Universidade Federal de Juiz de Fora
Programa de Mestrado em Modelagem Computacional

Um modelo de acoplamento eletromecânico do tecido cardíaco através do método dos elementos finitos

Por

Bernardo Martins Rocha

JUIZ DE FORA, MG - BRASIL
ABRIL DE 2008

UM MODELO DE ACOPLAMENTO ELETROMECÂNICO DO TECIDO CARDÍACO ATRAVÉS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Bernardo Martins Rocha

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE POS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.SC.) EM MODELAGEM COMPUTACIONAL.

Aprovada por:

Prof. Elson Magalhães Toledo, D.Sc.

(Orientador)

Prof. Luis Paulo da Silva Barra, D.Sc.

(Co-orientador)

Prof. Rodrigo Weber dos Santos, D.Sc.

(Co-orientador)

Prof. Abimael Fernando Dourado Loula, D.Sc.

Prof. João Nisan Correia Guerreiro, D.Sc.

JUIZ DE FORA, MG - BRASIL

ABRIL DE 2008

Rocha, Bernardo Martins

Um modelo de acoplamento eletromecânico do tecido cardíaco através do método de elementos finitos / Bernardo Martins Rocha; Orientador: Prof. Elson Magalhães Toledo; Co-orientador: Luis Paulo da Silva Barra, Rodrigo Weber dos Santos. -- 2008.

114 f.

Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Faculdade de Engenharia Civil, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, 2008.

1. Biomecânica. 2. Método dos elementos finitos. 3. Coração-Fisiologia. I. Toledo, Elson Magalhães. II. Barra, Luis Paulo da Silva III. Santos, Rodrigo Weber dos. IV. Título.

CDD 577.3

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho à minha querida filha Giovanna.

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimento à Débora por todo carinho, paciência e amor durantes todo tempo junto e especialmente nos momentos difíceis quando sempre esteve ao meu lado.

Aos meus pais pela educação, incentivo e apoio, com o qual sempre pude contar.

Aos meus amigos e companheiros de classe durante o Mestrado, com os quais compartilhei conversas, dúvidas e trabalhos.

Ao meu orientador Elson pelo conhecimento transmitido, pelas inúmeras aulas e discussões, sem as quais este trabalho não seria possível, e ainda pelo incentivo e amizade.

Aos meus co-orientadores, Rodrigo e Luis Paulo, que também contribuiram para este trabalho, resolvendo inúmeras dúvidas que surgiram e também pelo incentivo e amizade.

A todos os professores do mestrado que se dedicam para tornar o curso cada vez melhor e que contribuiram de forma direta ou indireta para minha formação.

E finalmente, à UFJF pela oportunidade de fazer este curso e a CAPES pela bolsa concedida.

Resumo da Dissertação apresentada à UFJF como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

UM MODELO DE ACOPLAMENTO ELETROMECÂNICO DO TECIDO CARDÍACO ATRAVÉS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Bernardo Martins Rocha

Abril/2008

Muitas doenças cardíacas podem ser relacionadas a padrões de ativação elétrica nas paredes do coração, denominadas de arritimias.

Nesses casos a modelagem computacional tem se mostrado uma ferramenta útil na investigação e compreensão de complexos processos biofísics relacionados ao comportamento eletromecânico cardíaco.

O presente trabalho tem como objetivo o estudo do acoplamento do comportamento bio-eletro-mecânico em tecidos cardíacos como a parede do ventrículo esquerdo. O estudo envolve a determinação da propagação de ondas elétricas em tecidos do coração e a determinação de tensões e deformações nesses tecidos através de análise não linear de grandes deformações com materiais incompressíveis caracterizados por comportamento hiperelástico do tipo Mooney-Rivlin.

Orientador : Elson Magalhães Toledo
Programa: Mestrado em Modelagem Computacional

Abstract of Dissertation presented to UFJF as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

A MODEL OF ELECTROMECHANICAL COUPLING OF THE CARDIAC TISSUE THROUGH THE FINITE ELEMENT METHOD

Bernardo Martins Rocha

April/2008

Many cardiac diseases can be related to irregular patterns of electrical activation on the walls of the heart, these diseases are called arrhythmia.

In these cases computational modelling has shown to be a useful tool in the investigation and understanding of the complex biophysical processes related to the cardiac electromechanical behavior.

The present dissertation aims to study the coupling of the bioelectromechanical behavior in cardiac tissues such those which occur in the wall of the left ventricle. The study involves the determination of the propagation of electrical waves in the tissues of the heart and the determination of stresses and deformations in theses tissues through non-linear analysis with finite deformation considering isotropic hyperelastic materials characterized by Mooney-Rivlin materials.

Supervisor: Elson Magalhães Toledo
Department: Computational Modelling

Sumário

1 Introdução **1**

1.1 Organização do texto 3

2 Eletrofisiologia Cardíaca **4**

2.1 Eletrofisiologia Celular 6

2.1.1 A Membrana Celular 6

2.1.2 Difusão e a Lei de Fick 7

2.1.3 O Potencial de Nernst 7

2.1.4 Modelo Elétrico para a Membrana 9

2.1.5 Modelos para a Corrente Iônica 11

2.1.6 Canais Iônicos 12

2.1.7 Modelo de Hodgkin-Huxley 14

2.1.8 Modelo de FitzHugh-Nagumo 16

2.1.9 Modelo de Aliev-Panfilov 17

2.2 Modelos para o Tecido 18

2.2.1 Modelo Bidomínio 18

2.2.2 Modelo Monodomínio 20

2.3 Acoplamento Excitação-Contração 22

3 Elementos de Mecânica do Contínuo **25**

3.1 Cinemática do contínuo 26

3.1.1 Descrição Material e Espacial 27

3.1.2 Gradiente de Deformação 28

3.1.3 Tensores de Deformação de Green-Lagrange e Euler-Almansi . 28

3.1.4 Mudança de Volume 30

3.1.5 Mudança de Área 30

3.1.6 Velocidade e Derivada Material 32

3.1.7 Taxa de Deformação 33

3.2 Tensão 34

3.2.1 Tensão de Cauchy 34

3.2.2 Primeiro tensor de Piola-Kirchhoff 35

3.2.3 Segundo tensor de Tensão de Piola-Kirchhoff 37

3.3 Princípio da Conservação da Quantidade de Movimento Linear 38

3.4 Relações constitutivas 39

3.4.1 Elasticidade Linear 39

3.4.2 Elasticidade Não-Linear 41

3.4.3 Materiais Hiperelásticos 41

3.4.4 Materiais Hiperelásticos Isotrópicos 42

3.4.5 Materiais Hiperelásticos Incompressíveis 45

3.4.6 Tensor de Elasticidade 45

3.4.7 Material do tipo Mooney-Rivlin 46

3.4.8 Material do tipo Neo-Hookeano 47

3.5 Estado Plano de Tensão 47

4 Acoplamento Eletromecânico **50**

4.1 Efeito Eletromecânico 51

4.1.1 Tensão ativa 51

4.1.2 Propriedades mecânicas da tensão passiva 52

4.1.3 Problema Mecânico 53

4.2 Efeito Mecanoelétrico 54

4.3 Resumo do Problema Acoplado 56

5 Estratégias de Solução **57**

5.1 Solução do Problema de Deformações Finitas do Tecido Cardíaco . . 58

5.1.1 Princípio dos Trabalhos Virtuais 58

5.1.2 Linearização do Princípio dos Trabalhos Virtuais 60

5.1.3 Discretização das Equações da Cinemática 65

5.1.4 Discretização da Equação do Equilíbrio 66

5.1.5 Discretização da Equação do Equilíbrio Linearizada 68

5.1.6 Método de Newton-Raphson para solução 70

5.2 Solução do Problema Elétrico 73

5.3 Solução do Problema Acoplado 74

6 Resultados Numéricos **78**

6.1 Implementação numérica 78

6.1.1 Implementação do material tipo Mooney-Rivlin 80

6.2 Membrana com deslocamento prescrito 80

6.2.1 Experimento 1 - Malha triangular 81

6.2.2 Experimento 2 - Malha retangular 83

6.3 Membrana com furo circular 84

6.3.1 Experimento 3 - Aplicação de carga 84

6.3.2 Experimento 4 - Alongamento uniaxial 87

6.4 Acoplamento Eletromecânico - Experimento 5 91

7 Conclusões **94**

Lista de Figuras

2.1 Fluxo sanguíneo 4

2.2 Potencial de Ação 5

2.3 A membrana celular 7

2.4 Circuito elétrico para a membrana celular 10

2.5 Potencial de Ação do Modelo de Hodgkin Huxley 14

2.6 Variáveis m, n e h 15

2.7 Contração do sarcômero (Adaptado de [16]) 22

2.8 Actina, Troponina e Tropomiosina (Adaptado de [16]) 23

2.9 Ligação actina-miosina (Adaptado de [16]) 24

3.1 Movimento de um corpo 26

3.2 Mudança de Área 31

3.3 Vetor tensão 34

5.1 Linearização da Equação do Equílibrio 61

5.2 Acoplamento 76

6.1 Descrição do Problema 81

6.2 Experimento 1 - Malhas e campos de deslocamentos 82

6.3 Experimento 1 - Gráfico força total versus número de elementos . . . 83

6.4 Experimento 2 - Configuração indeformada e deformada 84

6.5 Experimento 3 - Descrição do problema 85

6.6 Experimento 3 - Configuração indeformada 85

6.7 Experimento 3 - Configuração deformada 86

6.8 Experimento 3 - Gráfico força-deslocamento 86

6.9 Experimento 4 - Descrição do problema 87

6.10 Experimento 4 - Malha utilizada 88

6.11 Experimento 4 - Gráfico força aplicada para p = 64 *lb.* 89

6.12 Experimento 4 - Gráfico força aplicada para p = 160 *lb.* 89

6.13 Experimento 4 - Configuração deformada do furo para p = 64 lb . . . 90

6.14 Experimento 4 - Configuração deformada do furo para p = 160 lb . . 90

6.15 Experimento 5 92

6.16 Exp. 5 - Ausência e presença da deformação no instante t = 95 . . . 93

6.17 Exp. 5 - Ausência e presença da deformação no instante t = 126 . . . 93

Lista de Tabelas

6.1 Parâmetros para o modelo eletromecânico acoplado 91

Lista de Algoritmos

1 Algoritmo de solução 72

Capítulo 1

Introdução

O coração é uma bomba eletromecânica responsável pelo transporte do sangue para o corpo e para os pulmões. A sua falha pode levar à morte súbita (*sudden cardiac death*) que é considerada como uma das principais causas de mortalidade no mundo industrializado.

A morte súbita é um tipo de morte resultante de uma falha abrupta da função do coração, a qual pode ser causada por arritimias, que são disfunções que afetam o sistema elétrico do músculo cardíaco produzindo ritmos anormais para o batimento deste. Este funcionamento irregular do ritmo cardíaco pode fazer com que os impulsos elétricos que provocam a contração dos músculos das paredes cardíacas se tornem mais rápidos (taquicardia) ou se comportem de forma caótica (fibrilação).

Desta forma para se obter um melhor conhecimento dos mecanismos responsáveis pela arritimia e de suas causas é importante o estudo da estrutura e do comportamento eletromecânico do coração. Durante anos o coração tem sido estudado por pesquisadores e cardiologistas que utilizam medidas clínicas como, por exemplo, a taxa de batimento cardíaco, a pressão sanguínea e o eletrocardiograma (ECG) para diagnosticar doenças cardíacas.

Recentemente a modelagem computacional da eletromecânica do coração tem se mostrado uma ferramenta extremamente útil tanto na análise e interpretação de medidas fisiológicas e observações clínicas quanto na compreensão de diversos fenômenos. Dentro deste contexto a modelagem matemática da propagação elétrica e da atividade mecânica de contração do coração envolve Equações Diferenciais

Parciais (EDPs) e suas respectivas ferramentas computacionais para se obter uma solução numérica aproximada.

Diferentes modelos matemáticos para descrição da atividade elétrica do coração têm sido propostos ao longo de anos, incluindo os modelos mais simples utilizados para descrever o ECG aos atuais modelos celulares que descrevem o mecanismo do potencial de ação para diferentes tipos de células do tecido cardíaco de forma precisa. Os modelos celulares podem ser incorporados em modelos maiores, discretos ou contínuos, com o objetivo de descrever o comportamento do tecido cardíaco através do estudo da propagação de ondas elétricas. Modelos contínuos, como por exemplo o modelo do Bidomínio, tem sido amplamente utilizados [32, 40].

Por outro lado, diversos modelos têm sido desenvolvidos para estudar o comportamento mecânico do coração assim como as propriedades mecânicas do tecido cardíaco. Nesse contexto é importante conhecer a estrutura do órgão e como mudanças na mesma afetam o bombeamento do sangue. A modelagem computacional baseada nos princípios da mecânica do contínuo permite um entendimento da atividade mecânica do coração. Para isso, são usados modelos para a anatomia do coração e relações constitutivas apropriadas que descrevem o comportamento mecânico do miocárdio. Alguns modelos para representar a geometria do órgão inteiro foram desenvolvidos [26, 25]. Estes utilizam o método dos elementos finitos para estudar a contração cardíaca.

Apesar do desenvolvimento na modelagem do comportamento puramente elétrico ou mecânico, ainda existem poucos modelos que procuram estudar a atividade eletromecânica acoplada, isto é, que consideram a influência da propagação elétrica na contração do tecido e a resposta desta deformação nas propriedades da propagação da onda elétrica.

O objetivo do presente trabalho é estudar e discutir um modelo eletromecânico inicialmente apresentado em [27], para que nos estudos relacionados a distúrbios cardíacos o efeito do acoplamento eletromecânico seja considerado.

Para isso, inicialmente foi adicionado a um programa de resolução do problema mecânico o material do tipo Mooney-Rivlin, e em seguida este código foi acoplado a um programa responsável pela simulação da propagação de ondas elétricas no coração, de tal forma que o modelo eletromecânico pudesse ser estudado. Para validar

a implementação deste material alguns experimentos numéricos foram realizados e comparados com problemas clássicos da literatura. Por fim, alguns experimentos foram realizados para o modelo eletromecanico proposto neste trabalho.

1.1 Organização do texto

Inicialmente algumas noções da eletrofisiologia cardíaca como a descrição matemática dada às células, aos canais iônicos, ao tecido cardíaco e ao potencial de ação são apresentadas no Capítulo 2, onde ao final é apresentado de forma breve o mecanismo de contração das células cardíacas.

No capítulo seguinte, são introduzidos aspectos da teoria da mecânica do contínuo necessários à abordagem de problemas que envolvem grandes deformações e grandes deslocamentos, os quais serão utilizados na modelagem da contração do músculo cardíaco.

O Capítulo 4 propõe um modelo para o acoplamento da atividade elétrica e mecânica exercida pelo tecido cardíaco. Este modelo descreve o mecanismo da contração como resultado da excitação do tecido, assim como a influência da deformação nas propriedades da condutividade da onda elétrica.

Em seguida, no Capítulo 5 uma formulação de elementos finitos é apresentada para a resposta do problema mecânico não-linear discutindo desde a formulação variacional utilizada até a solução numérica do problema não-linear através de um esquema incremental-iterativo baseado no método de Newton-Raphson. A solução do modelo de propagação elétrica é abordada de forma sucinta, e em seguida um esquema para solução do modelo acoplado é apresentada.

Resultados numéricos para experimentos com o material do tipo Mooney-Rivlin são apresentados e comparados com outras aproximações no Capítulo 6, onde ainda são apresentados os resultados do modelo acoplado. Finalmente, são apresentadas no Capítulo 7 algumas conclusões e propostas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Eletrofisiologia Cardíaca

O coração e os vasos sanguíneos formam o sistema cardiovascular do corpo, que é responsável pelo transporte de sangue. Anatomicamente o coração pode ser dividido em duas metades, a esquerda e a direita, responsáveis pela circulação do sangue. Cada metade é dividida entre outras duas partes, o átrio, por onde o sangue chega, e o ventrículo, responsável por bombear o sangue para fora do coração.

O átrio direito recebe o sangue desoxigenado do corpo, leva-o para o ventrículo direito que bombeia-o para os pulmões, onde o mesmo será oxigenado. Depois de ser oxigenado pelos pulmões o sangue volta ao coração através do átrio esquerdo, que transporta o sangue para o ventrículo esquerdo para finalmente ser bombeado para o corpo, conforme o esquema da Figura 2.1.

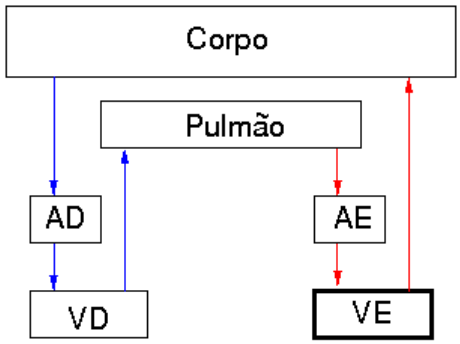

Figura 2.1: Fluxo sanguíneo

As células musculares que compõem o tecido cardíaco, chamadas de miócitos, pertencem a uma classe de células conhecidas como células excitáveis, as quais tem a

capacidade de responder a um estímulo elétrico e produzir um *potencial de ação*. A propagação do sinal elétrico em um tecido excitável ocorre devido a despolarização das células. No estado de repouso existe uma diferença de potencial através da membrana celular, de tal forma que o potencial intracelular é mais negativo do que o potencial extracelular, que é o potencial no espaço entre as células. Quando as células excitáveis são estimuladas, elas se despolarizam, ou seja, o seu potencial se torna mais positivo ou quase zero em um processo extremamente rápido. Em seguida acontece a repolarização que restaura a diferença de potencial transmembrânico ao seu valor de repouso. O ciclo completo de despolarização e repolarização é chamado de potencial de ação. A Figura 2.2 mostra um gráfico com o potencial de ação na membrana celular de um miócito canino ([35]).

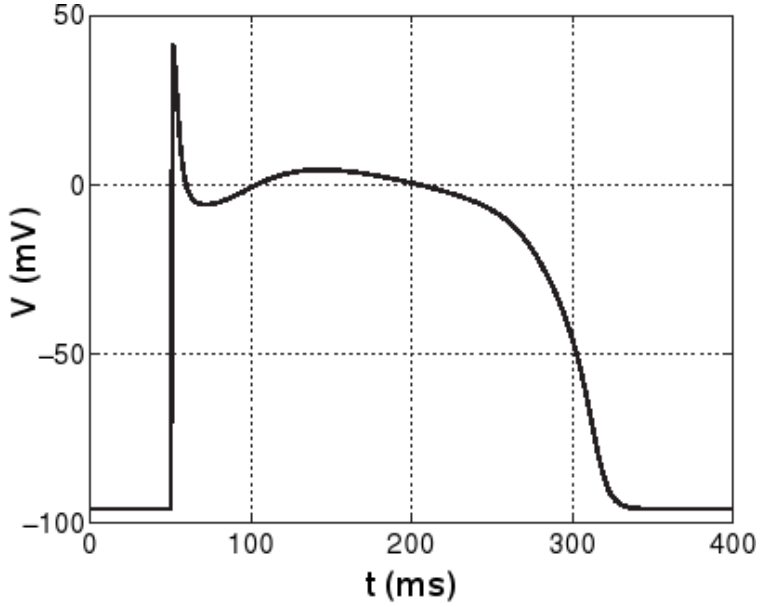

Figura 2.2: Potencial de Ação

Além de serem excitáveis, as células cardíacas são contráteis. A atividade mecânica de contração está associada à excitação elétrica do miócito. Quando uma célula é estimulada, ela permite a propagação do potencial de ação para as células vizinhas através do transporte intercelular de íons por proteínas que formam as *junções do tipo gap*. Através da propagação do estímulo elétrico as células cardíacas são capazes de estimular todo o coração, fazendo assim com que este se contraia e bombeie o sangue.

A atividade elétrica que dá início a contração do coração começa em um conjunto

de células conhecidas como *nó sinoatrial*, localizado abaixo da veia cava no átrio direito e se propaga através do átrio alcançando o miocárdio ventricular através do *feixe de His*. Em cada ventrículo este se divide em uma rede de fibras de rápida condutividade denominadas de *fibras de Purkinje*, as quais conduzem o sinal elétrico rapidamente até o interior dos ventrículos permitindo que os mesmos se contraiam e bombeiem o sangue. Os átrios e os ventrículos são separados por um conjunto especial de células conhecido como *nó atrioventricular*, que conduz de forma lenta o pulso elétrico até os ventrículos, provendo assim um sincronismo que garante que os átrios bombeiem o sangue para os ventrículos antes da contração ventricular.

Para modelar matematicamente a propagação da onda elétrica no coração, responsável pela contração, é necessário descrever, a dinâmica de íons através da membrana celular e o comportamento elétrico da mesma, bem como um modelo para o tecido que descreve como as células estão interconectadas. Neste capítulo, descreve-se, inicialmente, o funcionamento da célula e alguns modelos celulares e por fim, propostas de modelos para o tecido cardíaco, como por exemplo, os modelos Monodomínio e o Bidomínio.

2.1 Eletrofisiologia Celular

2.1.1 A Membrana Celular

As células são envoltas por uma membrana celular que serve como uma barreira separando o meio intracelular do meio extracelular. Esta membrana é constituída de uma bi-camada fosfolipídica, na qual cada lípidio contém duas caudas hidrofóbicas ligadas a uma cabeça hidrofílica. Em um meio aquoso as caudas estão alinhadas para dentro, repelidas pela água, enquanto a cabeça se encontra na superfície da bi-camada, formando uma barreira para moléculas carregadas, veja Figura 2.3 ([35]).

Aderidas à membrana celular existem proteínas que formam os chamados canais iônicos, que são responsáveis pelo mecanismo de transferência de determinados tipos de íons para dentro e fora da célula. Tanto o meio intracelular quanto o meio extracelular [23] são constituídos de uma solução aquosa de sais, principalmente de $NaCL$ e KCl, que se dissociam em íons de Na^+, K^+ e Cl^-.

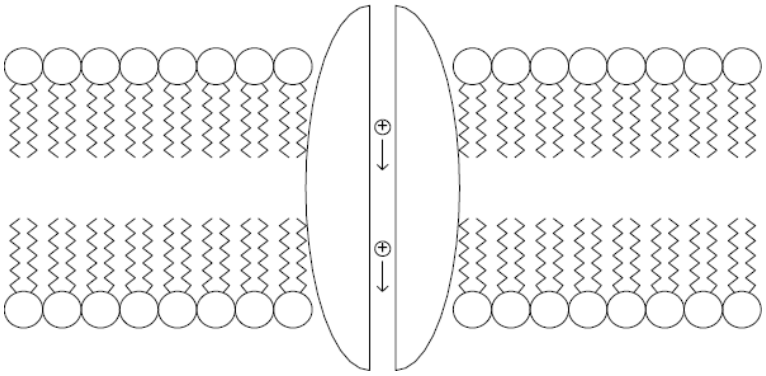

Figura 2.3: A membrana celular

A membrana celular impede o fluxo destes íons para dentro e fora da célula, mantendo assim uma diferença de concentração de íons. Esta diferença de concentração de íons gera uma diferença de potencial através da membrana celular.

2.1.2 Difusão e a Lei de Fick

Devido a diferença de concentração de íons entre o meio intracelular e extracelular, gradientes de concentração para cada tipo de íon são formados através da membrana celular que induzem a difusão de partículas de uma região de alta para uma de baixa concentração.

Esse processo de difusão, é descrito matematicamente pela Lei de Fick

$$\boldsymbol{J}_F = -D\nabla c \tag{2.1}$$

onde ∇c é o gradiente de concentração do íon c; D é o coeficiente de difusão do meio; J_F é o fluxo dos íons.

2.1.3 O Potencial de Nernst

Um dos efeitos do movimento de íons através da membrana celular é a criação de uma diferença de potencial elétrico.

Suponha que a membrana celular separa o meio intracelular do extracelular com diferentes concentrações de um determinado íon S, e que esta solução esteja eletricamente neutra, ou seja, está balanceada por um outro íon de sinal contrário ao de

S, diga-se, S'.

Se a membrana é permeável a apenas um dos íons, por exemplo, ao íon S, de acordo com a Lei de Fick devido a diferença de concentração haverá um fluxo desses íons de um lado para o outro. Desta forma, como a membrana só é permeável aos íons S, S' não irá se difundir pela membrana, e a difusão de S cria uma diferença de cargas entre os meios, resultando em um campo elétrico no sentido oposto ao da difusão.

Deste modo a força exercida pelo campo elétrico direciona os íons na direção contrária à da difusão e o equílibrio acontece quando o fluxo de íons devido a diferença de concentração é igual em tamanho e oposto em sinal ao fluxo devido a diferença de potencial.

Assim, o equílibrio é atingido quando o fluxo total $\boldsymbol{J}$ do íon S através da membrana celular for igual a zero. Como tem-se dois fluxos, um devido a difusão $\boldsymbol{J}_F$ e outro devido a ação de forças elétricas $\boldsymbol{J}_P$, o equílibrio é obtido quando a seguinte equação for satisfeita

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_F + \boldsymbol{J}_P = 0 \tag{2.2}$$

A contribuição do campo elétrico para o fluxo de íons é dada pela equação de Planck

$$\boldsymbol{J}_P = -m\frac{z}{|z|}c\nabla V \tag{2.3}$$

onde m é a mobilidade do íon no líquido. A carga do íon é denotada por z e a valência do íon por $|z|$, de tal forma que $z/|z|$ é o sinal da força no íon; c é a concentração do íon e V é o potencial elétrico, logo ∇V é o campo elétrico.

A relação entre a mobilidade do íon m e o coeficiente de difusão D, determinado por Einstein, é dada por

$$m = \boldsymbol{D}\frac{|z|F}{RT} \tag{2.4}$$

onde F é a constante de Faraday, R é a constante ideal dos gases e T é a temperatura absoluta. Utilizando a relação anterior pode-se escrever $\boldsymbol{J}_P$ como

$$\boldsymbol{J}_P = -\boldsymbol{D}\frac{zF}{RT}c\nabla V \tag{2.5}$$

E portanto o fluxo total é dado por

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J} &= \boldsymbol{J}_F + \boldsymbol{J}_P \\ &= -\boldsymbol{D}\nabla c - \boldsymbol{D}\frac{zF}{RT}c\nabla V \\ &= -\boldsymbol{D}\left(\nabla c + \frac{zF}{RT}c\nabla V\right) \end{aligned} \tag{2.6}$$

Tratando-se de fluxo através dos canais iônicos pode-se considerar as variações apenas ao longo do comprimento do canal, o que permite estabelecer uma relação unidimensional para esta equação, na qual o eixo x está direcionado ao longo do canal. Considerando $x = 0$ como interior do canal e $x = L$ como a borda externa do canal ao se reescrever (2.6) tem-se

$$J = -D\left(\frac{dc}{dx} + \frac{zF}{RT}c\frac{dV}{dx}\right) \tag{2.7}$$

Como o fluxo é nulo, $J = 0$, tem-se

$$\frac{dc}{dx} + \frac{zF}{RT}c\frac{dV}{dx} = 0 \tag{2.8}$$

e dividindo por c e integrando em x de 0 a L, obtem-se

$$\int_0^L \frac{1}{c}\frac{dc}{dx} + \int_0^L \frac{zF}{RT}\frac{dV}{dx} = 0 \tag{2.9}$$

e finalmente calculando a integral

$$\ln(c)\big|_{c(0)}^{c(L)} = -\frac{zF}{RT}\left[V(L) - V(0)\right] = \frac{zF}{RT}V_m \tag{2.10}$$

pois o potencial transmembrânico é $V_m = V_i - V_e$. Assim, no equílibrio, quando o fluxo é nulo, o potencial através da membrana é dado pelo potencial de Nernst:

$$V_{eq} = \frac{RT}{zF}\ln\left(\frac{c_e}{c_i}\right) \tag{2.11}$$

2.1.4 Modelo Elétrico para a Membrana

Um capacitor é formado por duas placas condutoras separadas por um material isolante. Como a membrana separa cargas entre os meios intracelular e o meio extracelular, em termos elétricos esta pode ser modelada como um capacitor. Para a membrana a bi-camada fosfolípidica funciona como um material isolante, enquanto o meio intracelular e extracelular como as placas condutoras.

A capacitância de um capacitor é definida como a razão entre a carga armazenada e a voltagem necessária para armazenar esta carga, ou seja

$$C_m = \frac{Q}{V} \tag{2.12}$$

Deste modo, além de separar cargas a membrana impede a passagem de íons entre o meio intracelular e extracelular. Para completar o modelo da membrana, um resistor é colocado em paralelo ao capacitor. A Figura 2.4 ilustra o circuito elétrico correspondente ao modelo elétrico da membrana.

