

INFLUÊNCIA DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO MULTIESCALA DE DESLOCAMENTOS LINEARES E MÍNIMA RESTRIÇÃO NA CINEMÁTICA MICROESTRUTURAL DE FASCÍCULOS DE TENDÕES

Bruno Klahr, Universidade Federal de Santa Catarina, bruno.klahr@posgrad.ufsc.br

Thiago André Carniel, Universidade Federal de Santa Catarina, carnielta@gmail.com

Eduardo Alberto Fancello, Universidade Federal de Santa Catarina, eduardo.fancello@ufsc.br

***Resumo.** O presente trabalho propõe um estudo numérico multiescala sobre a influência das condições de contorno de deslocamentos lineares e de mínima restrição na cinemática microestrutural de um elemento de volume representativo (EVR) do fascículo de tendão. A abordagem multiescala utilizada emprega conceitos variacionais e de homogeneização em cinemática finita aliada ao método dos elementos finitos. A modelagem das fases microestruturais é formulada em um quadro constitutivo variacional. O EVR proposto nesse estudo é composto de fibras de colágeno helicoidais imersas em uma matriz celular, consistente com dados geométricos reportados na literatura. Os resultados numéricos indicam que ambas condições de contorno investigadas não são adequadas para representar, de forma satisfatória, a cinemática do EVR proposto. Em vista disso, enfatiza-se que novas condições de contorno multiescala devem ser propostas visando a representação adequada da cinemática do EVR.*

Palavras chave: Multiescala, Homogeneização, Tendão, Elementos Finitos

1. INTRODUÇÃO

Os tendões são tecidos biológicos que apresentam uma composição interna multifásica (diferentes fases materiais), cuja distribuição é estruturada ao longo de diversas escalas espaciais. As diferentes geometrias e frações volumétricas dos seus constituintes resultam em uma complexa hierarquia estrutural, conferindo aos tendões comportamentos mecânicos particulares.

Na área de pesquisa de tecidos tendinosos, diversas questões clínicas motivam o desenvolvimento e aprimoramento de novas técnicas numéricas e experimentais no estudo da biomecânica dos tendões. Como exemplo, cita-se o crescente número de pesquisas relacionadas à engenharia de tecidos tendinosos, uma vez que mais de 800.000 pessoas por ano necessitam de assistência médica devido à rupturas ou patologias de tendões e ligamentos (Lim e Temenoff, 2009).

Em um contexto multiescala, percebe-se na literatura que estudos numéricos sobre os comportamentos mecânicos dos tendões ainda é escasso. Embora muitos avanços tecnológicos mostrem-se presentes nessa área, pouco sabe-se sobre o comportamento mecânico microestrutural entre as diferentes escalas espaciais e fases materiais desses tecidos. Em vista disso, é notório que muitas questões ainda não estão claras nessa área da biomecânica, tornando-a um campo aberto à pesquisas, sejam essas experimentais ou numéricas.

Em vista desses fatos, teorias multiescala formuladas em deformações finitas e aliadas ao método dos elementos finitos fornecem um quadro teórico-numérico conveniente à análise biomecânica dos tendões. Essas investigações numéricas visam auxiliar a compreensão e verificação de micromecanismos complexos, complementando as observações laboratoriais e motivando o desenvolvimento de novas técnicas experimentais.

Motivado pelos fatos previamente expostos, o objetivo deste trabalho consiste em apresentar resultados prévios relacionados à um projeto de pesquisa que visa investigar as respostas microestrutural e macroestrutural (homogeneizada) de um elemento de volume representativo (EVR) do fascículo através de uma abordagem numérica multiescala. Especificamente, serão enfatizadas questões numéricas referentes à cinemática microestrutural decorrentes do emprego de duas condições de contorno multiescala clássicas: modelo de deslocamentos lineares nos contornos e o modelo de tração uniforme nos contornos (mínima restrição).

