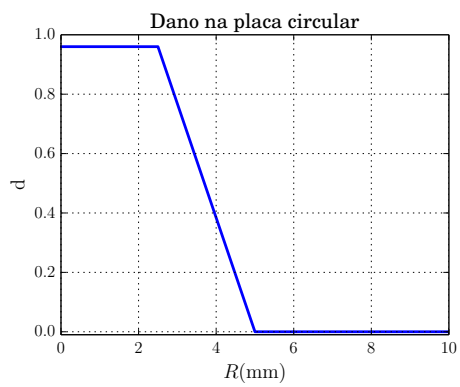
- **Caso 1:** $\omega_1^* = 1, \omega_2^* = 0, \xi = 10, \gamma = 0,7$
- **Caso 2:** $\omega_1^* = 0,5, \omega_2^* = 0,5, \xi = 1,4, \gamma = 0,7$

Onde ξ foi escolhido em cada caso de forma a obter $\tau^{(1)} \approx 1$. Os resultados do algoritmo considerando $\omega_1 = 0, \omega_2 = 1$ não são mostrados aqui, pois são bem aquém dos outros resultados.

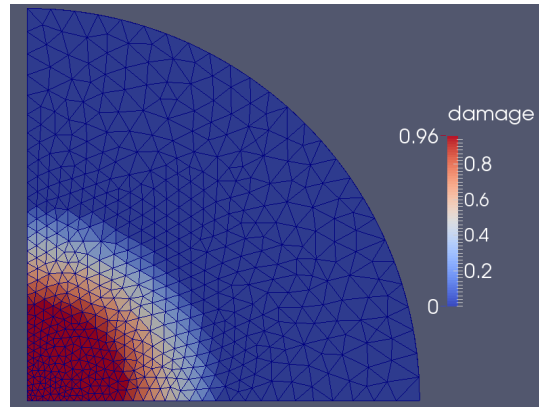
Na Fig. 6.4(a) é comparado o processo iterativo de minimização dos casos considerados segundo o valor do funcional normalizado pelo valor inicial do mesmo. Por outro lado, na Fig. 6.4(b) é comparado um índice de medida da diferença dos campos de dano (também normalizado pelo valor inicial do mesmo) dado abaixo:

$$\mathcal{I}_d = \int_{\Omega_m} (d - d^*)^2 d\Omega_m \quad (6.39)$$

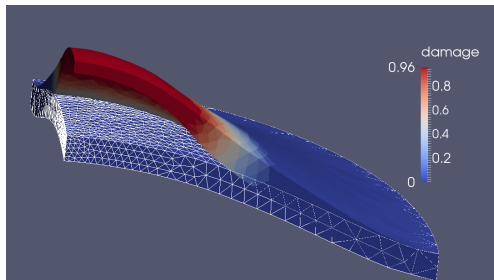
Vemos uma leve melhora na identificação do campo de dano ao se adicionar o termo de energia no funcional. Em relação somente ao valor do funcional, adição do termo da energia torna mais lenta a identificação nas primeiras iterações,



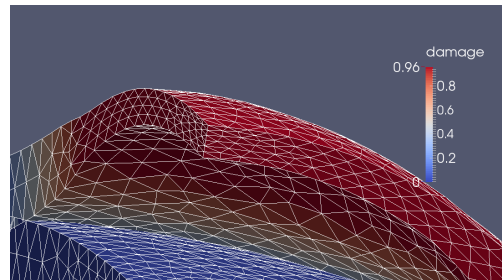
(a) Dano de referência em função do raio.



(b) Vista de cima da malha de um quarto da placa não deformada.

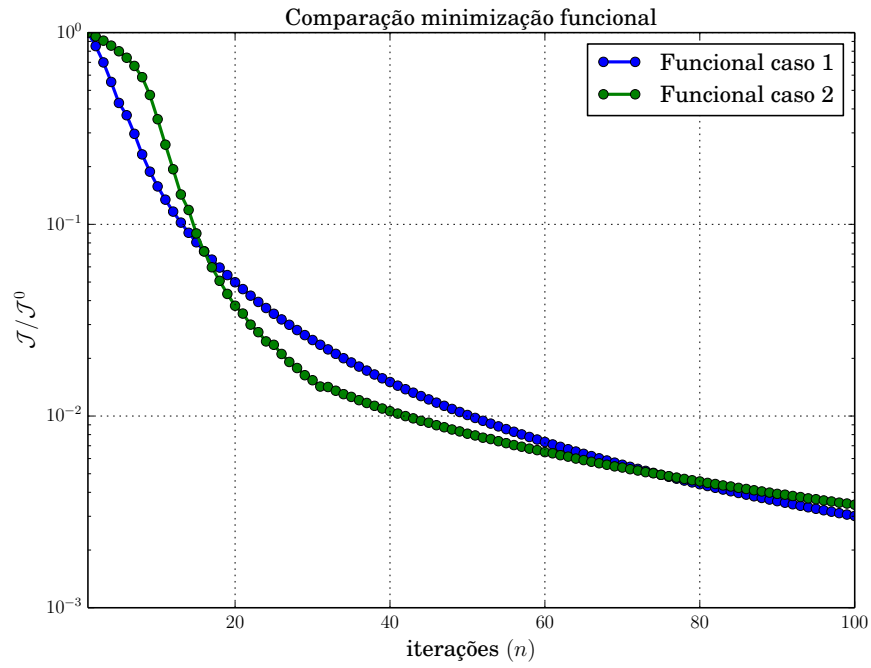


(c) Comparação da geometria deformada danificada e não danificada.

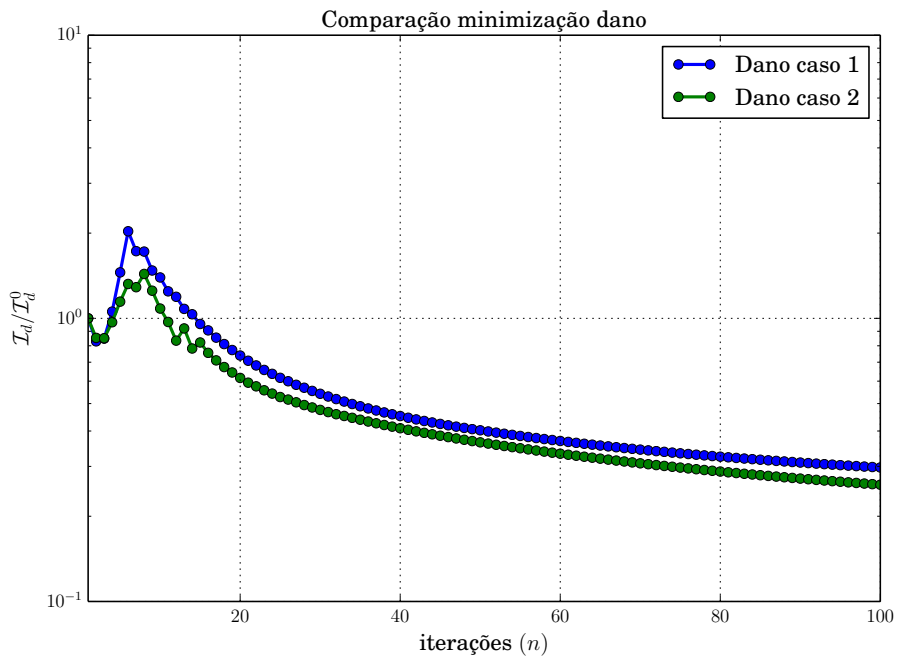


(d) Detalhe da malha danificada no centro da placa.

