MARCOS ANDRÉ MARGALHO DE BARROS

Modelagem do processo de fissuração em osso cortical
através da técnica de fragmentação de malha de elementos
finitos

São Paulo
2021

MARCOS ANDRÉ MARGALHO DE BARROS

Modelagem do processo de fissuração em osso cortical
através da técnica de fragmentação de malha de elementos
finitos

Dissertação apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo como parte
dos requisitos para obtenção do título de
Mestre em Ciências.

São Paulo
2021

MARCOS ANDRÉ MARGALHO DE BARROS

Modelagem do processo de fissuração em osso cortical
através da técnica de fragmentação de malha de elementos
finitos

VERSÃO CORRIGIDA

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo como parte dos requisitos
para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Engenharia de Estruturas

Orientador: Prof. Dr. Luís Antônio Guimarães
Bitencourt Júnior

São Paulo
2021

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 21 de Junho de 2021

Assinatura do autor: Marcos André Margalho de Barros

Assinatura do orientador: Roberto Piteucourt Jr.

Catálogo-na-publicação

Barros, Marcos André Margalho de
Modelagem do processo de fissuração em osso cortical através da
técnica de fragmentação de malha de elementos finitos / M. A. M. Barros --
versão corr. -- São Paulo, 2021.
139 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São
Paulo. Departamento de Engenharia de Estruturas e Geotécnica.

1.Osso cortical 2.mecânica do dano 3.método dos elementos finitos
4.microestrutura 5.técnica de fragmentação de malha I.Universidade de São
Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Estruturas e
Geotécnica II.t.

Aos meus queridos pais.

Agradecimentos

Esta dissertação não seria possível sem o auxílio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) que me concedeu bolsa de estudo durante o período da pós-graduação. Gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo (USP) por fornecer todas as condições necessárias ao desenvolvimento científico, gostaria de agradecer aos professores, as secretárias dos departamentos e aos funcionários responsáveis por manter o ambiente de trabalho sempre limpo.

Agradeço ao Professor Luís Bitencourt Jr. pela excelente orientação durante todo o período do mestrado. Aos professores Leila Meneghetti e Ruy Pauletti que tive oportunidade de trabalhar como monitor. E gostaria de agradecer aos mestres André Tayer, Paulo Calmon e Yasmin Trindade que me ajudaram a compreender como ciência é feita e aos meus amigos que conviveram diariamente comigo André Peres, Felipe Barbosa, Fernanda Ramos, Guilherme Gianotti, Gustavo Boriolo, Livia Borges, Ludmily Pereira, Maria Luísa Ribeiro e Tiago Marum. Não poderia esquecer de agradecer o Osmar Manzoli por constantemente se preocupar com o bem do laboratório.

Agradeço aos meus sogros, Adriana e Armin Mathis, por todas conversas e orientações sobre a vida de um pesquisador.

Agradeço à minha querida prima Gleicy Margalho Lobato, que tive a oportunidade de morar na mesma casa depois de muito tempo, por tudo que ela fez por mim. Minha gratidão é imensurável.

Agradeço ao meu querido irmão e melhor amigo Bruno Barros por todas as visitas e conversas que sempre foram animadoras e tornaram a vida no mestrado muito alegre e menos cansativa.

Agradeço aos meus pais, Rui e Socorro Barros, por terem sido incríveis em toda minha jornada até aqui. Sempre que puderam, estiveram ao meu lado e forneceram

o maior suporte que um filho poderia ter.

Agradeço a minha companheira, melhor amiga e noiva, Mariza Mathis, por entender e me ajudar a superar todas as situações difíceis deste período em São Paulo. Esse trabalho possui muita influência de nossas conversas e é fruto de nossos sonhos.

Resumo

Neste trabalho, o processo de iniciação e propagação de fissuras na microestrutura do osso cortical é simulado usando o método dos elementos finitos aliado com a técnica de fragmentação de malhas. Desta forma, pares de elementos finitos triangulares com alta razão de aspecto (elementos cuja altura é muito menor que o comprimento da base) são inseridos para preencher os vazios deixados após o processo de separação dos elementos finitos triangulares convencionais e caracterizar as possíveis trajetórias de propagação de fissuras. A microestrutura do osso cortical é modelada como um material compósito de 4 fases: matriz intersticial, linha de cimento, ósteons e canal de Havers. A não linearidade material é representada pelo comportamento dos elementos com alta razão de aspecto através de um modelo constitutivo de dano conjugado, com propriedades mecânicas adequadas para representação de cada fase do compósito. A metodologia é empregada na análise numérica de 6 modelos com representações conceituais da microarquitetura do osso cortical e 1 modelo com microestrutura definida a partir de uma imagem fotográfica. Comportamento à tração e flexão são avaliados considerando a presença de um e múltiplos ósteons. Os resultados obtidos demonstraram que a técnica de fragmentação de malha é adequada para representar o processo de fissuração do osso cortical, com resultados compatíveis com os descritos na literatura, incluindo a influência das propriedades mecânicas da linha de cimento no processo de fissuração.

Palavras-chave: Osso cortical; mecânica do dano; método dos elementos finitos; microestrutura; técnica de fragmentação de malha.

Abstract

In this work, the crack initiation and propagation process in the microstructure of the cortical bone is simulated using the finite element method combined with a mesh fragmentation technique. Thus, triangular finite elements with high aspect ratio (elements with the base much greater than the height) are inserted in pairs between the interfaces of regular triangular elements, after the fragmentation process to describe the possible crack path trajectories. The microstructure of the cortical bone is modeled as a 4-phased composite material: interstitial matrix, cement line, osteon and Haversian canal. The material non-linearity is represented by the behavior of the high aspect ratio elements via a combined damage model with adequate mechanical properties assigned to each phase of the material. The methodology is employed in the numerical simulations of 6 conceptual representations of the microarchitecture of the cortical bone and 1 model based on the geometry extracted from a digital picture. The mechanical behavior is assessed in tension and bending tests while considering geometries with one or multiple osteons. The results demonstrated that the proposed technique based on the mesh fragmentation process is suitable to represent the crack initiation and propagation process in the cortical bone, with results in good agreement with those available in the literature, including the mechanical influence of the cement line in the cracking process.

Keywords: cortical bone; damage mechanics; finite element method; microstructure; mesh fragmentation technique.