2. MORFOLOGIA DOS TENDÕES

Os tendões são basicamente compostos por água, células e matriz extracelular, sendo 55-70% de água em seu estado natural (Aro et al., 2012). Os fibroblastos (tenócitos) são as células encontradas em maior quantidade nos tendões (90-95%) (Franchi et al., 2007). Já a matriz extracelular é predominantemente composta por colágeno tipo I, representando cerca de 65-80% de sua massa seca (Kannus, 2000).

Através de microscopia ótica e/ou eletrônica é possível observar que os tecidos tendinosos possuem uma complexa hierarquia estrutural. Seguindo a representação esquemática da Fig. (1), nota-se que o tendão é revestido por um tecido conectivo frouxo, chamado de paratendão. O paratendão protege o tendão e aumenta o deslizamento com tecidos próximos, além de conter vasos sanguíneos que vascularizam o tecido tendinoso. Logo abaixo desse, encontra-se o epitendão, o qual conecta os fascículos formando a estrutura macroscópica do tendão. Já o endotendão recobre os feixes de fibras de colágeno formando os fascículos, sendo conhecido como matriz interfascicular. Os fascículos, por sua vez, são formados pelas fibras de colágeno imersas em uma matriz celular.

Considerando as estruturas mais básicas do tendão, a primeira encontrada está relacionadas às fibras de colágeno. As fibras apresentam geometria helicoidal (Kalson et al., 2015) e são formadas por feixes de fibrilas. Essas encontram-se imersas em uma matriz hidratada rica em proteoglicanas, geralmente denominada de substância base (Kannus, 2000; Franchi et al., 2007). As proteoglicanas possuem propriedades hidrofílicas devido a sua principal molécula formadora, a glicosaminoglicana. Na substância base, as proteoglicanas são em sua maioria ortogonais às fibrilas, com uma separação periódica de aproximadamente 60 nm (Franchi et al., 2007). Por fim, as fibrilas são formadas pelas moléculas de colágeno.

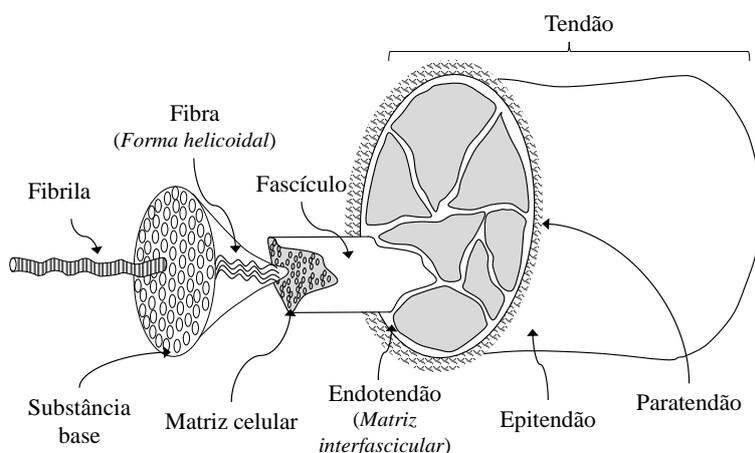


Figura 1. Representação esquemática da morfologia dos tendões.

3. TEORIA MULTIESCALA EM DEFORMAÇÕES FINITAS

A teoria multiescala apresentada neste trabalho é caracterizada por empregar conceitos variacionais e de homogeneização em cinemática finita segundo os desenvolvimentos apresentados em de Souza Neto e Feijóo (2006) e de Souza Neto et al. (2015).

3.1 Admissibilidade cinemática

Nessa teoria o deslocamento $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ e o gradiente de deformações $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t)$, definidos em um ponto macroscópico referencial \mathbf{X} e instante de tempo t , são relacionados à microescala através da média volumétrica de seus respectivos campos microscópicos $\mathbf{u}_\mu(\mathbf{Y}, t)$ e $\mathbf{F}_\mu(\mathbf{Y}, t)$, através de

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

e

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_Y} \mathbf{F}_\mu(\mathbf{Y}, t) dV_\mu \quad (2)$$

em que V_μ e \mathbf{Y} representam, respectivamente, o volume e os pontos referenciais do EVR.