Figura 6.3: Imagens da placa danificada.



(a) Minimiza o do Funcional.



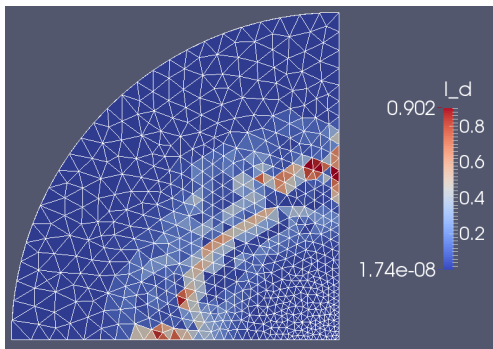
(b) Minimiza o da dist ncia entre os campos de dano.

Figura 6.4: Compara o da processo de minimiza o.

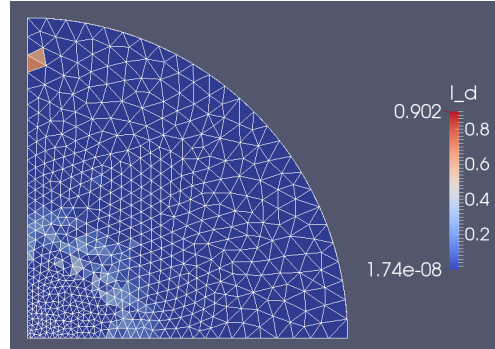
muito embora o algoritmo consiga se recuperar depois, tornando-o praticamente equivalente ao caso do funcional considerando a diferença do deslocamento somente.

Na Fig. 6.5 vemos a comparação do erro quadrático do dano em cada elemento. Concordando com a análise dos gráficos anteriores vemos novamente que o caso 2 se demonstrou mais eficiente na identificação do campo de dano. Vemos ainda que na face inferior (aonde é aplicada a pressão) a identificação do dano é menos precisa. Embora as diferenças entre os campos de dano sejam considerada pequenas, isto é principalmente devido ao fato que processo iterativo fez identificação espúrias em elementos isolados da malha. Foi ainda observado que a inclusão da parcela da energia de deformação no funcional amenizou o problema com os pontos espúrios de identificação além de acelerar o procedimento de identificação em trechos iniciais do mesmo.

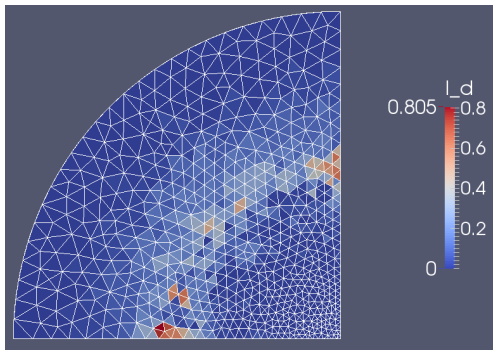
Finalmente na Fig. 6.6 vemos as comparações das geometrias deformadas, aonde a geometria plotada em *wireframe* é a geometria deformada de referência. Vemos que no caso 2 a geometria deformada é mais próxima da geometria de referência danificada que a do caso 1 (em relação ao deslocamento no centro da placa), muito embora na comparação vista na Fig. 6.4(a) o valor do funcional custo na última iteração seja menor no caso 1 que no caso 2. Vale observar que no caso 2 leva-se em conta a parcela da diferença da energia de deformação o que neste caso levou a um maior funcional custo (relativo ao funcional custo inicial) mesmo com uma geometria visualmente mais próxima.



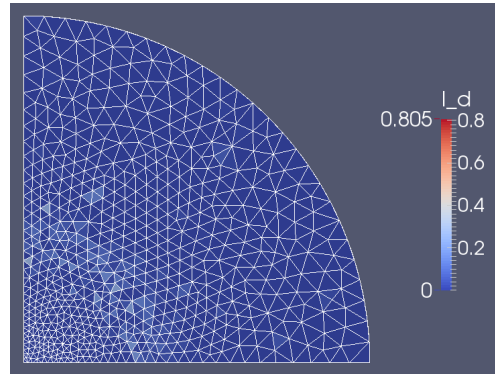
(a) Caso 1 vista de baixo.



(b) Caso 1 vista de cima.

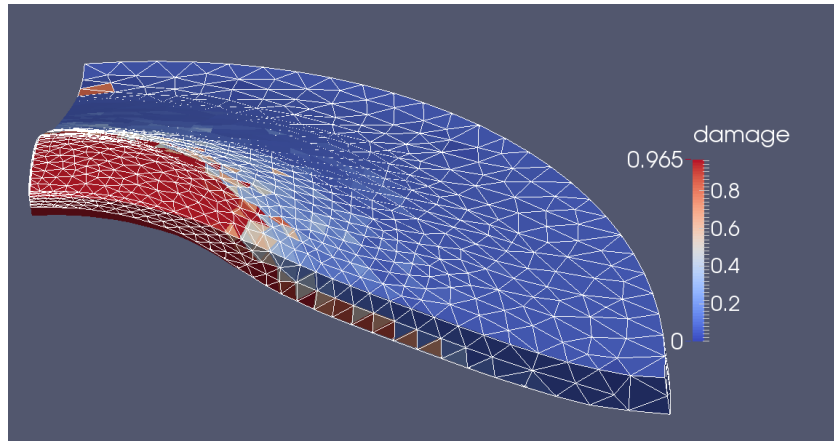


(c) Caso 2 vista de baixo.

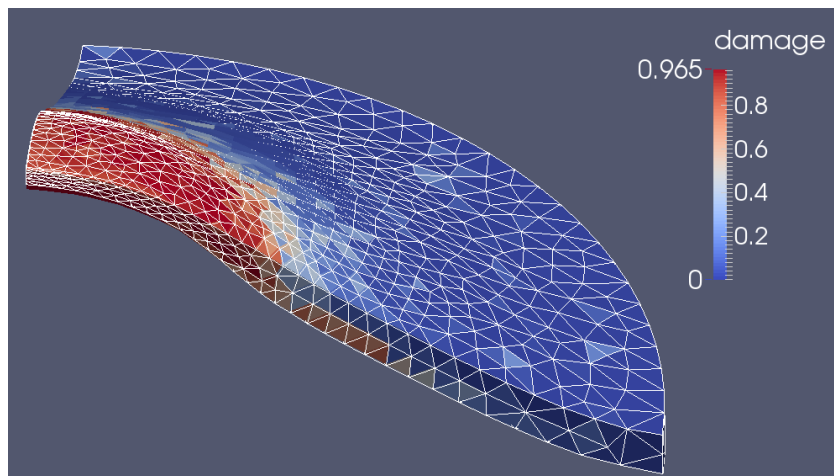


(d) Caso 2 vista de cima.