Lista de Figuras

1.1.	Detalhe de um osso seco ilustrando o osso cortical (compacto) e o trabecular (esponjoso). O osso cortical é o que envolve a estrutura e se destaca pelo branco mais intenso e sem vazios. O trabecular possui vazios e é constituído principalmente por trabéculas ósseas (imagem retirada de Junqueira e Carneiro, 2013).	24
1.2.	Imagem da microestrutura do osso cortical usando um microscópio óptico (adaptada de Budyn e Hoc, 2007). Matriz óssea em azul, ósteon em verde e linha de cimento em amarelo.	29
1.3.	Geometria tridimensional das estruturas ósseas de um quadril humano extraída a partir de uma tomografia computadorizada. A renderização da tomografia computadorizada foi realizada no software <i>open-source</i> InVesalius [®] desenvolvido pelo Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer (Amorim et al., 2015).	30
2.1.	Etapas da metodologia proposta para análise bidimensional da microestrutura do osso cortical: (a) fêmur humano; (b) representação conceitual da diáfise do fêmur; (c) plano transversal; (d) plano longitudinal; (e) fragmentação da malha de elementos finitos.	35
2.2.	Par de elementos finitos com alta razão de aspecto para ser inserido entre dois elementos triangulares de deformação constante que foram separados durante o processo de fragmentação da malha.	36
2.3.	Esquema para a análise numérica via MEF da microestrutura do osso cortical. O processo é dividido em três etapas: pré-processamento, análise numérica e pós-processamento.	38
2.4.	Componentes geométricas do elemento finito com alta razão de aspecto.	39
2.5.	Algoritmo do esquema de integração Impl-Ex.	50
2.6.	Geometria e configuração do modelo C1F proposto por Marco et al. (2018).	55

2.7. Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1F com tamanho dos elementos finitos de $10\mu\text{m}$	55
2.8. Geometria e configuração do modelo C2F proposto por Marco et al. (2018).	56
2.9. Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C2F com tamanho dos elementos finitos de $10\mu\text{m}$	56
2.10. Geometria e condições de contorno do modelo C1T1 idealizado por Gustafsson et al. (2019).	57
2.11. Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1T1 com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$	58
2.12. Geometria e condições de contorno do modelo C1T2 idealizado por Gustafsson et al. (2019).	59
2.13. Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1T2 com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$	59
2.14. Geometria e condições de contorno do modelo C1T3 idealizado por Gustafsson et al. (2019).	60
2.15. Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1T3 com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$	60
2.16. Geometria e condições de contorno do modelo CMT realizado por Abdel-Wahab et al. (2012).	61
2.17. Malha de elementos finitos para o exemplo numérico CMT com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$	62
2.18. Extração das geometrias a partir da imagem da viga w06003. (a) Estrutura de osso cortical original; (b) sobreposição das imagens do modelo numérico e experimental; e (c) geometria do modelo numérico. As imagens da microestrutura do osso cortical foram retiradas de Budyn e Hoc (2010).	63
2.19. Geometria e condições de contorno do modelo EMF reproduzido a partir do trabalho experimental e numérico realizado por Budyn e Hoc (2010).	63
2.20. Malha de elementos finitos para o exemplo numérico EMF adotando-se malha grosseira (a) (tamanho de elementos finitos de $200\mu\text{m}$ em cinza) e uma malha refinada (b) (tamanho de elementos finitos de $5\mu\text{m}$).	64
2.21. Malha de elemento finitos do modelo EMF (a). Mesma malha, ocultando o <i>layer</i> dos elementos CST (b).	65

3.1.	Visualização das configurações deformadas dos ensaios numéricos com o <i>layer</i> dos elementos finitos de interface ligado (a) e desligado (b).	66
3.2.	Diferentes refinamentos de malha para o modelo C1F. O refinamento da malha é descrito em função do tamanho do elemento 5, 10 e 20 μ m.	68
3.3.	Número de graus de liberdade e elementos finitos CST e de interface (HAR) do ensaio C1F para cada discretização de malha (tamanho do elemento finito definido no GiD: 5, 10 e 20 μ m). O número de graus de liberdade é calculado multiplicando o número de nós por 2.	68
3.4.	Gráfico força-deslocamento onde se compara os resultados de refinamento de malha com o deslocamento prescrito aplicado em 5000 passos.	69
3.5.	Distribuição de fissuras final do ensaio numérico da viga C1F para diferentes refinamentos de malha com deslocamentos aplicados em 5000 passos. A magnitude dos deslocamentos é aumentada em 10 vezes.	70
3.6.	Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de 5 μ m para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes.	70
3.7.	Gráfico força-deslocamento para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de 5 μ m.	71
3.8.	Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de 5 μ m para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos. Deslocamentos aumentados em 20 vezes em (a) e (b) e 10 vezes em (c).	72
3.9.	Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de 10 μ m para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes.	73
3.10.	Gráfico força-deslocamento para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de 10 μ m.	73
3.11.	Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de 20 μ m para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 2000 e 5000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes.	74
3.12.	Gráfico força-deslocamento para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de 20 μ m.	74
3.13.	Gráfico força-deslocamento do modelo C1F alterando o modelo de dano associado à linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.	75

3.14. Padrão de fissuração do modelo C1F com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.	76
3.15. Vista aproximada do padrão de fissuração do modelo DT no final da análise. Nota-se que há propagação de fissura dentro do ósteon. . . .	77
3.16. Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original, o vermelho representa a fissura. Os modelos numéricos estão com os deslocamentos aumentados em 10 vezes. (Imagem retirada de Marco et al., 2018).	78
3.17. Gráfico força-deslocamento do modelo C1F alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.	78
3.18. Padrão de fissuração do modelo C1F com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.	79
3.19. Diferentes refinamentos de malha para o modelo C2F. O refinamento da malha é descrito em função do tamanho do elemento 5, 10 e $20\mu\text{m}$	80
3.20. Número de graus de liberdade e elementos finitos CST e elementos de interface (HAR) do ensaio C2F para cada discretização de malha (tamanho do elemento finito definido no GiD: 5, 10 e $20\mu\text{m}$). O número de graus de liberdade é calculado multiplicando o número de nós por 2.	81
3.21. Gráfico força-deslocamento onde se compara os resultados de refinamento de malha com o deslocamento prescrito aplicado em 5000 passos.	82
3.22. Distribuição de fissuras final do ensaio numérico da viga C2F para diferentes refinamentos de malha com deslocamentos aplicados em 5000 passos.	83
3.23. Gráfico força-deslocamento para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $5\mu\text{m}$	84
3.24. Padrão de fissuração para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $5\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos.	85
3.25. Padrão de fissuração para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $10\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 2000 e 5000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes. . .	86