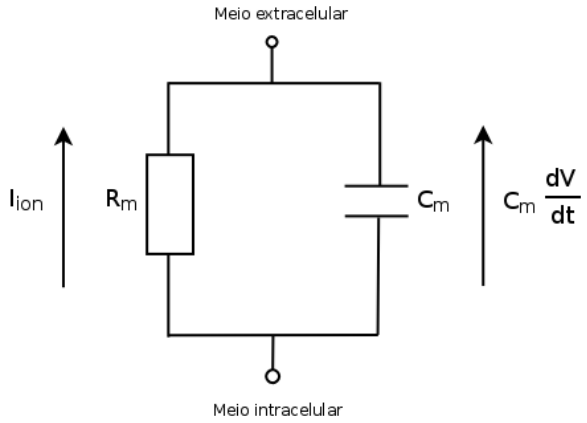

Figura 2.4: Circuito elétrico para a membrana celular

O fluxo de íons muda a quantidade de carga separada pelo capacitor, assim como o potencial transmembrânico, através da relação $Q = C_m V$ definida na Equação (2.12). Considerando a variação de carga no tempo, tem-se

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d(C_m V)}{dt} = C_m \frac{dV}{dt} \tag{2.13}$$

O termo dQ/dt é a variação de carga no tempo, que corresponde a uma corrente, denominada de corrente capacitiva. A corrente total através da membrana celular é definida como a soma da corrente capacitiva com a corrente iônica que atravessa os canais,

$$I_m = I_{ion} + I_c \tag{2.14}$$

Substituindo a Equação (2.13) segue que

$$I_m = I_{ion} + C_m \frac{dV}{dt} \tag{2.15}$$

Se o circuito da Figura 2.4 for fechado, isto é, não há transporte de íons para dentro ou fora da área, pela conservação da corrente temos

$$I_{ion} + C_m \frac{dV}{dt} = 0 \tag{2.16}$$

2.1.5 Modelos para a Corrente Iônica

Quando o potencial através da membrana é diferente do potencial de equílibrio de Nernst [34], determinado pela Equação (2.11), uma corrente de íons passa pelos canais iônicos. Portanto é necessário estabelecer como esta corrente se relaciona com o potencial transmembrânico, e para isso serão apresentados dois modelos.

O primeiro é conhecido como modelo linear pois estabelece uma relação linear entre a corrente e a voltagem, como

$$I = G(V - V_{eq}) \tag{2.17}$$

onde G é a condutância, definida como o inverso da resistência do canal. A condutância dependendo do tipo de canal iônico pode ser uma constante ou uma função do tempo, do potencial elétrico e até mesmo da concentração iônica.

O outro modelo é deduzido a partir da hipótese de que o campo elétrico é constante na membrana, para mais detalhes veja [23]. Também conhecido como equação de Goldman-Hodgkin-Katz (GHK), considera-se uma relação não-linear entre o potencial transmembrânico e a corrente, definida por

$$I = P_S \frac{z^2F^2}{RT} V \frac{c_i - c_e \exp(\frac{-zFV}{RT})}{1 - \exp(\frac{-zFV}{RT})} \tag{2.18}$$

onde $P_S = \frac{D}{L}$ é a permeabilidade da membrana ao íon considerado e c_i e c_e são as concentrações interna e externa deste íon, respectivamente.

Ambos modelos devem satisfazer o potencial de equilíbrio de Nernst, ou seja, quando o potencial transmembrânico é igual ao potencial de Nernst, não há fluxo, pois a força difusiva e elétrica estão em equilíbrio. Para o modelo linear quando $V = V_{eq}$, é fácil ver que a corrente é zero, enquanto que para o modelo GHK fazendo

$V = V_{eq}$ e com o uso da Equação (2.11) tem-se

$$\begin{aligned} I &= P_S z F \frac{zF}{RT} V_{eq} \frac{c_i - c_e \exp(\frac{-zFV_{eq}}{RT})}{1 - \exp(\frac{-zFV_{eq}}{RT})} \\ &= P_S z F \ln\left(\frac{c_e}{c_i}\right) \frac{c_i - c_e \exp(-\ln\left(\frac{c_e}{c_i}\right))}{1 - \exp(-\ln\left(\frac{c_e}{c_i}\right))} \\ &= P_S z F \ln\left(\frac{c_e}{c_i}\right) \frac{c_i - c_e(\frac{c_i}{c_e})}{1 - (\frac{c_i}{c_e})} \\ &= P_S z F \ln\left(\frac{c_e}{c_i}\right) \frac{c_i - c_i}{1 - \frac{c_i}{c_e}} = 0 \end{aligned} \tag{2.19}$$

ou seja, também neste modelo a corrente é zero quando o potencial transmembrânico é igual ao potencial de Nernst.

2.1.6 Canais Iônicos

Como dito, os canais iônicos são formados por proteínas que aderidas à membrana permitem o transporte de íons. Quando os canais iônicos são descritos por condutâncias constantes, o fluxo de íons pode ser descrito por um modelo linear para a corrente, de acordo com a Equação (2.17), onde G é a condutância constante.

Entretanto, a condutância dos canais iônicos pode variar no tempo em resposta a mudanças no potencial transmembrânico. Tal ocorre pois determinadas partes do canal que estão carregadas fazem as moléculas mudarem de forma quando o potencial da membrana muda.

Do ponto de vista da modelagem os canais iônicos são representados como um conjunto de sub-unidades, as quais podem estar abertas ou fechadas sendo que a passagem de íons só ocorre quando todas as sub-unidades estão abertas. Denotando a concentração de canais no estado aberto e fechado por $[O]$ e $[C]$, respectivamente, e tendo em vista que a concentração total de canais $[O] + [C]$ é constante.

As mudanças entre os estados aberto e fechado podem ser descritas por

$$C \underset{\beta}{\overset{\alpha}{\rightleftharpoons}} O \tag{2.20}$$

onde α é taxa com que os canais se abrem e β a taxa com que os canais se fecham, e ambas dependem do potencial transmembrânico V. A taxa com a qual os canais

abertos se fecham é proporcional à concentração de canais abertos, e analogamente, a taxa com a qual os canais fechados se abrem é proporcional à concentração de canais fechados. Isto é

$$\frac{d[O]}{dt} = \alpha(V)[C] - \beta(V)[O] \tag{2.21}$$

Pode-se dividir esta equação pela concentração total $[C] + [O]$ e obter

$$\frac{dg}{dt} = \alpha(V)(1 - g) - \beta(V)g \tag{2.22}$$

onde $g = [O]/([O] + [C])$ é a fração de canais abertos. Para um simples canal, g é a probabilidade deste canal iônico estar aberto.

A maioria dos canais iônicos são compostos por várias sub-unidades, que podem estar abertas ou fechadas. Assim a Equação (2.22) pode ser vista como a probabilidade de cada uma destas sub-unidades estar aberta.

Logo para um canal com n sub-unidades iguais, as quais se abrem e fecham independentes umas das outras, a probabilidade O do canal estar aberto é

$$O = g^n \tag{2.23}$$

onde g é dado por (2.22).

Entretanto, muitas vezes os canais iônicos são formados por diferentes sub-unidades, que tem a sua dinâmica governada por (2.22), porém com diferentes taxas de abertura e fechamento α e β. Por exemplo, um canal com uma sub-unidade g e outra h, tem as taxas definidas por α_g, β_g, α_h e β_h. Finalmente, se o canal tem m sub-unidades g e n sub-unidades do tipo h, a probabilidade do canal estar aberto é definida por

$$O = g^m h^n \tag{2.24}$$

Por fim a condutividade pode ser computada pelo produto da condutividade máxima (quando todos os canais estão abertos) pela proporção de canais abertos. Logo, a corrente iônica é da forma:

$$I = G_{max} O(V - V_{eq}) \tag{2.25}$$

onde G_{max} é a condutância máxima.

2.1.7 Modelo de Hodgkin-Huxley

Nas células existem várias correntes iônicas que contribuem para mudanças no potencial da membrana. As correntes mais importantes são formadas de íons de sódio, potássio e cálcio. Um modelo para a corrente iônica total através da membrana pode ser elaborado utilizando o modelo linear para a corrente de cada tipo de íon. Em 1952 surgiu o primeiro modelo deste tipo, proposto por Hodgkin e Huxley, que receberam em 1963 o Prêmio Nobel de Medicina por este trabalho.

O modelo foi proposto com o objetivo de explicar o mecanismo de geração do potencial de ação em células do axônio gigante de lula, que embora inadequado para estudos relevantes com o coração, tem sido utilizado como base para muitos outros modelos de células nervosas e cardíacas.

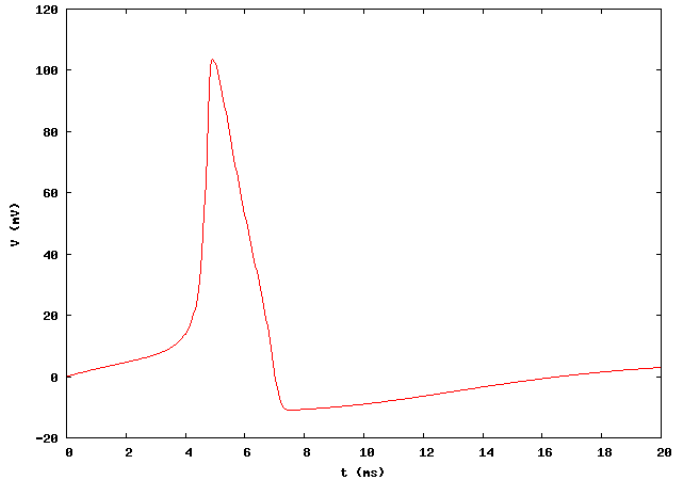

Figura 2.5: Potencial de Ação do Modelo de Hodgkin Huxley

Neste axônio, assim como em vários tipos de células nervosas, as principais correntes iônicas são de sódio e potássio, denominadas de I_{Na} e I_K, respectivamente. Embora existam outras, no modelo proposto as demais correntes foram agrupadas em uma única corrente, denominada corrente de fuga e denotada por I_L. Assim a corrente iônica pode ser escrita como

$$I_{ion} = I_{Na} + I_K + I_L \tag{2.26}$$

Adotando os modelos lineares para as correntes iônicas, elas são determinadas pelas condutâncias g_{Na}, g_K e g_L, respectivamente para os íons de sódio e potássio e

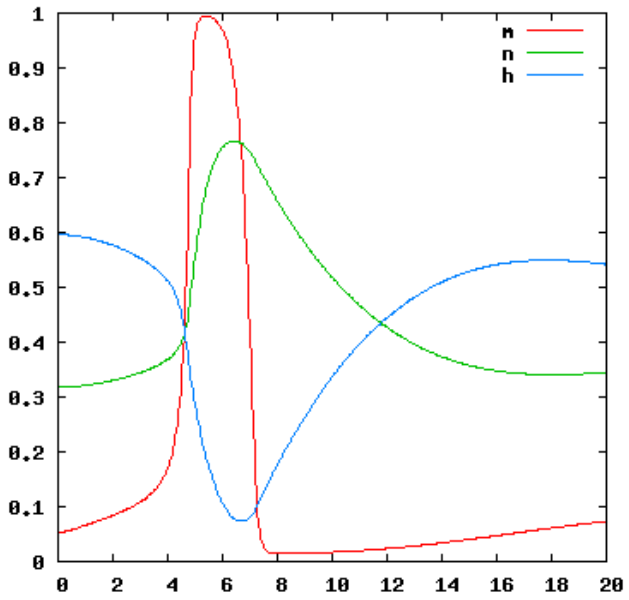

Figura 2.6: Variáveis m, n e h

para a corrente de fuga e também pela diferença entre o potencial transmembrânico e as voltagens de equilíbrio (potencial de Nernst) dadas por V_{Na}, V_K e V_L. Logo

$$I_{Na} = g_{Na}(V - V_{Na}) \tag{2.27}$$

$$I_K = g_K(V - V_K) \tag{2.28}$$

$$I_L = g_L(V - V_L) \tag{2.29}$$

As equações para as correntes em conjunto com as Equações (2.16) e (2.26) fornecem

$$-C_m\frac{dV}{dt} = I_{ion} = I_{Na} + I_K + I_L \tag{2.30}$$

$$= g_{Na}(V - V_{Na}) + g_K(V - V_K) + g_L(V - V_L) \tag{2.31}$$

A condutânica g_L é considerada constante, e portanto o fluxo de íons é descrito com o modelo linear. Entretanto as demais condutâncias podem variar no tempo em resposta a mudanças no potencial transmembrânico. No modelo de Hodgkin-Huxley a condutância do sódio e potássio são dependentes do tempo e da voltagem, e essa dependência é modelada por Equações Diferenciais Ordinárias do tipo (2.22) que descrevem como os canais iônicos se abrem e fecham.

O canal de sódio no modelo de Hodgkin Huxley é formado por quatro sub-unidades, três das quais são iguais, enquanto o canal de potássio é formado por

quatro sub-unidades idênticas. Desta forma, como discutido anteriormente, pode-se escrever as correntes iônicas como

$$I_{Na} = \bar{g}_{Na} m^3 h (V - V_{Na}) \tag{2.32}$$

$$I_K = \bar{g}_K n^4 (V - V_K) \tag{2.33}$$

$$I_L = g_L (V - V_L) \tag{2.34}$$

Assim o modelo de Hodgkin Huxley pode ser sintetizado como

$$-C_m \frac{dV}{dt} = \bar{g}_{Na} m^3 h (V - V_{Na}) + \bar{g}_K n^4 (V - V_K) + g_L (V - V_L) \tag{2.35}$$

onde as variáveis m, n e h obedecem a

$$\frac{dg}{dt} = \alpha_i(V)(1 - g) - \beta_i(V) g \tag{2.36}$$

com $i = m, n, h$. Para mais detalhes sobre a definição das funções α_i e β_i veja [23].

As Figuras (2.5) e (2.6) apresentam o potencial de ação gerado pelo modelo de Hodgkin e Huxley e as variáveis m, n e h que controlam a abertura dos canais iõnicos.

2.1.8 Modelo de FitzHugh-Nagumo

Existem duas classes de modelos matemáticos para descrever a corrente iônica I_{ion}. Na primeira estão os modelos iônicos, que são baseados em observações experimentais e geralmente incluem várias equações do tipo de Hodgkin-Huxley para descrever o comportamento dos canais iônicos através da membrana. Alguns desses modelos possuem entre 10 a 60 EDOs para descrever a concentração de íons nas células. Por outro lado existem ainda modelos qualitativos, os quais possuem uma abordagem mais simples que procura descrever e reproduzir características macroscópicas do tecido cardíaco como por exemplo a duração do potencial de ação, e o período refratário, isto é, um período após a excitação no qual estímulos adicionais não geram outro potencial de ação.

O modelo de FitzHugh-Nagumo foi desenvolvido com o intuito de representar o comportamento qualitativo do modelo de Hodgkin-Huxley de uma forma mais simples utilizando duas variáveis: uma rápida u e uma lenta v. A variável u representa o potencial transmembrânico enquanto que a variável v descreve a inibição.

O modelo pode ser descrito por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u - \frac{u^3}{3} - v}{\epsilon} \tag{2.37}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \epsilon(u + \beta - \gamma v) \tag{2.38}$$

onde os valores típicos para os parâmetros são: $0 < |\beta| < \sqrt{3}$, $0 < \gamma < 1$ e $\epsilon \ll 1$.

Para mais detalhes qualitativos sobre o modelo de FHN, como o comportamento do plano de fases, derivação do modelo e diagrama do circuito elétrico veja [23].

2.1.9 Modelo de Aliev-Panfilov

Embora o modelo de FitzHugh-Nagumo descreva bem aspectos qualitativos da propagação da excitação, o modelo não descreve de forma adequada alguns parâmetros quantitativos do tecido cardíaco como a forma do potencial de ação e propriedades da recuperação (*restitution properties*) do tecido. Esses parâmetros são importantes em simulações que procuram estudar as arritimias cardíacas.

O modelo de Aliev-Panfilov [2] foi criado como uma modificação do modelo de FHN com o intuito de descrever melhor as características de recuperação do tecido, bem como para representar de modo adequado a forma do potencial de ação. Desta forma o modelo pode ser utilizado em simulações computacionais para o estudo de arritimias.

Aliev e Panfilov propuseram o seguinte modelo:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -kV(V - a)(V - 1) - rV \tag{2.39}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \left(\epsilon + \frac{\mu_1 r}{\mu_2 + V}\right)(-r - kV(V - a - 1)) \tag{2.40}$$

onde V é o potencial transmembrânico, r é a variável que representa a inibição (repolarização) e t é o tempo. O parâmetro a é o limiar (*threshold*), enquanto os outros parâmetros k, μ_1 e μ_2 não possuem nenhum significado fisiológico, são apenas escolhidos com o intuito de reproduzir determinadas caracterśticas do tecido cardíaco tais como a forma do potencial de ação, o período refratário e a duração do potencial de ação.

É importante ressaltar que o modelo de Aliev-Panfilov, como um modelo do tipo FHN, possui as suas variáveis V, r e t em unidades adimensionais. Para maiores de-

talhes sobre os mapeamentos necessários para comparações com dados experimentais consulte [2] e [27].

2.2 Modelos para o Tecido

As células cardíacas são conectadas entre si pelas chamadas junções gap formando um canal entre células adjacentes, o qual permite o fluxo de corrente elétrica na forma de íons e portanto funciona como uma conexão elétrica entre células vizinhas. Desta forma, uma célula estimulada transmite o sinal elétrico para as células vizinhas, permitindo que o estímulo elétrico de uma parte do coração se propague e ative a contração do coração inteiro.

O objetivo desta seção é descrever como as células estão interconectadas formando o tecido cardíaco pelo qual a onda elétrica se propaga assim como discutir as propriedades condutivas da estrutura do tecido. Para isso dois modelos são apresentados, o Monodomínio e o Bidomínio, que se diferem quanto ao número de domínios utilizados para o fluxo de corrente elétrica.

2.2.1 Modelo Bidomínio

Uma primeira abordagem para modelar o tecido trata cada célula como uma unidade separada e assim controla a variação de potencial tanto no meio intracelular quanto no meio extracelular. Entretanto, a quantidade de células no coração é tão grande que esta abordagem se torna inadequada. Assim utiliza-se uma aproximação contínua do tecido capaz de distinguir os domínios intracelular e extracelular.

O modelo do Bidomínio descreve a estrutura do tecido de uma forma homogenizada [23], na qual as equações resultantes descrevem o fenômeno de forma macroscópica, o que é bastante adequado para a maioria das situações. O tecido é dividido em dois domínios: o intracelular e o extracelular. Os domínios são contínuos pois no intracelular as células estão interconectadas entre si através das junções do tipo gap, enquanto no extracelular a corrente elétrica flui nos espaços entre as células.

Em cada um dos domínios define-se um potencial elétrico, que em cada ponto pode ser visto como uma quantidade média sobre um pequeno volume. Assim, cada

ponto no espaço é composto de uma fração do domínio intracelular e uma fração do extracelular. Consequentemente cada ponto possui um potencial intracelular e extracelular denotados por V_i e V_e assim como duas correntes J_i e J_e, respectivamente.

A relação entre os potenciais e as correntes é dada pela Lei de Ohm, logo

$$J_i = -\boldsymbol{D}_i \nabla V_i \tag{2.41}$$

$$J_e = -\boldsymbol{D}_e \nabla V_e \tag{2.42}$$

onde $\boldsymbol{D}_i$ e $\boldsymbol{D}_e$ são as condutividades de cada domínio. Em cada ponto do espaço a corrente total é dada por $J_t = J_i + J_e$, e a menos que exista uma fonte externa de corrente, esta corrente é conservada, ou seja

$$\nabla \cdot J_t = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V_i + \boldsymbol{D}_e \nabla V_e) = 0 \tag{2.43}$$

O potencial transmembrânico em cada ponto é definido como a diferença do potencial intracelular para o potencial extracelular

$$V = V_i - V_e \tag{2.44}$$

De acordo com o modelo da membrana, descrito previamente, a corrente transmembrânica é definida como a soma de uma corrente iônica e uma corrente capacitiva, portanto

$$I_m = \chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) \tag{2.45}$$

onde χ é uma constante utilizada para converter a corrente transmembrânica de unidade de área para unidade de volume. A corrente iônica I_{ion} assim como a capacitância C_m são convenientemente medidas por unidade de área da membrana.

Qualquer corrente que deixa o meio intracelular é uma corrente transmembrânica, assim o tecido está acoplado de acordo com a seguinte equação

$$\chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V_i) \tag{2.46}$$

O modelo Bidomínio completo pode ser descrito pelas Equações (2.43) e (2.46). Utilizando a relação $V_i = V_e + V$ é possível eliminar o potencial intracelular das equações

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla (V_e + V)) = \chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) \tag{2.47}$$

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla (V_e + V)) + \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_e \nabla V_e) = 0 \tag{2.48}$$

e ainda, rearranjando os termos, tem-se

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) + \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V_e) = \chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) \quad (2.49)$$

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) + \nabla \cdot ((\boldsymbol{D}_i + \boldsymbol{D}_e) \nabla V_e) = 0 \quad (2.50)$$

que é a formulação padrão do modelo Bidomínio, proposta pela primeira vez na década de 70 por Tung e Geselowitz [38] e bem aceita para descrever o comportamento elétrico do tecido cardíaco.

Vale ressaltar que a condutividade no coração não é a mesma em todas as direções, ou seja o tecido cardíaco é anisotrópico, e portanto $\boldsymbol{D}_i$ e $\boldsymbol{D}_e$ são tensores de segunda ordem.

O músculo do coração é constituído de fibras, nas quais a condutividade elétrica é maior no sentido das fibras que são organizadas em folhas de fibras. Assim tem-se três direções para a condutividade, sendo elas: paralela às fibras, perpendicular às fibras mas paralelo as folhas das fibras ou perpendicular as folhas. Para maiores detalhes das propriedades condutivas do tecido cardíaco veja [35].

2.2.2 Modelo Monodomínio

O modelo Bidomínio é um sistema de equações diferenciais parciais de difícil resolução. Entretanto, é possível simplificar o mesmo e obter um modelo mais simples que descreve apenas o comportamento do potencial transmembrânico V. Para isso considera-se que os domínios intracelular e extracelular possuem uma taxa igual de anisotropia, ou seja, $\boldsymbol{D}_e = \lambda \boldsymbol{D}_i$ onde λ é uma constante. Ou ainda, pode-se dizer simplesmente que as condutividades dos dois domínios são proporcionais.

Assim é possível eliminar $\boldsymbol{D}_e$ das Equações (2.49) e (2.50) e obter

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) + \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V_e) = \chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) \quad (2.51)$$

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) + (1 + \lambda) \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V_e) = 0 \quad (2.52)$$

Pode-se reescrever (2.52) como

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V_e) = -\frac{1}{(1 + \lambda)} \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) \quad (2.53)$$

e substituindo em (2.51) vem

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) - \frac{1}{(1+\lambda)} \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) = \chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) \tag{2.54}$$

e rearranjando os termos

$$\frac{\lambda}{(1+\lambda)} \nabla \cdot (\boldsymbol{D}_i \nabla V) = \chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) \tag{2.55}$$

Se o tecido for considerado isotrópico, tem-se

$$D \, \nabla^2 V = \chi \left(C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \right) \tag{2.56}$$

onde D é um escalar.

Como uma simplificação do Bidomínio, o modelo do Monodomínio decrito pela Equação (2.55) é mais simples tanto matematicamente quanto computacionalmente, porém como consequência possui algumas limitações. Uma delas é a hipótese de taxas de anisotropia iguais para o meio intracelular e extracelular, pois experimentos com as condutividades de ambos os meios provam que isto não acontece. Além disso, é difícil de se especificar o parâmetro λ para que se obtenha uma boa aproximação das condutividades. Portanto o modelo do Monodomínio torna-se útil para análise e estudos mais simples, ao passo que simulações realísticas devem ser realizadas utilizando o Bidomínio.

É importante ressaltar que o termo I_{ion} nas equações anteriores descreve a corrente iônica na célula, e portanto irá depender do modelo celular utilizado. Para o modelo de Hodgkin-Huxley por exemplo, I_{ion} é descrito pela Equação (2.26) que descreve o fluxo de íons de sódio e potássio e de outros íons agrupados numa corrente de fuga.

Desta forma é possível utilizar o modelo Monodomínio para representação do tecido associado a um determinado modelo celular. Em particular, para o modelo de Aliev-Panfilov associando a Equação (2.55) às Equações (2.39) e (2.40) tem-se

$$C_m \frac{\partial V}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D} \nabla V) - kV(V-a)(V-1) - rV + I_s \tag{2.57}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \left(\varepsilon + \frac{\mu_1 r}{\mu_2 + V} \right) (-r - kV(V-a-1)) \tag{2.58}$$

que descreve a propagação elétrica para células representadas pelo modelo de Aliev-Panfilov.

2.3 Acoplamento Excitação-Contração

Como já foi discutido, as células do músculo cardíaco são excitáveis e possuem a capacidade de se contrairem quando são estimuladas. Nesta seção discute-se sucintamente o mecanismo responsável pela contração muscular cardíaca, o acoplamento excitação-contração (*excitation-contraction coupling*). Inicialmente, discute-se um pouco sobre a estrutura microscópica e a organização molecular dos miócitos com o intuito de complementar a descrição da contração.

As células musculares cardíacas possuem uma forma cilíndrica com comprimentos que variam entre 80 e 100 μm, diâmetros entre 10 a 20 μm e são envoltas pela membrana celular que separa o espaço extracelular do intracelular. Este último, é formado pelo núcleo, mitocôndria, miofibrila, retículo sarcoplasmático, citoesqueleto e é preenchido pelo sarcoplasma (citoplasma), que contém água, lipídios, sais e proteínas.

Cada miofibrila é formada por uma cadeia de unidades contráteis chamadas de sarcômeros. As miofibrilas são formadas por uma cadeia de unidades contráteis chamadas de sarcômeros, os quais constituem grande parte do citoplasma e são formados por dois tipos de filamentos: os filamentos espessos de miosina, os filamentos finos de actina e os discos Z. A Figura 2.7 apresenta um esquema da organização do sarcômero.

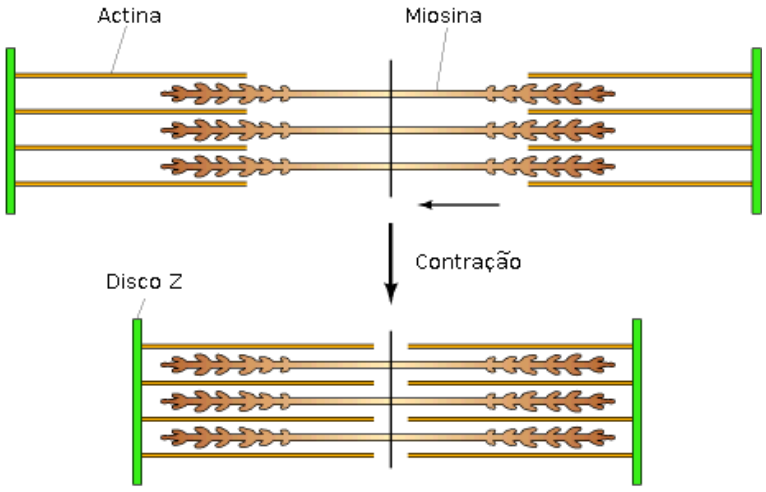

Figura 2.7: Contração do sarcômero (Adaptado de [16])

A actina é uma proteína globular com locais para ligação com a miosina e está

envolta pela tropomiosina, de acordo com a ilustração da Figura 2.8. Cada molécula de tropomiosina está ligada à troponina, a qual é uma estrutura composta de três subunidades: a troponina I, a troponina T e a troponina C, a qual é responsável por iniciar a contração muscular. Quando a concentração intracelular de cálcio (Ca^{2+}) é baixa o complexo formado pelas três subunidades da troponina atua bloqueando a interação da actina com a miosina e como consequência o músculo não se contrai.

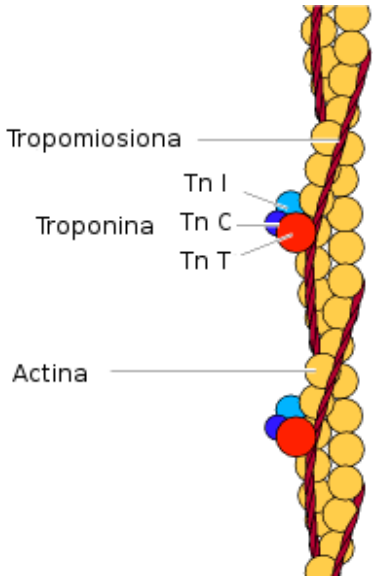

Figura 2.8: Actina, Troponina e Tropomiosina (Adaptado de [16])

O desenvolvimento de tensão durante a contração acontece quando os miócitos são despolarizados, fazendo com que os canais de cálcio do tipo-L presentes na membrana celular se ativem. Assim irá ocorrer um fluxo de íons de cálcio do meio extracelular para o meio intracelular, aumentando a concentração de Ca^{2+} no interior da célula.

A entrada de cálcio no meio intracelular ativa receptores no retículo sarcoplasmático, o qual é um compartimento especializado em armazenar íons de cálcio, fazendo com que este libere mais cálcio no citoplasma. Esse processo é denominado de liberação de Ca^{2+} induzida por Ca^{2+} (CICR - *Ca^{2+}-induced Ca^{2+} release*) e o seu resultado é um aumento significativo da concentração intracelular de Ca^{2+}.