Figura 6.5: Erro no campo de dano na última iteração.



(a) Caso 1.



(b) Caso 2.

Figura 6.6: Comparação das geometrias deformadas com o dano identificado na ultima iteração com a geometria danificada de referência (em *wireframe*).

Considerações Finais

Neste trabalho primeiramente foram desenvolvidas as equações básicas da mecânica dos sólidos não-linear, desde as definições básicas da cinemática de grandes deformações até a formulação variacional do equilíbrio mecânico através do princípio de potências virtuais. Uma atenção especial foi dada para a modelagem da incompressibilidade, levando a uma formulação mista além daquela de um campo que também é considerada. Foi mostrada ainda linearização dos princípios variacionais visando a posterior resolução numérica.

Foram apresentados os aspectos básicos da teoria constitutiva clássica (fenomenológica) com ênfase nos conceitos úteis para as aplicações em biomecânica, tal como as leis hiperelásticas. Destaque especial foi dado para a modelagem da degradação dos materiais através da variável contínua de dano, que foi ingrediente básico para dois capítulos finais de aplicação. Ainda neste contexto, foram derivadas formas analíticas para os tensores de Piola-Kirchhoff e tangente constitutiva para leis isotrópicas na forma de invariantes sendo ainda considerada a extensão para leis do tipo transversalmente isotrópicas, sendo esta uma forma alternativa exata ao cálculo aproximado por diferenças finitas.

Foram realizados dois estudos computacionais para validar a implementação dos conceitos teóricos de base. No primeiro estudo foram testados diferentes combinações de espaços e formulações para um caso simples de um cilindro incompressível com simetria de revolução com diferentes pré-*stretches* aonde conhecemos uma solução semianalítica, sendo este um modelo simplificado para uma artéria carótida humana. Foi concluído que a formulação mista com combinação de espaços $\mathbb{P}_2/\mathbb{P}_1$ foi a que se comportou melhor pois aproximou

bem a solução semianalítica, no sentido do deslocamento da parede interna do cilindro, além de resultar em um campo de pressão livre de oscilações espúrias. A combinação $\mathbb{P}_{1,b}/\mathbb{P}_1$ em contrapartida apresentou oscilações espúrias na pressão. As combinações de um campo (compressíveis) mesmo para um coeficiente de energia volumétrica elevados, até antes de um ponto onde o condicionamento é inteiramente comprometido, apresentaram pequenos desvios em relação a solução de referência. Em um segundo estudo foram avaliadas e validadas as implementações dos modelos de dano tomando como referência a solução semianalítica adaptada para a incorporação do dano. Vale ressaltar que este último estudo se mostrou de fundamental importância para o entendimento do comportamento físico dos mecanismos de dano, visto que estes foram massivamente considerados nas aplicações de multiescala e identificação.

Após a discussão dos aspectos clássicos das equações constitutivas fenomenológicas, seguindo um procedimento sistemático de modelagem em um contexto variacional, foi apresentada uma formulação do problema de modelagem constitutiva multiescala baseada em EVR no contexto da mecânica dos sólidos em grandes deformações. Foram utilizados como axiomas básicos a homogeneização do vetor deslocamento e do tensor gradiente de deformação como o média volumétrica das quantidades microscópicas dentro do EVR, bem como uma versão estendida do princípio de Hill-Mandel para levar em consideração forças de corpo. Com isso chegamos a um Princípio de Potência Virtual na microescala além de homogeneização para o tensor de tensão de Piola-Kirchhoff e vetor de forças externas todos variacionalmente e fisicamente consistentes.

Neste cenário, foram apresentados exemplos numéricos do ensaio de tração axial (impondo o estiramento na direção axial) de um EVR da matriz porosa da elastina da intima de uma artéria cerebral. Foram considerados diferentes arranjos de poros, porosidades e refinamento de malhas e seus efeitos sobre resposta constitutiva e a formação das bandas de localização induzidas pelo dano. Foi concluído que poros elípticos arranjados aleatoriamente tendem a ter um ponto de

localização de bandas mais precoce, tendo início através dos poros mais próximos e com angulações alinhadas. Foi observado que o início da localização coincide com o ponto de máximo em tensão da resposta constitutiva, sendo a região após este ponto de difícil ou impossível resolução pela modelagem contínua (no sentido de não permitir saltos) realizada até então.

Ao final, foi proposto um procedimento de identificação do campo de dano em um corpo dado o carregamento e as geometrias não-deformadas e deformadas conhecidas. Para isto foi formulado um problema de minimização de um funcional custo que leva em consideração diferenças no campo de deslocamentos e na energia de deformação, sendo utilizado um funcional Lagrangiano para a relaxação da condição subsidiária. Foi obtida então de maneira analítica (a nível de contínuo) a sensibilidade do funcional em questão em relação ao dano. Dessa forma foi proposto um algoritmo que usa a sensibilidade como critério para a marcha do processo iterativo de identificação.

Por fim, para mostrar a viabilidade do algoritmo, foi exposto um procedimento aplicado a um placa circular danificada no centro. Os resultados se mostraram bons no sentido do método sempre tomar uma direção de descida no funcional (ao menos até as iterações consideradas), muito embora a taxa de decaimento deste diminua a partir de um certo patamar do seu valor. O mesmo comportamento monótono não acontece nos primeiros passos com a diferença dos campos de dano, mas a direção de descida neste aspecto é logo reestabelecida.

Perspectivas Futuras

Destacamos aqui alguns pontos que devem ser melhor explorados em estudos futuros de doutorado:

- Sobre o aspecto das formulações de elementos finitos, um ponto não abordado no texto foram técnicas de estabilização do problema misto para a melhor viabilidade computacional da implementação utilizando espaços incompatíveis no sentido da condição de inf-sup, como por exemplo o do

tipo $\mathbb{P}_1/\mathbb{P}_1$. Vale salientar porém que este tema aplicado as equações da mecânica dos sólidos não-linear, não é um assunto totalmente fechado na literatura especializada na área.

- No contexto da modelagem microescala, o que foi mostrado neste texto é apenas pequena amostra das potencialidades desta teoria no cenário da modelagem constitutiva de tecidos biológicos. É possível (e preciso) por exemplo estudar a modelagem das fibras de colágeno no EVR, dentre outros aspectos.
- No cenário multiescala, é de interesse prático resolver o problema macroscópico usando as informações da microescala seja através da parametrização da lei constitutiva ou seja através da resolução do problema totalmente acoplado entre escalas. Uma aplicação dessa abordagem é por exemplo estudar início e propagação de falhas em tecidos biológicos, que é um fenômeno visível macroscopicamente mas com origem em escala microscópica como apreciado através de testes preliminares neste texto de dissertação.
- Em relação à identificação do dano, ainda há bastante espaço para a melhoria do algoritmo bem como é necessário a realização de testes com geometrias e energias de deformação mais realistas (podendo ter mais de um parâmetro de dano a se identificar) para a melhor avaliação do procedimento proposto. Um aspecto importante não levado em consideração é como se fazer o mapeamento de uma geometria deformada com relativamente mais elementos do que uma geometria não-deformada na região danificada. Por fim, ainda é preciso correlacionar informações de índole mecânica (por exemplo o dano) com diversos outros dados da literatura médica com coeficientes puramente geométricos ou baseados na fluidodinâmica, avaliando-se assim a viabilidade do uso destes tipos de coeficientes.