3.26. Gráfico força-deslocamento para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $10\mu\text{m}$	86
3.27. Gráfico força-deslocamento para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $20\mu\text{m}$	87
3.28. Padrão de fissuração para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $20\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos.	88
3.29. Gráfico força-deslocamento do modelo C2F alterando o modelo de dano associado à linha de cimento: dano à tração e dano conjugado. .	89
3.30. Padrão de fissuração do modelo C2F com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para o deslocamento prescrito de $2\mu\text{m}$ e em 5 vezes para o de $5\mu\text{m}$	90
3.31. Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original, o vermelho representa a fissura (Imagem retirada de Marco et al., 2018).	91
3.32. Gráfico força-deslocamento do modelo C2F alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.	91
3.33. Padrão de fissuração do modelo C2F com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para o deslocamento prescrito de $2\mu\text{m}$ e em 5 vezes para o de $5\mu\text{m}$	92
3.34. Gráfico força-deslocamento do modelo C1T1 alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado. .	93
3.35. Padrão de fissuração do modelo C1T1 com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para os deslocamentos prescritos de $2,56\mu\text{m}$ e $3,65\mu\text{m}$ e 3 vezes para o deslocamento prescrito de $7,3\mu\text{m}$	94
3.36. Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. Os modelos estão coloridos de acordo com a magnitude dos deslocamentos verticais que se estende de 0 (azul) até $7,3\mu\text{m}$ (vermelho). O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem retirada de Gustafsson et al., 2019). . .	95
3.37. Gráfico força-deslocamento do modelo C1T1 alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.	96

3.38. Padrão de fissuração do modelo C1T1 com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para o deslocamento prescrito de $2,56\mu m$ e $3,65\mu m$. . .	97
3.39. Gráfico força-deslocamento do modelo C1T2 alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado. .	98
3.40. Padrão de fissuração do modelo C1T2 com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes. . .	99
3.41. Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. Os modelos estão coloridos de acordo com a magnitude dos deslocamentos verticais que se estende de 0 (azul) até $5\mu m$ (vermelho). O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem adaptada de Gustafsson et al., 2019). .	100
3.42. Gráfico força-deslocamento do modelo C1T2 alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.	101
3.43. Padrão de fissuração do modelo C1T2 com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.	102
3.44. Gráfico força-deslocamento do modelo C1T3 alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado. .	103
3.45. Padrão de fissuração do modelo C1T3 com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes. .	104
3.46. Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. Os modelos estão coloridos de acordo com a magnitude dos deslocamentos verticais que se estende de 0 (azul) até $3,5\mu m$ (vermelho). O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem retirada de Gustafsson et al., 2019). . .	105
3.47. Gráfico força-deslocamento do modelo C1T3 alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.	106
3.48. Padrão de fissuração do modelo C1T3 com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (C LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.	107
3.49. Gráfico força-deslocamento do modelo CMT alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano à tração e cisalhamento.	108

3.50. Padrão de fissuração do modelo CMT com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 2 e $3\mu\text{m}$	110
3.51. Visualização do campo de deslocamentos horizontais no final da análise do modelo numérico CMT com dano à tração.	111
3.52. Visualização do campo de deslocamentos horizontais no final da análise do modelo numérico CMT com dano conjugado.	111
3.53. Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original (imagem retirada de Abdel-Wahab et al., 2012).	112
3.54. Gráfico força-deslocamento do modelo CMT alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.	113
3.55. Padrão de fissuração do modelo CMT com a linha de cimento associada (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 2 e $3\mu\text{m}$	114
3.56. Gráfico força-deslocamento do modelo EMF alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.	115
3.57. Padrão de fissuração do modelo EMF com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 14,95 e 20,15 μm	116
3.58. Comparação dos campos de deslocamento das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. A coloração nas geometrias detalha o deslocamento horizontal. O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem adaptada de Budyn e Hoc, 2010).	117
3.59. Gráfico força-deslocamento do modelo EMF alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.	118
3.60. Padrão de fissuração do modelo EMF com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 14,95 e 20,15 μm	119
4.1. Tamanho dos arquivos de saída gerados pelo solver de elementos finitos nas análises de cada modelo.	122
A.1. Programa MeFS, aba que detalha as informações da malha de elementos finitos antes e depois de carregar o arquivo.	134

A.2. Programa MeFS, aba em que o usuário define os materiais a serem fragmentados, altura do elemento finito com alta razão de aspecto.	135
A.3. Separação dos elementos finitos CST e criação de novos nós. Neste exemplo, somente os elementos em azul passam pelo processo de fragmentação. (A) Malha de elementos finitos CST. (B) Criação de novos nós e separação dos elementos finitos CST. A variável h é a altura do elemento finito de interface definida pelo usuário.	138
A.4. Inserção dos elementos finitos com alta razão de aspecto. Cada cor representa um material, o amarelo é o material associado ao elemento de interface que conecta dois materiais azuis e o vermelho conecta o azul e o verde.	138

Lista de Tabelas

2.1. Equações do modelo de dano.	48
2.2. Propriedades mecânicas dos constituintes do osso cortical. Módulo de Young E ; tensão crítica de tração f^t ; tensão crítica de cisalhamento f^τ ; energia de deformação em modo I G_f^I ; energia de deformação em modo II G_f^{II}	52
2.3. Propriedades mecânicas dos constituintes do osso cortical. Módulo de Young E ; tensão crítica de tração f^t ; tensão crítica de cisalhamento f^τ ; energia de fratura em modo I G_f^I ; energia de fratura em modo II G_f^{II}	52
2.4. Resumo das informações sobre os modelos numéricos.	53

Notação

Símbolos

Letras gregas

σ	Campo de tensões nominais.
$\bar{\sigma}$	Campo de tensões efetivas (tensor das tensões de Cauchy).
$\bar{\sigma}^t$	Campo de tensões efetivas (após a aplicação do dano ao cisalhamento).
$\bar{\sigma}^\tau$	Matriz que comporta os valores de tensões cisalhantes efetivas locais.
σ_{nn}^t	Tensão de tração normal à base do elemento finito de interface.
ε	Campo de deformações nominais.
$\bar{\varepsilon}$	Campo de deformações equivalente.
$\hat{\varepsilon}$	Parcela do campo de deformações em função da altura do elemento finito de interface.
$\tilde{\varepsilon}$	Parcela do campo de deformações em função da base do elemento finito de interface.
ν	Coefficiente de Poisson.
σ	Tensão normal.
τ	Tensão de cisalhamento.
γ	Distorção angular.
$\bar{\tau}$	Vetor tensão efetiva de cisalhamento.
θ	Ângulo de rotação.
Φ^t	Critério de falha em modo I.
Φ^τ	Critério de falha em modo II.