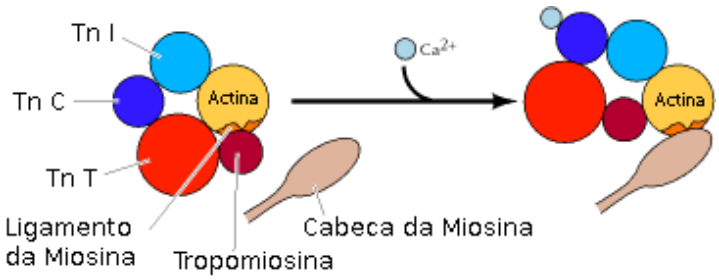

Figura 2.9: Ligação actina-miosina (Adaptado de [16])

Devido às altas concentrações de cálcio no meio intracelular, o Ca^{2+} se liga à troponina C que se movimenta e muda a posição da estrutura da troponina fazendo com que a tropomiosina desbloqueie os canais de ligação da miosina, conforme ilustrado pela Figura 2.9. Finalmente, na presença de ATP a miosina e a actina se ligam, formam pontes cruzadas que, a seguir, são desfeitas e os filamentos finos e espessos se movem adiante um do outro, ocorrendo o encurtamento do comprimento do sarcômero que produz tensão mecânica.

Capítulo 3

Elementos de Mecânica do Contínuo

A Mecânica do Contínuo estuda o comportamento de sólidos e fluídos, em escala macroscópica, desprezando as características microscópicas da partícula. Portanto a mecânica do contínuo ignora a característica descontínua da matéria, que é constituida de átomos, moléculas e de partículas menores ainda.

No contexto do presente estudo envolvendo tecidos biológicos tais como a parede do ventrículo esquerdo, tendo em vista a magnitude das deformações que ocorrem durante sua contração e expansão, o estudo do comportamento mecânico deste tecido requer a consideração de deformações finitas. Isto implica uma abordagem que envolve definições precisas dentro da mecânica do contínuo. Neste capítulo descreve-se e discute-se conceitos da mecânica do contínuo necessários para a abordagem deste tipo de problema.

A mecânica do contínuo é dividida no estudo da cinemática, que descreve o movimento e a deformação; da tensão e dos princípios de balanço, que descrevem a conservação de massa e energia de um corpo.

Esses princípios são aplicáveis a corpos constituídos por qualquer classe de material. Entretanto, estes são insuficientes para descrever o comportamento mecânico, pois é necessário estabelecer para cada tipo de material a dependência das tensões com relação a variáveis como a deformação ou a taxa de deformação, que são as chamadas relações constitutivas.

3.1 Cinemática do contínuo

O estudo do movimento de um corpo sem se preocupar com as causas de sua origem é abordado pela cinemática. Nesta seção, para descrever o movimento de um corpo deformável, buscamos definir e identificar as variáveis de interesse para esse estudo.

A posição do conjunto de partículas que constituem um corpo, em um dado instante de tempo, é chamada de configuração, sendo esta configuração no instante $t = 0$ chamada de *configuração indeformada*, enquanto a configuração no instante de tempo t é chamada de *configuração deformada*. O movimento de um corpo é descrito através de uma sequência de configurações em diversos instantes de tempo t arbitrários.

A Figura 3.1 apresenta o movimento de um corpo descrito pelas coordenadas $\boldsymbol{X}$ de seus pontos na configuração indeformada, $t = 0$. A configuração deformada é definida pelas coordenadas $\boldsymbol{x}$ de seus pontos no instante de tempo $t > 0$.

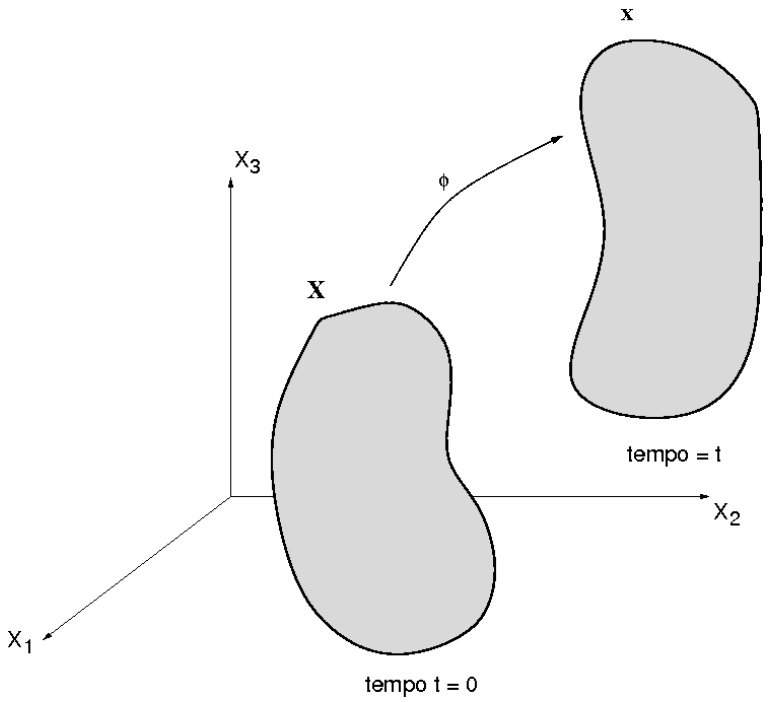

Figura 3.1: Movimento de um corpo

O movimento pode ser descrito pelo mapeamento ϕ que descreve a dependência

da posição $\boldsymbol{x}$ das partículas com relação a posição inicial $\boldsymbol{X}$, ou seja

$$\boldsymbol{x} = \phi(\boldsymbol{X}, t) \tag{3.1}$$

Para um instante de tempo t fixo a Equação (3.1) representa um mapeamento entre o corpo indeformado e o corpo deformado, sendo possível escrever

$$\boldsymbol{X} = \phi^{-1}(\boldsymbol{x}, t) \tag{3.2}$$

onde as coordenadas $\boldsymbol{X}$ da posição inicial são dadas em relação a posição $\boldsymbol{x}$ que as partículas ocupam no instante corrente, sendo o vetor de deslocamento de um ponto é definido por $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}$.

Nos problemas que envolvem pequenos deslocamentos a configuração deformada difere pouco da configuração inicial, o que não ocorre quando temos grandes deslocamentos e/ou grandes deformações como nos problemas aqui tratados. Neste caso é necessário um estudo mais rigoroso sobre as várias possibilidades que surgem para as definições de deformação e tensão que podem ser empregadas.

3.1.1 Descrição Material e Espacial

Em casos de problemas como os aqui descritos, quando é necessário diferenciar entre as configurações do corpo, duas possibilidades surgem para a definição das variáveis envolvidas na abordagem do problema.

A descrição material, usualmente empregada na mecânica dos sólidos, utiliza para descrever o movimento as coordenadas materiais $\boldsymbol{X}$, conforme a Equação (3.1). Neste caso o foco da atenção é o que acontece à partícula, a medida que esta se movimenta.

Por outro lado a descrição espacial utiliza como variável independente a posição $\boldsymbol{x}$ ocupada pelas partículas no tempo t, de acordo com a Equação (3.2). Ao contrário da descrição material, fixa-se a atenção a uma região no espaço e estuda-se o que ocorre nesta com o decorrer do tempo.

Assim os problemas na mecânica do contínuo podem ser formulados por uma descrição material utilizando como variáveis independentes as coordenadas $\boldsymbol{X}$ ou por uma descrição espacial com as coordenadas $\boldsymbol{x}$. Os termos descrição material

e descrição espacial também são chamados de descrição *Lagrangiana* ou *Euleriana*, respectivamente.

Em algumas situações é necessário expressar uma quantidade descrita espacialmente em termos de sua descrição material e vice-versa. Por exemplo, considere a densidade ρ na descrição espacial, pode-se facilmente transformar esta quantidade na descrição material usando a Equação (3.1), como

$$\rho(\boldsymbol{x}, t) = \rho(\phi(\boldsymbol{X}, t), t) \tag{3.3}$$

3.1.2 Gradiente de Deformação

Uma medida importante na análise de deformações finitas é o gradiente de deformação que é definido por

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} = \nabla\phi\,; \qquad \text{onde} \quad i, j = 1 \ldots 3 \tag{3.4}$$

Assim F_{ij} são as componentes de um tensor de segunda ordem, não necessariamente simétrico, chamado gradiente de deformação e representado por $\boldsymbol{F}$ podendo-se definir o inverso de $\boldsymbol{F}$ por

$$F_{ij}^{-1} = \frac{\partial X_i}{\partial x_j} = \nabla\phi^{-1} \tag{3.5}$$

Considerando um segmento material $d\boldsymbol{X}$ na configuração indeformada o gradiente de deformação transforma-o em um segmento $d\boldsymbol{x}$ na configuração deformada, através da operação

$$d\boldsymbol{x} = \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X} \tag{3.6}$$

De forma inversa, o segmento material $d\boldsymbol{X}$ pode ser obtido a partir de $d\boldsymbol{x}$ como

$$d\boldsymbol{X} = \boldsymbol{F}^{-1} d\boldsymbol{x} \tag{3.7}$$

3.1.3 Tensores de Deformação de Green-Lagrange e Euler-Almansi

Embora o tensor gradiente de deformação apresentado seja importante na análise de deformação, este não é uma medida de deformação apropriada, já que as suas

componentes não são iguais a zero quando o corpo sofre um deslocamento de corpo rígido. Desta forma, é necessário, ao se definir tensores de deformação, verificar se estes satisfazem essa propriedade.

Considere dois segmentos $d\boldsymbol{X}_1$ e $d\boldsymbol{X}_2$ que se deformam em $d\boldsymbol{x}_1$ e $d\boldsymbol{x}_2$, logo

$$d\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X}_1 \tag{3.8}$$

$$d\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X}_2 \tag{3.9}$$

Assim, calculando o produto escalar dos segmentos deformados tem-se

$$\begin{aligned} d\boldsymbol{x}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2 &= \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X}_1 \cdot \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X}_2 \cdot \boldsymbol{F} d\boldsymbol{X}_1 \\ &= d\boldsymbol{X}_1 \cdot \boldsymbol{F}^T \boldsymbol{F}\, d\boldsymbol{X}_2 \\ &= d\boldsymbol{X}_1 \cdot \boldsymbol{C}\, d\boldsymbol{X}_2 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Define-se então o tensor direito de *Cauchy-Green* dado por $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}^T \boldsymbol{F}$ e de forma análoga define-se o tensor esquerdo de *Cauchy-Green* $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^T$, a partir do produto escalar dos segmentos indeformados $d\boldsymbol{X}_1$ e $d\boldsymbol{X}_2$. Assim

$$d\boldsymbol{X}_1 \cdot d\boldsymbol{X}_2 = d\boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{b}^{-1} d\boldsymbol{x}_2 \tag{3.11}$$

Como medida de deformação pode-se considerar a mudança do produto escalar destes vetores quando eles passam de $d\boldsymbol{X}_1$ e $d\boldsymbol{X}_2$ para $d\boldsymbol{x}_1$ e $d\boldsymbol{x}_2$, respectivamente. Usando (3.10) e fazendo a diferença tem-se

$$\begin{aligned} d\boldsymbol{x}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2 - d\boldsymbol{X}_1 \cdot d\boldsymbol{X}_2 &= d\boldsymbol{X}_1 \cdot \boldsymbol{C}\, d\boldsymbol{X}_2 - d\boldsymbol{X}_1 \cdot d\boldsymbol{X}_2 \\ &= d\boldsymbol{X}_1 \cdot (\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})\, d\boldsymbol{X}_2 \\ &= 2 d\boldsymbol{X}_1 \cdot \boldsymbol{E}\, d\boldsymbol{X}_2 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Assim define-se o tensor de deformação de Green-Lagrange $\boldsymbol{E}$ por

$$\boldsymbol{E} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{F}^T \boldsymbol{F} - \boldsymbol{I}) \tag{3.13}$$

Uma outra medida de deformação possível é o tensor de deformação de Euler-Almansi, definido por $\boldsymbol{e}$. A mesma mudança no produto escalar dos vetores pode ser escrita utilizando este tensor, como

$$d\boldsymbol{x}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2 - d\boldsymbol{X}_1 \cdot d\boldsymbol{X}_2 = 2 d\boldsymbol{x}_1 \cdot \boldsymbol{e}\, d\boldsymbol{x}_2 \tag{3.14}$$

sendo o tensor de deformação de Euler-Almansi $\boldsymbol{e}$ dado por

$$\boldsymbol{e} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{b}^{-1}) \tag{3.15}$$

Estes tensores são medidas adequadas de deformação, já que durante um movimento de corpo rígido $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{I}$ (e consequentemente $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{I}$), tem-se que $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{0}$, assim como $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{0}$, ou seja, para movimentos sem deformação estes tensores são nulos.

3.1.4 Mudança de Volume

Para descrever a mudança de volume durante uma deformação finita, considere um volume infinitesimal na configuração inicial dado por $d\boldsymbol{X}_1 = dX_1\boldsymbol{e_1}$, $d\boldsymbol{X}_2 = dX_2\boldsymbol{e_2}$ e $d\boldsymbol{X}_3 = dX_3\boldsymbol{e_3}$. O volume material dV formado por estes três vetores é claramente dado por

$$dV = dX_1\, dX_2\, dX_3 \tag{3.16}$$

Após a deformação, os segmentos $d\boldsymbol{X}_1$, $d\boldsymbol{X}_2$ e $d\boldsymbol{X}_3$ deformam-se, respectivamente, em $d\boldsymbol{x}_1$, $d\boldsymbol{x}_2$ e $d\boldsymbol{x}_3$ através da definição do gradiente de deformação. Assim

$$d\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{F}d\boldsymbol{X}_1 = \frac{\partial\phi}{\partial X_1}dX_1 \tag{3.17}$$

$$d\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{F}d\boldsymbol{X}_2 = \frac{\partial\phi}{\partial X_2}dX_2 \tag{3.18}$$

$$d\boldsymbol{x}_3 = \boldsymbol{F}d\boldsymbol{X}_3 = \frac{\partial\phi}{\partial X_3}dX_3 \tag{3.19}$$

O produto triplo destes vetores fornece o volume deformado dv como

$$dv = d\boldsymbol{x}_1 \cdot (d\boldsymbol{x}_2 \times d\boldsymbol{x}_3) = \frac{\partial\phi}{\partial X_1} \cdot \left(\frac{\partial\phi}{\partial X_2} \times \frac{\partial\phi}{\partial X_3}\right) dX_1 dX_2 dX_3 \tag{3.20}$$

Como o produto triplo é o determinante de $\boldsymbol{F}$, pode-se escrever a mudança de volume em termos do Jacobiano $J = \det \boldsymbol{F}$, como

$$dv = J dV \tag{3.21}$$

3.1.5 Mudança de Área

Com o intuito de descrever a mudança de área considere um elemento de área $d\boldsymbol{A} = dA\,\boldsymbol{N}$ na configuração inicial, que após o movimento e deformação se torna

$d\boldsymbol{a} = da\,\boldsymbol{n}$ e ainda um vetor arbitrário $d\boldsymbol{L}$ que se deforma em $d\boldsymbol{l}$, conforme mostrado pela Figura 3.2.

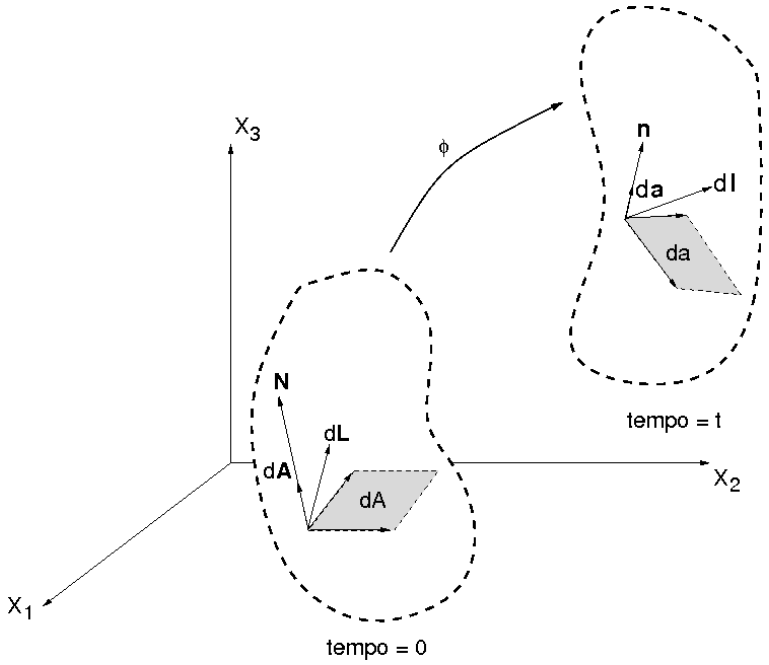

Figura 3.2: Mudança de Área

Os volumes iniciais e finais do elemento são dados por

$$dV = d\boldsymbol{L} \cdot d\boldsymbol{A} \tag{3.22}$$

$$dv = d\boldsymbol{l} \cdot d\boldsymbol{a} \tag{3.23}$$

Usando a Equação (3.21) tem-se

$$J d\boldsymbol{L} \cdot d\boldsymbol{A} = d\boldsymbol{l} \cdot d\boldsymbol{a} \tag{3.24}$$

e lembrando que o segmento $d\boldsymbol{L}$ se transforma de acordo com o gradiente de deformação, ou seja, $d\boldsymbol{l} = \boldsymbol{F} d\boldsymbol{L}$, pode-se reescrever a Equação (3.24) como

$$J d\boldsymbol{L} \cdot d\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{F} d\boldsymbol{L}) \cdot d\boldsymbol{a} \tag{3.25}$$

Utilizando a definição do transposto de um tensor de segunda ordem pode-se reescrever a Equação (3.25) como

$$J d\boldsymbol{L} \cdot d\boldsymbol{A} - (\boldsymbol{F} d\boldsymbol{L}) \cdot d\boldsymbol{a} = 0 \tag{3.26}$$

$$J d\boldsymbol{L} \cdot d\boldsymbol{A} - d\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{F}^T d\boldsymbol{a} = 0 \tag{3.27}$$

$$d\boldsymbol{L} \cdot (\boldsymbol{F}^T d\boldsymbol{a} - J d\boldsymbol{A}) = 0 \tag{3.28}$$

Como a relação anterior é válida para qualquer vetor $d\boldsymbol{L}$, tem-se

$$\boldsymbol{F}^T d\boldsymbol{a} - J\, d\boldsymbol{A} = 0 \tag{3.29}$$

Pré-multiplicando a Equação (3.29) por $\boldsymbol{F}^{-T}$, pode-se estabelecer uma relação entre a mudança de área dos elementos como

$$d\boldsymbol{a} = J\, \boldsymbol{F}^{-T} d\boldsymbol{A} \tag{3.30}$$

3.1.6 Velocidade e Derivada Material

Nesta seção os conceitos de velocidade e derivada material no tempo são definidos tendo em vista o seu uso no princípio dos trabalhos virtuais, o qual é obtido em termos da velocidade virtual. Com este propósito, derivando a Equação (3.1) com relação ao tempo, obtem-se a velocidade $\boldsymbol{v}$ como

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{X}, t) = \frac{\partial \phi(\boldsymbol{X}, t)}{\partial t} \tag{3.31}$$

A equação anterior também pode ser definida como função da posição $\boldsymbol{x}$ usando a relação (3.2), isto é

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t) = \boldsymbol{v}(\phi^{-1}(\boldsymbol{x}, t), t) \tag{3.32}$$

O tensor gradiente de velocidade é definido como a derivada da velocidade na descrição espacial com relação às coordenadas espaciais, isto é

$$\boldsymbol{l} = \frac{\partial \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial \boldsymbol{x}} = \nabla \boldsymbol{v} \tag{3.33}$$

A taxa de variação do gradiente de deformação pode ser escrita como

$$\dot{\boldsymbol{F}} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{X}}\right) \tag{3.34}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}}\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right) \tag{3.35}$$

$$= \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{X}} = \nabla_0 \boldsymbol{v} \tag{3.36}$$

onde $\nabla_0(\bullet) = \partial(\bullet)/\partial \boldsymbol{X}$ representa o gradiente com relação às coordenadas iniciais. Através da regra da cadeia obtem-se

$$\dot{\boldsymbol{F}} = \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{x}} \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{l}\boldsymbol{F} \tag{3.37}$$

3.1.7 Taxa de Deformação

Considere os vetores materiais $d\boldsymbol{X}_1$ e $d\boldsymbol{X}_2$ que se transformam em $d\boldsymbol{x}_1$ e $d\boldsymbol{x}_2$, respectivamente, como descrito em (3.8) e (3.9). Sendo assim, com a relação $2\boldsymbol{E} = (\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})$, a derivada no tempo de (3.10) é

$$\frac{d}{dt}(d\boldsymbol{x}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2) = d\boldsymbol{X}_1 \cdot \dot{\boldsymbol{C}} d\boldsymbol{X}_2 = 2d\boldsymbol{X}_1 \cdot \dot{\boldsymbol{E}} d\boldsymbol{X}_2 \tag{3.38}$$

onde $\dot{\boldsymbol{E}}$ é a derivada com relação ao tempo do tensor de deformação de Green-Lagrange, chamado de tensor taxa de deformação material. Este tensor pode ser escrito com relação a $\dot{\boldsymbol{F}}$ como

$$\dot{\boldsymbol{E}} = \frac{1}{2}\dot{\boldsymbol{C}} = \frac{1}{2}(\dot{\boldsymbol{F}}^T \boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}^T \dot{\boldsymbol{F}}) \tag{3.39}$$

Para se obter a taxa de deformação na descrição espacial considere o inverso de (3.8) e (3.9), ou seja

$$d\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{F}^{-1} d\boldsymbol{x}_1 \qquad d\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{F}^{-1} d\boldsymbol{x}_2 \tag{3.40}$$

as quais introduzidas em (3.38) fornecem

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}(d\boldsymbol{x}_1 \cdot d\boldsymbol{x}_2) = d\boldsymbol{x}_1 \cdot (\boldsymbol{F}^{-T} \dot{\boldsymbol{E}} \boldsymbol{F}^{-1}) d\boldsymbol{x}_2 \tag{3.41}$$

onde define-se a expressão entre parênteses do lado direito da equação anterior como o tensor taxa de deformação $\boldsymbol{d}$. Este tensor pode ser escrito como a parte simétrica do tensor gradiente de velocidade

$$\boldsymbol{d} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{l} + \boldsymbol{l}^T) \tag{3.42}$$

usando a relação $\dot{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{l}\boldsymbol{F}$ em (3.41), isto é

$$\begin{aligned} \boldsymbol{d} &= \boldsymbol{F}^{-T} \dot{\boldsymbol{E}} \boldsymbol{F}^{-1} \\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{F}^{-T}(\dot{\boldsymbol{F}}^T \boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}^T \dot{\boldsymbol{F}})\boldsymbol{F}^{-1} \\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{F}^{-T}\left(\boldsymbol{F}^T \boldsymbol{l}^T \boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}^T \boldsymbol{l} \boldsymbol{F}\right)\boldsymbol{F}^{-1} \\ &= \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{l}^T + \boldsymbol{l}\right) \end{aligned} \tag{3.43}$$

3.2 Tensão

Devido ao movimento e deformação de um corpo, interações entre suas partes ocorrem e uma medida dessas interações é a tensão, que na configuração de equilíbrio (após a deformação) é definida como a taxa de força por unidade de área.

No caso em que as deformações são finitas várias medidas são possíveis para a definição do tensor de tensões. Sendo assim, define-se nesta seção além da tensão de Cauchy, definida como força por unidade de área deformada, tensores de tensão alternativos como o primeiro e o segundo tensor de Piola-Kirchhoff, que permitem expressar a tensão com relação a configuração indeformada de diferentes formas.

3.2.1 Tensão de Cauchy

Considere um corpo na sua configuração deformada como mostra a Figura 3.3. Suponha que o corpo foi dividido nas regiões R_1 e R_2 para se estudar a ação das forças de uma região na outra. Sendo assim considere o ponto p contido na superfície de R_1, no elemento de área Δa cujo vetor normal é $\boldsymbol{n}$.

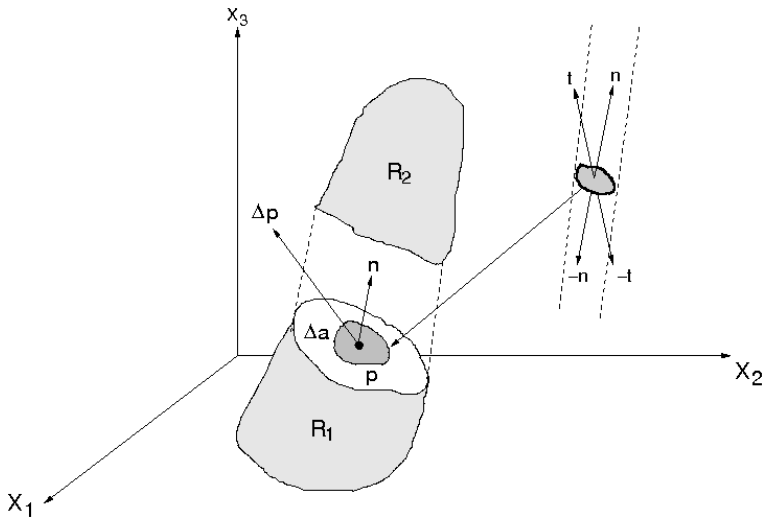

Figura 3.3: Vetor tensão

Se $\Delta \boldsymbol{p}$ é a força resultante nesta área, então o vetor de tensão $\boldsymbol{t}$ correspondente à normal $\boldsymbol{n}$ no ponto p é definido por

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{n}) = \lim_{\Delta a \to 0} \frac{\Delta \boldsymbol{p}}{\Delta a} \tag{3.44}$$

No ponto p existe um vetor $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{n})$ associado a cada plano de separação do corpo que passa por p. Dado um sistema de coordenadas cartesianas retangulares, cujos vetores base são formados por $\boldsymbol{e_i}$, tem-se um vetor de tensão associado a cada vetor base. $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e}_1)$ é o vetor tensão associado a direção $\boldsymbol{e_1}$, assim como $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e}_2)$ e $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e}_3)$ estão associados às direções $\boldsymbol{e_2}$ e $\boldsymbol{e_3}$, respectivamente.

Escrevendo os vetores $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e}_1)$, $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e}_2)$ e $\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e}_3)$ em componentes no sistema de coordenadas $\boldsymbol{e_i}$, tem-se

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e_1}) = \sigma_{11}\boldsymbol{e_1} + \sigma_{12}\boldsymbol{e_2} + \sigma_{13}\boldsymbol{e_3} \tag{3.45}$$

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e_2}) = \sigma_{21}\boldsymbol{e_1} + \sigma_{22}\boldsymbol{e_2} + \sigma_{23}\boldsymbol{e_3} \tag{3.46}$$

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{e_3}) = \sigma_{31}\boldsymbol{e_1} + \sigma_{32}\boldsymbol{e_2} + \sigma_{33}\boldsymbol{e_3} \tag{3.47}$$

Pode-se reescrever esta equação da seguinte forma

$$\boldsymbol{t}(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{n} \tag{3.48}$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é um tensor de segunda ordem, conhecido como tensor de tensão de Cauchy, que relaciona forças por unidade de área na configuração deformada. Como um tensor de segunda ordem, pode-se escrever o tensor de Cauchy como

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \tag{3.49}$$

Tendo em vista o princípio de conservação do momento angular é possível concluir que o tensor de tensão é um tensor simétrico, portanto

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \tag{3.50}$$

As quantidades σ_{ij}, são chamadas de componentes de tensão, sendo σ_{11} a componente de $\boldsymbol{t_1}$ na direção de $\boldsymbol{e_1}$. As componentes σ_{11}, σ_{22} e σ_{33} são chamadas de tensões normais, enquanto as demais componentes σ_{12}, σ_{13} e σ_{23} são chamadas de tensões de cisalhamento.

3.2.2 Primeiro tensor de Piola-Kirchhoff

Como dito anteriormente, em algumas ocasiões é mais conveniente utilizar um tensor de tensão definido em termos da configuração inicial.

Desta forma, considere um elemento de superfície que na configuração indeformada tenha área dA e vetor normal unitário $\boldsymbol{N}$ e que após a deformação tenha área da e normal $\boldsymbol{n}$. Tem-se a seguinte relação

$$\boldsymbol{n}\, da = J\boldsymbol{F}^{-T}\,\boldsymbol{N}\, dA \tag{3.51}$$

onde $J = det\,\boldsymbol{F}$.

A relação (3.44) estabelece que o vetor tensão $\boldsymbol{t}$ relaciona força por unidade de área na configuração deformada. Pode-se estabelecer outras medidas de tensão através de um vetor de tensão e um vetor normal $\boldsymbol{n}$ ou $\boldsymbol{N}$.

Sendo assim considere o vetor tensão

$$\boldsymbol{t}_0 = \frac{da}{dA}\,\boldsymbol{t} \tag{3.52}$$

Como $\boldsymbol{t}\, da$ descreve a força $d\boldsymbol{p}$ atuando na superfície deformada de área da, pode-se escrever

$$d\boldsymbol{p} = \boldsymbol{t}_0\, dA = \boldsymbol{t}\, da \tag{3.53}$$

Define-se então o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff, $\boldsymbol{P}$, através do vetor de tensão $\boldsymbol{t}_0$ como

$$\boldsymbol{t}_0 = \boldsymbol{P}\boldsymbol{N} \tag{3.54}$$

e utilizando as Equações (3.48) e (3.51) tem-se

$$\boldsymbol{t}_0 = \frac{da}{dA}\,\boldsymbol{t} = \frac{da}{dA}\,\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{n} = J\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{F}^{-T}\boldsymbol{N} \tag{3.55}$$

Como as Equações (3.54) e (3.55) são válidas para qualquer $\boldsymbol{N}$ tem-se que o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff é dado por

$$\boldsymbol{P} = J\,\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{F}^{-T} \tag{3.56}$$

onde $\boldsymbol{P}$ é um tensor de segunda ordem, não simétrico, que descreve forças correntes por unidade de área da configuração indeformada.