Referências Bibliográficas

G. Ares. **Tese de doutorado**. Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, Brasil, (em andamento).

D. Arnold, F. Brezzi, e M. Fortin. A stable finite element for the stokes equations. **Calcolo**, 21(4):337–344, 1984. ISSN 0008-0624. URL <http://dx.doi.org/10.1007/bf02576171>.

JohnM. Ball. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. **Archive for Rational Mechanics and Analysis**, 63(4):337–403, 1976. ISSN 0003-9527. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF00279992>.

Daniel Balzani, Sarah Brinkhues, e Gerhard A. Holzapfel. Constitutive framework for the modeling of damage in collagenous soft tissues with application to arterial walls. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 213–216(0):139 – 151, 2012. ISSN 0045-7825. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782511003616>.

Nicolas Bilger, François Auslender, Michel Bornert, Jean-Claude Michel, Hervé Moulinec, Pierre Suquet, e André Zaoui. Effect of a nonuniform distribution of voids on the plastic response of voided materials: a computational and statistical analysis. **International Journal of Solids and Structures**, 42(2):517 – 538, 2005. ISSN 0020-7683. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768304003452>.
Micromechanics of Materials.

P. J. Blanco, P. J. Sánchez, E. A. de Souza Neto, e R. A. Feijóo.

- Variational foundations of rve-based multiscale models. **LNCC Research and Development Internal Report**, 2014a.
- P.J. Blanco, P.J. Sánchez, E.A. de Souza Neto, e R.A. Feijóo. Variational foundations and generalized unified theory of rve-based multiscale models. **Archives of Computational Methods in Engineering (aguardando publicação)**, 2014b.
- J. Bonet e R.D. Wood. **Nonlinear Continuum Mechanics**. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- Franco Brezzi e Michel Fortin. **Mixed and Hybrid Finite Element Methods**. Springer-Verlag New York, Inc., New York, NY, USA, 1991. ISBN 0-387-97582-9.
- T.Y.P. Chang, A.F. Saleeb, e G. Li. Large strain analysis of rubber-like materials based on a perturbed lagrangian variational principle. **Computational Mechanics**, 8(4):221–233, 1991. ISSN 0178-7675. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF00577376>.
- P. G. Ciarlet. **Mathematical Elasticity. Volume I: Three-dimensional Elasticity**. Amsterdam: North-Holland., 1988.
- E. A. de Souza Neto, D. Perić, e D. R. J. Owen. **Computational Methods for Plasticity**. John Wiley Sons, Ltd, 2008. ISBN 9780470694626.
- E.A. de Souza Neto, P.J. Blanco, P.J. Sánchez, e R.A. Feijóo. An rve-based mutiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects. **Mechanics of Materials**, 2014. ISSN 0167-6636. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167663614001872>.
- E.A. de Souza Neto e R.A. Feijóo. Variational foundation of multi-scale constitutive models of solids: small and large strain kinematical formulation. **LNCC Research and Development Report**, 2006.

- E.A. de Souza Neto e R.A. Feijóo. On the equivalence between spatial and material volume averaging of stress in large strain multi-scale solid constitutive models. **Mechanics of Materials**, 40(10):803–811, 2008. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-45949084079partnerID=40md5=69326d3332578ecbca6305fffc3f6c20>.
- A. Delfino, N. Stergiopoulos, J.E. Moore Jr, e J.-J. Meister. Residual strain effects on the stress field in a thick wall finite element model of the human carotid bifurcation. **Journal of Biomechanics**, 30(8):777 – 786, 1997. ISSN 0021-9290. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929097000250>.
- A. Dorfmann e R.W. Ogden. A constitutive model for the mullins effect with permanent set in particle-reinforced rubber. **International Journal of Solids and Structures**, 41(7):1855–1878, 2004. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-1342310528partnerID=40md5=bd53fe0e6c7cae929301f8c33dcd9669>. cited By (since 1996)156.
- A. Ern e J.L. Guermond. **Éléments finis: théorie, applications, mise en oeuvre**. Mathématiques et Applications. Springer, 2002. ISBN 9783540426158. URL <http://books.google.com.br/books?id=ExLLnQEACAAJ>.
- R. A. Feijóo e E. O. Taroco. **I Curso de Mecânica Teórica e Aplicada: Teoria das Cascas e suas Aplicações, Módulo 1, Capítulo: Princípios Variacionais y Métodos Variacionales en Mecánica**. Laboratório de Computação Científica, LCC-CNPq, 1982.
- R. A. Feijóo e E. O. Taroco. **I Curso de Mecânica Teórica e Aplicada: Teoria das Cascas e suas Aplicações, Módulo 2, Capítulo: Princípios Variacionales y el Método de los Elementos Finitos en la Teoria de Placas y Cascaras**. Laboratório de Computação Científica, LCC-CNPq, 1983.

- T.C. Gasser, R.W. Ogden, e G.A. Holzapfel. Hyperelastic modelling of arterial layers with distributed collagen fibre orientations. **Journal of the Royal Society Interface**, 3(6):15–35, 2006. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-33745171176partnerID=40md5=120548119053f8311bfed4fafb69e277>. cited By (since 1996)419.
- P. Germain. Sur l’application de la méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus. **C.R. Acad. Sci. Paris Sér. A**, 274:1051–1055, 1972.
- L.A. Gracia, E. Peña, J.M. Royo, J.L. Pelegay, e B. Calvo. A comparison between pseudo-elastic and damage models for modelling the mullins effect in industrial rubber components. **Mechanics Research Communications**, 36(7):769–776, 2009. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-68249137026partnerID=40md5=3559e9cf3c31201b3c23f180be04fde0>. cited By (since 1996)0.
- M. E. Gurtin. **An Introduction to Continuum Mechanics**. New York: Academic Press, 1981.
- M.F. Hadi, E.A. Sander, e V.H. Barocas. Multiscale model predicts tissue-level failure from collagen fiber-level damage. **Journal of Biomechanical Engineering**, 134(9), 2012. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84865674799partnerID=40md5=2f233f3b8bb5f267d4f33037bc9b59a2>. cited By (since 1996)8.
- P. A. Heidenreich, J. G. Trogon, O. A. Khavjou, K. Butler, J.and Dracup, M.D. Ezekowitz, E. A. Finkelstein, Y. Hong, A. Lloyd-Jones D.M. Johnston, S. C. Khera, S. A. Nelson, D. Nichol, G.and Orenstein, P. W.F. Wilson, e Y. J. Woo. Forecasting the future of cardiovascular disease in the united states: A policy statement from the american heart association. **Circulation**, 123(8):933–944, 2011.