Letras romanas minúsculas

b	Comprimento da base do elemento finito de interface.
d^t	Dano calculado devido à tração no elemento de interface.
d^τ	Dano calculado devido o cisalhamento no elemento de interface.
dx, dy	Componentes horizontal e vertical do versor normal à base do elemento finito de interface
$\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$	Versores ortonormais do sistema cartesiano de coordenadas.
f^t	Tensão crítica de tração.
f^τ	Tensão crítica de cisalhamento.
h	Comprimento da altura do elemento finito de interface.
i	Número de identificação local do nó do elemento finito triangular.
$\mathbf{n}$	Versor normal à base do elemento finito de interface.
n^i	Coordenada vertical do nó i .
q^t	Variável interna de tensão normal.
q^τ	Variável interna de tensão de cisalhamento.
r^t	Variável interna de deformação normal.
r^τ	Variável interna de deformação de cisalhamento.
s^i	Coordenada horizontal do nó i .
$\mathbf{u}$	Vetor de deslocamentos nodais.
$\hat{\mathbf{u}}$	Vetor de deslocamentos nodais relativos entre o nó afastado da base e sua projeção na base do elemento finito de interface.

Letras romanas maiúsculas

A	Fator de amolecimento à tração.
B	Fator de amolecimento ao cisalhamento
$\mathbf{B}$	Matriz de compatibilidade cinemática.
$\mathbf{C}$	Matriz das constantes elásticas.
$\mathbf{C}_{local}$	Matriz das constantes elásticas local.
$\mathbf{C}^{tan}$	Matriz das constantes elásticas tangente.
E	Módulo de elasticidade (módulo de Young).
G	Módulo de elasticidade transversal.
G_f^I	Energia de fratura em modo I de falha.
G_f^{II}	Energia de fratura em modo II de falha.
$\mathbf{R}$	Matriz de rotação.

Abreviações

DIC	<i>Digital Image Correlation.</i>
CDMT	<i>Continuum Damage Mechanics Theory</i> (teoria da mecânica do dano contínuo).
ACDF	<i>Continuum Strong Discontinuity Approach</i> (aproximação contínua de descontinuidades fortes).
CST	<i>Constant Strain Triangle</i> (elemento finito triangular de deformação constante).
EPD	Estado plano de deformação
EPT	Estado plano de tensão.
HAR	<i>High Aspect Ratio Finite Element</i> (elemento finito com alta razão de aspecto).
MAXPE	<i>Maximum principal strain criterion</i> (critério da máxima tensão principal).
MEF	Método dos elementos finitos.
MeFS	<i>Mesh Fragmentation Software.</i>
PNM	<i>Phantom-Node Method.</i>
QUADE	<i>Quadratic nominal strain criterion</i> (critério da deformação nominal quadrática).
TFM	<i>Mesh Fragmentation Technique</i> (técnica de fragmentação de malha)
X-FEM	<i>Extended Finite Element Method</i> (método dos elementos finitos estendidos).

Sumário

1. Introdução	23
1.1. Motivação e Justificativa	26
1.2. Tecidos ósseos	27
1.2.1. Osso cortical	28
1.2.2. Modelagem computacional de estruturas ósseas	29
1.2.2.1. Modelagem computacional da microestrutura de osso cortical	31
1.3. Objetivos	33
1.4. Estrutura da dissertação	34
2. Metodologia	35
2.1. Técnica de fragmentação de malha de elementos finitos	35
2.1.1. Elementos finitos com alta razão de aspecto	38
2.1.2. Modelo de dano contínuo	42
2.1.2.1. Dano ao cisalhamento	42
2.1.2.2. Dano à tração	45
2.1.2.3. Esquema de integração implícito-explícito (Impl-Ex)	47
2.2. Propriedades mecânicas	51
2.3. Descrição dos modelos numéricos	52
2.3.1. Modelos conceituais	54
2.3.1.1. C1F: Ensaio de flexão em 3 pontos com 1 ósteon	54
2.3.1.2. C2F: Ensaio de flexão em 3 pontos com 2 ósteons	55
2.3.1.3. C1T1: Ensaio de tração uniaxial com 1 ósteon	57
2.3.1.4. C1T2: Ensaio de tração uniaxial com 1 ósteon	58
2.3.1.5. C1T3: Ensaio de tração uniaxial com 1 ósteon	59
2.3.1.6. CMT: Ensaio de tração uniaxial com múltiplos ósteons	61
2.3.2. Modelo baseado em imagem	62
2.3.2.1. EMF: Ensaio de flexão em três pontos com múltiplos ósteons	62

3. Resultados	66
3.1. C1F	67
3.1.1. Estudo de convergência	67
3.1.2. Influência do modelo de dano	74
3.1.3. Influência da linha de cimento	78
3.2. C2F	79
3.2.1. Estudo de convergência	80
3.2.2. Influência do modelo de dano	88
3.2.3. Influência da linha de cimento	91
3.3. C1T1	92
3.3.1. Influência do modelo de dano	92
3.3.2. Influência da linha de cimento	95
3.4. C1T2	97
3.4.1. Influência do modelo de dano	97
3.4.2. Influência da linha de cimento	100
3.5. C1T3	102
3.5.1. Influência do modelo de dano	102
3.5.2. Influência da linha de cimento	105
3.6. CMT	108
3.6.1. Influência do modelo de dano	108
3.6.2. Influência da linha de cimento	112
3.7. EMF	114
3.7.1. Influência do modelo de dano	115
3.7.2. Influência da linha de cimento	117
4. Conclusão	120
4.1. Recomendações para pesquisas futuras	121
Referências Bibliográficas	124
A. Mesh Fragmentation Software (MeFS)	134
A.1. Fragmentação de malha	135
A.1.1. Algoritmo da função de fragmentação	137

1. Introdução

Desde a metade do século XX, as sociedades ocidentais estão passando por um processo de envelhecimento populacional. O Brasil se encontra neste processo desde a década de 70, quando houve um decréscimo de 30% nas taxas de fertilidade (Kalache, 1987). Neste período, também foi observado um acréscimo no número de ocorrências de patologias que estão relacionadas às faixas etárias mais avançadas, como por exemplo a osteoporose, que é caracterizada pela perda de massa e deterioração da microarquitetura do tecido ósseo, impactando negativamente na qualidade de vida de indivíduos (Loures et al., 2017). Consequentemente, estudos voltados a novas metodologias que proporcionem subsídios para a prevenção, recuperação, reabilitação e até a cura desta patologia vêm sendo desenvolvidos.