Além disso, a teoria de multiescala propõe a seguinte expressão para o campo de deslocamentos microscópicos,

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{Y}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) + [\nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)] \mathbf{Y} + \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t) \quad (3)$$

em que a operação $\nabla_{\mathbf{X}}(\cdot)$ é o gradiente material e o termo $\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t)$ é denominado de deslocamento microscópico flutuante, representando um termo de ordem superior.

A partir das Eqs. (1) e (2), e utilizando a Eq. (3), pode-se obter as seguintes restrições ao campo de deslocamentos microscópicos flutuantes:

$$\int_{\Omega_Y} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t) dV_\mu = \mathbf{0}, \quad (4)$$

$$\int_{\partial\Omega_Y} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{Y}, t) \otimes \mathbf{n}_Y dA_\mu = \mathbf{0} \quad (5)$$

em que \mathbf{n}_Y é a normal unitária da superfície do EVR. As Eqs. (4) e (5) representam restrições translacionais e rotacionais de corpo rígido do EVR, respectivamente. Dessa forma, tais restrições motivam a definição de um espaço mínimo de deslocamentos microscópicos flutuantes cinematicamente admissíveis, formalmente definido por:

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \tilde{\mathbf{w}}, \mid \int_{\Omega_Y} \tilde{\mathbf{w}} dV_\mu = \mathbf{0}; \int_{\partial\Omega_Y} \tilde{\mathbf{w}} \otimes \mathbf{n}_Y dA_\mu = \mathbf{0} \right\}. \quad (6)$$

Entretanto, existem espaços $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$ mais restritos, que também respeitam as condições impostas pelas Eqs. (4) e (5), sendo assim subespaços de $\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}$. Dessa forma, esses subespaços definem classes de modelos multiescala, representando condições de contorno adequadas que devem ser impostas ao EVR, sendo que mais detalhes podem ser encontrados em de Souza Neto et al. (2015).

Neste trabalho serão utilizados os clássicos modelos de deslocamentos lineares nos contornos e de tração uniforme nos contornos. O modelo de deslocamentos lineares nos contornos admite que os deslocamentos flutuantes são nulos em todos os pontos do contorno do EVR, resultando no espaço:

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu} = \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\text{lin}} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \tilde{\mathbf{w}} \in \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min} \mid \tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{Y} \in \partial\Omega_Y \right\}. \quad (7)$$

Por outro lado, se nenhuma restrição adicional for imposta, o modelo de tração uniforme nos contornos, ou mínima restrição, representa o próprio espaço mínimo admissível,

$$\mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu} = \mathcal{K}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}^{\min}. \quad (8)$$

Esse modelo pode ser interpretado como uma tração uniforme no contorno do EVR, isto é,

$$\mathbf{P}_\mu(\mathbf{Y}) \mathbf{n}_{Y_\mu}(\mathbf{Y}) = \mathbf{P} \mathbf{n}_{Y_\mu}(\mathbf{Y}), \quad \forall \mathbf{Y} \in \partial\Omega_Y, \quad (9)$$

em que \mathbf{P} é o primeiro tensor tensão de Piola-Kirchhoff macroscópico e \mathbf{P}_μ sua contraparte microscópica.

3.2 Princípio do trabalho virtual multiescala

Como apresentado em de Souza Neto et al. (2015), a consistência energética entre as escalas macroscópica e microscópica é estabelecida através do chamado princípio do trabalho virtual multiescala, o qual considera que a potência (ou trabalho) virtual das tensões macroscópicas deve ser igual à média volumétrica da correspondente potência (ou trabalho) virtual realizada pelas tensões microscópicas, isto é,

$$\mathbf{P} : \delta \mathbf{F} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_Y} \mathbf{P}_\mu : (\delta \mathbf{F} + \nabla_Y \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV_\mu, \quad \forall \delta \mathbf{F}, \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu} \quad (10)$$

onde $\mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu}$ representa o espaço dos deslocamentos virtuais flutuantes cinematicamente admissíveis.