- R. Hill. A self-consistent mechanics of composite materials. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 13(4):213 – 222, 1965. ISSN 0022-5096. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509665900104>.
- G. A. Holzapfel. **Nonlinear Solid Mechanics. A continuum Approach for Engineering**. London : John Wiley Sons, 2000.
- G.A. Holzapfel, T.C. Gasser, e R.W. Ogden. A new constitutive framework for arterial wall mechanics and a comparative study of material models. **Journal of Elasticity**, 61(1-3):1–48, 2000. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-0034434740partnerID=40md5=8939d791d517facc6650c7ef3a1052a3>.
- G.A. Holzapfel e R.W. Ogden. Constitutive modelling of arteries. **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, 466(2118):1551–1597, 2010. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-77953418030partnerID=40md5=e2699a393b6c11e36d699cc3648862e2>. cited By (since 1996)77.
- L. Kachanov. **Introduction to continuum damage mechanics**. Mechanics of Elastic Stability. M. Nijhoff, 1986. ISBN 9789024733194. URL <http://books.google.com.br/books?id=gXnKpaCcgawC>.
- O. A. Ladyzhenskaya. **The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow**. Gordon and Breach, New York, 1969.
- J.E. Marsden e T.J.R. Hughes. **Mathematical Foundations of Elasticity**. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice-Hall., 1983.
- C. Martin e W. Sun. Modeling of long-term fatigue damage of soft tissue with stress softening and permanent set effects. **Biomechanics and Modeling in Mechanobiology**, 12(4):645–655,

2013. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84879890863partnerID=40md5=eece5daa16a41f83178d3b31b1cf776b>. cited By (since 1996)1.
- C. Martin e W. Sun. Simulation of long-term fatigue damage in bioprosthetic heart valves: Effects of leaflet and stent elastic properties. **Biomechanics and Modeling in Mechanobiology**, 13(4):759–770, 2014. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84905592693partnerID=40md5=5b420c7ada25b2297dc4e206ecb0dbe6>. cited By (since 1996)2.
- G. A. Maugin. The method of virtual power in continuum mechanics: Application to coupled fields. **Acta Mechanica**, 35:1–70, 1980.
- S. Mendis. Global atlas on cardiovascular disease prevention and control. **World Health Organization**, páginas chapter 1,page 155, 2011.
- C. Miehe. Discontinuous and continuous damage evolution in Ogden-type large-strain elastic materials. **Eur. J. Mech. A/Solids**, 14(5):697–720, 1995.
- Christian Miehe. Numerical computation of algorithmic (consistent) tangent moduli in large-strain computational inelasticity. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 134 (3-4):223–240, Agosto 1996. ISSN 00457825. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0045782596010195>.
- R. W. Ogden. Large deformation isotropic elasticity - on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences**, 326 (1567):pp. 565–584, 1972. ISSN 00804630.
- R. W. Ogden. **Non-Linear Elastic Deformations**. Ellis Horwood, 1984.
- R.W. Ogden e D.G. Roxburgh. A pseudo-elastic model for the mullins effect in filled rubber. **Proceedings of the Royal Society A:**

- Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, 455(1988):2861–2877, 1999. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-33746426645partnerID=40md5=ee59a8d109201be65327b951219d6aa7>. cited By (since 1996)220.
- E. Peña e M. Doblaré. An anisotropic pseudo-elastic approach for modelling mullins effect in fibrous biological materials. **Mechanics Research Communications**, 36(7):784–790, 2009. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-68149141429partnerID=40md5=9f1ac236a3c0115356ff78b972b495d6>. cited By (since 1996)24.
- Estefanía Peña, Juan A. Peña, e Manuel Doblaré. On the mullins effect and hysteresis of fibered biological materials: A comparison between continuous and discontinuous damage models. **International Journal of Solids and Structures**, 46(7–8):1727 – 1735, 2009. ISSN 0020-7683. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768308005179>.
- A.M. Robertson, M.R. Hill, e D. Li. Structurally motivated damage models for arterial walls. theory and application. **D. Ambrosi, A. Quarteroni, G. Rozza (Eds.), Modelling of Physiological Flows, Simulation and Applications**, 5:143–185, 2012. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84874389120partnerID=40md5=bbfb558fa3dd47cd79a2386137c7876c>.
- A.M. Robertson e P.N Watton. **Mechanobiology of the Arterial Wall**, In: **Kuznetsov A, Becker S, editors. Transport in biological media**. Elsevier, 2013.
- Thomas Schmidt, Daniel Balzani, e Gerhard A. Holzapfel. Statistical approach for a continuum description of damage evolution in soft collagenous tissues. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 278(0):41 – 61, 2014. ISSN 0045-7825. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782514001364>.

J.C. Simo. On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: Formulation and computational aspects. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 60(2):153–173, 1987. URL <http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-0023288184partnerID=40md5=2624e2800cc08247fdc64fed6be2db6f>. cited By (since 1996)374.

D C D Speirs, E A de Souza Neto, e D Perić. An approach to the mechanical constitutive modelling of arterial tissue based on homogenization and optimization. **J Biomech**, 41(12):2673–80, 2008. ISSN 0021-9290. URL <http://www.biomedsearch.com/nih/approach-to-mechanical-constitutive-modelling/18674766.html>.

SymPy Development Team. **SymPy: Python library for symbolic mathematics**, 2014. URL <http://www.sympy.org>.

P.J. Sánchez, P.J. Blanco, A.E. Huespe, e R.A. Feijóo. Failure-oriented multi-scale variational formulation: Micro-structures with nucleation and evolution of softening bands. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 257(0):221 – 247, 2013. ISSN 0045-7825. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782512003659>.

Masato Tanaka, Masaki Fujikawa, Daniel Balzani, e Jörg Schröder. Robust numerical calculation of tangent moduli at finite strains based on complex-step derivative approximation and its application to localization analysis. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 269:454–470, Fevereiro 2014. ISSN 00457825. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045782513003009>.

E. O. Taroco, G. R. Feijóo, P. J. Blanco, e R. A. Feijóo. **Introducción a la Formulación Variacional de la Mecánica**. Monografía LNCC, 2014.

SA Urquiza, PJ Blanco, GD Ares, e RA Feijóo. Implementation issues of large

strain formulations of hyperelastic materials for the modeling of arterial wall mechanics. **Scientific Computing Applied to Medicine and Healthcare, MACC**, páginas 79–120, 2012.

Hannah Weisbecker, David M. Pierce, Peter Regitnig, e Gerhard A. Holzapfel. Layer-specific damage experiments and modeling of human thoracic and abdominal aortas with non-atherosclerotic intimal thickening. **Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials**, 12(0):93 – 106, 2012. ISSN 1751-6161. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1751616112000926>.