Pode-se ainda definir o tensor de tensão de Cauchy como o inverso da relação (3.56), isto é

$$\boldsymbol{\sigma} = J^{-1}\,\boldsymbol{P}\boldsymbol{F}^{T} \tag{3.57}$$

3.2.3 Segundo tensor de Tensão de Piola-Kirchhoff

Definindo um vetor de tensão como

$$\hat{\boldsymbol{t}}_0 = \boldsymbol{F}^{-1}\,\boldsymbol{t}_0 \tag{3.58}$$

o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff $\boldsymbol{S}$, pode ser definido por

$$\hat{\boldsymbol{t}}_0 = \boldsymbol{S}\boldsymbol{N} \tag{3.59}$$

onde $\boldsymbol{N}$ é o vetor normal a área dA da configuração indeformada. Pode-se relacionar o tensor $\boldsymbol{S}$ aos tensores $\boldsymbol{\sigma}$ e $\boldsymbol{P}$ através de

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{t}}_0 &= \boldsymbol{F}^{-1}\,\boldsymbol{t}_0 \\
&= \frac{da}{dA}\,\boldsymbol{F}^{-1}\boldsymbol{t} \\
&= \frac{da}{dA}\,\boldsymbol{F}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{n} \\
&= J\boldsymbol{F}^{-1}\,\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{F}^{-T}\,\boldsymbol{N}
\end{aligned} \tag{3.60}$$

E comparando (3.59) com (3.60) tem-se

$$\boldsymbol{S} = J\,\boldsymbol{F}^{-1}\,\boldsymbol{\sigma}\,\boldsymbol{F}^{-T} = \boldsymbol{F}^{-1}\,\boldsymbol{P} \tag{3.61}$$

onde $\boldsymbol{S}$ é um tensor de segunda ordem. Ao contrário de $\boldsymbol{P}$, o tensor $\boldsymbol{S}$ é simétrico e descreve forças projetadas na configuração indeformada por unidade de área indeformada.

Pode-se expressar o tensor de tensão de Cauchy como o inverso da expressão para o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff, como

$$\boldsymbol{\sigma} = J^{-1}\,\boldsymbol{F}\boldsymbol{S}\boldsymbol{F}^{T} \tag{3.62}$$

Da Equação (3.61) pode ser observada uma relação entre o primeiro tensor de tensão de Piola-Kirchhoff $\boldsymbol{P}$ com o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff $\boldsymbol{S}$ dada por

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{S} \tag{3.63}$$

3.3 Princípio da Conservação da Quantidade de Movimento Linear

Muitas das leis da física podem ser escritas como princípios de balanço ou leis de conservação, que estabelecem que alguma quantidade física como por exemplo a massa, a carga elétrica ou momento é conservada.

O princípio de conservação da quantidade de movimento linear estabelece que a taxa de variação do momento linear de um corpo é igual à força resultante aplicada a este. Para o caso estático, no qual as forças de inércia são ignoradas, a conservação do momento linear fornece a *equação de equilíbrio de Cauchy*.

Para se obter a equação de equílibrio de Cauchy de um corpo deformável, considere este em sua configuracão deformada, e seja v o seu volume e ∂v o contorno do corpo. Considere que o corpo sofre ação de forças de corpo $\boldsymbol{f}$ por unidade de volume, como por exemplo a força gravitacional, e também forças de superfície $\boldsymbol{t}$ por unidade de área atuando no contorno ∂v.

Para o equílibrio estático ser satisfeito, desconsidera-se a presença de forças de inércia, e portanto o somatório de todas as forças atuando no corpo deve ser nulo.

$$\int_{\partial v} \boldsymbol{t}\, da + \int_{v} \boldsymbol{f}\, dv = 0 \tag{3.64}$$

Usando (3.48) a expressão anterior pode ser reescrita em função das tensões de Cauchy como

$$\int_{\partial v} \boldsymbol{\sigma n}\, da + \int_{v} \boldsymbol{f}\, dv = 0 \tag{3.65}$$

Através do uso do teorema de Gauss (ou teorema da Divergência), que converte uma integral de superfície em uma integral de volume, pode-se escrever a integral do primeiro termo da Equação (3.65) como uma integral de volume e agrupando os termos, tem-se

$$\int_{v} (\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f})\, dv = 0 \tag{3.66}$$

A equação anterior estabelece uma relação que é válida em todo o domínio do corpo. Se a expressão é válida em todo o corpo a mesma deve ser válida para cada subregião do mesmo, concluindo-se que esta é então válida para cada ponto, de modo

que pode-se escrever

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f} = 0 \tag{3.67}$$

3.4 Relações constitutivas

As equações apresentadas até o momento se aplicam igualmente para todos os tipos de materiais. Entretanto, elas são insuficientes para descrever completamente o comportamento mecânico de um determinado material.

Para completar a descrição das propriedades mecânicas de um material específico é necessário o uso de equações adicionais chamadas de *equações constitutivas*. Estas equações são específicas para um determinado material ou para uma classe de materiais.

Estas equações descrevem a dependência existente entre tensão de um corpo e a deformação que o mesmo sofre.

As equações constitutivas procuram descrever determinados comportamentos de um material em questão através de estudos experimentais. Pode-se dizer que descrever de forma exata o comportamento do material é impossível, pois as equações constitutivas são aproximações do comportamento do mesmo.

Inicialmente, a elasticidade linear é discutida de forma simples e objetiva com o intuito de fornecer uma introdução para a modelagem de relações constitutivas. Em seguida, materiais hiperelásticos são considerados e alguns modelos para estes, tais como o modelo de Mooney-Rivlin e o modelo Neo-Hookeano, são apresentados.

3.4.1 Elasticidade Linear

Muitos materiais como os metais, a madeira, o concreto, entre outros, podem ser modelados utilizando a teoria da elasticidade linear. Dentro desta teoria os materiais possuem a propriedade de sofrerem pequenas mudanças de forma quando submetidas a forças externas e voltarem a sua forma original quando estas forças são removidas.

Para descrever a elasticidade linear, considere um simples experimento com uma

barra de comprimento l e diâmetro d. Ao aplicar uma carga F na direção axial da barra, esta se deforma, alongando-se uma quantidade Δl e o seu diâmetro inicial se reduz de uma quantidade Δd.

Assim, pode-se dizer que a relação linear entre deformação ε e tensão σ em uma barra unidimensional obedece a Lei de Hooke e portanto pode ser definida como

$$\sigma = \frac{1}{E}\varepsilon \tag{3.68}$$

onde E é o de módulo de elasticidade ou módulo de Young. A medida de deformação ε é a razão entre a mudança no comprimento da barra Δl e o comprimento inicial l da mesma, logo

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l} \tag{3.69}$$

Outra constante importante associada ao material é o coeficiente de Poisson, que relaciona a deformação lateral ($\Delta d/d$) à deformação axial ($\Delta l/l$). Denotando o coeficiente de Poisson por ν tem-se

$$\nu = \frac{-\Delta d}{d}\frac{l}{\Delta l} \tag{3.70}$$

Sólidos elásticos lineares possuem uma energia interna por unidade de volume definida por uma função W, chamada de função energia de deformação. A função W satisfaz a propriedade de depender apenas do tensor de deformação infinitesimal (ou linear) e pode ser descrita por uma aproximação quadrática das componentes deste tensor como

$$W = \frac{1}{2} C_{ijkl}\, \varepsilon_{ij}\, \varepsilon_{kl} \tag{3.71}$$

onde C_{ijkl} são constantes.

Assim, pode-se chegar a

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}} \tag{3.72}$$

que dá origem a uma forma da Lei de Hooke generalizada para descrever a relação entre o tensor de tensão $\boldsymbol{\sigma}$ e o tensor de deformação linear $\boldsymbol{\varepsilon}$ no espaço tridimensional como

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\, \varepsilon_{kl} \tag{3.73}$$

onde $\boldsymbol{C}$ é um tensor de quarta ordem conhecido como tensor de elasticidade. Por esta equação fica óbvio a dependência linear da tensão com relação à deformação.

3.4.2 Elasticidade Não-Linear

A teoria da mecânica do contínuo dentro do contexto linear possui vários modelos desenvolvidos, aplicados e testados adequadamente a uma série de problemas com diferentes materiais. Entretanto, para materiais como os tecidos biológicos a relação entre a tensão e a deformação é não-linear. Para descrever o comportamento destes materiais relações constitutivas apropriadas precisam ser estabelecidas.

3.4.3 Materiais Hiperelásticos

Relações constitutivas não-lineares de um *material hiperelástico* advém de uma função energia de deformação W. Assim, define-se que W depende de alguma forma das componentes do gradiente de deformação F_{ij}, de modo que pode-se escrever

$$W = W(F_{ij}) = W(\boldsymbol{F}) \tag{3.74}$$

Se o corpo em questão sofre uma rotação de corpo rígido após a deformação a sua função energia de deformação não deve mudar. Sendo assim, considere uma partícula inicialmente na posição $\boldsymbol{X}$ e que após o movimento se encontra na posição $\boldsymbol{x}$. Agora suponha que a mesma partícula se mova para $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{x}$, onde $\boldsymbol{Q}$ representa um tensor ortogonal.

Logo

$$F_{ir} = \frac{\partial x_i}{\partial X_r} \tag{3.75}$$

$$\bar{F}_{ir} = \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial X_r} \tag{3.76}$$

Então

$$\bar{F}_{ir} = Q_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial X_r} = Q_{ij}F_{jr} \qquad \text{ou} \qquad \bar{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{F} \tag{3.77}$$

Desta forma, para qualquer tensor ortogonal $\boldsymbol{Q}$, a função W deve obedecer a

$$W(\boldsymbol{F}) = W(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{F}) \tag{3.78}$$

o que representa uma restrição na escolha da função W.

Através do uso do teorema da decomposição polar, que permite escrever o gradiente de deformação como $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{U}$, onde $\boldsymbol{R}$ é um tensor ortogonal de rotação e $\boldsymbol{U}$ é um tensor que representa apenas a deformação, tem-se

$$W(\boldsymbol{F}) = W(\boldsymbol{Q} \cdot \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{U}) \tag{3.79}$$

Como $\boldsymbol{Q}$ é um tensor ortogonal qualquer, em particular pode-se considerar $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{R}^T$, assim

$$W(\boldsymbol{F}) = W(\boldsymbol{R}^T \cdot \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{U}) = W(\boldsymbol{U}) \tag{3.80}$$

Desta forma W depende apenas das seis componentes do tensor simétrico $\boldsymbol{U}$. Como existe uma relação única entre $\boldsymbol{U}$ e $\boldsymbol{C}$, dada por $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{U}^2$, pode-se escrever W como uma função de $\boldsymbol{C}$. Então para que a função W seja independente de uma rotação de corpo rígido é necessário que ela seja da forma

$$W = W(\boldsymbol{C}) \tag{3.81}$$

onde, fica claro que W nesta equação não é o mesmo que na Equação (3.74).

As equações constitutivas escritas em termos do primeiro e segundo tensor de Piola-Kirchhoff ficam mais simples, e possuem a seguinte forma

$$P_{ij} = \frac{\partial W}{\partial F_{ij}}, \qquad S_{ij} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{C}_{ij}} + \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{C}_{ji}} = 2\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{C}_{ij}} \tag{3.82}$$

3.4.4 Materiais Hiperelásticos Isotrópicos

Quando um material sofre deformação e seu comportamento é idêntico em todas as direções este material é chamado de *isotrópico*. As borrachas, por exemplo, podem ser vistas como um material que apresenta este tipo de comportamento. Neste caso é necessário restringir a função energia de deformação do material para atender essa propriedade.

Considere uma partícula $\boldsymbol{X}$ na configuração inicial que se move para $\boldsymbol{x}$ através de $\phi(\boldsymbol{X}, t)$. Nosso interesse é estudar o efeito de um movimento de corpo rígido imposto na configuração inicial. Assim, na posição inicial o corpo é transladado pelo vetor $\boldsymbol{c}$ e rotacionado pelo tensor ortogonal $\boldsymbol{Q}$, de acordo com

$$\boldsymbol{X}^* = \boldsymbol{c} + \boldsymbol{Q}\boldsymbol{X} \tag{3.83}$$

Seja também um outro movimento, denotado por $\boldsymbol{x} = \phi^*(\boldsymbol{X}^*, t)$, que leva a partícula de $\boldsymbol{X}^*$ para $\boldsymbol{x}$, ou seja

$$\boldsymbol{x} = \phi(\boldsymbol{X}, t) = \phi^*(\boldsymbol{X}^*, t) \tag{3.84}$$

O gradiente de deformação é obtido através da regra da cadeia, como

$$\boldsymbol{F} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{X}^*}\frac{\partial \boldsymbol{X}^*}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{X}^*}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{F}^*\boldsymbol{Q} \tag{3.85}$$

Como $\boldsymbol{Q}$ é ortogonal, tem-se que

$$\boldsymbol{F}^* = \boldsymbol{F}\boldsymbol{Q}^T \tag{3.86}$$

Portanto um material hiperelástico é isotrópico com relação a configuração indeformada se os valores da função $W(\boldsymbol{F})$ e $W(\boldsymbol{F}^*)$ forem os mesmos para qualquer tensor ortogonal $\boldsymbol{Q}$. Ou seja,

$$W(\boldsymbol{F}) = W(\boldsymbol{F}^*) = W(\boldsymbol{F}\boldsymbol{Q}^T) \tag{3.87}$$

Portanto, quando a um corpo é imposto uma translação e/ou uma rotação e a sua função energia de deformação for a mesma, este material é considerado isotrópico. Caso contrário, quando a relação (3.87) não é satisfeita, o material é considerado *anisotrópico*.

Como foi mostrado anteriormente que $W = W(\boldsymbol{C})$, a restrição para que o material seja isotrópico impõe que

$$W(\boldsymbol{C}) = W(\boldsymbol{C}^*) \tag{3.88}$$

e como $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F}$, tem-se que $\boldsymbol{C}^* = \boldsymbol{F}^{*T}\boldsymbol{F}^*$. Assim (3.88) se torna

$$\begin{aligned} W(\boldsymbol{C}) &= W(\boldsymbol{C}^*) \\ &= W(\boldsymbol{F}^{*T}\boldsymbol{F}^*) \\ &= W((\boldsymbol{F}\boldsymbol{Q}^T)^T\boldsymbol{F}\boldsymbol{Q}^T) \\ &= W(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F}\boldsymbol{Q}^T) \end{aligned} \tag{3.89}$$

E como $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F}$ tem-se

$$W(\boldsymbol{C}) = W(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{C}\boldsymbol{Q}^T) \tag{3.90}$$

Se (3.90) for satisfeita diz-se que W é um invariante do tensor simétrico $\boldsymbol{C}$. Se W é invariante com relação a uma rotação, a função pode ser escrita em termos dos seus invariantes principais, ou seja, em termos dos invariantes de $\boldsymbol{C}$ ou $\boldsymbol{b}$, denotados por $I_i(\boldsymbol{C})$ e $I_i(\boldsymbol{b})$, com $i = 1, 2, 3$, respectivamente.

Sendo assim

$$W = W(I_1(\boldsymbol{C}), I_2(\boldsymbol{C}), I_3(\boldsymbol{C})) = W(I_1(\boldsymbol{b}), I_2(\boldsymbol{b}), I_3(\boldsymbol{b})) \tag{3.91}$$

pois conforme mostrado por [18] os tensores $\boldsymbol{C}$ e $\boldsymbol{b}$ possuem as seguintes propriedades

$$I_1(\boldsymbol{C}) = I_1(\boldsymbol{b}) \tag{3.92}$$

$$I_2(\boldsymbol{C}) = I_2(\boldsymbol{b}) \tag{3.93}$$

$$I_3(\boldsymbol{C}) = I_3(\boldsymbol{b}) \tag{3.94}$$

Logo para determinar a relação constitutiva para materiais isotrópicos é necessário calcular a derivada de W com relação ao tensor $\boldsymbol{C}$. Utilizando a regra da cadeia, tem-se

$$\frac{\partial W(\boldsymbol{C})}{\partial \boldsymbol{C}} = \frac{\partial W}{\partial I_1}\frac{\partial I_1}{\partial \boldsymbol{C}} + \frac{\partial W}{\partial I_2}\frac{\partial I_2}{\partial \boldsymbol{C}} + \frac{\partial W}{\partial I_3}\frac{\partial I_3}{\partial \boldsymbol{C}} \tag{3.95}$$

As derivadas dos invariantes principais com relação a $\boldsymbol{C}$ são

$$\frac{\partial I_1}{\partial \boldsymbol{C}} = \boldsymbol{I} \tag{3.96}$$

$$\frac{\partial I_2}{\partial \boldsymbol{C}} = I_1\boldsymbol{I} - \boldsymbol{C} \tag{3.97}$$

$$\frac{\partial I_3}{\partial \boldsymbol{C}} = I_3\boldsymbol{C}^{-1} \tag{3.98}$$

e substituindo-as na Equação (3.95) tem-se

$$\boldsymbol{S} = 2\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{C}} = 2\left[\left(\frac{\partial W}{\partial I_1} + I_1\frac{\partial W}{\partial I_2}\right)\boldsymbol{I} - \frac{\partial W}{\partial I_2}\boldsymbol{C} + I_3\frac{\partial W}{\partial I_3}\boldsymbol{C}^{-1}\right] \tag{3.99}$$

Utilizando a Equação (3.62) pode-se obter uma expressão para a equação constitutiva em termos do tensor de tensão de Cauchy como

$$\boldsymbol{\sigma} = 2J^{-1}\left[I_3\frac{\partial W}{\partial I_3}\boldsymbol{I} + \left(\frac{\partial W}{\partial I_1} + I_1\frac{\partial W}{\partial I_2}\right)\boldsymbol{b} - \frac{\partial W}{\partial I_2}\boldsymbol{b}^2\right] \tag{3.100}$$

3.4.5 Materiais Hiperelásticos Incompressíveis

Existem alguns materiais que são capazes de sustentarem grandes deformações sem sofrerem uma mudança de volume considerável. Estes materiais são chamados de *incompressíveis* e seu tratamento matemático dentro das relações constitutivas é o foco desta seção.

Materiais incompressíveis mantém o seu volume durante um movimento e deformação e esta restrição é caracterizada matematicamente por

$$J = \det \boldsymbol{F} = 1 \tag{3.101}$$

onde $\boldsymbol{F}$ é o tensor gradiente de deformação. A equação anterior resulta em $I_3 = 1$, onde $I_3(\boldsymbol{C}) = I_3(\boldsymbol{b})$.

A função energia de deformação W pode ser reescrita como

$$W = \hat{W}(I_1, I_2) - \frac{1}{2}p\,(I_3 - 1) \tag{3.102}$$

onde $p/2$ é um multiplicador de Lagrange indeterminado.

Para obter a relação constitutiva através do segundo tensor de tensão de Piola Kirchhoff $\boldsymbol{S}$ a equação anterior precisa ser derivada com relação ao tensor $\boldsymbol{C}$. Procedendo da mesma forma pela qual se obteve (3.99) tem-se

$$\boldsymbol{S} = -p\boldsymbol{C}^{-1} + 2\left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_1} + I_1\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_2}\right)\boldsymbol{I} - 2\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_2}\boldsymbol{C} \tag{3.103}$$

onde $I_3(\partial W/\partial I_3) = -p/2$ foi utilizado.

Utilizando a Equação (3.62) tem-se que o tensor de tensão de Cauchy pode ser escrito como

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\boldsymbol{I} + 2\left(\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_1} + I_1\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_2}\right)\boldsymbol{b} - 2\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_2}\boldsymbol{b}^2 \tag{3.104}$$

ou como

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\boldsymbol{I} + 2\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_1}\boldsymbol{b} - 2\frac{\partial \hat{W}}{\partial I_2}\boldsymbol{b}^{-1} \tag{3.105}$$

através de uma relação existente entre $\boldsymbol{b}^2$ e $\boldsymbol{b}^{-1}$ de acordo com [18].

3.4.6 Tensor de Elasticidade

Em problemas não-lineares na análise de grandes deformações e grandes deslocamentos a solução é obtida utilizando um procedimento *incremental-iterativo* do

tipo Newton. Assim, dentro deste contexto é necessário que a relação constitutiva seja linearizada.

Considere o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff $\boldsymbol{S}$ em um certo instante de tempo t como uma função tensorial cujo argumento é o tensor $\boldsymbol{C}$. O seu gradiente é denotado por

$$\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \mathbb{C} : \frac{1}{2}\,\mathrm{d}\boldsymbol{C} \tag{3.106}$$

onde

$$\mathbb{C} = 2\frac{\partial \boldsymbol{S}(\boldsymbol{C})}{\partial \boldsymbol{C}} \qquad \text{ou} \qquad C_{ABCD} = 2\frac{\partial S_{AB}}{\partial C_{CD}} \tag{3.107}$$

é um tensor de quarta ordem.

Assim se o material é hiperelástico e definido por uma função energia de deformação W, o tensor $\boldsymbol{S}$ é obtido como $\boldsymbol{S} = 2\partial W/\partial \boldsymbol{C}$, e consequentemente

$$\mathbb{C} = 4\frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{C}\partial \boldsymbol{C}} \qquad \text{ou} \qquad C_{ABCD} = 4\frac{\partial^2 W}{\partial C_{AB}\partial C_{CD}} \tag{3.108}$$

O tensor de elasticidade $\mathbb{C}$ está em função do tensor $\boldsymbol{S}$, logo este está na descrição material e pode ser chamado de tensor de elasticidade material. O tensor de elasticidade espacial $\mathbb{c}$ é dado pela seguinte operação

$$c_{abcd} = J^{-1}F_{aA}F_{bB}F_{cC}F_{dD}C_{ABCD} \tag{3.109}$$

onde J é o determinante do gradiente de deformação.

É importante ressaltar que ambos tensores $\mathbb{C}$ e $\mathbb{c}$ como tensores de quarta ordem possuem 81 coeficientes, entretanto a seguinte simetria é valida para ambos

$$C_{ABCD} = C_{BACD} = C_{ABDC} \tag{3.110}$$

que reduz para 36 o número de componentes independentes. Caso o material seja hiperelástico a seguinte simetria também é válida

$$\mathbb{C} = \mathbb{C}^T \qquad \text{ou} \qquad C_{ABCD} = C_{CDAB} \tag{3.111}$$

e finalmente o tensor pode ser definido com apenas 21 componentes.

3.4.7 Material do tipo Mooney-Rivlin

As equações descritas até então se referem de forma genérica a um material hiperelástico isotrópico incompressível. Um modelo muito utilizado dentro desta

classe de materiais é o modelo de Mooney-Rivlin, cuja função energia de deformação possui a seguinte forma

$$\hat{W} = c_1(I_1 - 3) + c_2(I_2 - 3) \tag{3.112}$$

onde c_1 e c_2 são constantes específicas do material e I_1 e I_2 são os invariantes do tensor de deformação direito de Cauchy-Green.

É importante ressaltar que na ausência de deformação quando $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{I}$ os invariantes são $I_1 = I_2 = 3$ e portanto a função energia de deformação é nula, consistente com o resultado esperado.

3.4.8 Material do tipo Neo-Hookeano

Um outro tipo de material é dado pela seguinte forma da função energia de deformação

$$\hat{W} = c_1(I_1 - 3) \tag{3.113}$$

a qual descreve o material conhecido como Neo-Hookeano, que apresenta características que podem ser identificadas com as propriedades do material linear elástico.

3.5 Estado Plano de Tensão

Dentro do contexto da mecânica do contínuo alguns problemas bidimensionais envolvendo membranas finas podem ser modelados como um caso de estado plano de tensão, no qual a tensão normal ao plano formado por x_1 e x_2 é nula, isto é, $S_{33} = 0$. Considerando que $C_{13} = C_{23} = 0$ o problema se reduz ao de encontrar um estado de tensão bidimensional e estuda-se deformações simétricas em relação à espessura do corpo.

Neste caso o tensor de deformação direito de Cauchy-Green $\boldsymbol{C}$ é dado por

$$\boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & 0 \\ C_{21} & C_{22} & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} \end{bmatrix} \qquad C_{33} = \frac{h^2}{H^2} \tag{3.114}$$

onde h e H são as espessuras da membrana nas configurações deformada e indeformada, respectivamente.

A condição de incompressibilidade impõe que

$$\det \boldsymbol{C} = I_3 = 1 \tag{3.115}$$

logo

$$C_{33}(C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}) = 1 \tag{3.116}$$

Utilizando a restrição de que a tensão normal ao plano é nula, ou seja, $S_{33} = 0$, é possível encontrar uma expressão explícita para a pressão hidrostática p. Substituindo esta expressão na equação constitutiva e utilizando (3.116) encontra-se uma expressão para o tensor de tensão em duas dimensões. Por exemplo, para o material do tipo Neo-Hookeano o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff é dado por

$$\bar{\boldsymbol{S}} = 2c_1(\bar{\boldsymbol{I}} - C_{33}\bar{\boldsymbol{C}}^{-1}) \tag{3.117}$$

onde o traço sobre os tensores denota suas componentes 2×2.

A equação constitutiva para o material do tipo Mooney-Rivlin pode ser encontrada em [37] escrita na forma matricial utilizando a notação de Voigt [7], como

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} S_{11} \\ S_{22} \\ S_{12} \end{bmatrix} &= 2c_1 \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + C_{33}^2 \begin{bmatrix} C_{22} \\ C_{11} \\ -C_{12} \end{bmatrix} \right) \\
&+ 2c_2 \left(C_{33} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \left[1 - C_{33}^2 (C_{11} + C_{22})\right] \begin{bmatrix} C_{22} \\ C_{11} \\ -C_{12} \end{bmatrix} \right)
\end{aligned} \tag{3.118}$$

e a relação entre os incrementos de tensão e de deformação dada pelo tensor de elasticidade $\mathbb{C}$, na descrição material, é

$$\begin{aligned}
\mathbb{C} &= 4\,c_1\,C_{33}^2 \left(2C_{33} \begin{bmatrix} C_{22}^2 & C_{11}C_{22} & -C_{12}C_{22} \\ & C_{11}^2 & -C_{12}C_{11} \\ \text{sim.} & & C_{12}^2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \\
&+ 4\,c_2\,C_{33}^2 \left(2C_{33}(C_{11} + C_{22}) \begin{bmatrix} C_{22}^2 & C_{11}C_{22} & -C_{12}C_{22} \\ & C_{11}^2 & -C_{12}C_{11} \\ \text{sim.} & & C_{12}^2 \end{bmatrix} \right. \\
&+ \left. (C_{11} + C_{22}) \begin{bmatrix} 0 & -2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -2C_{22} & \frac{1}{C_{33}^2} & C_{12} \\ \frac{1}{C_{33}^2} & -2C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & -\frac{1}{2\,C_{33}^2} \end{bmatrix} \right)
\end{aligned} \tag{3.119}$$

Para se obter a tensão de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ e o tensor de elasticidade espacial $\mathbb{c}$ relativo ao material do tipo Mooney-Rivlin, utiliza-se as operações dadas pelas Equações (3.109) e (3.109), respectivamente. Para mais detalhes sobre a formulação de problemas em estado plano de tensão consulte [28].

Capítulo 4

Acoplamento Eletromecânico

O coração funciona como uma bomba que transporta sangue para o corpo através da contração de seus ventrículos. A contração dos músculos cardíacos ocorre através da propagação de uma onda elétrica pelos miócitos, que de forma sincronizada se contraem, possibilitando que os ventrículos bombeiem o sangue. Desta forma, o coração pode ser visto como uma bomba eletromecânica, na qual a atividade elétrica estimula e inicia a atividade mecânica de contração do órgão, que por sua vez também influencia a propagação da onda elétrica.

A modelagem matemática tem sido utilizada como ferramenta para investigar a atividade elétrica no coração, assim como para estudar arritimias e outros distúrbios cardíacos. Os modelos que descrevem o comportamento elétrico do coração vêm sendo aprimorados durante os últimos anos e são capazes de reproduzir vários resultados experimentais. Entretanto, a maioria dos estudos está relacionada ao comportamento elétrico do coração sem levar em consideração a contração cardíaca. Existem ainda modelos que se focam puramente no comportamento mecânico do coração e estudam propriedades materiais do músculo cardíaco, como a relação entre tensão e deformação. Alguns destes descrevem e propõem modelos para a geometria da anatomia cardíaca.

Alguns dos modelos computacionais que foram desenvolvidos para estudar o efeito da atividade elétrica na contração ventricular foram propostos por [26] e [17]. Entretanto, estes não descrevem a resposta da atividade mecânica na atividade elétrica. Por outro lado, alguns estudos modelam apenas o efeito da mecânica na eletro-

fisiologia cardíaca [39] sem descrever os efeitos do acoplamento excitação-contração. Um estudo feito por [20] apresenta uma modelagem com o efeito eletromecânico e a resposta mecano-elétrica. Entretanto, de acordo com [27] o modelo apresenta resultados limitados.