Em vista da relação variacional definida na Eq. (10), a equação de equilíbrio do EVR,

$$\int_{\Omega_Y} \mathbf{P}_\mu : (\nabla_Y \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu) dV_\mu = 0, \quad \forall \delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_{\tilde{\mathbf{u}}_\mu} \quad (11)$$

e a equação de homogeneização das tensões,

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_Y} \mathbf{P}_\mu dV_\mu \quad (12)$$

são derivadas sem pressupostos *a priori*.

A versão discreta da teoria multiescala apresentada aqui encontra-se implementada em um código laboratorial de elementos finitos não linear baseado em linguagem Fortran. O Código de elementos finitos foi extensivamente validado com auxílio de códigos comerciais de elementos finitos como Abaqus, Ansys e Marc. Por outro lado, o procedimento de homogeneização foi verificado através da média volumétrica dos campos microscópicos.

4. MÉTODO

Este trabalho tem por objetivo investigar as respostas cinemáticas microestruturais de um EVR de fascículo de tendão considerando duas condições de contorno multiescala clássicas: o modelo de deslocamentos lineares nos contornos e o modelo de tração uniforme nos contornos.

Como ilustrado na Fig. (2), o EVR proposto para o fascículo é composto por fibras de colágeno em formato helicoidal imersas em uma matriz celular, sendo essas características geométricas consistentes com observações de microscopia eletrônica tridimensional (Kalson et al., 2015). A representação do comportamento mecânico dessas fases materiais emprega modelos constitutivos viscoelásticos formulados em um quadro constitutivo variacional (Ortiz e Stainier, 1999). Os parâmetros constitutivos de cada modelo microestrutural foram estimados com base em dados experimentais realizados com auxílio de microscopia de força atômica, os quais foram obtidos da literatura. O modelo de elementos finitos do EVR apresenta 21.600 elementos hexaédricos isoparamétricos lineares. Mais detalhes sobre a geometria do EVR, particularidades dos modelos materiais microestruturais e as estratégias empregadas para o ajuste dos parâmetros materiais podem ser encontradas em Carniel (2017).

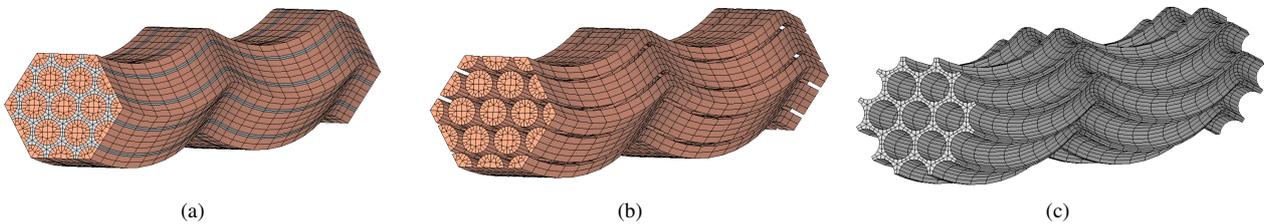


Figura 2. Discretização por elementos finitos do EVR do fascículo. (a) EVR do Fascículo. (b) Fibras de colágeno. (c) Matriz celular.

Devido à morfologia e biomecânicas dos tendões, as maiores solicitações mecânicas ocorrem na direção axial às fibras de colágeno. Motivado por esse fato, os experimentos numéricos multiescala propostos aqui visam investigar a resposta uniaxial dos fascículos. Portanto, nessa condição de ensaio, o gradiente de deformação macroscópico é definido como

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}, \quad (13)$$

onde λ_1 representa o alongamento na direção axial às fibras e λ_2 e λ_3 são os alongamentos transversais. Limitando a deformação macroscópica à níveis fisiológicos, os valores de $\lambda_1 = 1,04$ (4% de deformação axial) e $\lambda_2 = \lambda_3 = 0,97$ (3% de deformações transversais) foram escolhidos com base em medições experimentais (ver Carniel, 2017). Os experimentos numéricos foram realizados à taxa de deformação macroscópica de 1%/s.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Esta seção tem por objetivo apresentar os resultados numéricos obtidos de análises multiescalas de um EVR do fascículo do tendão. Particularmente, foram investigadas as respostas cinemáticas microestruturais considerando duas condições de contorno multiescala clássicas: modelo de deslocamentos lineares nos contornos e o modelo de tração uniforme nos contornos. Os resultados referentes ao padrão de deslocamentos do EVR de ambas as simulações realizadas são mostrados na Fig. (3).