P. Wriggers. **Nonlinear Finite Element Methods**. Berlin: Springer-Verlag, 2008.

Apêndice A

Referência Rápida de Notações

Segue abaixo um guia notações que não pretende ser exaustivo mas pode ser útil para a melhor compreensão do texto. A forma indicial é sempre fixando uma base ortonormal. Os índices i, j, k e l pertencem a $\{1, 2, \dots, nd\}$. Considerar $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^{nd}$ e $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \text{Lin}$.

nd	Dimensão espacial, geralmente 2 ou 3 neste texto
\mathbf{A}, \mathbf{a}	vetor ou tensor de segunda ordem (não importa a caixa).
\mathbf{A}	matriz ou vetor sem conotação tensorial (física).
\mathbb{A}	tensor de quarta ordem.
\mathcal{A}	Operador ou Funcional.
\mathcal{A}	Espaço vetorial, variedade linear ou conjuntos de funções.
\mathcal{A}'	Espaço dual de \mathcal{A} .
Lin	Espaço das transformações lineares de \mathbb{R}^{nd} para \mathbb{R}^{nd} .
Sym	Se $\mathbf{A} \in \text{Lin}$ tal que $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ então $\mathbf{A} \in \text{Sym}$ (simétricas).
Orth	Se $\mathbf{A} \in \text{Lin}$ tal que $\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{I}$ (identidade) então $\mathbf{A} \in \text{Orth}$ (ortogonais).
δ_{ij}	delta de Kronecker, $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$
\otimes	$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{ij} = a_i b_j$, $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c})_{ijk} = a_i b_j c_k$, $(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})_{ijkl} = A_{ij} B_{kl}$
\otimes^s	$\mathbf{a} \otimes^s \mathbf{b} = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{a})$
\odot	$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \odot (\mathbf{c} \otimes \mathbf{d}) = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{c} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{d} + \mathbf{a} \otimes \mathbf{d} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c})$

$(\cdot)^s$	$(\mathbf{A})^s = \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)$
\mathbb{I}	$I_{ijkl} = \delta_{ik}\delta_{jl}$ é tal que $\mathbb{I}\mathbf{A} = \mathbf{A}, \forall \mathbf{A} \in \text{Lin}$
\mathbb{I}^T	$I_{ijkl}^T = \delta_{il}\delta_{jk}$ é tal que $\mathbb{I}^T\mathbf{A} = \mathbf{A}^T, \forall \mathbf{A} \in \text{Lin}$
\mathbb{I}^s	$I_{ijkl}^s = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ é tal que $\mathbb{I}^s\mathbf{A} = \mathbf{A}^s, \forall \mathbf{A} \in \text{Lin}$
\mathcal{U}	Espaço vetorial suficientemente regular.
$\text{Kin}_{\mathcal{U}}$	Variedade linear suficientemente regular contendo restrições.
$\text{Var}_{\mathcal{U}}$	Espaço gerador da variedade linear \mathcal{U} .
$[\mathcal{H}^m]^{\text{nd}}$	Espaços de Hilbert regular até a m-ésima derivada com dimensão espacial nd.
$\mathcal{P}^i, \mathcal{P}^e$	Funcionais de potência interna e externa.
$\mathcal{D}, \mathcal{D}^*$	Operador abstrato de deformação e seu adjunto.
$\delta\mathcal{F}(\mathbf{u}, \hat{\mathbf{u}})$	Derivada de Gâteaux (ou direcional) do funcional \mathcal{F} na variável \mathbf{u} na direção de $\hat{\mathbf{u}}$.
Ω	Aberto de \mathbb{R}^{nd} , domínio de um corpo macroscópico.
Γ^N, Γ^D	Partes de Neumann e Dirichlet da fronteira de Ω .
Ω_m, Ω_s	Domínios material e espacial respectivamente.
\mathbf{X}, \mathbf{x}^1	Elemento de Ω_m e Ω_s respectivamente.
χ	Difeomorfismo que mapeia Ω_m em Ω_s .
$(\cdot)_s$	Significa $(\cdot)_s = (\cdot) \circ \chi^{-1}$, se (\cdot) tem domínio Ω_m (descrição material).
$(\cdot)_m$	Significa $(\cdot)_m = (\cdot) \circ \chi$, se (\cdot) tem domínio Ω_s (descrição espacial).
∇	Gradiente genérico ou em configuração material.
grad	Gradiente em configuração espacial ² .
div	Divergente genérico ou em configuração espacial.
Div	Divergente em configuração espacial ³ .
\mathbf{F}	Gradiente do mapeamento (ou de deformação).
\mathbf{C}	Tensor de Cauchy-Green esquerdo.

¹ \mathbf{x} é redefinido no contexto de multiescala como sendo o ponto no domínio material macroscópico

² Não usado se não houver possibilidade de confusão entre configurações, ao invés disso é usado o gradiente genérico.

³ Não usado se não houver possibilidade de confusão entre configurações, ao invés disso é usado o divergente genérico.

\mathbf{E}	Tensor de Euler-Lagrange.
$\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{C}}$	Partes isocóricas de \mathbf{F} e \mathbf{C} .
J	Determinante de \mathbf{F} .
I_1, I_2 e I_3	Invariantes de \mathbf{C} .
\bar{I}_1, \bar{I}_2 e \bar{I}_3	Invariantes de $\bar{\mathbf{C}}$.
λ_1, λ_2 e λ_3	Autovalores de de \mathbf{F} .
\mathbf{P}, \mathbf{S}	Tensores de Piola-Kirchhoff de primeira e segunda espécie respectivamente.
\mathbb{D}^c	Tensor tangente constitutiva.
\mathbb{D}	Tensor tangente total (constitutiva mais geométrica).
Ψ	Função energia de deformação.
Ψ_0	Função energia de deformação do material virgem (sem dano).
$(\cdot)^{\text{iso}}, (\cdot)^{\text{vol}}$	Relativo a isocórico e volumétrico respectivamente.
$(\cdot)^{\text{iso}}, (\cdot)^{\text{aniso}}$	Relativo a isotrópico e anisotrópico respectivamente.
d, d_1, d_2	Variável de dano total, descontínuo e contínuo respectivamente.
d^*	Dano de referência (para identificação).
\mathbf{u}_d	Campo de deslocamentos material da geometria danificada com o dano de referência.
$\mathcal{J}, \tilde{\mathcal{J}}$	Funcionais custo.
\mathcal{L}	Funcional Lagrangeano.
EVR	Elemento de volume representativo (versão portuguesa de RVE).
Ω_μ	Domínio macroscópico associado ao EVR.
\mathbf{y}	Ponto no domínio Ω_μ .
$(\cdot)^\mu$ ou $(\cdot)_\mu$	Versão microscópica da variável ou conjunto macroscópico (\cdot) .
$(\cdot)^h$ ou $(\cdot)_h$	Versão aproximada (ou discreta) de uma variável ou conjunto (\cdot) .
\mathcal{T}^h	Malha de elementos finitos.
K	Elementos finitos da malha \mathcal{T}^h , geralmente tetraedros.
\mathbb{P}_P	Espaço de polinômios completos de ordem P .
$\mathbb{P}_{1,b}$	Espaço de polinômios lineares enriquecido com bolha.