O objetivo deste capítulo é apresentar um modelo computacional, inicialmente proposto em [27] e [24], para estudar os efeitos combinados da mecânica cardíaca e da atividade elétrica. Para isso, inicia-se o capítulo com a descrição matemática dos efeitos da propagação elétrica na contração e em seguida a resposta da deformação mecânica nas propriedades da propagação elétrica é discutida. Por fim, uma estratégia para a solução do problema acoplado é descrita.

4.1 Efeito Eletromecânico

Para descrever os efeitos da excitação na contração é necessário entender como uma tensão ativa, que será responsável pela contração do tecido, se forma nos miócitos quando estes se despolarizam. Conforme descrito no Capítulo 2, quando a célula se despolariza ocorre um fluxo de íons de cálcio para o interior desta que em seguida libera mais cálcio no citoplasma através do retículo sarcoplasmático. Em altas concentrações de Ca^{2+}, este se liga à troponina C que permite que a actina se ligue à miosina e como resultado a célula se contrai, produzindo uma tensão.

4.1.1 Tensão ativa

No presente trabalho, detalhes biofísicos do acoplamento eletromecânico, como por exemplo, a concentração intracelular de $[Ca^{2+}]$, entre outros fatores que influenciam o desenvolvimento da tensão ativa foram ignorados. De forma mais simples, foi suposto que o desenvolvimento da tensão ativa depende diretamente do potencial transmembrânico V.

Desta forma, o estado total de tensão é modelado como a soma da tensão ativa com a tensão passiva, que é uma característica intrínseca do material que compõe o tecido cardíaco. Denotando a tensão ativa por $\boldsymbol{\sigma}_a$ e a tensão passiva por $\boldsymbol{\sigma}_p$, o

estado total de tensão é dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_p(\boldsymbol{F}) + \boldsymbol{\sigma}_a(\boldsymbol{F}, V) \tag{4.1}$$

onde $\boldsymbol{F}$ é o gradiente de deformação. O termo $\boldsymbol{\sigma}_p(\boldsymbol{F})$ representa a dependência da tensão passiva em relação a uma medida de deformação do material que depende de $\boldsymbol{F}$, como por exemplo, os tensores $\boldsymbol{C}$ e $\boldsymbol{b}$, enquanto que a tensão ativa $\boldsymbol{\sigma}_a(\boldsymbol{F}, V)$ depende também do potencial transmembrânico V.

A parcela $\boldsymbol{\sigma}_a$ que representa a tensão ativa é modelada como $\boldsymbol{\sigma}_a = \sigma_a \boldsymbol{I}$ através do uso de uma nova variável σ_a introduzida como uma EDO, que depende de V, no sistema de equações do modelo elétrico. Esta equação tem a forma [27]

$$\frac{\partial \sigma_a}{\partial t} = \epsilon(V)(k_T V - \sigma_a) \tag{4.2}$$

onde k_T é uma constante que controla a amplitude da tensão ativa gerada. A função $\epsilon(V)$ é definida por

$$\epsilon(V) = \begin{cases} \epsilon_0 & \text{para } V < 0.05, \\ 10\epsilon_0 & \text{para } V \geq 0.05 \end{cases} \tag{4.3}$$

com $\epsilon_0 = 1$. Esta função controla o atraso no desenvolvimento da tensão ativa quando $V < 0.05$ e na recuperação da tensão ativa quando $V \geq 0.05$ com relação ao potencial de ação.

4.1.2 Propriedades mecânicas da tensão passiva

A tensão passiva é gerada como consequência da deformação do tecido e é determinada pela relação constitutiva do material, a qual expressa de forma sucinta a relação entre os tensores de tensão e deformação através de observações experimentais.

De acordo com [26] os tecidos biológicos são anisotrópicos e não homogêneos, apresentam propriedades dependentes do tempo e ainda possuem um comportamento não-linear em um regime de deformações finitas. Portanto, é necessário incorporar a análise de deformações finitas para a modelagem e estudo do comportamento mecânico deste tecido.

Como dito anteriormente, o tecido cardíaco é formado por uma camada de fibras, e portanto tanto do ponto de vista da propagação elétrica, que é maior no sentido

das fibras, quanto da deformação mecânica o tecido é anisotrópico. Consideramos aqui, o comportamento mecânico do tecido tratado de forma mais simples como um sólido elástico isotrópico e incompressível. Desta forma, este é modelado como um material hiperelástico, capaz de sofrer grandes deformações de aproximadamente 15% a 25%, consistente com o regime de contração cardíaco conforme a referência [30].

A tensão para um material hiperelástico é dada através da definição de uma função energia de deformação W como

$$\boldsymbol{S} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{C}} \tag{4.4}$$

onde $\boldsymbol{S}$ é o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff e $\boldsymbol{C}$ é o tensor direito de deformação de Cauchy-Green.

Conforme proposto em [27] o modelo de Mooney-Rivlin para materiais isotrópicos pode ser utilizado para modelar as características passivas do tecido cardíaco. Este tipo de material possui a seguinte forma para a função energia de deformação

$$W(I_1, I_2) = c_1(I_1 - 3) + c_2(I_2 - 3) \tag{4.5}$$

onde c_1 e c_2 são constantes do material e I_1 e I_2 são os invariantes do tensor direito de deformação de Cauchy-Green $\boldsymbol{C}$.

Portanto para um determinado material, tem-se uma função energia de deformação W definida, que derivada com relação ao tensor $\boldsymbol{C}$ fornece a expressão para o segundo tensor de tensão Piola-Kirchhoff. Para se obter a tensão passiva $\boldsymbol{\sigma}_p$, definida em termos do tensor de tensão de Cauchy, basta aplicar a operação (3.62), que obtem-se

$$\boldsymbol{\sigma}_p = J^{-1}\boldsymbol{F}\boldsymbol{S}\boldsymbol{F}^T \tag{4.6}$$

onde J é o determinante do gradiente de deformação $\boldsymbol{F}$ definido em (3.4).

4.1.3 Problema Mecânico

Conforme discutido no Capítulo 3 através da lei de conservação da quantidade de movimento linear obtém-se a equação que governa o movimento para a análise de deformações finitas, a qual será definida neste texto como *problema mecânico*. O

problema mecânico é iniciado a partir da tensão ativa, gerada pela propagação da onda elétrica. O seu objetivo é encontrar o equilíbrio de forças através da solução da seguinte equação diferencial

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f} = 0 \tag{4.7}$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o estado total da tensão de Cauchy e $\boldsymbol{f}$ são forças por unidade de volume conforme definido no Capítulo 3 na Equação (3.67).

O estado total de tensão $\boldsymbol{\sigma}$ é definido como

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_p + \sigma_a \boldsymbol{I} \tag{4.8}$$

onde $\boldsymbol{\sigma}_p$ descreve a tensão elástica do tecido e $\sigma_a \boldsymbol{I}$ é a tensão ativa gerada através da propagação da onda elétrica.

A solução do problema mecânico com uma dada tensão ativa fornece a deformação sofrida pelo tecido. Esta por sua vez, afeta determinadas propriedades da propagação da onda elétrica conforme se detalha na seção seguinte.

4.2 Efeito Mecanoelétrico

Para considerar a resposta da deformação mecânica na excitação cardíaca é preciso descrever como é modelada a atividade elétrica no tecido. Como introduzido no Capítulo 2 a excitação de uma célula cardíaca ocorre devido a mudanças no potencial transmembrânico causado pelo fluxo de íons carregados. Matematicamente a excitação de uma célula é descrita por

$$I = C_m \frac{dV}{dt} + I_{ion} \tag{4.9}$$

onde I representa a corrente total através da membrana, C_m é a capacitância da membrana, V é o potencial transmembrânico e I_{ion} é a corrente iônica.

A propagação elétrica no meio intracelular do tecido cardíaco é dada por

$$I = \nabla \cdot (\boldsymbol{D} \nabla V) = C_m \frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion} \tag{4.10}$$

onde $\boldsymbol{D}$ é o tensor de condutividade.

Os efeitos da deformação mecânica na excitação cardíaca são complexos e ainda não são completamente conhecidos [27], mas pode-se afirmar que as propriedades elétricas são funções do estado de deformação, ou seja, da resposta mecânica. Assim, pode-se escrever

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}(\boldsymbol{C})\,\nabla V) = C_m(\boldsymbol{C})\,\frac{\partial V}{\partial t} + I_{ion}(\boldsymbol{C}) \tag{4.11}$$

onde $\boldsymbol{C}$ é o tensor de deformação direito de Cauchy-Green que define o estado de deformação.

A equação anterior mostra a dependência das propriedades elétricas da condutividade $\boldsymbol{D}$, da capacitância C_m e da corrente iônica I_{ion} com relação ao tensor de deformação $\boldsymbol{C}$. Entretanto, neste estudo as dependências capacitivas e iônicas são desprezadas. Sendo assim, estuda-se apenas o efeito da deformação do tecido na condutividade, descrito pelo lado esquerdo da Equação (4.11).

Neste estudo, o problema elétrico foi caracterizado pelo modelo do Monodomínio para representação do tecido cardíaco associado ao modelo celular qualitativo de duas variáveis proposto por Aliev-Panfilov. O problema elétrico é definido por

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}\nabla V) - kV(V-a)(V-1) - rV + I_s \tag{4.12}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \left(\varepsilon + \frac{\mu_1 r}{\mu_2 + V}\right)(-r - kV(V-a-1)) \tag{4.13}$$

onde as variáveis V, r e t e os parâmetros k, a, ε, μ_1 e μ_2 já foram introduzidos e descritos no Capítulo 2.

Por fim, utilizando a Equação (5.90) e introduzindo a nova variável σ_a no problema elétrico tem-se

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}\nabla V) - kV(V-a)(V-1) - rV + I_s \tag{4.14}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \left(\varepsilon + \frac{\mu_1 r}{\mu_2 + V}\right)(-r - kV(V-a-1)) \tag{4.15}$$

$$\frac{\partial \sigma_a}{\partial t} = \epsilon(V)(k_T V - \sigma_a) \tag{4.16}$$

onde foi considerado que $C_m = 1$.

4.3 Resumo do Problema Acoplado

O problema elétrico e o problema mecânico juntos compõem um modelo acoplado para o comportamento eletromecânico do tecido cardíaco. A seguir um resumo do modelo é apresentado

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{D}\nabla V) - kV(V-a)(V-1) - rV + I_s \tag{4.17}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \left(\varepsilon + \frac{\mu_1 r}{\mu_2 + V}\right)(-r - kV(V-a-1)) \tag{4.18}$$

$$\frac{\partial \sigma_a}{\partial t} = \epsilon(V)(k_T V - \sigma_a) \tag{4.19}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f} = 0 \tag{4.20}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_p + \boldsymbol{\sigma}_a \tag{4.21}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_a = \sigma_a \boldsymbol{I} \tag{4.22}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_p = J^{-1}\boldsymbol{F}\boldsymbol{S}\boldsymbol{F}^T \tag{4.23}$$

$$\boldsymbol{S} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{C}} \tag{4.24}$$

$$W(I_1, I_2) = c_1(I_1 - 3) + c_2(I_2 - 3) \tag{4.25}$$

considerando as condições de contorno e condições iniciais para V, r, u e σ_a.

As Equações (4.17)-(4.19) definem o problema elétrico que descreve a excitação do tecido. Os problemas são acoplados através de uma equação diferencial ordinária qualitativa introduzida no problema elétrico e dada por (4.19) que define a tensão ativa. Esta última será fornecida como entrada para o problema mecânico, definido pelas Equações (4.20)-(4.25), que descrevem a equação de equílibrio, a tensão ativa, a tensão passiva e a relação constitutiva que é definida por um material hiperelástico do tipo Mooney-Rivlin.

No capítulo seguinte descrevemos a solução numérica do problema elétrico discutindo com mais detalhes como o método dos elementos finitos é utilizado para a solução da equação que governa o problema mecânico, apresentado por fim, uma descrição do esquema numérico para a solução acoplada desses problemas.

Capítulo 5

Estratégias de Solução

Nos capítulos anteriores foram apresentadas equações que modelam a propagação do potencial elétrico no tecido cardíaco responsável pela contração deste órgão. Devido à complexidade destes modelos e a dificuldade em se obter soluções analíticas, faz-se necessário o uso de métodos numéricos apropriados para obtenção de soluções aproximadas.

O universo de métodos de solução numérica é vasto e diversificado, incluindo diversas técnicas como os métodos de diferenças finitas, volumes finitos, elementos de contorno, elementos finitos entre outros. Neste capítulo apresentamos os principais aspectos da formulação de elementos finitos aqui utilizada para solução das equações não-lineares da mecânica do contínuo, ilustrando de forma sucinta o esquema numérico de diferenças finitas para a solução do problema elétrico no tecido cardíaco finalizando com o esquema utilizado para a solução desses problemas acoplados.

O método dos elementos finitos pode ser descrito como um procedimento sistemático através do qual a solução de um problema de valor de contorno é aproximada a partir de um conjunto de valores avaliados num número finito de pontos do domínio chamados de nós, tomando-se como base aproximações por partes da solução do problema sobre um número finito de subdomínios chamados de elementos.

As aproximações locais da função solução sobre cada elemento são definidas a partir dos valores desta sobre os nós desses elementos. Além da aproximação da função solução, neste caso o domínio do problema contínuo também é aproximado por uma coleção de elementos conectados entre si pelos nós. Desta forma a solução

de um problema de valor de contorno com infinitos graus de liberdade recai na resolução de um sistema de equações algébricas lineares ou não-lineares conforme o problema original seja linear ou não.

5.1 Solução do Problema de Deformações Finitas do Tecido Cardíaco

Na busca de soluções para problemas com deformações finitas na mecânica dos sólidos podemos, por exemplo, utilizar como ponto de partida o *princípio dos trabalhos virtuais* (PTV) ou *princípio dos deslocamentos virtuais*.

Para estabelecer uma solução do problema de deformações finitas através do método dos elementos finitos é necessário escrever uma forma fraca da equação diferencial em questão. Na mecânica dos sólidos usa-se o princípio dos trabalhos virtuais ou princípio dos deslocamentos virtuais como forma fraca da equação.

Inicialmente o princípio dos trabalhos virtuais é apresentado e a sua linearização é discutida tendo em vista a utilização do método de Newton-Raphson para obtenção de soluções aproximadas dessas equações não-lineares. Assim, são apresentadas também as linearizações dos vários termos do PTV e as suas respectivas discretizações, que permitem chegar ao modelo discreto do problema.

5.1.1 Princípio dos Trabalhos Virtuais

A forma do princípio dos trabalhos virtuais aqui utilizada é obtida a partir da equação do equilíbrio (3.66), a qual é multiplicada por uma velocidade virtual $\delta\boldsymbol{v}$ definida na configuração deformada. Temos então que:

$$\delta W = \int_v (\mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f}) \cdot \delta\boldsymbol{v}\, dv = 0 \tag{5.1}$$

onde a velocidade virtual $\delta\boldsymbol{v}$ obedece a propriedade de que $\delta\boldsymbol{v} = 0$ no contorno do corpo ∂v onde o deslocamento é prescrito. O termo $\mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta\boldsymbol{v}$ em (5.1) pode ser reescrito como

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{\sigma}\delta\boldsymbol{v}) = \mathrm{div}\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla\delta\boldsymbol{v} \tag{5.2}$$

que resulta em

$$\int_v \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}\delta\boldsymbol{v})\,dv - \int_v \boldsymbol{\sigma} : \nabla\delta\boldsymbol{v}\,dv + \int_v \boldsymbol{f}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dv = 0 \tag{5.3}$$

Através do uso do teorema da divergência é possível transformar a integral do primeiro termo da equação anterior de uma integral de volume para uma integral de superfície. Logo,

$$\int_{\partial v} \boldsymbol{\sigma}\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}\,ds - \int_v \boldsymbol{\sigma} : \nabla\delta\boldsymbol{v}\,dv + \int_v \boldsymbol{f}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dv = 0 \tag{5.4}$$

Como o vetor de tensão de Cauchy prescrito na superfície definida pelo vetor normal $\boldsymbol{n}$ é dado por $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \boldsymbol{t}$ e o gradiente de $\delta\boldsymbol{v}$ é o tensor gradiente de velocidade $\delta\boldsymbol{l}$ como definido em (3.33), ao substituir estas expressões em (5.4) obtem-se

$$\int_v \boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{l}\,dv = \int_{\partial v} \boldsymbol{t}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,ds + \int_v \boldsymbol{f}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dv \tag{5.5}$$

Finalmente, o tensor gradiente da velocidade virtual $\delta\boldsymbol{l}$ pode ser escrito em termos da sua parte simétrica e anti-simétrica, $\delta\boldsymbol{d}$ e $\delta\boldsymbol{w}$, respectivamente, e considerando que o tensor $\boldsymbol{\sigma}$ é simétrico a Equação (5.5) se torna o PTV na descrição espacial, que é dado por

$$\int_v \boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{d}\,dv - \int_{\partial v} \boldsymbol{t}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,ds - \int_v \mathbf{f}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dv = 0 \tag{5.6}$$

O PTV estabelece que o trabalho virtual interno é igual ao trabalho virtual externo, ou seja, o trabalho virtual de $\boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{d}$ é igual ao trabalho realizado pelas forças de volume $\boldsymbol{f}$ e pelas forças de superfície $\boldsymbol{t}$. Isto é

$$\delta W_{\text{int}} = \int_v \boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{d}\,dv \tag{5.7}$$

$$\delta W_{\text{ext}} = \int_{\partial v} \boldsymbol{t}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,ds + \int_v \boldsymbol{f}\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dv \tag{5.8}$$

onde δW_{int} é o trabalho virtual interno e δW_{ext} é o trabalho virtual externo.

Pode ser demonstrado que ao se descrever o trabalho virtual com relação à configuração indeformada, outros tensores de tensão podem ser empregados obtendo-se duas outras expressões para o PTV dadas por

$$\delta W = \int_V \boldsymbol{P} : \delta\dot{\boldsymbol{F}}dV - \int_V \boldsymbol{f}_0\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dV - \int_{\partial V} \boldsymbol{t}_0\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dS \tag{5.9}$$

$$\delta W = \int_V \boldsymbol{S} : \delta\dot{\boldsymbol{E}}dV - \int_V \boldsymbol{f}_0\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dV - \int_{\partial V} \boldsymbol{t}_0\cdot\delta\boldsymbol{v}\,dS \tag{5.10}$$

onde $\boldsymbol{P}$ e $\boldsymbol{S}$ são respectivamente o primeiro e o segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff e $\dot{\boldsymbol{F}}$ e $\dot{\boldsymbol{E}}$ são as deformações conjugadas destes tensores de tensão, conforme [18].

Até o momento nada foi especificado com relação a qualquer tipo particular de material, portanto o princípio dos trabalhos virtuais é genérico no sentido de que pode ser aplicado a diversos tipos de comportamentos materiais.

5.1.2 Linearização do Princípio dos Trabalhos Virtuais

As formas variacionais aqui apresentas são não-lineares com relação à variável de interesse, no caso, o campo de deslocamentos. No presente caso as não linearidades são devidas aos grandes deslocamentos e grandes deformações do corpo, bem como pela relação constitutiva do material.

Para problemas não-lineares uma técnica comum e muita difundida é utilizar um procedimento incremental-iterativo para solução através do método de Newton-Raphson. Neste método substituimos o problema não-linear por uma sequência de problemas lineares a serem resolvidos a cada iteração, sendo, para isso necessário linearizar corretamente todas as quantidades que estão associadas com a variável do problema de modo a obter uma fórmula de recorrência para atualização da solução do problema não-linear.

O conceito de linearização é brevemente abordado neste texto, com o propósito de se obter as linearizações necessárias para a aplicação do método dos elementos finitos. Maiores detalhes são encontrados em [8].

Considere a equação $\boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}) = 0$ que representa um conjunto de equações não lineares para o qual deseja-se encontrar a solução quando $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{u}$, sendo $\boldsymbol{x}_0$ tal que $\boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}_0) = 0$. Assim, utilizando a mesma notação que [8], o valor de $\boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{u})$ pode ser linearizado ou aproximado linearmente como

$$\boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{u}) \approx \boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}_0) + D\boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}_0)[\boldsymbol{u}] = 0 \tag{5.11}$$

onde o segundo termo do lado direito da equação anterior é chamado de derivada direcional de $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ em $\boldsymbol{x}_0$ na direção de $\boldsymbol{u}$ e é definida como

$$D\boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}_0)[\boldsymbol{u}] = \frac{d}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} \boldsymbol{\mathcal{F}}(\boldsymbol{x}_0 + \epsilon\boldsymbol{u}) \tag{5.12}$$

onde ϵ é um parâmetro escalar. A derivada direcional de $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ em $\boldsymbol{x}_0$ na direção de $\boldsymbol{u}$ representa a variação da função $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ na direção de $\boldsymbol{u}$.

Para se obter uma linearização do PTV na descrição espacial, considere que este é escrito em termos das velocidades virtuais $\delta\boldsymbol{v}$ como

$$\delta W(\phi, \delta\boldsymbol{v}) = \int_v \boldsymbol{\sigma} : \delta\boldsymbol{d}\, dv - \int_{\partial v} \boldsymbol{t} \cdot \delta\boldsymbol{v}\, ds - \int_v \mathbf{f} \cdot \delta\boldsymbol{v}\, dv = 0 \tag{5.13}$$

onde ϕ é o mapeamento da configuração indeformada para a configuração deformada e representa a solução que se deseja encontrar.

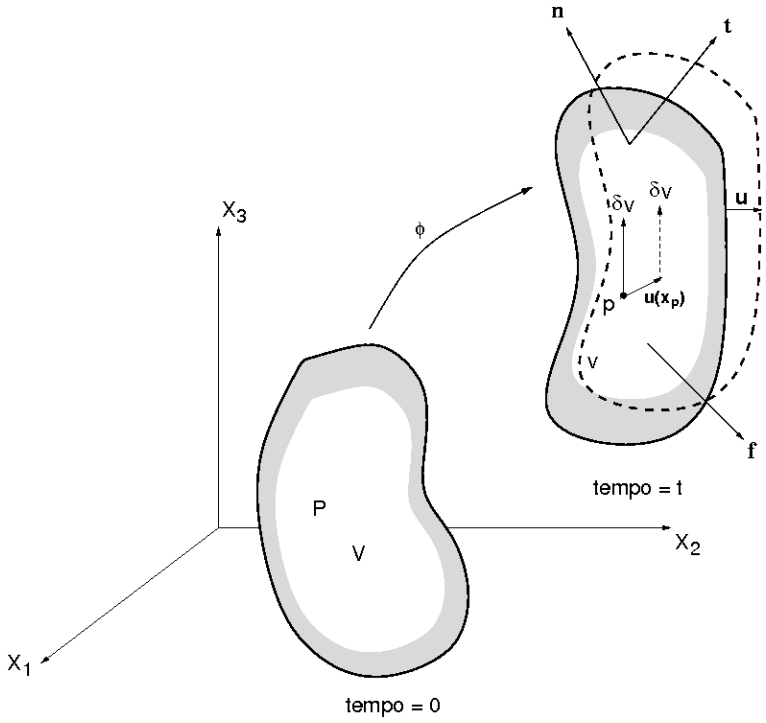

Figura 5.1: Linearização da Equação do Equílibrio

Seja ϕ_k uma solução aproximada em um determinado instante, a Equação (5.13) é linearizada neste instante na direção de um incremento de deslocamento representado por $\boldsymbol{u}$, como

$$\delta W(\phi_k, \delta\boldsymbol{v}) + D\delta W(\phi_k, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] = 0 \tag{5.14}$$

Assim, é necessário calcular a derivada direcional da equação do trabalho virtual avaliada em ϕ_k na direção do incremento $\boldsymbol{u}$, denotado aqui por $D\delta W(\phi_k, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}]$, que representa a variação do trabalho virtual δW devido a mudança de ϕ_k para $\phi_k + \boldsymbol{u}$. Como a velocidade virtual $\delta\boldsymbol{v}$ se mantém constante durante esta mudança,

a derivada direcional descreve a mudança nas forças internas devido ao incremento de deslocamento $\boldsymbol{u}$, provocado, por exemplo, por um acréscimo no carregamento.

Essa mudança nas forças internas descrita pela derivada direcional na configuração ϕ_k na direção de $\boldsymbol{u}$ irá se balancear com as forças externas até o equilíbrio ser atingido. Dentro do procedimento de Newton-Raphson a derivada direcional será responsável pela obtenção da matriz tangente. A equação do trabalho virtual (5.6) pode ser dividida entre o trabalho virtual interno e externo, como

$$\delta W(\phi, \delta\boldsymbol{v}) = \delta W_{\text{int}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v}) - \delta W_{\text{ext}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v}) \tag{5.15}$$

e através da linearização na direção do incremento de deslocamento $\boldsymbol{u}$, obtem-se

$$D\delta W(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] = D\delta W_{\text{int}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] - D\delta W_{\text{ext}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] \tag{5.16}$$

A linearização do trabalho virtual externo $D\delta W_{\text{ext}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}]$ depende das contribuições das forças de corpo $\boldsymbol{f}$ e das forças de superfície $\boldsymbol{t}$, as quais supomos aqui não dependerem da configuração atual do corpo, isto é, estas forças não mudam conforme o corpo se deforma. Consequentemente, uma linearização na direção de $\boldsymbol{u}$ não irá contribuir para o trabalho virtual linearizado, logo

$$D\delta W_{\text{ext}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] = 0 \tag{5.17}$$

Dentro do contexto deste trabalho (como utilizamos uma formulação lagrangeana atualizada) deseja-se obter a linearização do PTV na descrição espacial o que é conseguido considerando a transformação dos termos da linearização obtidos na descrição material em suas respectivas descrições espaciais. Para isso considere a Equação (5.10) que ao ser linearizada, resulta em

$$\begin{aligned} D\delta W_{\text{int}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] &= \int_V D(\delta\dot{\boldsymbol{E}} : \boldsymbol{S})dV \\ &= \int_V \boldsymbol{S} : D\delta\dot{\boldsymbol{E}}[\boldsymbol{u}] + \delta\dot{\boldsymbol{E}} : D\boldsymbol{S}[\boldsymbol{u}]\, dV \\ &= \int_V \boldsymbol{S} : D\delta\dot{\boldsymbol{E}}[\boldsymbol{u}] + \delta\dot{\boldsymbol{E}} : \mathbb{C} : D\boldsymbol{E}[\boldsymbol{u}]\, dV \end{aligned} \tag{5.18}$$

onde $D\delta\dot{\boldsymbol{E}}[\boldsymbol{u}]$ representa a derivada direcional de $\dot{\boldsymbol{E}}$ na direção de um incremento de deslocamento $\boldsymbol{u}$.

Neste ponto é necessário considerar a linearização de algumas medidas de deformação tendo em vista o seu uso na obtenção da forma linearizada (5.18). Para isso,

considere um deslocamento $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ a partir da configuração $\boldsymbol{x} = \phi_t(\boldsymbol{X}) = \phi(\boldsymbol{X}, t)$ que o corpo se encontra conforme a Figura (5.1). Sendo assim, o gradiente de deformação $\boldsymbol{F}$ pode ser linearizado na direção de $\boldsymbol{u}$ como

$$\begin{aligned} D\boldsymbol{F}(\phi_t)[\boldsymbol{u}] &= \frac{d}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} \boldsymbol{F}(\phi_t + \epsilon\boldsymbol{u}) \\ &= \frac{d}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} \frac{\partial(\phi_t + \epsilon\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{X}} \\ &= \frac{d}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \boldsymbol{X}} + \epsilon \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{X}}\right) \\ &= \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{X}} = \nabla_0 \boldsymbol{u} \end{aligned} \tag{5.19}$$

Através da regra da cadeia

$$\begin{aligned} D\boldsymbol{F}(\phi_t)[\boldsymbol{u}] &= \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}} \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{X}} \\ &= (\nabla \boldsymbol{u})\, \boldsymbol{F} \end{aligned} \tag{5.20}$$

de onde se obtem a seguinte relação

$$\nabla_0 \boldsymbol{u} = \nabla \boldsymbol{u} \boldsymbol{F} \tag{5.21}$$

A taxa de variação do gradiente de deformação pode ser escrita da seguinte forma

$$\dot{\boldsymbol{F}} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{X}}\right) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}}\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right) = \nabla_0 \boldsymbol{v} \tag{5.22}$$

e usando (5.20) e (5.21) conclui-se que

$$D\boldsymbol{F}[\boldsymbol{v}] = \nabla_0 \boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{F}} \tag{5.23}$$

ou seja, a linearização de $\boldsymbol{F}$ na direção da velocidade $\boldsymbol{v}$ é igual a taxa de variação do gradiente de deformação $\dot{\boldsymbol{F}}$.