As estruturas ósseas são caracterizadas por suas complexas geometrias, comportamento frágil e sua capacidade de cura (Cowin, 2001). Segundo Koch (1917), a dificuldade em reproduzir seu comportamento através de modelos analíticos é devido aos seguintes fatores:

- geometria: os tecidos ósseos apresentam formas irregulares e únicas;
- condições de contorno: os ossos estão conectados ao corpo através de tendões, músculos e cartilagens. Cada movimento ou mesmo o equilíbrio estático é resultado do esforço de diversas estruturas que exercem ou atenuam forças em determinados pontos e superfícies, por isso, reproduzir essas condições com precisão é uma tarefa árdua;
- propriedades mecânicas: tecido ósseo é um material heterogêneo, apresentando variações abruptas de suas propriedades mecânicas mesmo em porções vizinhas de tecido.

Na macroescala, as estruturas ósseas podem ser divididas em três tipos: longo (fêmur), curto (vértebras) e chato (crânio). Nessas geometrias, é possível identificar (sem auxílio de aparelhos microscópicos) dois tipos de tecidos: osso cortical e osso trabecular (Figura 1.1). O primeiro, também chamado de osso compacto devido sua

densidade e organização, envolve as estruturas ósseas, possui uma rigidez elevada e caráter anisótropo (comumente é modelado como transversalmente isótropo) devido à presença de ósteons que atuam como fibras de alta rigidez embebidas na matriz óssea. A direção dos ósteons é uma consequência do histórico de carregamento que a estrutura foi submetida, visto que estes se alinham com os valores de máxima tensão principal (Heřt et al., 1994). O osso trabecular, também chamado de esponjoso, localizado nas epífises (extremidades) de ossos longos e no interior de ossos curtos e chatos, é principalmente formado por trabéculas (pequenas estruturas com comportamento estrutural similar ao de elementos de treliça) que se arranjam "aleatoriamente" ao ponto de possuírem um comportamento isótropo (em macroescala). A rigidez do material é inferior se comparada ao do osso cortical.

Figura 1.1.: Detalhe de um osso seco ilustrando o osso cortical (compacto) e o trabecular (esponjoso). O osso cortical é o que envolve a estrutura e se destaca pelo branco mais intenso e sem vazios. O trabecular possui vazios e é constituído principalmente por trabéculas ósseas (imagem retirada de Junqueira e Carneiro, 2013).

A fissuração em estruturas ósseas é um processo que depende da organização dos constituintes em escalas menores (O'Brien et al., 2005; Nalla et al., 2006). Dessa forma, é essencial estudar o comportamento do processo de fissuração de estruturas ósseas levando em consideração os constituintes nessa escala. Neste sentido, dada a complexidade do problema, modelos computacionais têm sido amplamente utilizados e têm se mostrado como grandes aliados para um melhor entendimento dos fatores que influenciam o complexo comportamento deste material heterogêneo.

Os modelos numéricos são ferramentas pelas quais os problemas matemáticos são

formulados de modo que possam ser resolvidos com operações lógicas e aritméticas (Chapra, 2013). Na engenharia de estruturas, o método dos elementos finitos (MEF) se destaca como uma ferramenta numérica capaz de considerar geometrias complexas, heterogeneidades dos materiais e reproduzir falhas estruturais (Fish e Belytschko, 2007). Recentemente, modelos numéricos baseados no MEF foram utilizados para representar a fissuração na microestrutura do osso cortical. As 3 principais técnicas que se destacam segundo Gustafsson et al. (2019), são:

- redução da rigidez da estrutura através da exclusão de elementos (em inglês, *element deletion*), visando reproduzir a propagação de fissuras (Donaldson et al., 2014; Giner et al., 2017);
- elementos coesivos, inseridos nas arestas de elementos adjacentes, as quais definem os possíveis caminhos de propagação de fissuras (Hamed e Jasiuk, 2013);
- X-FEM, através do qual são empregados elementos especiais com enriquecimento dos seus nós, que permitem a propagação de fissuras pelo interior dos elementos (Budyn e Hoc, 2007).

Baseado nos resultados promissores oriundos do emprego das diferentes técnicas listadas acima, as quais vêm sendo essenciais para um melhor entendimento do processo de fissuração de estruturas ósseas, este trabalho visa contribuir nessa linha de pesquisa, a fim de solucionar algumas lacunas deixadas pelas abordagens numéricas que vêm sendo utilizadas, através do emprego de uma técnica de fragmentação de malha de elementos finitos proposta por Manzoli et al. (2016) e Sánchez et al. (2014). Esta técnica vem se destacando com resultados promissores na simulação da iniciação e propagação de fissuras em materiais quase frágeis (Manzoli et al., 2016; Rodrigues et al., 2016, 2017; Sánchez et al., 2014), e consiste na inserção de pares de elementos finitos com alta razão de aspecto (Manzoli et al., 2012) para preencher os vazios deixados entre os elementos finitos, após o processo de fragmentação de malhas. Uma das principais vantagens desta técnica é o emprego de modelos constitutivos contínuos para descrever o comportamento dos elementos de interface, e consequentemente, o processo de iniciação e propagação de fissuras. Modelos constitutivos baseados na mecânica do dano serão empregados neste trabalho, os quais serão integrados utilizando um método de integração implícito-explícito (Impl-Ex), visando evitar problemas de convergência numérica usualmente encontrados na simulação computacional do processo de propagação de fissuras.

1.1. Motivação e Justificativa

O fraturamento de estruturas ósseas é um problema de saúde pública com uma grande importância social, principalmente com o crescente envelhecimento da população, ocasionando um aumento dos custos envolvidos, incluindo os gastos públicos (Gold, 2001; Kanis e Johnell, 2005; Aziziyeh et al., 2019). Este tema faz parte da área de biomecânica, que envolve o estudo do comportamento estrutural de sistemas biológicos. Segundo Marco et al. (2018), o entendimento do processo de fissuração de estruturas ósseas em diferentes escalas ainda é um desafio e sua modelagem computacional pode fornecer resultados promissores para prevenção e reabilitação de estruturas ósseas. Além disso, segundo Taylor e Prendergast (1997) e O'Brien et al. (2005), o emprego de modelos numéricos têm sido muito importantes para remodelação e na reparação do tecido ósseo.