Apêndice B

Identidades úteis

Considere:

- $\mathbf{T} : \Omega \rightarrow \text{Lin}$ ou $\mathbf{T} : \text{Lin} \rightarrow \text{Lin}$ ou $\mathbf{T} \in \text{Lin}$ dependendo do contexto.
- $\mathbf{S} : \Omega \rightarrow \text{Sym}$ ou $\mathbf{S} : \text{Sym} \rightarrow \text{Sym}$ ou $\mathbf{S} : \mathbb{R} \rightarrow \text{Sym}$ ou $\mathbf{S} \in \text{Sym}$ dependendo do contexto.
- $\mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{nd}$ ou $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{nd}$ dependendo do contexto.
- $\phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$.
- $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \in \text{Lin}$.

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}^T \mathbf{B} = \mathbf{C} \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \mathbf{C} = \mathbf{A} \mathbf{C}^T \cdot \mathbf{B} \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{A}^S, \quad \forall \mathbf{A} \quad (\text{B.3})$$

$$\text{div} \left(\frac{1}{\phi} \mathbf{v} \right) = \frac{1}{\phi} \text{div}(\mathbf{v}) - \frac{1}{\phi^2} \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \quad (\text{B.4})$$

$$\int_{\Omega} \text{div} \mathbf{T} \, d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{T} \mathbf{n} \, d\Gamma \quad (\text{B.5})$$

$$\int_{\Omega} \nabla \phi \, d\Omega = \int_{\Gamma} \phi \mathbf{n} \, d\Gamma \quad (\text{B.6})$$

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} \, d\Gamma \quad (\text{B.7})$$

$$\int_{\Gamma} \mathbf{T} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, d\Gamma = \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{v} \, d\Omega \quad (\text{B.8})$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{T} (\nabla \mathbf{v})^T \, d\Omega = - \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{T} \otimes \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{T} \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} \, d\Gamma \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{\partial \det \mathbf{T}}{\partial \mathbf{T}} = (\det \mathbf{T}) \mathbf{T}^{-T} \quad (\text{B.10})$$

$$\frac{\partial \sqrt{\det \mathbf{T}}}{\partial \mathbf{T}} = \frac{\sqrt{\det \mathbf{T}}}{2} \mathbf{T}^{-T} \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}^{-1}}{\partial \mathbf{S}} = -\mathbf{S}^{-1} \odot \mathbf{S}^{-1} \quad (\text{B.12})$$

$$(\mathbf{T}^{-1}) \cdot = -\mathbf{T}^{-1} \dot{\mathbf{T}} \mathbf{T}^{-1} \quad (\text{B.13})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H} = \{ \mathbf{v} \in \mathcal{U}; \int_{\Omega} \mathbf{v} \, d\Omega = \mathbf{0}, \int_{\Gamma} \nabla \mathbf{v} \, d\Gamma = \mathbf{0} \} \\ \mathcal{H}^{\perp} = \{ \mathbf{w} \in \mathcal{U}; \mathbf{w} = \bar{\mathbf{k}} \text{ in } \Omega, \mathbf{w} = \bar{\mathbf{T}} \mathbf{n} \text{ on } \Gamma, \forall (\bar{\mathbf{k}}, \bar{\mathbf{T}}) \in \mathbb{R}^{nd} \times \mathbb{R}^{nd \times nd} \} \\ \text{com o produto interno: } (\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} \, d\Gamma \end{array} \right. \quad (\text{B.14})$$

Apêndice C

Derivadas analíticas

As derivadas mostradas abaixo foram calculadas usando a biblioteca de computação numérica *Sympy* SymPy Development Team (2014). Procedemos reescrevendo as equações em função de I_1, I_2, I_3, I_4 da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\Psi &= \Psi^{\text{iso}}(\bar{I}_1, \bar{I}_2) + \Psi^{\text{aniso}}(\bar{I}_4) + \Psi^{\text{vol}}(J) = \\ &\Psi^{\text{iso}}((\sqrt{I_3})^{-2/3} I_1, (\sqrt{I_3})^{-4/3} I_2) + \Psi^{\text{aniso}}(\sqrt{I_3})^{-2/3} I_4 + \Psi^{\text{vol}}(\sqrt{I_3})\end{aligned}$$

Depois das derivadas feitas, reescrevemos o resultado em função de $\bar{I}_1, \bar{I}_2, \bar{I}_4$ e J pois esta é em geral a forma mais compacta. Vale lembrar que para recuperar as leis incompressíveis (funcionalmente mais simples), basta tomar $J = 1$ e $\bar{I}_i = I_i, i = 1, 2, 3, 4$.

Em seguida são mostradas somente as derivadas **não-nulas**. Em muitos casos as expressões não estão simplificadas adequadamente pois foram geradas de maneira semi-automática.

(1) Termo volumétrico - Tipo Quadrático

$$\begin{cases} \Psi &= \frac{\kappa}{2} (J - 1)^2 \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} &= \frac{1}{2} \left(\kappa - \frac{\kappa}{\sqrt{J^2}} \right) \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3^2} &= \frac{\kappa}{4 (J^2)^{\frac{3}{2}}} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

(2) Termo volumétrico - Tipo logaritmo quadrático

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi = \kappa(\ln J)^2 \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} = \frac{\kappa \ln J}{J} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3^2} = \frac{\kappa(1 - \ln J)}{2J^3} \end{array} \right. \quad (C.2)$$

(3) Termo volumétrico - Tipo misto

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi = \frac{\kappa}{2} \left(\frac{1}{2}(J - 1) - \ln J \right) \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} = \frac{\kappa(J - 1)}{8J^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3^2} = \frac{\kappa(2 - \ln J)}{16J^4} \end{array} \right. \quad (C.3)$$

(4) Modelo de Delfino

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi = \frac{c_1}{2c_2} \left(e^{c_2(\bar{I}_1-3)} - 1 \right) \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \bar{I}_1} = \frac{c_1}{2\sqrt[3]{J^2}} e^{c_2(\bar{I}_1-3)} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} = -\frac{\bar{I}_1 c_1 e^{\bar{I}_1 c_2}}{6J^2} e^{-3c_2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \bar{I}_1^2} = \frac{c_1 c_2}{2(J^2)^{\frac{2}{3}}} e^{c_2(\bar{I}_1-3)} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3^2} = \frac{1}{18J^4} (\bar{I}_1 c_1 (\bar{I}_1 c_2 + 4)) e^{c_2(\bar{I}_1-3)} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \bar{I}_1 \partial I_3} = -\frac{c_1}{6(J^2)^{\frac{4}{3}}} (\bar{I}_1 c_2 + 1) e^{c_2(\bar{I}_1-3)} \end{array} \right. \quad (C.4)$$

(5) Modelo de Mooney-Rivlin

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi = c_1 (\bar{I}_1 - 3) + c_2 (\bar{I}_2 - 3) \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_1} = \frac{c_1}{\sqrt[3]{J^2}} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_2} = \frac{c_2}{(J^2)^{\frac{2}{3}}} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} = -\frac{\bar{I}_1 c_1}{3J^2} - \frac{2\bar{I}_2 c_2}{3J^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3^2} = \frac{4\bar{I}_1 c_1}{9J^4} + \frac{10\bar{I}_2 c_2}{9J^4} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_2 \partial I_3} = -\frac{2c_2}{3(J^2)^{\frac{5}{3}}} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_1 \partial I_3} = -\frac{c_1}{3(J^2)^{\frac{4}{3}}} \end{array} \right. \quad (\text{C.5})$$

(6) Modelo exponencial quadrático ¹ para 1 fibra.