A Fig. (3a) mostra os deslocamentos em uma seção transversal às fibras no plano médio do EVR para uma deformação macroscópica axial de 4%. Nesse caso, empregou-se o modelo de deslocamentos lineares nos contornos. Nota-se que essa condição de contorno impõe um padrão linear de deslocamentos nos contornos, limitando significativamente a cinemática do EVR. Outro fato observado é referente ao padrão de deslocamentos transversais das fibras, as quais transladam para uma das extremidades dos contornos. Essa cinemática é consistente com o desenrolar das fibras helicoidais, e pode estar relacionada às grandes razões de Poisson observadas em tecidos tendinosos (Reese e Weiss, 2013). Além disso, percebe-se que esses grandes deslocamentos transversais levam a elevados - e questionáveis - níveis de deformação na matriz celular, sendo consequência direta da condição de contorno linear.

No segundo caso de estudo, utilizou-se o modelo de tração uniforme nos contornos, nas mesmas condições de ensaio empregadas no modelo de deslocamentos lineares nos contornos. Entretanto, ao atingir aproximadamente 1% de deformação axial macroscópica, a simulação por elementos finitos foi interrompida por problemas numéricos referentes aos

elevados níveis de deformação de malha na matriz celular, como pode ser visto na Fig. (3b). Nesse caso, o alto nível de deformação de malha influencia diretamente no determinante do jacobiano de elementos finitos, resultando no mau condicionamento da matriz tangente global. Essa questão está diretamente relacionada ao tipo de condição de contorno e os discrepantes valores de rigidez entre as fibras de colágeno e a matriz celular. O modelo multiescala de mínima restrição pode ser interpretado como uma tração uniforme nos contornos do EVR (ver Eq. (9)). Desse modo, como a matriz celular apresenta rigidez muito inferior a fase material das fibras, para valores equivalentes de tração nos contornos em ambas fases materiais, os deslocamentos resultantes na fase material menos rígida serão maiores.

Os resultados numéricos apresentados neste estudo indicam que ambas condições de contorno multiescala investigadas não representam satisfatoriamente a cinemática microestrutural do EVR proposto para o fascículo do tendão. Enquanto o modelo de deslocamentos lineares restringe consideravelmente a cinemática dos contornos, superestimando as deformações na matriz celular, o modelo de tração uniforme nos contornos mostrou-se ineficaz. É importante enfatizar, também, que a imposição da clássica condição de contorno periódica não é trivial no presente caso, devido à geometria não usual dos contornos do EVR.

Finalmente, conclui-se que novas condições de contorno multiescala - em detrimento das clássicas - devem ser propostas visando a representação adequada da cinemática do EVR, viabilizando assim novas investigação numéricas relacionadas à biomecânica dos fascículos dos tendões. Uma alternativa a ser estudada é a utilização de condições de contorno mistas, as quais combinam diferentes características dos modelos multiescala clássicos, tais como as apresentadas nos trabalhos de Hazanov e Amieur (1995), Pahr e Zysset (2008) e Mercer et al. (2015).