Devido à alta hierarquia apresentada pela estrutura óssea (Rho et al., 1998; Currey, 2012), modelos multiescala que consideram sua heterogeneidade são altamente recomendados para uma apropriada simulação computacional (Ural e Mischinski, 2013; Burczyński et al., 2010). Aqui, destacam-se as simulações aplicadas ao osso cortical, uma vez que eles são os principais responsáveis por absorver a maior parte do carregamento mecânico que essas estruturas são submetidas. O papel desempenhado pelo osso cortical é crucial no comportamento global do fraturamento de estruturas ósseas.

Apesar do avanço proporcionado pelos modelos numéricos acerca do entendimento do comportamento mecânico do osso cortical, incluindo o seu processo de fissuração, algumas limitações apresentadas por esses modelos ainda precisam ser superadas (Giner et al., 2017). Dentre os trabalhos mais recentes, destacam-se aqueles baseados no X-FEM. Nestes trabalhos, o ponto de iniciação da fissura precisa ser previamente definido (Budyn e Hoc, 2007), e geralmente apresentam como critério para sua propagação, o critério da máxima deformação principal, o qual é comumente usado para materiais homogêneos. Além disso, a trajetória de propagação da fissura é reta e ortogonal ao deslocamento prescrito, sem detectar a presença de heterogeneidades, como as linhas de cimento (Budyn e Hoc, 2007; Abdel-Wahab et al., 2012). Utilizando métodos alternativos de critérios de propagação de fissuras, os trabalhos de Marco et al. (2018) e Gustafsson et al. (2019) com base nos métodos *Phantom-Node* e X-FEM, respectivamente, conseguiram captar a influência da linha de cimento e reproduzir padrões de fissuração compatíveis com aqueles observados

em experimentos laboratoriais. No entanto, observa-se que os modelos propostos continuam necessitando da definição do ponto de iniciação de fissura, não sendo observados padrões com múltiplas fissuras.

Neste contexto, fica claro que há necessidade de se aplicar modelos mais robustos que consigam detectar automaticamente o processo de iniciação e propagação de múltiplas fissuras em osso cortical. Neste sentido, destaca-se o uso da Técnica de Fragmentação de Malha (TFM), que tem sido amplamente utilizada para simulação do processo de fraturamento de materiais quase frágeis, incluindo a influência de zonas de transição interfaciais (ZTI) de materiais representados em multiescala (Rodrigues et al., 2016, 2017). Dentre as principais vantagens desta técnica estão:

- Diferentemente das técnicas discretas, como aquelas que utilizam elementos de interface com espessura nula (em inglês, *zero-thickness interface elements*), na TFM não é necessária utilizar uma relação constitutiva do tipo tensão-deslocamento (leis constitutivas discretas ou coesivas) e leis de integração especiais para descrever o processo de propagação de fissuras. Na TFM modelos constitutivos usuais do tipo tensão-deformação são empregados para descrever o comportamento de abertura e fechamento de fissuras.
- Não há necessidade de atribuir aos elementos de interface uma alta rigidez quando submetidos a esforços de compressão, como usualmente adotados pelos modelos discretos para evitar sobreposição de malhas. Esta característica evita problemas de convergência e instabilidade numérica na TFM.
- Os elementos de interface permitem a iniciação e propagação de uma, ou múltiplas fissuras, de forma automática, não sendo necessário um algoritmo para definir a trajetória de fissuração.
- A implementação desta técnica em códigos de MEF é relativamente simples visto que podem ser utilizado elementos finitos e modelos constitutivos já disponíveis, sendo necessário apenas a implementação da técnica de fragmentação de malha na etapa de pré-processamento.

1.2. Tecidos ósseos

De maneira geral, o tecido ósseo é o constituinte principal do esqueleto, serve de suporte para as partes moles e protege órgãos vitais, como os contidos nas caixas craniana, torácica e no canal raquidiano. Aloja e protege, no seu interior, a medula

óssea, formadora das células do sangue. Proporciona apoio aos músculos esqueléticos, transformando suas contrações em movimentos úteis, e constitui um sistema de alavancas que amplia as forças geradas na contração muscular (Junqueira e Carneiro, 2013), diferenciando-se de outros tipos de tecido por sua rigidez. Destaca-se que quando jovens, os tecidos ósseos possuem comportamento dúctil, porém se enrijecem progressivamente com o passar do tempo. O osso cortical é mais rígido e resistente que o trabecular, ele é responsável por absorver esforços solicitantes e, por isso, o estudo de sua falha estrutural é essencial para a compreensão do comportamento mecânico de estruturas ósseas (Boruah et al., 2017).

1.2.1. Osso cortical

O osso cortical (Figura 1.2) é uma estrutura heterogênea com propriedades anisotrópicas onde há uma dependência da organização de seus componentes microscópicos em sua resposta estrutural (Currey, 2012). Segundo Giner et al. (2017), em uma análise estrutural em microescala, o osso cortical é formado por 4 fases (material compósito):

- matriz óssea: é composta principalmente de ósteons antigos (estas estruturas perdem sua função devido a remodelação óssea) e possui um alto índice de minerais em sua composição (Marco et al., 2018). O módulo de elasticidade é de 10-15% maior que de ósteons secundários (Rho et al., 2001; Li et al., 2013);
- linha de cimento: é o material que preenche a interface entre ósteons secundários e matriz óssea. Possui espessura de 1-5 μ m, o que dificulta sua caracterização. É descrito como uma estrutura com baixíssimo módulo de elasticidade (se comparado com a matriz óssea e os ósteons secundários) como visto em Li et al. (2013); Nobakhti et al. (2014); Vercher et al. (2014); Burr et al. (1988) e Giner et al. (2017). Entretanto, alguns autores a consideram como um material de rigidez equivalente ao dos outros constituintes do osso cortical (Gustafsson et al., 2019). Independente das discussões sobre suas propriedades, conforme detalhado por Skedros et al. (2005), seu importante papel no processo de fissuração é tido como um consenso científico, e pode ser descrito como um material que possui alta probabilidade de ser atravessado por uma fissura; assim, age como uma barreira ao evitar a propagação de fissuras no interior de ósteons (Weindereich, 1930; Boyce et al., 1998);
- ósteons secundários: os ósteons, também chamados de sistemas de Havers, são

estruturas compostas por fibras de colágeno organizadas em lamelas paralelas que se dispõem em camadas concêntricas em torno de um canal (Junqueira e Carneiro, 2013). Eles são constantemente formados pelo processo de remodelação dos tecidos ósseos, possuem comprimento que varia de 3-5mm e diâmetro de 50-200 μ m (Cowin, 2001; Taylor et al., 2007). Destaca-se que a quantidade de ósteons e a direção em que se encontram dependem do histórico de carregamento da estrutura (Figura 1.2);

- *canal de Havers*: é um canal por onde passam vasos sanguíneos e nervos. O canal de Havers é normalmente considerado como um vazio estrutural nas análises numéricas (Marco et al., 2018; Giner et al., 2017; Budyn e Hoc, 2010; Abdel-Wahab et al., 2012), entretanto em Gustafsson et al. (2019), esta região foi representada por um material com módulo de elasticidade extremamente inferior (valor de 0,1GPa) aos outros constituintes.