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi = \frac{k_1}{2k_2} \left(e^{k_2(\bar{I}_4-1)^2} - 1 \right) \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_3} = -\frac{\bar{I}_4 k_1}{3J^2} (\bar{I}_4 - 1) e^{k_2(\bar{I}_4-1)^2} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial I_4} = \frac{k_1}{\sqrt[3]{J^2}} (\bar{I}_4 - 1) e^{k_2(\bar{I}_4-1)^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3^2} = \frac{\bar{I}_4 k_1}{9J^4} \left(2\bar{I}_4 k_2 (\bar{I}_4 - 1)^2 + 5\bar{I}_4 - 4 \right) e^{k_2(\bar{I}_4-1)^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_4^2} = \frac{k_1}{(J^2)^{\frac{2}{3}}} \left(2k_2 (\bar{I}_4 - 1)^2 + 1 \right) e^{k_2(\bar{I}_4-1)^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial I_3 \partial I_4} = -\frac{J^2 k_1}{3(J^2)^{\frac{7}{3}}} \left(2\bar{I}_4 k_2 (\bar{I}_4 - 1)^2 + 2\bar{I}_4 - 1 \right) e^{k_2(\bar{I}_4-1)^2} \end{array} \right. \quad (\text{C.6})$$

¹ O termo quadrático aqui significa simplesmente que a expressão (\bar{I}_4-3) dentro do exponencial está elevado ao quadrado.

Apêndice D

Dedução da solução semialítica para um cilindro incompressível com simetria de revolução

Inicialmente considere um cilindro de paredes espessas com coordenadas materiais (R, Θ, Z) tais que:

$$A \leq R \leq B \quad , \quad 0 \leq \Theta \leq 2\pi \quad , \quad 0 \leq Z \leq L$$

onde A, B são os raios interno e externo e L o comprimento do cilindro, em configuração material. Utilizando correspondentes letras minúsculas análogas às de cima temos da condição de incompressibilidade que:

$$\pi(R^2 - A^2)L = \pi(r^2 - a^2)\ell \tag{D.1}$$

Definindo $\lambda_z = \ell/L$, $\lambda_a = a/A$, $\lambda = r/R$, $q_R = A^2/R^2$, notando que λ_z e λ são os *stretches* na direção axial e circunferencial respectivamente, temos:

$$\lambda = \sqrt{\lambda_z^{-1}(1 - q_R) + \lambda_a^2 q_R} \tag{D.2}$$

Sendo assim a única incógnita que temos é λ_a , dado que λ_z é fixo e os demais *stretches* ao longo do raio são dados pela equação acima. Novamente da

incompressibilidade segue que $\det \mathbf{F} = 1$, então \mathbf{F} é dado por:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda\lambda_z} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_z \end{bmatrix} \quad (\text{D.3})$$

O que leva aos invariantes dados por:

$$I_1 = I_1(\mathbf{C}) = \frac{1}{\lambda_z^2\lambda^2} + \lambda^2 + \lambda_z^2 \quad (\text{D.4})$$

$$I_2 = I_2(\mathbf{C}) = \frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda_z^2} + \lambda^2\lambda_z^2 \quad (\text{D.5})$$

$$I_3 = I_3(\mathbf{C}) = 1 \quad (\text{D.6})$$

Sabemos que para materiais incompressíveis modifica-se a lei constitutiva inserindo um multiplicador de Lagrange (pressão) segundo (3.3)¹, utilizando ainda as relações (2.20), (1.51) e (1.62) pode-se mostrar que o tensor de tensões de Cauchy é dado por:

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\mathbf{F} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} \right)_s + p \mathbf{I} \quad (\text{D.7})$$

Ou equivalentemente em coordenadas principais:

$$\sigma_{ii} = \lambda_i \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda_i} + p, \quad i \in \{r, \theta, z\} \quad (\text{D.8})$$

Como λ_z é fixo e a hipótese de incompressibilidade torna λ_r função de $\lambda_\theta = \lambda$ temos:

$$\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta} = -\lambda \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \quad (\text{D.9})$$

Na ausência de forças de corpo (ou desprezando-as) o equilíbrio na configuração

¹ Foi utilizado uma convenção diferente para o sinal da pressão da encontrada em alguns trabalhos da área, no entanto como se trata de um multiplicador de Lagrange e que no fim dos cálculos será eliminado, não há problema quanto a diferença de notação.

especial de forma forte em coordenadas cilíndricas e considerando as simetrias do problema é dado por:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = 0 \Rightarrow \frac{d\sigma_{rr}}{dr} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} = 0 \quad (\text{D.10})$$

Temos usando (D.9) na expressão (D.10) e integrando-a em $[a, b]$ para $\sigma_{rr}(a) = -P$ e $\sigma_{rr}(b) = 0$ fica:

$$P = \int_a^b \lambda \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \frac{dr}{r} \quad (\text{D.11})$$

A ultima expressão pode ser reescrita em termos exclusivos de *stretches* utilizando já que $\lambda = r/R$, para isso partindo de (D.1) e manipulando como segue é possível achar uma expressão para $\frac{dr}{r}$:

$$\begin{aligned} \pi(R^2 - A^2)L &= \pi(r^2 - a^2)\ell \\ \Rightarrow \frac{d}{dr} (\lambda_z(r^2 - a^2)) &= \frac{d}{dr} \left(\frac{r^2}{\lambda(r)^2} - A^2 \right) \\ \Rightarrow 2\lambda_z r &= \frac{2r\lambda(r)^2 - 2r^2\lambda(r)\lambda'(r)}{\lambda^4} \\ \Rightarrow \lambda'(r) &= \frac{d\lambda}{dr} = \frac{\lambda}{r}(1 - \lambda^2\lambda_z) \\ \Rightarrow \frac{dr}{r} &= \frac{d\lambda}{\lambda}(1 - \lambda^2\lambda_z)^{-1} \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Substituindo (D.12) em (D.11) segue finalmente permutando os limites de integração que:

$$P = \int_{\lambda_b}^{\lambda_a} (\lambda_z \lambda^2 - 1)^{-1} \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} d\lambda \quad (\text{D.13})$$

Dada uma energia deformação dependente dos invariantes (D.4), (D.5) e (D.6) é possível reduzi-la a uma expressão do tipo $\Psi = \Psi(\lambda)$, na qual podemos avaliar sua derivada analiticamente (ou mesmo auxiliado por computação simbólica). Dado um valor de P achamos então o valor de λ_a (perceba que através de (D.2) temos $\lambda = \lambda(\lambda_a)$ e $\lambda_b = \lambda_b(\lambda_a)$) solução da equação (D.13). Dado que é

uma equação não-linear utiliza-se algum método numérico de solução de equações algébricas não-lineares como por exemplo o da secante onde não é preciso avaliar derivadas. A integral também é avaliada numericamente por algum método de integração como por exemplo trapézio ou quadratura gaussiana.