Utilizando (5.20) a linearização do tensor de deformação de Green-Lagrange $\boldsymbol{E}$ no instante de tempo t, é dada por

$$\begin{aligned} D\boldsymbol{E}[\boldsymbol{u}] &= \frac{1}{2} D\left(\boldsymbol{F}^T D\boldsymbol{F}[\boldsymbol{u}] + D\boldsymbol{F}^T[\boldsymbol{u}]\, \boldsymbol{F}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left[\boldsymbol{F}^T \nabla \boldsymbol{u}\, \boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}^T (\nabla \boldsymbol{u})^T \boldsymbol{F}\right] \\ &= \frac{1}{2} \boldsymbol{F}^T \left[\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T\right] \boldsymbol{F} \end{aligned} \tag{5.24}$$

É importante ressaltar que o termo entre parênteses na equação anterior é o tensor $\boldsymbol{\varepsilon}$, que é a parte linear do tensor de deformação de Euler-Almansi $\boldsymbol{e}$ para o campo de incremento de deslocamento $\boldsymbol{u}$. Isto é,

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}\left[\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T\right] \tag{5.25}$$

Através da relação (3.41) o tensor taxa de deformação virtual $\delta\dot{\boldsymbol{E}}$ é dado por

$$\delta\dot{\boldsymbol{E}} = \frac{1}{2}\left(\delta\dot{\boldsymbol{F}}^T\boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}^T\delta\dot{\boldsymbol{F}}\right) \tag{5.26}$$

e assim através das relações $D\boldsymbol{F}[\boldsymbol{u}] = \nabla_0\boldsymbol{u}$ e $\delta\dot{\boldsymbol{F}} = \nabla_0\delta\boldsymbol{v}$, a sua linearização na direção de um incremento de deslocamento $\boldsymbol{u}$ é obtida como

$$\begin{aligned} D\delta\dot{\boldsymbol{E}}[\boldsymbol{u}] &= \frac{1}{2}\left[(\nabla_0\delta\boldsymbol{v})^T D\boldsymbol{F}[\boldsymbol{u}] + (D\boldsymbol{F}[\boldsymbol{u}])^T\nabla_0\delta\boldsymbol{v}\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[(\nabla_0\delta\boldsymbol{v})^T\nabla_0\boldsymbol{u} + (\nabla_0\boldsymbol{u})^T\nabla_0\delta\boldsymbol{v}\right] \qquad (5.27) \\ &= (\nabla_0\boldsymbol{u})^T\nabla_0\delta\boldsymbol{v} \qquad (5.28) \end{aligned}$$

Desta forma, utilizando as relações aqui descritas, o primeiro termo da Equação (5.18) pode ser reescrito na descrição espacial usando a regra da cadeia e as Equações (5.21) e (5.27) como

$$\int_V \boldsymbol{S} : \left[\,(\nabla_0\boldsymbol{u})^T\,\nabla_0\delta\boldsymbol{v}\right] dV = \int_v \boldsymbol{\sigma} : \left[(\nabla\boldsymbol{u})^T\,\nabla\delta\boldsymbol{v}\right] dv \tag{5.29}$$

Para o segundo termo, a relação entre a derivada direcional e a derivada no tempo, conforme discutido para a Equação (5.23), é utilizada para se obter a seguinte expressão $\delta\dot{\boldsymbol{E}} = D\boldsymbol{E}[\delta\boldsymbol{v}]$, que permite reescrever este termo como

$$\delta\dot{\boldsymbol{E}} : \mathbb{C} : D\boldsymbol{E}[\boldsymbol{v}]\, dV = D\boldsymbol{E}[\delta\boldsymbol{v}] : \mathbb{C} : D\boldsymbol{E}[\boldsymbol{u}]\, dV \tag{5.30}$$

e assim, considerando que

$$\begin{aligned} D\boldsymbol{E}[\boldsymbol{u}] &= \boldsymbol{F}^T\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{F} \qquad (5.31) \\ D\boldsymbol{E}[\delta\boldsymbol{v}] &= \boldsymbol{F}^T\delta d\boldsymbol{F} \qquad (5.32) \end{aligned}$$

a descrição espacial deste termo é obtida como

$$D\boldsymbol{E}[\delta\boldsymbol{v}] : \mathbb{C} : D\boldsymbol{E}[\boldsymbol{u}]\, dV = \delta\boldsymbol{d} : c : \boldsymbol{\varepsilon}\, dv \tag{5.33}$$

através do uso de (5.24) e da relação entre o tensor de elasticidade material e espacial dada por (3.109). A prova desta equação pode ser encontrada em [8].

Finalmente, chega-se à expressão linearizada para o trabalho virtual interno formulado na descrição espacial como

$$D\delta W_{\text{int}}\,(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] = \int_v \boldsymbol{\sigma} : [(\nabla \boldsymbol{u})^T \nabla \delta\boldsymbol{v}]\, dv + \int_v \delta\boldsymbol{d} : c : \boldsymbol{\varepsilon}\, dv \tag{5.34}$$

onde $\delta\boldsymbol{d}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}$ são a parte simétrica do gradiente de velocidade virtual e o tensor de deformação linear, respectivamente. A discretização desta expressão irá dar origem à uma matriz simétrica, denominada de matriz de rigidez tangente.

5.1.3 Discretização das Equações da Cinemática

Dadas as linearizações das quantidades necessárias, a equação que governa o problema de deformações finitas é discretizada através do método dos elementos finitos para se obter uma solução aproximada.

A essência do método dos elementos finitos está na discretização da forma fraca do problema, e este processo envolve a aproximação da variável do problema assim como da função teste, aproximações estas que por sua vez são escritas como expansões em termos das funções de interpolação (ou funções de forma).

Como dito anteriormente, a variável do problema assim como a função teste são aproximadas pelas funções de interpolação. Assim, tanto o incremento de deslocamento $\boldsymbol{u}$ quanto a velocidade virtual $\delta\boldsymbol{v}$ são dados por

$$\boldsymbol{u} = \sum_{a=1}^{n} N_a \boldsymbol{u}_a; \qquad \delta\boldsymbol{v} = \sum_{a=1}^{n} N_a \delta\boldsymbol{v}_a \tag{5.35}$$

onde n representa o número de nós de um elemento e N_a são as funções de forma. As coordenadas nodais iniciais e finais serão interpoladas utilizando elementos isoparamétricos, logo

$$\boldsymbol{X} = \sum_{a=1}^{n} N_a \boldsymbol{X}_a; \qquad \boldsymbol{x} = \sum_{a=1}^{n} N_a \boldsymbol{x}_a \tag{5.36}$$

Como o gradiente de deformação é dado por $\boldsymbol{F} = \partial\boldsymbol{x}/\partial\boldsymbol{X}$, diferenciando-o com relação às coordenadas iniciais, obtem-se a seguinte expressão

$$\boldsymbol{F} = \sum_{a=1}^{n} \boldsymbol{x}_a \otimes \nabla_0 N_a \tag{5.37}$$

onde $\nabla_0 N_a = \partial N_a/\partial \boldsymbol{X}$ é o gradiente das funções de forma com relação às coordenadas iniciais.

As funções de forma são geralmente definidas e tabeladas no sistema de coordenadas local como $N_a = N_a(\xi, \eta)$, portanto é preciso saber como $\nabla_0 N_a$ se relaciona com o gradiente das funções de forma no sistema de coordenadas local definido por $\nabla_\xi N_a = \partial N_a/\partial \boldsymbol{\xi}$. Pela regra da cadeia tem-se

$$\frac{\partial N_a}{\partial \boldsymbol{X}} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{X}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)^{-T} \frac{\partial N_a}{\partial \boldsymbol{\xi}} \tag{5.38}$$

onde

$$\frac{\partial \boldsymbol{X}}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \begin{bmatrix} \partial X_1/\partial \xi_1 & \partial X_1/\partial \xi_2 & \partial X_1/\partial \xi_3 \\ \partial X_2/\partial \xi_1 & \partial X_2/\partial \xi_2 & \partial X_2/\partial \xi_3 \\ \partial X_3/\partial \xi_1 & \partial X_3/\partial \xi_2 & \partial X_3/\partial \xi_3 \end{bmatrix} \tag{5.39}$$

O gradiente $\partial \boldsymbol{X}/\partial \boldsymbol{\xi}$ é calculado e invertido, possibilitanto assim o cálculo do gradiente das funções de forma com relação às coordenadas iniciais dado por (5.38).

Tendo em vista (3.42) e (5.24) a discretização do tensor de taxa de deformação virtual $\delta \boldsymbol{d}$ e do tensor de deformação linear $\boldsymbol{\varepsilon}$ é dada por

$$\delta \boldsymbol{d} = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^{n} (\delta \boldsymbol{v}_a \otimes \nabla N_a + \nabla N_a \otimes \delta \boldsymbol{v}_a) \tag{5.40}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^{n} (\boldsymbol{u}_a \otimes \nabla N_a + \nabla N_a \otimes \boldsymbol{u}_a) \tag{5.41}$$

onde $\nabla N_a = \partial N_a/\partial \boldsymbol{x}$ é o gradiente das funções de forma com relação às coordenadas finais e pode ser obtida de forma análoga a $\nabla_0 N_a$ como

$$\frac{\partial N_a}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)^{-T} \frac{\partial N_a}{\partial \boldsymbol{\xi}} \tag{5.42}$$

onde

$$\frac{\partial N_a}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \partial x_1/\partial \xi_1 & \partial x_1/\partial \xi_2 & \partial x_1/\partial \xi_3 \\ \partial x_2/\partial \xi_1 & \partial x_2/\partial \xi_2 & \partial x_2/\partial \xi_3 \\ \partial x_3/\partial \xi_1 & \partial x_3/\partial \xi_2 & \partial x_3/\partial \xi_3 \end{bmatrix}^{-T} \begin{bmatrix} \partial N_a/\partial \xi_1 \\ \partial N_a/\partial \xi_2 \\ \partial N_a/\partial \xi_3 \end{bmatrix} \tag{5.43}$$

5.1.4 Discretização da Equação do Equilíbrio

Para avaliar a contribuição ao trabalho virtual $\delta W(\phi, \delta \boldsymbol{v})$ causada por uma velocidade virtual nodal $\delta \boldsymbol{v}_a$ do nó a do elemento (e), substitui-se na expressão (5.13) as

interpolações de $\delta \boldsymbol{v}$ e $\delta \boldsymbol{d}$ dadas por (5.35) e (5.40), respectivamente, e considerando a simetria do tensor de tensão de Cauchy, obtem-se

$$\begin{aligned} \delta W^{(e)}(\phi, N_a \delta \boldsymbol{v}_a) &= \int_{v^{(e)}} \boldsymbol{\sigma} : (\delta \boldsymbol{v}_a \otimes \nabla N_a)\, dv \\ &- \int_{v^{(e)}} \mathbf{f} \cdot (N_a\, \delta \boldsymbol{v}_a)\, dv - \int_{\partial v^{(e)}} \boldsymbol{t} \cdot (N_a\, \delta \boldsymbol{v}_a)\, ds \end{aligned} \tag{5.44}$$

que é reescrita como

$$\begin{aligned} \delta W^{(e)}(\phi, N_a \delta \boldsymbol{v}_a) &= \int_{v^{(e)}} \delta \boldsymbol{v}_a \cdot \boldsymbol{\sigma} \nabla N_a\, dv \\ &- \int_{v^{(e)}} \mathbf{f} \cdot (N_a\, \delta \boldsymbol{v}_a)\, dv - \int_{\partial v^{(e)}} \boldsymbol{t} \cdot (N_a\, \delta \boldsymbol{v}_a)\, ds \end{aligned} \tag{5.45}$$

Como $\delta \boldsymbol{v}_a$ são valores nodais constantes, os mesmos são independentes da integração e portanto pode se reescrever a equação anterior como

$$\delta W^{(e)}(\phi, N_a \delta \boldsymbol{v}_a) = \delta \boldsymbol{v}_a \cdot \left(\int_{v^{(e)}} \boldsymbol{\sigma} \nabla N_a\, dv - \int_{v^{(e)}} N_a\, \mathbf{f}\, dv - \int_{\partial v^{(e)}} N_a\, \boldsymbol{t}\, ds \right) \tag{5.46}$$

Como o trabalho virtual é composto pelos trabalho virtual interno e externo, para as forças nodais internas e externas definidas por $\boldsymbol{T}_a$ e $\boldsymbol{F}_a$, respectivamente, temos

$$\delta W^{(e)}(\phi, N_a \delta \boldsymbol{v}_a) = \delta \boldsymbol{v}_a \cdot (\boldsymbol{T}_a^{(e)} - \boldsymbol{F}_a^{(e)}) \tag{5.47}$$

onde

$$\boldsymbol{T}_a^{(e)} = \int_{v^{(e)}} \boldsymbol{\sigma} \nabla N_a\, dv \tag{5.48}$$

$$\boldsymbol{F}_a^{(e)} = \int_{v^{(e)}} N_a\, \boldsymbol{f}\, dv + \int_{\partial v^{(e)}} N_a\, \boldsymbol{t}\, ds \tag{5.49}$$

As forças nodais internas podem ser escritas na forma indicial como

$$\boldsymbol{T}_{a,i}^{(e)} = \sum_{j=1}^{3} \int_{v^{(e)}} \sigma_{ij} \frac{\partial N_a}{\partial x_j}\, dv \tag{5.50}$$

e para serem escritas na forma matricial, considere que os tensores $\boldsymbol{\sigma}$ e $\delta \boldsymbol{d}$ na Equação (5.13) são simétricos e os mesmos podem ser escritos como vetores utilizando apenas as seis componentes independentes. Isto é

$$\underline{\sigma} = [\sigma_{11},\ \sigma_{22},\ \sigma_{33},\ \sigma_{12},\ \sigma_{13},\ \sigma_{23}]^T \tag{5.51}$$

$$\delta \underline{\boldsymbol{d}} = [d_{11},\ d_{22},\ d_{33},\ 2d_{12},\ 2d_{13},\ 2d_{23}]^T \tag{5.52}$$

Assim, a Equação (5.48) pode ser escrita como

$$\int_v \boldsymbol{\sigma} \nabla N_a \, dv = \int_v \delta \boldsymbol{d}^T \underline{\boldsymbol{\sigma}} \, dv \tag{5.53}$$

onde

$$\delta \underline{\boldsymbol{d}} = \sum_{a=1}^{n} \boldsymbol{B}_a \boldsymbol{u}_a, \qquad \boldsymbol{B}_a = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial N_a}{\partial x_1} & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{\partial N_a}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{\partial N_a}{\partial x_3} \\ \dfrac{\partial N_a}{\partial x_2} & \dfrac{\partial N_a}{\partial x_1} & 0 \\ \dfrac{\partial N_a}{\partial x_3} & 0 & \dfrac{\partial N_a}{\partial x_1} \\ 0 & \dfrac{\partial N_a}{\partial x_3} & \dfrac{\partial N_a}{\partial x_2} \end{bmatrix} \tag{5.54}$$

Substituindo (5.54) em (5.53) permite escrever a equação do PTV linearizado (5.44) como

$$\begin{aligned} \delta W^{(e)}(\phi, N_a \delta \boldsymbol{v}_a) &= \int_{v^{(e)}} (\boldsymbol{B}_a \, \delta \boldsymbol{v}_a)^T \underline{\boldsymbol{\sigma}} dv \\ &- \int_{v^{(e)}} \boldsymbol{f} \cdot (N_a \, \delta \boldsymbol{v}_a) \, dv - \int_{\partial v^{(e)}} \boldsymbol{t} \cdot (N_a \, \delta \boldsymbol{v}_a) \, ds \end{aligned} \tag{5.55}$$

que comparada a (5.46) fornece uma expressão alternativa escrita na forma matricial para as forças nodais equivalentes $\boldsymbol{T}_a$ como

$$\boldsymbol{T}_a^{(e)} = \int_{v^{(e)}} \boldsymbol{B}_a^T \underline{\sigma} \, dv \tag{5.56}$$

Em uma determinada configuração do procedimento de solução, na qual o equilíbrio entre as forças nodais internas e externas ainda não foi obtido, existe um desequilíbrio nodal entre estas de modo que existe uma força residual nodal $\boldsymbol{R}_a$ definida por

$$\boldsymbol{R}_a = \boldsymbol{T}_a - \boldsymbol{F}_a = 0 \tag{5.57}$$

onde $\boldsymbol{T}$, $\boldsymbol{F}$ e $\boldsymbol{R}$ são vetores com N componentes, onde N é o número de graus de liberdade.

5.1.5 Discretização da Equação do Equilíbrio Linearizada

A discretização do PTV linearizado dá origem à matriz de rigidez tangente, a qual será separada nas componentes que se referem aos termos com o tensor constitutivo

e com a tensão na Equação (5.34), que representa a linearização do trabalho virtual interno.

A equação $\delta W^{(e)}(\phi, N_a\delta\boldsymbol{v}_a) = \delta\boldsymbol{v}_a \cdot (\boldsymbol{T}_a^{(e)} - \boldsymbol{F}_a^{(e)})$ exprime a contribuição das forças nodais equivalentes $\boldsymbol{T}_a$ e das forças externas $\boldsymbol{F}_a$ para o equilíbrio do nó a. A linearização desta expressão fixa em $N_a\delta\boldsymbol{v}_a$ na direção de $N_b\boldsymbol{u}_b$ representa a mudança de $\boldsymbol{T}_a$ e $\boldsymbol{F}_a$ no nó a devido ao incremento $\boldsymbol{u}_b$ da posição do nó b. Assim

$$\begin{aligned} D\delta W^{(e)}(\phi, N_a\delta\boldsymbol{v}_a)[N_b\boldsymbol{u}_b] &= D(\delta\boldsymbol{v}_a \cdot (\boldsymbol{T}_a^{(e)} - \boldsymbol{F}_a^{(e)}))[N_b\boldsymbol{u}_b] \\ &= \delta\boldsymbol{v}_a \cdot D(\boldsymbol{T}_a^{(e)} - \boldsymbol{F}_a^{(e)})[N_b\boldsymbol{u}_b] \\ &= \delta\boldsymbol{v}_a \cdot \boldsymbol{K}_{ab}^{(e)}\boldsymbol{u}_b \end{aligned} \tag{5.58}$$

A matriz de rigidez tangente $\boldsymbol{K}_{ab}^{(e)}$ será obtida através das contribuições do termo constitutivo e do termo da tensão inicial da equação do trabalho virtual linearizada, isto é

$$\boldsymbol{K}_{ab}^{(e)} = \boldsymbol{K}_{c,ab}^{(e)} + \boldsymbol{K}_{\sigma,ab}^{(e)} \tag{5.59}$$

sendo que $\boldsymbol{K}_{c,ab}^{(e)}$ é obtido substituindo-se as interpolações de $\delta\boldsymbol{d}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}$ no segundo termo da equação (5.34), logo

$$\left[\boldsymbol{K}_{c,ab}^{(e)}\right]_{ij} = \int_{v^{(e)}} \sum_{k,l=1}^{3} \frac{\partial N_a}{\partial x_k}\, c_{ikjl}^{sim}\, \frac{\partial N_b}{\partial x_l}\, dv \tag{5.60}$$

onde $i, j = 1, 2, 3$.

Por outro lado, a componente $\boldsymbol{K}_{\sigma,ab}^{(e)}$ é obtida utilizando as seguintes interpolações para o gradiente da velocidade virtual e para o gradiente de deslocamento

$$\nabla\delta\boldsymbol{v} = \sum_{a=1}^{n} \delta\boldsymbol{v}_a \otimes \nabla N_a \tag{5.61}$$

$$\nabla\boldsymbol{u} = \sum_{b=1}^{n} \boldsymbol{u}_b \otimes \nabla N_b \tag{5.62}$$

que substituídas no primeiro termo de (5.34) resultam em

$$\begin{aligned} D\delta W_\sigma(\phi, N_a\delta\boldsymbol{v}_a)[N_b\boldsymbol{u}_b] &= \int_{v^{(e)}} \boldsymbol{\sigma} : \left[(\nabla\boldsymbol{u}_b)^T \nabla\delta\boldsymbol{v}_a\right] dv \\ &= \int_{v^{(e)}} \boldsymbol{\sigma} : [(\delta\boldsymbol{v}_a \cdot \boldsymbol{u}_b)\nabla\boldsymbol{u}_b \otimes \nabla\delta\boldsymbol{v}_a]\, dv \\ &= (\delta\boldsymbol{v}_a \cdot \boldsymbol{u}_b) \int_{v^{(e)}} \boldsymbol{\sigma} : \nabla\boldsymbol{u}_b \otimes \nabla\delta\boldsymbol{v}_a\, dv \end{aligned} \tag{5.63}$$

que pode ser escrita de forma matricial como

$$D\delta W_\sigma(\phi, N_a\delta\boldsymbol{v}_a)[N_b\boldsymbol{u}_b] = \delta\boldsymbol{v}_a \cdot \boldsymbol{K}^{(e)}_{\sigma,ab}\boldsymbol{u}_b \tag{5.64}$$

onde

$$\left[\boldsymbol{K}^{(e)}_{\sigma,ab}\right]_{ij} = \int_{v^{(e)}} \sum_{k,l=1}^{3} \frac{\partial N_a}{\partial x_k}\,\sigma_{kl}\,\frac{\partial N_b}{\partial x_l}\,\delta_{ij}\,dv \tag{5.65}$$

Finalmente a matriz de rigidez pode ser obtida combinando as equações anteriores como

$$D\delta W^{(e)}(\phi, \delta\boldsymbol{v})[N_b\boldsymbol{u}_b] = \delta\boldsymbol{v}_a \cdot (\boldsymbol{K}^{(e)}_{c,ab} + \boldsymbol{K}^{(e)}_{\sigma,ab})\boldsymbol{u}_b \tag{5.66}$$

$$= \delta\boldsymbol{v}_a \cdot \boldsymbol{K}^{(e)}_{ab}\boldsymbol{u}_b \tag{5.67}$$

5.1.6 Método de Newton-Raphson para solução

Na seção anterior foi mostrado que o princípio dos trabalhos virtuais e a sua linearização resultam nas seguintes expressões

$$\delta W(\phi, \delta\boldsymbol{v}) = \delta\mathbf{v}^T\mathbf{R} \tag{5.68}$$

$$D\delta W(\phi, \delta\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}] = \delta\mathbf{v}^T\mathbf{K}\mathbf{u} \tag{5.69}$$

onde $\mathbf{R}$ é o vetor resíduo que expressa o desequilíbrio entre as forças nodais internas e externas, representadas respectivamente por $\mathbf{T}$ e $\mathbf{F}$.

Com o propósito de se ilustrar o procedimento incremental-iterativo baseado no método de Newton-Raphson para solução das equações não-lineares aqui utilizado, considere que ${}^t\mathbf{T}$ e ${}^t\mathbf{F}$ denotam as forças nodais internas e externas de uma configuração já em equilíbrio. Deseja-se aplicar um incremento de força $\Delta\mathbf{F}$ e determinar qual é a nova configuração deformada de tal forma que as forças nodais internas e externas nesta nova configuração, correspondente ao instante $t + \Delta t$, estejam em equilíbrio

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{T} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{F} = 0 \tag{5.70}$$

sendo que ${}^{t+\Delta t}\mathbf{F} = {}^t\mathbf{F} + \Delta\mathbf{F}$.

Desta forma, tem-se o seguinte esquema iterativo

$$-\mathbf{R}^{(i-1)} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{T}^{(i-1)} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{F} \tag{5.71}$$

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{K}^{(i-1)}\mathbf{u}^i = -\mathbf{R}^{(i-1)} \tag{5.72}$$

com

$$^{t+\Delta t}\mathbf{K}^{(0)} = {}^{t}\mathbf{K} \tag{5.73}$$

$$^{t+\Delta t}\mathbf{T}^{(0)} = {}^{t}\mathbf{T} \tag{5.74}$$

Estas equações foram obtidas linearizando a equação não-linear do equilíbrio no instante $t + \Delta t$ na iteração $(i - 1)$, para se obter o incremento de deslocamento $\mathbf{u}^{(i)}$. A matriz de rigidez tangente $\mathbf{K}$ é atualizada a cada nova iteração conforme estabelece o procedimento de Newton-Raphson.

Embora seja possível encontrar a solução com apenas um incremento de carga, considera-se aqui o caso em que a carga $\mathbf{F}$ é aplicada em uma série de incrementos

$$\mathbf{F} = \sum_{i=1}^{l} \Delta\mathbf{F}_i \tag{5.75}$$

onde l é o número total de incrementos.

Desta forma, tem-se uma melhor convergência para o método de Newton-Raphson a cada incremento de força aplicado, ao contrário de quando se aplica a carga total em apenas um incremento, ou seja, quanto mais incrementos, mais fácil se torna para o método convergir dentro de cada incremento de carga.

Em seguida, o pseudo-código que descreve o procedimento incremental-iterativo acima descrito é apresentado no Algoritmo 1.

Algoritmo 1: Algoritmo de solução

1 inicie $\boldsymbol{F} = 0$; $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{X}$; $\boldsymbol{R} = 0$;
2 **enquanto** $(incrm < nincr)$ **faça**
3 calcula $\Delta\boldsymbol{F}$;
4 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F} + \Delta\boldsymbol{F}$;
5 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R} - \Delta\boldsymbol{F}$;
6 **enquanto** $(\|\boldsymbol{R}\|/\|\boldsymbol{F}\| > tol)$ **faça**
7 calcula $\boldsymbol{K}$;
8 $\boldsymbol{K}\boldsymbol{u} = -\boldsymbol{R}$;
9 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{u}$;
10 calcula $\boldsymbol{b}$;
11 calcula $\boldsymbol{\sigma}$;
12 calcula $\boldsymbol{T}$ usando Eq. (5.48);
13 calcula $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{T} - \boldsymbol{F}$;
14 **fim**
15 **fim**

Inicialmente, os vetores de força externa e resíduo são inicializados com zero e as coordenadas nodais atuais $\mathbf{x}$ são inicializadas como as posições iniciais $\mathbf{X}$. Em seguida o vetor de cargas nodais equivalentes para a parcela de carregamento considerada ($\Delta\boldsymbol{F}$) é calculado, depois o algoritmo entra no *loop* responsável por aplicar todos os incrementos de carga e atualizar o vetor de força e resíduo. Ainda neste, na linha 8 o algoritmo realiza iterarções até que um critério de convergência seja satisfeito e calcula a matriz de rigidez tangente atualizada e o sistema de equações algébricas lineares é resolvido para se obter os incrementos de deslocamentos.

Assim, com os incrementos de deslocamentos atualizam-se as coordenadas nodais e calcula-se o tensor de deformação $\boldsymbol{b}$, necessário para a determinação da tensão de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$. Com as tensões calculadas, obtem-se as forças nodais internas equivalentes na linha 12, as quais irão gerar um resíduo devido ao desequilíbrio como descrito no passo 13. Este *loop* interno termina quando este resíduo for suficientemente pequeno.

5.2 Solução do Problema Elétrico

No Capítulo 2 foram apresentadas as equações que modelam a atividade elétrica cardíaca que descrevem a distribuição do potencial elétrico neste tecido, seja utilizando o potencial intracelular e extracelular (modelo do Bidomínio) ou apenas o potencial transmembrânico (modelo do Monodomínio). Aborda-se nesta seção de forma sucinta o esquema numérico adotado para obter a solução aproximada do problema elétrico descrito pelo modelo do Monodomínio.

Com o intuito de descrever o método de solução para o problema elétrico descrito pelas Equações (4.17)-(4.19), as mesmas são reescritas aqui da seguinte forma

$$\frac{\partial V}{\partial t} + (L_1 + L_2)V = 0 \tag{5.76}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = g(V, r) \tag{5.77}$$

$$\frac{\partial \sigma_a}{\partial t} = h(V, \sigma_a) \tag{5.78}$$

onde

$$L_1(V) = \nabla \cdot D\nabla V \tag{5.79}$$

$$L_2(V) = I_{ion} = -kV(V-a)(V-1) - rV \tag{5.80}$$

$$g(V, r) = \left(\varepsilon + \frac{\mu_1 r}{\mu_2 + V}\right)(-r - kV(V-a-1)) \tag{5.81}$$

$$h(V, \sigma_a) = \epsilon(V)(k_T V - \sigma_a) \tag{5.82}$$

onde V é o potencial transmembrânico; I_m a corrente transmembrânica; $\boldsymbol{D}$ o tensor de condutividades.

O problema elétrico descrito pelo modelo do Monodomínio requer a solução da equação diferencial parcial parabólica definida por (5.76) acoplada a um sistema de equações diferenciais dado por (5.77) e (5.78) e no presente trabalho a solução deste problema é feita utilizando uma técnica denominada de *operator splitting*.

Nesta técnica o sistema de equações diferenciais original é aproximado por uma sequência de equações diferenciais mais simples solucionados por diferentes métodos de integração em cada passo.

No simulador cardíaco aqui utilizado emprega-se o método de Crank-Nicholson para a equação parabólica e o método de Euler explícito para as demais equações

deste sistema. Desta forma, obtem-se a seguinte discretização no tempo

$$1. \quad \left(1 - \frac{\Delta t}{2} L_1\right) V^{k+1/2} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2} L_1\right) V^k \tag{5.83}$$

$$2. \quad V^{k+1} = V^{k+1/2} - \Delta t \, I_{ion}(V^{k+1/2}, r^k) \tag{5.84}$$

$$3. \quad r^{k+1} = r^k + \Delta t \, g(V^{k+1/2}, r^k) \tag{5.85}$$

$$4. \quad {\sigma_a}^{k+1} = {\sigma_a}^k + \Delta t \, h(V^{k+1/2}, {\sigma_a}^k) \tag{5.86}$$

onde L_1 é a discretização espacial para $\nabla \cdot (\boldsymbol{D}\nabla)$; Δt é o passo de tempo; V^k, r^k e ${\sigma_a}^k$ são as discretizações no tempo de V, r e σ_a respectivamente.

Com relação a discretização espacial diferentes abordagens podem ser utilizadas, sendo que neste código um esquema de diferenças finitas foi empregado. Para mais detalhes sobre a solução numérica deste problema veja [33, 40].