Figura 1.2.: Imagem da microestrutura do osso cortical usando um microscópio óptico (adaptada de Budyn e Hoc, 2007). Matriz óssea em azul, ósteon em verde e linha de cimento em amarelo.

1.2.2. Modelagem computacional de estruturas ósseas

Realizou-se a primeira análise numérica usando o método dos elementos finitos no contexto da biomecânica de tecidos ósseos na década de 70 (Brekelmans et al., 1972). Neste trabalho, foi desenvolvido um modelo bidimensional de um fêmur com condições de contorno baseadas nos artigos publicados por Koch (1917) e Rydell (1966), onde estudou-se os campos de tensões e deformações. A primeira década ficou marcada pela análise de tensões em estruturas ósseas, próteses ósseas, dispositivos de

fixação de fraturas e outros tipos de tecido e, consequentemente, o MEF passou a ser visto como uma ferramenta promissora para biomecânica ortopédica (Huiskes e Chao, 1983).

Na década de 80, as análises via MEF continuaram a ser desenvolvidas no ambiente acadêmico, porém devido a tecnologia e o recurso computacional da época, as análises tinham dificuldade em representar as aplicações clínicas. A falta de modelos tridimensionais precisos, informações sobre as propriedades mecânicas das estruturas ósseas e estudos sobre condições de contorno contribuíam para esta situação (Zysset et al., 2013).

Durante a década de 90 houve um grande salto na complexidade das análises, o recurso computacional disponível e a popularização de tomografias computadorizadas (Figura 1.3) possibilitaram um acréscimo no número de estudos com modelos que continham geometrias complexas e eram baseadas em estruturas ósseas de pacientes (Prendergast, 1997). Neste período, os primeiros modelos tridimensionais não lineares foram analisados (Zysset e Curnier, 1996).

Figura 1.3.: Geometria tridimensional das estruturas ósseas de um quadril humano extraída a partir de uma tomografia computadorizada. A renderização da tomografia computadorizada foi realizada no software *open-source* InVesalius® desenvolvido pelo Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer (Amorim et al., 2015).

No início do século XXI, houve um processo de conscientização da osteoporose, fazendo com que houvesse um aumento no número de trabalhos que usavam o MEF para simular o comportamento mecânico de estruturas ósseas. Grandes avanços na

disponibilidade de recurso computacional possibilitaram modelos tridimensionais capazes de representar a complexa geometria e a heterogeneidade do tecido ósseo, como por exemplo, o realizado por Schileo et al. (2007). Empenhou-se em estudar o comportamento mecânico da microestrutura dos tecidos ósseos com o desenvolvimento de técnicas precisas para caracterização das estruturas microscópicas, visto que já era reconhecidamente relevante em escala macro, como descrito por O'Brien et al. (2005).

Atualmente, modelos não lineares que representam a heterogeneidade do material e sua complexa geometria são possíveis em pequena escala, com os computadores disponíveis ao público, ou em grande escala, usando supercomputadores como em Sugimoto e Ogino (2017), que discute análises com dezenas de bilhões de graus de liberdade. Logo, a propagação de fissuras em estruturas ósseas, que é um fenômeno multiescala (Gottesman e Hashin (1980); Hogan (1992) e Aoubiza et al. (1996)), antes visto como inviável devido a dificuldade de caracterização dos componentes ósseos e a restrição devido a tecnologia da época, se tornou viável nesse século.

1.2.2.1. Modelagem computacional da microestrutura de osso cortical

Em Budyn e Hoc (2010), ensaiou-se em laboratório três amostras de osso cortical. As propriedades dos materiais foram extraídas de forma a reproduzir sua heterogeneidade e replicou-se os experimentos numericamente utilizando o X-FEM com uma técnica de correlação de imagem digital (DIC) entre os experimentos e os modelos numéricos, baseada em Sutton et al. (1991); Réthoré et al. (2008); Heripre et al. (2007). Estudou-se o campo de tensões em função do campo de deslocamentos do modelo experimental usando a seguinte metodologia: a cada determinado intervalo de carregamento, reportava-se o padrão de fissuração e os deslocamentos no corpo de prova para então os atribuir ao modelo computacional. Os modelos numéricos descreveram o campo de tensões correspondentes ao padrão de fissuração dos modelos experimentais, destacando-se que as fissuras iniciaram-se na matriz intersticial e percorreram a estrutura em direção ao ponto de aplicação do carregamento sofrendo mudanças de percurso devido à presença da linha de cimento.

No trabalho de Abdel-Wahab et al. (2012), um modelo numérico bidimensional capaz de reproduzir o processo de fraturamento no osso cortical bovino foi desenvolvido considerando sua microestrutura através do X-FEM com a finalidade de estudar os efeitos causados pela linha de cimento na propagação de fissuras. Gerou-se a geometria dos modelos a partir de um algoritmo desenvolvido em MATLAB® (MATLAB,

2018) para alocar automaticamente ósteons em função da densidade e limites de diâmetro (menor e maior) para ósteons e canais de Havers extraídos a partir de imagens de um osso cortical. Ensaiou-se o mesmo exemplo considerando-o como: material homogêneo (mesma propriedades a todas geometrias), compósito (desconsiderando a linha de cimento) e, uma terceira vez, compósito considerando a linha de cimento. As propriedades dos materiais associadas ao modelo numérico foram extraídas experimentalmente em Abdel-Wahab et al. (2011). Utilizou-se segmento coesivo baseado no X-FEM para análise da propagação e iniciação de fissuras nos modelos numéricos, o critério de deformação máxima é implementado para descrever o fenômeno de iniciação da fissura com sua evolução do dano descrita em função da energia de fratura (G_f). Embora as linhas de cimento terem apresentado influência no comportamento da estrutura, não foi possível reproduzir o comportamento esperado, visto que, em todos os modelos, houve propagação de fissuras dentro de ósteons. Inicialmente, nos três modelos, as duas fissuras propagaram através da matriz intersticial e dos ósteons, ortogonalmente às tensões principais. Nos modelos homogêneo e heterogêneo (que desconsiderava a linha de cimento), a fissuração provocou a divisão da geometria; no modelo com a linha de cimento, as fissuras se propagaram ortogonalmente às tensões máximas principais, entretanto não dividiram a geometria.