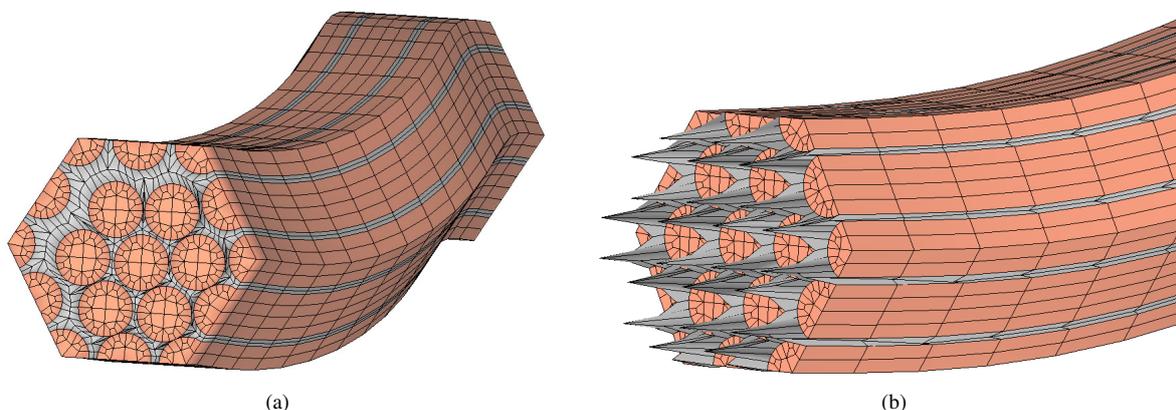


Figura 3. Resultados de deslocamentos do EVR. (a) Corte de uma seção transversal às fibras no plano médio do EVR utilizando o modelo de deslocamentos lineares nos contornos para uma deformação macroscópica axial de 4%. (b) Extremidades do EVR utilizando o modelo de tração uniforme nos contornos para uma deformação macroscópica axial de aproximadamente 1%.

6. REFERÊNCIAS

- ARO, A. A.; VIDAL, B. C.; PIMENTEL, E. R. Biochemical and anisotropical properties of tendons. **Micron, Elsevier Ltd**, v. 43, n. 2-3, p. 205-214, 2012.
- CARNIEL, T. A. Investigações numéricas multiescala do comportamento viscoelástico de tecidos tendinosos. **Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina**, 2017.
- DE SOUZA NETO, E. A.; FEIJÓO, R. A. Variational Foundations of Multi-Scale Constitutive Models of Solid : Small and Large Strain Kinematical Formulation, 2006.
- DE SOUZA NETO, E. A. ET AL. A. An RVE-based multiscale theory of solids with micro-scale inertia and body force effects. **Mechanics of Materials**, v. 80, p. 136-144, 2015.
- FRANCHI, M. ET AL. Collagen structure of tendon relates to function. **The Scientific World - Journal**, v. 7, p. 404-420, 2007.
- HAZANOV, S., AMIEUR, M., 1995. On overall properties of elastic heterogeneous bodies smaller than the representative volume. **International Journal of Engineering Science**, 33, (9), 1289-1301.
- KALSON, N. S. ET AL. A structure-based extracellular matrix expansion mechanism of fibrous tissue growth. **eLife**, v. 4, p. 1-22, 2015.
- KANNUS, P. Structure of the tendon connective tissue. **Scandinavian Journal of Medicine and Science in Sports**, v. 10, n. 6, p. 312-320, 2000.

- LIM, J. J.; TEMENOFF, J. S. Tendon and Ligament Tissue Engineering: Restoring Tendon/Ligament and Its Interfaces. In: MEYER, U. ET AL. Fundamentals of Tissue Engineering and Regenerative Medicine. **Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg**, cap. 20, p. 255-269, 2009.
- MERCER, B. S., MANDADAPU, K. K., PAPADOPOULOS, P., 2015. Novel formulations of microscopic boundary-value problems in continuous multiscale finite element methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 286, 268?292.
- ORTIZ, M.; STAINIER, L. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 1999.
- PAHR, D. H., ZYSSET, P. K., 2008. Influence of boundary conditions on computed apparent elastic properties of cancellous bone. **Biomechanics and Modeling in Mechanobiology**, 7, (6), 463?476.
- REESE, S. P.; WEISS, J. A. Tendon Fascicles Exhibit a Linear Correlation Between Poisson's Ratio and Force During Uniaxial Stress Relaxation. **Journal of Biomechanical Engineering**, 2013.

7. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à "Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES" e ao "Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq" pelo apoio financeiro a esta pesquisa.

8. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

Os autores são os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.