5.3 Solução do Problema Acoplado

Dado que o método de solução do problema mecânico e do problema elétrico já foram discutidos, é necessário considerar como esses problemas são resolvidos de forma acoplada e quais são os dados de entrada e saída trocados entre os problemas.

Um esquema numérico híbrido aqui proposto, é similar ao em [27] para a solução do modelo eletromecânico acoplado, no qual o método de diferenças finitas é empregado para solução do problema da propagação elétrica e o método dos elementos finitos é utilizado para calcular as deformações finitas do tecido cardíaco.

A discretização espacial do problema da excitação elétrica é obtida através do método de diferenças finitas, enquanto o método de Euler explícito e Crank-Nicholson são utilizados para a integração numérica no tempo, como discutido na seção anterior.

O problema acoplado é resolvido utilizando diferentes malhas para a discretização de cada problema devido a diferenças de escala espacial entre estes. Sendo assim, o problema elétrico é resolvido com uma malha de diferenças finitas bem refinada, pois as interações que acontecem neste problema ocorrem em uma escala menor. Por outro lado, para o problema mecânico é utilizado uma malha mais grosseira,

definida sobre a malha de diferenças finitas de tal forma que dentro de cada elemento existem vários pontos da discretização problema elétrico.

Como exemplo, considere uma malha contendo 91×91 pontos de diferenças finitas para o problema elétrico e uma malha com 15×15 elementos para o problema mecânico. Desta forma, cada elemento finito utilizado na discretização do problema mecânico contém 7×7 pontos de diferenças finitas utilizadas na solução do problema elétrico.

O procedimento para solução do problema acoplado é como segue: considera-se inicialmente o problema elétrico, o qual avança no tempo ao ser integrado numericamente por um número N_{mec} de passos de tempo. Ao final destes passos, tem-se um valor obtido para a variável σ_a em cada ponto da malha que corresponde à tensão ativa, a qual será utilizada como entrada para o problema mecânico.

Entretanto, devido às diferentes malhas utilizadas para cada problema, apenas os valores de σ_a definidos sobre os pontos nodais dos elementos do problema mecânico serão utilizados como entrada para este. Estes valores nodais da tensão ativa definidos sobre os nós dos elementos precisam ser interpolados para os pontos de integração numérica (pontos de Gauss), já que para a solução do problema mecânico as integrais para o cálculo das matrizes dos elementos são obtidas por integração numérica.

A tensão ativa σ_a serve como entrada para carregar o tecido com um estado de tensão que irá causar a deformação deste, sendo assim, tal estado de tensão pode ser visto como uma tensão inicial para o problema mecânico, a qual será introduzida da seguinte forma

$$\boldsymbol{T} - \boldsymbol{F} - \boldsymbol{F^i} = 0 \tag{5.87}$$

onde $\boldsymbol{T}$ e $\boldsymbol{F}$ definem as forças nodais internas e externas, respectivamente, como discutido anteriormente. O estado de tensão inicial $\boldsymbol{\sigma^i}$ é incorporado ao vetor de forças nodais $\boldsymbol{F^i}$ pela seguinte expressão

$$\boldsymbol{F}_a^i = \int_v \boldsymbol{\sigma^i} \nabla N_a \, dv \tag{5.88}$$

que é análoga à Equação (5.48) que define o cálculo das forças nodais equivalentes.

Assim, através de um procedimento incremental-iterativo o problema mecânico é computado utilizando o método de Newton-Raphson para resolver a equação de

equilíbrio que governa o problema mecânico. Ao final deste processo, quando o equilíbrio é atingido, tem-se como resultado um estado de deformação que pode ser representado pelo tensor $\boldsymbol{C}$. Este tensor será utilizado para atualizar as propriedades da condutividade do problema elétrico, como discutido no Capítulo 4, as quais serão utilizadas para os próximos N_{mec} passos de tempo deste problema.

O acoplamento entre os dois problemas é ilustrado pela Figura 5.2, a qual enfatiza que, após N_{mec} passos de tempo do problema elétrico a tensão ativa é fornecida para o problema mecânico, que obtem um novo estado de deformação e através do tensor de deformação $\boldsymbol{C}$ as propriedades elétricas são atualizadas por mais N_{mec} passos.

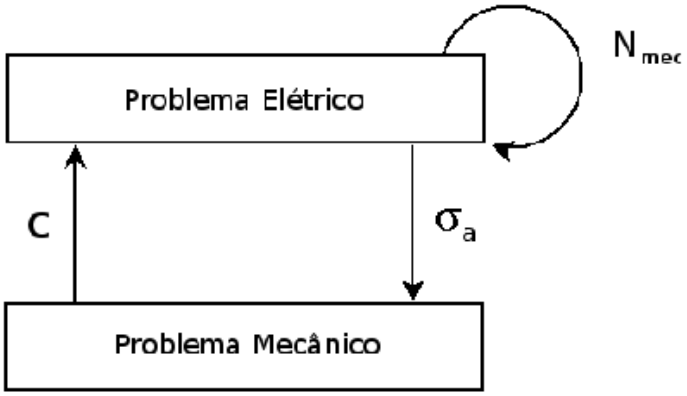

Figura 5.2: Acoplamento

As forças nodais $\boldsymbol{F}^i$ que são utilizadas para carregar o problema mecânico são aplicadas em uma série de incrementos dentro dos quais um esquema de Newton-Raphson é utilizado para a determinação da configuração de equilíbrio. A cada vez que o problema mecânico precisa ser resolvido, utiliza-se a configuração indeformada do problema original para se obter a deformação correspondente ao estado de tensão ativa atual.

Para considerar os efeitos da deformação no problema elétrico, o termo da difusão na Equação (4.11) é avaliado através de uma expressão utilizando coordenadas curvilíneas dada por

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{D}(\boldsymbol{C})\, \nabla V_m) = \frac{1}{\sqrt{C}} \frac{\partial}{\partial X^M} \left(\sqrt{C} D_N^M C^{NL} \frac{\partial V_m}{\partial X^L} \right) \tag{5.89}$$

onde $C = \det(\boldsymbol{C})$ e ainda D_N^M e C^{NL} são as componentes do tensor de condutividade e do tensor direito de deformação de Cauchy-Green. Desta forma é possível resolver

numericamente o problema elétrico utilizando sempre a mesma malha, pois a deformação da mesma está embutida na expressão reescrita com o uso das coordenadas curvilíneas. Para maiores detalhes sobre esta operação e sistemas de coordenadas curvilíneas consulte [27] e [10].

Considerando o tensor de condutividade elétrica isotrópico $D_N^M = \delta_N^M$ a Equação (5.89) pode ser reescrita como

$$\frac{1}{\sqrt{C}}\frac{\partial}{\partial X^M}\left(\sqrt{C}D_N^M C^{NL}\frac{\partial V_m}{\partial X^L}\right) = \frac{1}{\sqrt{C}}\frac{\partial}{\partial X^M}\left(\sqrt{C}C^{ML}\frac{\partial V_m}{\partial X^L}\right) \tag{5.90}$$

assim o problema elétrico é escrito como

$$\frac{\partial V_m}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{C}}\frac{\partial}{\partial X^M}\left(\sqrt{C}C^{ML}\frac{\partial V_m}{\partial X^L}\right) - kV_m(V_m - a)(V_m - 1) - rV_m + I_s \tag{5.91}$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \left(\varepsilon + \frac{\mu_1 r}{\mu_2 + V_m}\right)(-r - kV_m(V_m - a - 1)) \tag{5.92}$$

$$\frac{\partial \sigma_a}{\partial t} = \epsilon(V_m)(k_T V_m - \sigma_a) \tag{5.93}$$

Capítulo 6

Resultados Numéricos

Nos capítulos anteriores foram apresentados conceitos necessários para o desenvolvimento de um modelo eletromecânico acoplado para o tecido cardíaco. Apresentamos e discutimos em seguida alguns resultados numéricos obtidos através de simulações computacionais do modelo proposto, incluindo experimentos numéricos realizados no programa utilizado para solução das equações da mecânica. Estes experimentos tiveram o intuito de validar a implementação da resolução do problema mecânico e para isso os resultados aqui obtidos foram comparados com problemas encontrados na literatura.

6.1 Implementação numérica

Para a solução numérica da equação de equilíbrio do problema de deformações finitas foi utilizado o programa *FLagSHyP* (*Finite element LArGe Strain HYperelasticity Program*) implementando na linguagem FORTRAN e desenvolvido por [8]. Trata-se de uma versão escrita em FORTRAN 90 traduzida do FORTRAN 77 por J. E. Akin, cujo código fonte e exemplos para utilização encontram-se disponíveis em [9].

O programa considera relações constitutivas compressíveis e incompressíveis para o material Neo-Hookeano em duas ou três dimensões. Um procedimento incremental-iterativo através do método de Newton-Raphson é usado para solução da equação

de equilíbrio não-linear utilizando-se uma formulação Lagrangiana atualizada para solução do problema de deformações finitas, através do método dos elementos finitos.

A simulação de um caso problema é definida através de um arquivo de entrada que possui informações sobre os nós e elementos, que descrevem o domínio, as forças aplicadas e as condições de contorno para o problema. Além disso devem ser incluídas informações sobre os materiais utilizados e os parâmetros de controle do método de solução incremental-iterativo, tais como tolerância para teste de convergência do procedimento iterativo e números de passos em que o carregamento é dividido. Vale ressaltar que, na especificação de um tipo de elemento para uma determinada malha está implícita a quantidade de pontos de integração numérica que será utilizado pelo programa, isto é, cada tipo de elemento utiliza apenas uma determinada quantidade de pontos de Gauss.

No arquivo de saída fornecido ao final da execução de cada problema são descritos, para cada incremento de carga, as novas coordenadas dos nós, as forças nodais equivalentes e as componentes do tensor de tensão de Cauchy nos pontos de integração de Gauss. O programa gera ainda outro arquivo de saída que permite continuar a execução de um problema caso este não tenha convergido para os parâmetros de controle de solução especificados (opção de *restart*).

Para resolver o sistema de equações lineares resultantes em cada passo de carga é utilizada uma subrotina para resolução de sistemas de equação baseada na decomposição LDL^T descrita em [41]. Neste procedimento a matriz de rigidez tangente é armazenada em dois vetores, um contendo a diagonal e outro contendo a parte superior (ou inferior) da diagonal.

Dentre todas as subrotinas que compõem o programa, as mais importantes são a subrotina mestre, que faz a leitura e escrita dos arquivos de entrada e saída e organiza o fluxo de execução do programa de acordo com o procedimento de solução, e a subrotina *elemtk*. Esta última, é responsável por calcular as forças nodais equivalentes e as componentes da matriz de rigidez tangente. Para maiores detalhes sobre estas e outras rotinas do programa consulte [8], onde uma lista de todas variáveis, relações constitutivas implementadas e tipos de elementos disponíveis pode ser encontrada.

6.1.1 Implementação do material tipo Mooney-Rivlin

Tendo em vista que o programa FLagSHyP só possui relações constitutivas implementadas para o material do tipo Neo-Hookeano, para os propósitos do presente trabalho foi necessário implementar neste programa relações constitutivas para materiais do tipo Mooney-Rivlin.

As expressões do segundo tensor de tensão de Piola-Kirchhoff $\boldsymbol{S}$ e o tensor de elasticidade material $\mathbb{C}$ para este tipo de material foram apresentadas no Capítulo 3 e são dadas pelas expressões (3.118) e (3.119), respectivamente. Para introduzir este material no programa foi necessário transformar estas equações em suas respectivas versões na descrição espacial, isto é, no tensor de tensão de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ e no tensor de elasticidade espacial $\mathbb{c}$. Este último foi obtido, numericamente, através da operação (3.109).

6.2 Membrana com deslocamento prescrito

Em seguida estudou-se o problema do alongamento horizontal de uma membrana quadrada, fina, fixada em seus lados opostos e sujeita a deslocamentos prescritos conforme ilustrado pela Figura 6.1. Para isso os deslocamentos na direção x_1 dos nós onde $x_1 = \pm\, a/2$ foram prescritos como $\pm\, a(\lambda - 1)/2$, onde λ é o alongamento relativo (*stretch*) que se deseja aplicar a esta membrana na direção x_1. Na literatura este problema é conhecido como *biaxial strip test* e é utilizado para determinar propriedades de materiais como borrachas sintéticas, polímeros e propelentes sólidos.

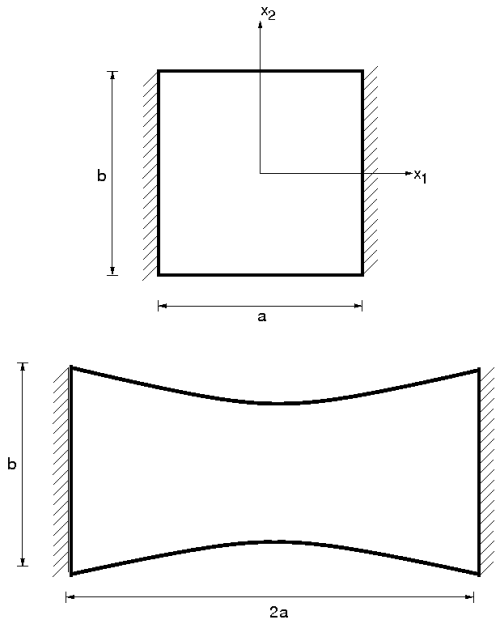

Figura 6.1: Descrição do Problema

Resultados numéricos para este problema foram obtidos por [29] ao alongar a membrana até o dobro de seu comprimento inicial, ou seja, utilizando $\lambda = 2$ e considerando que inicialmente a mesma é quadrada com lados medindo 8 *in* e com 0.05 *in* de espessura. Neste experimento o material é considerado como do tipo Mooney-Rivlin com constantes c_1 e c_2 dadas por 24.0 e 1.5 *psi*, respectivamente.

Em alguns estudos é de interesse conhecer a força F final necessária para produzir uma extensão de $\lambda = 2$ que atua nos lados onde $x_1 = \pm a/2$. Essa força é obtida através da soma das componentes x_1 das forças nodais equivalentes nestes lados.

6.2.1 Experimento 1 - Malha triangular

O problema foi resolvido utilizando elementos triangulares lineares para diferentes malhas de elementos finitos, refinadas sucessivamente de acordo com a Figura 6.2, que ilustra as respectivas configurações indeformada e deformada destas malhas.

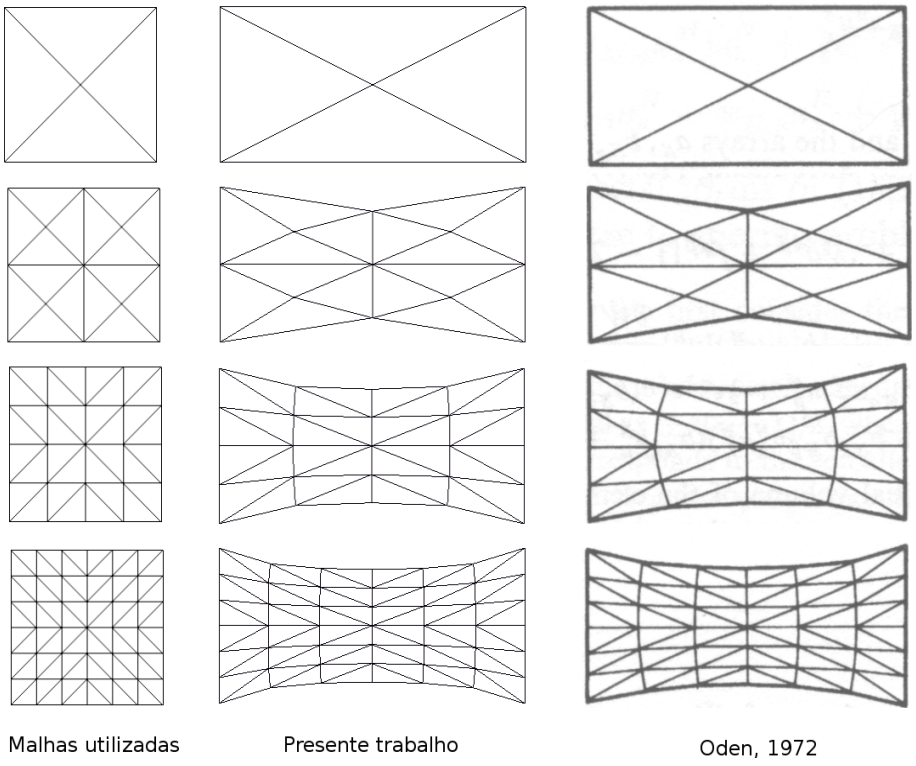

Figura 6.2: Experimento 1 - Malhas e campos de deslocamentos

Um gráfico que ilustra a convergência da força F para o valor 36.0 lb comparando o resultado original e o resultado obtido por [28] neste experimento é mostrado na Figura 6.3. Este gráfico sugere que o resultado obtido está em concordância com os resultados acima citados, pois apesar da pequena diferença da força F em cada malha, a mesma converge para o valor esperado.

Nas simulações realizadas por [28] o campo de deslocamento obtido para cada uma das malhas tomou como deslocamento inicial o resultado obtido na malha mais grossa anterior a esta na sequência de malhas utilizadas. Diferentemente dos resultados aqui obtidos, no quais, para cada malha, partiu-se da configuração original indeformada.

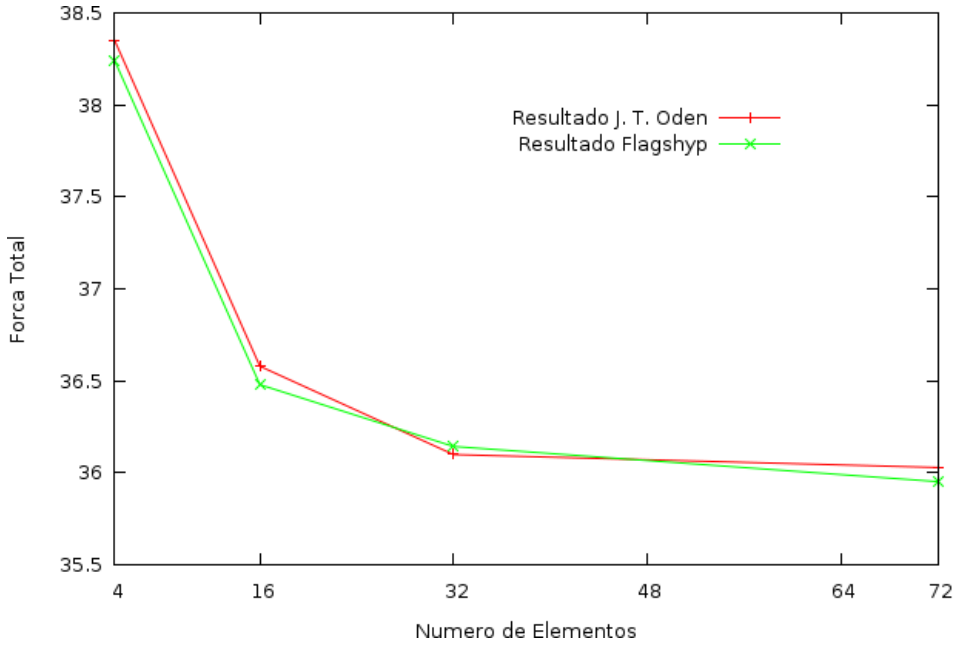

Figura 6.3: Experimento 1 - Gráfico força total versus número de elementos

6.2.2 Experimento 2 - Malha retangular

Para este mesmo problema, do *biaxial strip test*, um outro experimento foi realizado utilizando-se elementos quadrangulares bilineares empregando-se na simulação apenas um quarto da geometria.

A Figura 6.4 mostra a malha de elementos finitos inicialmente quadrada para um quarto do problema e a configuração deformada obtida para uma extensão de $\lambda = 2$, prescrevendo os deslocamentos da mesma forma como já descrito.

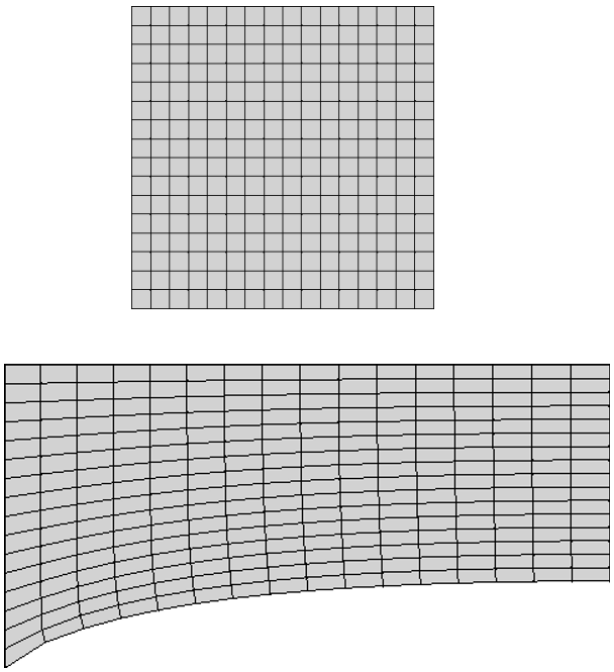

Figura 6.4: Experimento 2 - Configuração indeformada e deformada

6.3 Membrana com furo circular

6.3.1 Experimento 3 - Aplicação de carga

Como primeira aplicação analisou-se o comportamento dos deslocamentos e das deformações através da aplicação de forças nodais na direção x_1 em uma membrana quadrada com um furo circular. Este problema foi inicialmente proposto e resolvido em [5], onde o material foi assumido hiperelástico incompressível do tipo Mooney-Rivlin com constantes $c_1 = 25\ psi$ e $c_2 = 7\ psi$.

A Figura 6.6 apresenta em detalhes o problema proposto para o qual a solução numérica foi obtida através da discretização de um quarto do problema original. Nesta figura é mostrada a malha de elementos finitos utilizada nesta análise e os nós rotulados como A, B e C que foram utilizados para análise e comparação dos deslocamentos obtidos.

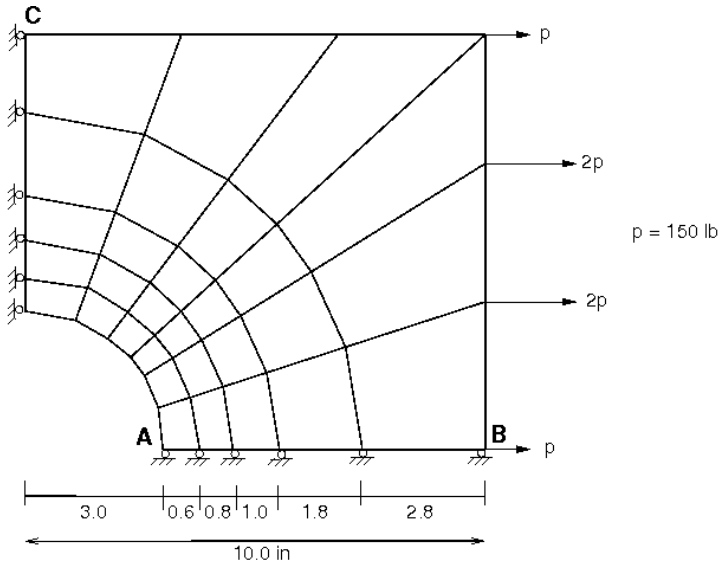

Figura 6.5: Experimento 3 - Descrição do problema

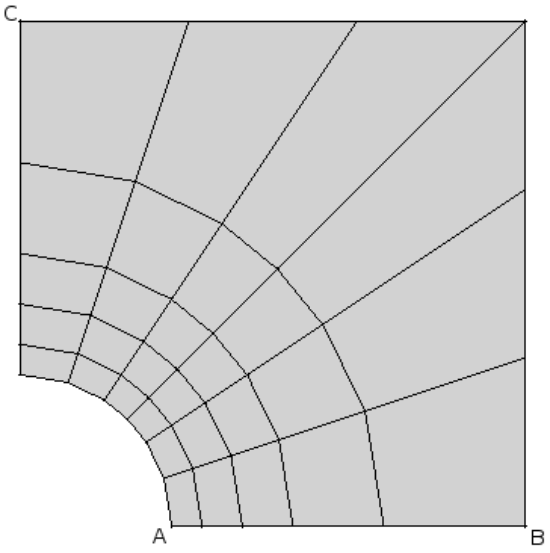

Figura 6.6: Experimento 3 - Configuração indeformada

Na solução numérica deste problema consideramos apenas 5 incrementos iguais para uma carga $p = 900\ lb$ uniformemente aplicada aos nós de coordenada $x_1 = 10\ in$. Na Figura 6.7 a configuração deformada é mostrada, sendo que um deslocamento maior que 11.0 in na direção x_1 foi obtido para o nó B.

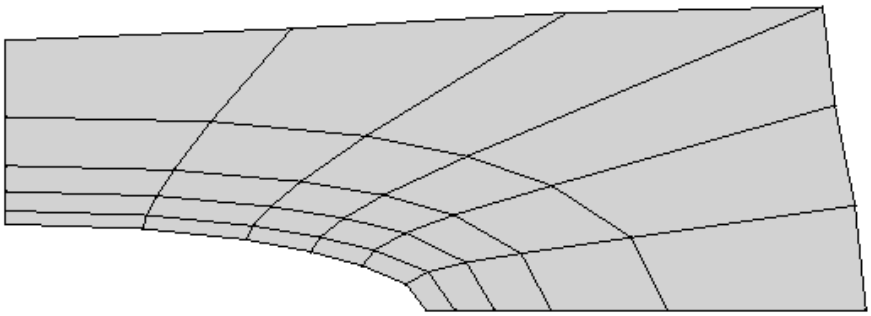

Figura 6.7: Experimento 3 - Configuração deformada

Para efeito de comparação um gráfico força-deslocamento para os nós A, B e C é apresentado na Figura 6.8 na qual o resultado obtido em [5] foi considerado como "solução exata" e é representado pelos pontos no gráfico. Conforme pode ser observado, a solução através do material hiperelástico incompressível Mooney-Rivlin implementado fornece boa concordância com o resultado fornecido por [5].

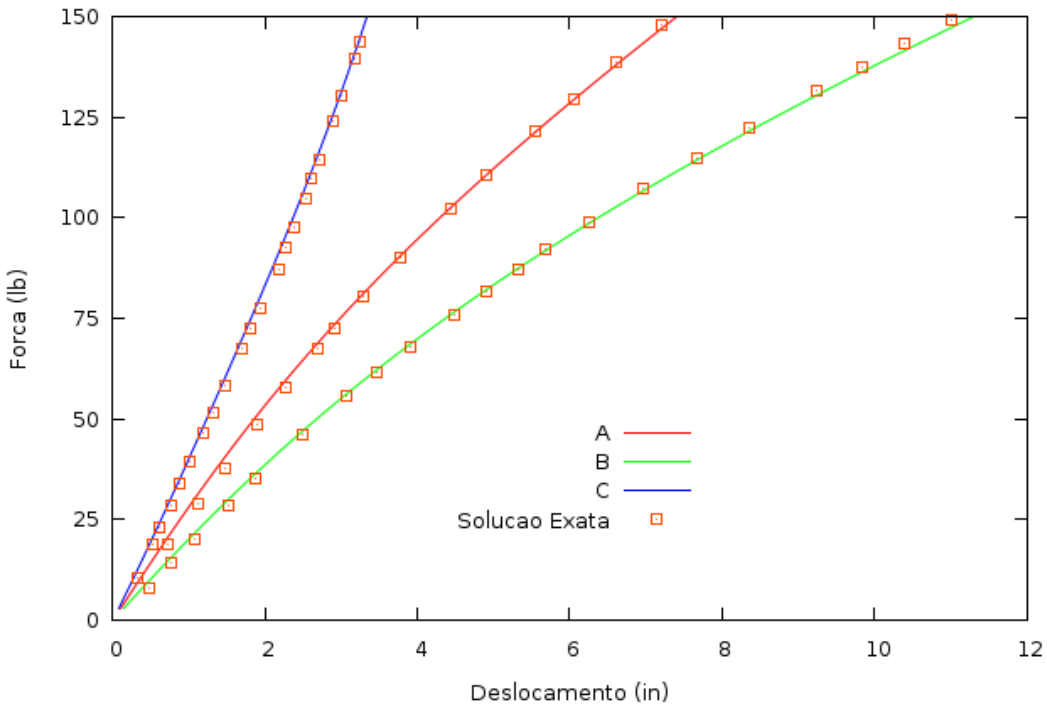

Figura 6.8: Experimento 3 - Gráfico força-deslocamento

6.3.2 Experimento 4 - Alongamento uniaxial

Neste experimento estudou-se o comportamento de uma membrana fina, inicialmente quadrada, contendo um furo circular em seu centro ao ser alongada na direção horizontal estando fixa na direção vertical. A Figura 6.9 apresenta esquematicamente a configuração inicial do problema proposto sendo que o furo central tem um raio $r = 0.25\ in$ e os lados medem $6.5\ in$.

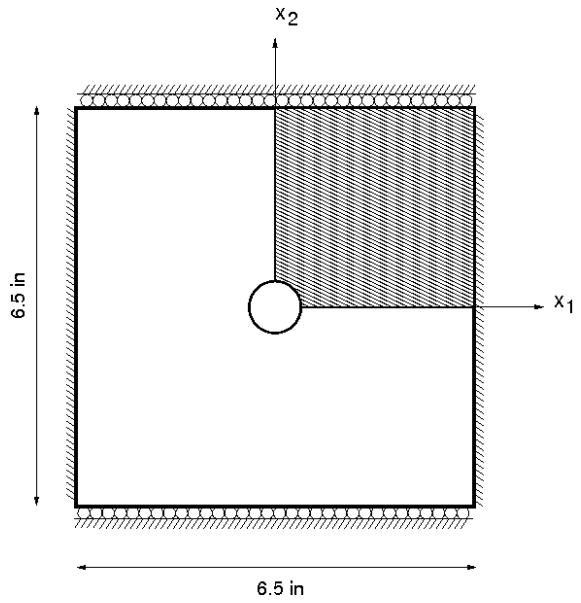

Figura 6.9: Experimento 4 - Descrição do problema

Este problema foi analisado por [28] com o objetivo de comparar diferentes formas da função energia de deformação W que define um material hiperelástico. Assim, neste experimento consideramos os materiais do tipo Neo-Hookeano e Mooney-Rivlin, sendo que para efeito de comparação foram utilizadas as seguintes constantes $c_1 = 27.02\ psi$ e $c_2 = 1.42\ psi$ para uma membrana de espessura $0.079\ in$.

O alongamento horizontal foi obtido aplicando-se uma força p através de incrementos de carga aos nós do contorno onde $x_1 = 3.25\ in$ e fixando-se os nós com $x_2 = 3.25\ in$, da mesma forma em [28]. É importante ressaltar que no estudo original aqui mencionado os deslocamentos de todos estes nós na direção x_1 foi imposto ser igual.

A malha utilizada neste problema é ilustrada na Figura 6.10, a qual possui 80 elementos quadrangulares lineares e mostra o nó A usado nas comparações feitas

para este problema.

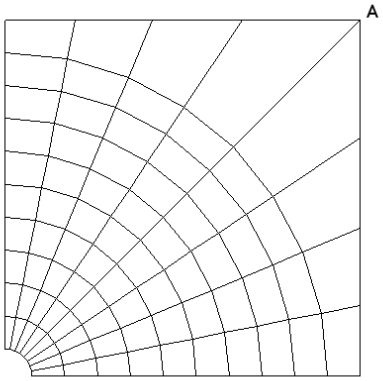

Figura 6.10: Experimento 4 - Malha utilizada

Na Figura 6.11 os resultados de uma análise incremental correspondente a uma força final total aplicada de $p = 64\ lb$ na direção x_1 são apresentados em um gráfico que mostra a variação de λ na direção x_1 com p (tomando-se como base o deslocamento do nó A), e confrontando com o resultado obtido por [28].

Em seguida analisou-se o comportamento quando a força aplicada é $p = 160\ lb$, capaz de produzir uma extensão de $2 < \lambda < 5.5$. Neste caso observou-se que tanto o material do tipo Neo-Hookeano quanto o de Mooney-Rivlin apresentaram um comportamento praticamente linear para o problema de alongamento uniaxial, assim como observado por [28]. Este resultado encontra-se na Figura 6.12.

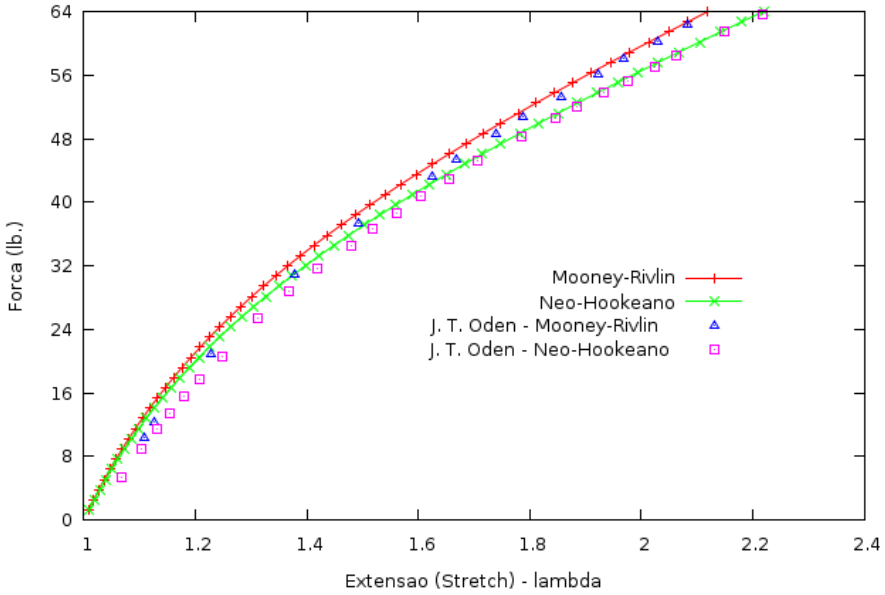

Figura 6.11: Experimento 4 - Gráfico força aplicada para p = 64 *lb*.

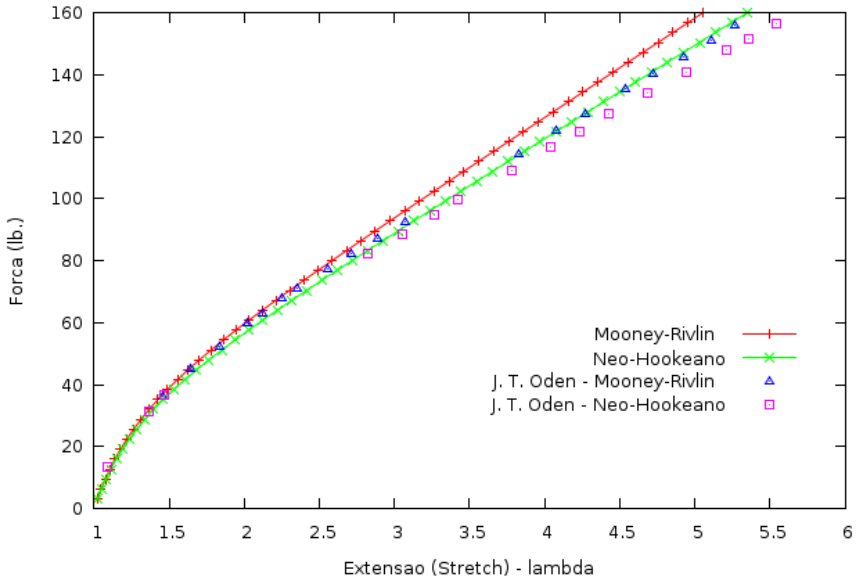

Figura 6.12: Experimento 4 - Gráfico força aplicada para p = 160 *lb*.

A forma deformada do furo central da membrana também foi analisada e comparada para $p = 64$ *lb* e $p = 160$ *lb* e os resultados são apresentados nas Figuras 6.13 e 6.14, respectivamente. Para $p = 64$ *lb*, a forma deformada do furo para os materiais Neo-Hookeano e Mooney-Rivlin são bem similares, enquanto que para cargas maiores como $p = 160$ *lb*, observou-se uma diferença significativa do deslocamento na

direção x_2. Nesta análise, observa-se que com o acréscimo da carga as diferenças das respostas se acentuam quando utilizamos diferentes formas para a função energia de deformação.

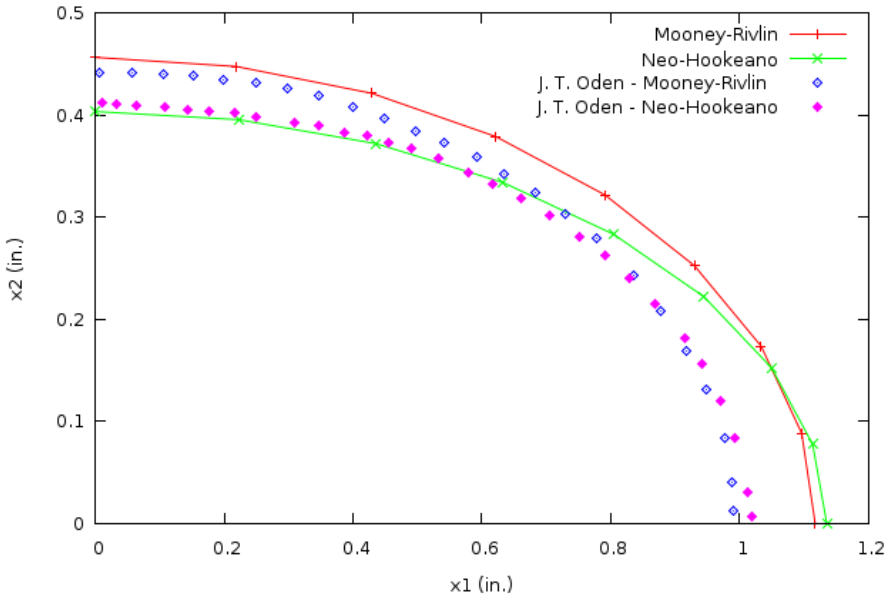

Figura 6.13: Experimento 4 - Configuração deformada do furo para p = 64 lb

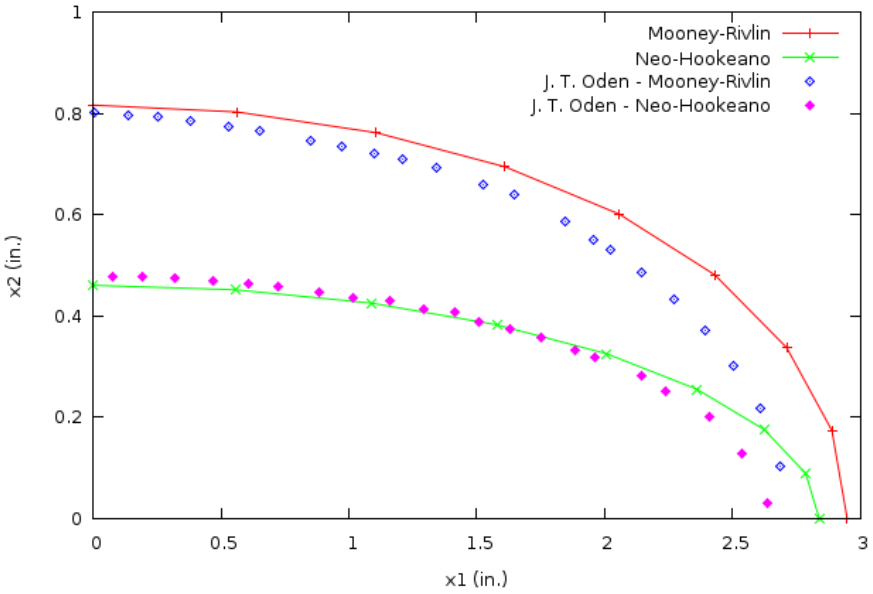

Figura 6.14: Experimento 4 - Configuração deformada do furo para p = 160 lb

6.4 Acoplamento Eletromecânico - Experimento 5

Neste experimento o modelo para o acoplamento eletromecânico do tecido cardíaco em duas dimensões é simulado e discutido. A simulação do modelo acoplado requer a solução do problema elétrico que foi obtida por um programa para simulações cardíacas implementado por [32].

Os parâmetros que descrevem o modelo acoplado tais como a malha utilizada para discretização do problema elétrico, do problema mecânico, as propriedades do material utilizado (Mooney-Rivlin), bem como os parâmetros do modelo elétrico são apresentados na Tabela 6.1. Estes parâmetros foram utilizados originalmente na referência [27], ressaltando-se que as malhas aqui utilizadas são diferentes daquelas utilizadas nesta referência.

Parâmetros de excitação	$a = 0.1$	$k = 8.0$	$C_m = 1$
	$\mu_1 = 0.12$	$\mu_2 = 0.3$	$\varepsilon = 0.01$
	$\epsilon_0 = 1$	$k_T = 47.9$	
Parâmetros do material	$c_1 = 2$	$c_2 = 6.0$	
Problema Elétrico - Malha	91×91	$\Delta t = 0.1$	$\Delta x = \Delta y = 0.1$
Problema Mecânico - Malha	15×15		

Tabela 6.1: Parâmetros para o modelo eletromecânico acoplado

Os pontos do contorno foram fixados, ou seja, um deslocamento prescrito zero foi aplicado, e a cada 5 passos da integração numérica no tempo do programa elétrico o programa mecânico é invocado utilizando como entrada a tensão ativa σ_a.

Estudou-se a atividade eletromecânica provocada por um estímulo elétrico pontual aplicado no ponto central da malha no instante de tempo $t = 0$ com duração de uma unidade de tempo (u.t). Neste caso, foram utilizados 2500 passos de tempo, resultando num tempo total de $t = 250$ u.t., considerando o valor utilizado para cada passo de tempo, conforme a Tabela 6.1.

Assim, observou-se que a onda que se propaga de forma radial, excitando a membrana, provocando deformações simétricas partindo do ponto central da malha. Na Figura 6.15 são apresentadas as diversas configurações deformadas, em diferentes

instantes de tempo, da malha de elementos finitos utilizada no problema mecânico bem como (em vermelho) o potencial transmembrânico (para $V_m > 0.6$) obtidos nos pontos da malha de diferenças finitas.

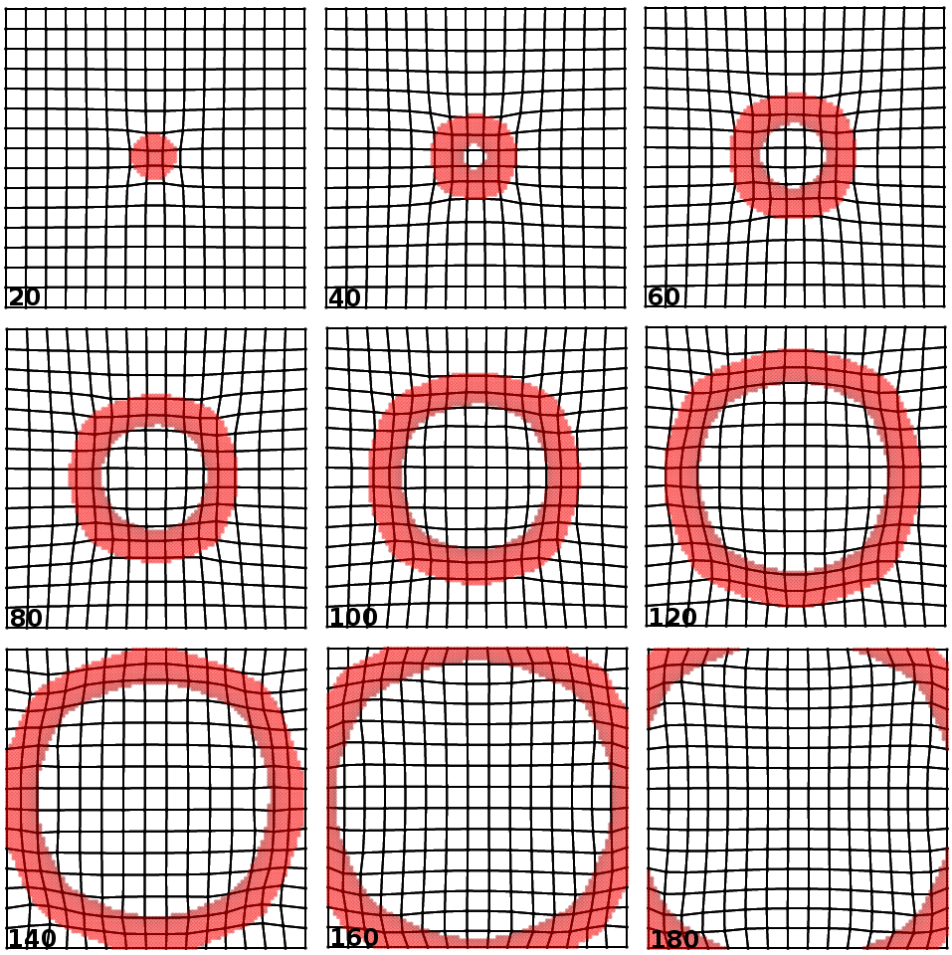

Figura 6.15: Experimento 5

A seguir comparamos o comportamento da propagação da onda elétrica na ausência de deformação (utilizando apenas o problema elétrico) e com a presença de deformação para o mesmo estímulo pontual descrito anteriormente. Observou-se que na presença da deformaçao a velocidade de propagação da onda é um pouco menor, como sugerem as Figuras 6.16 e 6.17. Nestas figuras o tempo t é definido como $n\Delta t$, onde n é o número de passos de tempo já calculados.

A primeira delas, mostra que no instante $t = 95$, na ausência de deformação, a onda já alcançou a borda da malha, enquanto na presença de deformação tal não ocorre. A outra figura mostra que na ausência de deformação, no tempo $t = 126$, a

onda já saiu do domínio de integração do problema, enquanto que na presença de deformação isto ainda não se deu de maneira completa.

Este mesmo comportamento é observado nos resultados apresentados em [24], que o justifica em função do alongamento na frente da onda, fazendo com que a velocidade de propagação seja menor, pois a distância efetiva percorrida pela onda é ligeiramente aumentada.

Nestas simulações os mesmos parâmetros da Tabela 6.1 foram utilizados, entretanto a malha de diferenças finitas possui 61×61 pontos e a malha de elementos finitos com 10×10 elementos.

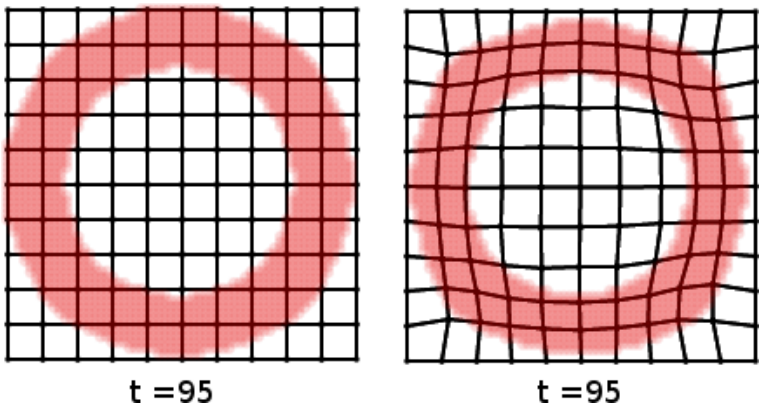

Figura 6.16: Exp. 5 - Ausência e presença da deformação no instante t = 95

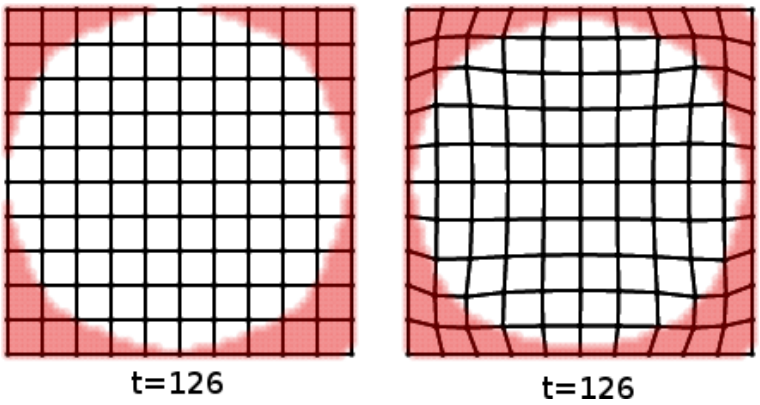

Figura 6.17: Exp. 5 - Ausência e presença da deformação no instante t = 126

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho foi realizado um estudo de um modelo para o acoplamento da atividade elétrica com a atividade mecânica no tecido cardíaco e nesse contexto algumas simulações computacionais foram realizadas. Inicialmente foram feitos alguns experimentos com o intuito de validar a implementação do material tipo Mooney-Rivlin em um programa de análise não-linear através do método dos elementos finitos para em seguida, resolvido os problemas de interface entre o código de análise mecânica e o código para resolução do problema de propagação do campo elétrico, proceder-se ao estudo do modelo eletromecânico acoplado.

Na fase de validação do programa utilizado, algumas comparações foram feitas com problemas clássicos e com resultados previamente obtidos na literatura que demonstram a corretude da implementação das equações para um material tipo Mooney-Rivlin no programa FLagSHyP. A simulação realizada para um problema acoplado mostrou estar qualitativamente em concordância com resultados obtidos em [27, 30, 24]. Entretanto, mais simulações e comparações são necessárias para validar a implementação desenvolvida já que diferenças de modelos entre os resultados conseguidos para comparação não permitiram que mais exemplos pudessem ser comparados.

Considerando as limitações do presente trabalho, discute-se a seguir algumas propostas para trabalhos futuros:

- A aproximação pelo modelo do monodomínio para a propagação de ondas

elétricas no tecido cardíaco foi utilizada neste trabalho. Tal modelo negligencia o potencial extracelular através de uma redução do modelo do bidomínio, o qual poderia ser utilizado para estas simulações.

- O material utilizado para descrever as propriedades mecânicas do tecido é isotrópico do tipo Mooney-Rivlin, entretanto, sabe-se que o tecido cardíaco possui um comportamento anisotrópico, o qual pode ser incorporado nos próximos estudos.

- A tensão ativa responsável por iniciar a contração foi obtida através de um modelo representado por uma EDO de natureza qualitativa que depende do potencial transmembrânico. Descrições mais detalhas de desenvolvimento de uma tensão ativa nas células em termos da concentração de cálcio e da mudança de comprimento da célula poderiam ser empregadas neste estudo.

- No presente trabalho o modelo celular utilizado não descreve fenômenos biofísicos dos canais iônicos, trata-se de um modelo qualitativo proposto por Aliev-Panfilov, portanto, para trabalhos futuros propõe-se o uso de modelos celulares iônicos, os quais são capazes de descrever tais processos nos canais iônicos. Um exemplo deste tipo de modelo é o modelo de ten-Tusscher [36] para células do ventrículo humano.

- O programa utilizado para resolução numérica das equações do problema de deformações finitas possui algumas restrições quanto aos tipos de elementos disponíveis para o caso de estado plano de tensão, sendo que apenas elementos triangulares lineares e quadráticos e elementos retangulares lineares estão disponíveis. Portanto, para simulações mais complexas modificações ou uma implementação mais robusta e flexível são necessárias.

- Um aspecto importante a ser considerado em estudos posteriores é a utilização de elementos 3-D conforme a modelagem proposta por [11, 12]. Nestas aplicações esses autores utilizam a técnica de multiplicadores de Lagrange para o tratamento da restrição de incompressibilidade gerando uma formulação mista com a inclusão da pressão como variável adicional do problema. Entretanto, é sabido que essas formulações e outras similares como método de penalizações, também aplicáveis a estes casos, apresentam problemas numéricos tais

como o trancamento da solução (*locking*). Uma possibilidade, neste caso, conforme sugerida por [8], seria a construção de um princípio variacional tipo Hu-Washizu, separando-se as parcelas das energias de deformação volumétrica e de distorção com o emprego de esquemas de integração reduzida na parte volumétrica.

Referências Bibliográficas

[1] A. J. M. Spencer. *Continuum Mechanics.* Dover Publications Inc., 1980.

[2] Rubin B. Aliev and Alexander V. Panfilov. A simple two-variable model of cardiac excitation. *Chaos, Solitons and Fractals*, 7:293–301, 1996.

[3] Yavuz Basar and Dieter Weichert. *Nonlinear Continuum Mechanics of Solids.* Springer, Verlag Berlin Heidelberg, 2000.

[4] K. J. Bathe. *Finite Element Procedures.* Prentice Hall, 1996.

[5] K. J. Bathe, E. Ramm, and E. L. Wilson. Finite element formulations for large deformation dynamic analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 9:353–386, 1975.

[6] E. B. Becker. *A Numerical Solution of a Class of Problems of Finite Elastic Deformation.* PhD thesis, University of California, Berkeley, 1966.

[7] T. Belytschko, W. K. Liu, and B. Moran. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures.* Wiley, 2000.

[8] J. Bonet and R. D. Wood. *Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis.* Cambridge University Press, 1997.

[9] J. Bonet and R. D. Wood. Flagshyp (Finite element large strain hyperelasticity program). http://www.flagshyp.com/, 2008.

[10] R. M. Brannon. *Curvilinear Analysis in Euclidean Space.* University of New Mexico, 2004.

[11] K. D. Costa, P. J. Hunter, J. M. Rogers, J. M. Guccione, L. K. Waldman, and A. D. McCulloch. A Three-Dimensional Finite Element Method for Large

Elastic Deformations of Ventricular Myocardium: I-Cylindrical and Spherical Polar Coordinates. *Transactions of the ASME*, 1996.

[12] K. D. Costa, P. J. Hunter, J. M. Rogers, J. M. Guccione, L. K. Waldman, and A. D. McCulloch. A Three-Dimensional Finite Element Method for Large Elastic Deformations of Ventricular Myocardium: II-Prolate Spheroidal Coordinates. *Transactions of the ASME*, 1996.

[13] M. A. Crisfield. *Non-linear Finite Element Analysis of Solids and Structures Volume 1.* John Wiley & Sons Ltd., 1991.

[14] E. N. Dvorkin and Marcela B. Goldschmit. *Nonlinear Continua.* Springer, 2006.

[15] N. F. F. Ebecken. Grandes deformações de membranas de materiais hiperelásticos incompressíveis. *Anais do IV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, 1977.

[16] Geoffrey M. Cooper. *The Cell: A Molecular Approach.* 2000.

[17] J. M. Guccione, K.D. Costa, and A. D. McCulloch. Finite element stress analysis of left ventricular mechanics in the beating dog heart. *J. Biomech*, 28:1167–1177, 1995.

[18] G. A. Holzapfel. *Nonlinear Solid Mechanics.* John Wiley & Sons Ltd., 2006.

[19] J. D. Humphrey. *Cardiovascular Solid Mechanics: Cells, Tissues and Organs.* Springer Verlag, 2002.

[20] Peter J. Hunter, Martyn P. Nash, and G. B. Sands. *Computational Biology of the Heart.* Wiley, 1997.

[21] Peter J. Hunter, Andrew J. Pullan, and Bruce H. Smaill. Modeling total heart function. *Annu. Rev. Biomed. Eng.*, 5:147–177, 2003.

[22] H. Iding, K. S. Pister, and R. L. Taylor. Identification of nonlinear elastic solids by a finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 4:121–142, 1974.

[23] James Keener and James Sneyd. *Mathematical Physiology.* Springer-Verlag New York Inc., 175 Fifth Avenue, New York, Ny 10010, USA, 1998.

[24] R. H. Keldermann, Martyn P. Nash, and Alexander V. Panfilov. Pacemakers in a reaction-diffusion mechanics system. *Journal of Statistical Physics*, 128:375–392, 2007.

[25] Martyn P. Nash. *Mechanics and Material Properties of the Heart using an Anatomically Accurate Mathematical Model.* PhD thesis, University of Auckland, 1998.

[26] Martyn P. Nash and Peter J. Hunter. Computational mechanics of the heart: from tissue structure to ventricular function. *J. Elasticity*, 61:113–141, 2000.

[27] Martyn P. Nash and Alexander V. Panfilov. Electromechanical model of excitable tissue to study reentrant cardiac arrhythmias. *Progress in Biophysics & Molecular Biology*, 85:501–522, 2004.

[28] J. T. Oden. *Finite Elements of Nonlinear Continua.* Dover Publications Inc., 1972.

[29] J. T. Oden and T. Sato. Finite strains and displacements of elastic membranes by the finite element method. *International Journal of Solids and Structures*, pages 471–488, 1967.

[30] Alexander V. Panfilov and Rikkert H. Keldermann. Self-organized pacemakers in a coupled reaction-diffusion-mechanics system. *Physical Review Letters*, 95:258104, 2005.

[31] F. B. Sachse. *Computational Cardiology - Modeling of Anatomy, Electrophysiology, and Mechanics.* Springer-Verlag Heidelberg New York, 2004.

[32] R. W. Santos. *Modelagem da Eletrofisiologia Cardíaca.* PhD thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2002.

[33] R. W. Santos, G. Plank, S. Bauer, and E. Vigmond. Preconditioning techniques for the bidomain equations. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 40:571–580, 2004.

[34] J. Sundnes and G. T. Lines. Numerical methods and software for modeling the electrical activity in the human heart. Technical report, Simula Research Laboratory, 2004.

[35] J. Sundnes, G. T. Lines, X. Cai, B. F. Nielsen, Kent-Andre Mardal, and Aslak Tveito. *Computing the Electrical Activity in the Heart.* Springer-Verlag Heidelberg New York, 2006.

[36] K. H. W. J. ten Tusscher, D. Noble, P. J. Noble, and A. V. Panfilov. A model for human ventricular tissue. *Am J Physiol Heart Circ Physiol.*, pages H1573–H1589, 2004.

[37] E. M. Toledo. Modelos mistos de elementos finitos para analise de grandes deformacoes. Tese M.Sc. COPPE/UFRJ, 1980.

[38] L. Tung. *A Bi-domain model for describing ischemic myocardial D-C potentials.* PhD thesis, MIT, Cambridge, MA, 1978.

[39] F. J. Vetter and A. D. McCulloch. Mechanoelectric feedback in a model of the passively inflated left ventricle. *Ann. Biomed. Eng.*, 29:414–426, 2001.

[40] E. J. Vigmond, R. W. Santos, A. J. Prassl, M. Deo, and G. Plank. Solvers for the cardiac bidomain equations. *Progress in Biophysics and Molecular Biology*, 96:3–18, 2007.

[41] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The finite element method, Volume 1 and 2.* McGraw-Hill, 1994.