Em Giner et al. (2017), um procedimento é proposto para estimar a energia de deformação em modo I de fraturamento da linha de cimento através da correlação de ensaios de flexão em três pontos experimentais e numéricos em estruturas de osso cortical ovino. A iniciação e propagação de fissuras é descrita por um modelo de dano baseado no critério de máxima deformação principal, onde a perda de rigidez, devido a presença de fissura, é causada pela degradação das matrizes constitutivas dos elementos finitos. Os resultados numéricos estão em concordância com os experimentais, as fissuras se propagam pela matriz intersticial e pela linha de cimento sem atravessar os ósteons.

No trabalho de Marco et al. (2018), os autores modelaram a microestrutura do osso cortical usando o X-FEM com um critério de orientação de fissuras aliado a metodologia *phantom-node* (PNM) desenvolvida em Hansbo e Hansbo (2004). O PNM trata as descontinuidades explicitamente, similar ao X-FEM, com segmentos retos e constantes dentro dos elementos, entretanto o PNM não enriquece o modelo numérico com mais graus de liberdade. Conforme detalhado pelos autores, quando uma fissura atravessa um elemento, esse elemento é duplicado, então a conectividade dos dois elementos é modificada, conectando os novos elementos a cada lado

da fissura. Os nós que pertencem aos novos elementos são chamados de *phantom nodes*. Portanto, assegura-se a descontinuidade no campo de deslocamentos necessária para descrever o processo de fissuração. Contextualizando o artigo: os modelos numéricos que usavam X-FEM padrão não conseguiam capturar a distribuição de fissuras esperada para estruturas ósseas por desconsiderar a heterogeneidade dos materiais. Os modelos computacionais do osso cortical são representados como um compósito heterogêneo constituído por quatro fases (matriz intersticial, linha de cimento, ósteon e canal de Havers). Quatro modelos foram ensaiados, sendo três com geometrias simples e um baseado no osso cortical w06003 do artigo de Budyn e Hoc (2010). Os resultados obtidos pelos autores estão de acordo com análises experimentais da microestrutura do osso cortical. Destaca-se que quando se utilizou a metodologia PNM, somente uma fissura percorreu os modelos numéricos sendo que estas partiram de uma fissura previamente implementada, ou seja, em todas as análises há somente uma fissura que tende a dividir os corpos geométricos.

No estudo desenvolvido por Gustafsson et al. (2019), um modelo para propagação de fissuras é desenvolvido usando o X-FEM para simular numericamente o comportamento mecânico da microestrutura do osso cortical em três planos diferentes. Combinou-se o critério de máxima deformação principal (MAXPE) com uma lei de dano para interface chamada critério de deformação nominal quadrática (QUADE) para representar a propagação de fissuras. Assim, aliou-se o trajeto independente de fissuras do X-FEM com um modelo de interface que se comporta analogamente ao de elementos coesivos (Gustafsson et al., 2019). Este é o único trabalho numérico (da bibliografia usada para esta pesquisa) que não considera o canal de Havers como um vazio estrutural. O módulo de elasticidade associado à linha de cimento é inferior aos outros materiais (0,1GPa) e possui a mesma deformação crítica que os outros materiais. Além disso, os resultados foram coerentes com o comportamento esperado da estrutura, quando utilizado valores bem pequenos de deformação crítica às propriedades da linha de cimento.

1.3. Objetivos

O propósito geral deste trabalho é contribuir para um melhor entendimento do processo de fissuração da microestrutura do osso cortical através de análises via método dos elementos finitos aliado com a técnica de fragmentação de malha. Os objetivos específicos são:

- investigar a capacidade de um modelo de dano conjugado em prever o processo de fissuração em osso cortical, incluindo falhas em modo misto;
- integrar o modelo constitutivo conjugado para descrever o comportamento dos elementos de interface através de um método Impl-Ex para evitar problemas de convergência numérica;
- estudar a influência da linha de cimento no processo de propagação de fissuras;
- estudar a influência do modelo de dano ao cisalhamento associado a linha de cimento;
- comparar os resultados obtidos de distribuição de fissuras com aqueles disponíveis na literatura empregando outras abordagens numéricas.

1.4. Estrutura da dissertação

A dissertação é subdividida em 4 Capítulos e 1 Apêndice. O Capítulo 1 é a introdução do trabalho que discute o tema abordado, apresenta uma breve revisão bibliográfica e lista os objetivos das análises numéricas da microestrutura do osso cortical.

No Capítulo 2, a técnica de fragmentação de malha é apresentada. O modelo de dano conjugado (à tração e ao cisalhamento) é matematicamente desenvolvido junto com o algoritmo para implementação computacional. As geometrias, condições de contorno e as malhas de elementos finitos de todos os exemplos numéricos são detalhados.

No Capítulo 3, estudos de convergência são realizados, modificando o número de passos de carregamento e o refinamento de malhas de elementos finitos, baseados em 2 geometrias conceituais da microestrutura do osso cortical. Em seguida, discute-se a influência do modelo de dano aplicado aos elementos de interface na resposta da estrutura. Por fim, avalia-se a influência da presença da linha de cimento na resposta da estrutura e na propagação de fissuras.

Finalmente, no Capítulo 4, as conclusões deste trabalho são apresentadas e sugestões para trabalhos futuros são listadas.

2. Metodologia

2.1. Técnica de fragmentação de malha de elementos finitos

Neste trabalho é empregada a técnica de fragmentação de malha de elementos finitos (Manzoli et al., 2016; Sánchez et al., 2014) para estudar o processo de iniciação e propagação de fissuras em osso cortical. A Figura 2.1 fornece uma visão geral de todas as etapas da metodologia proposta para realizar análises bidimensionais. Assim, partindo de uma estrutura óssea (Figura 2.1(a)), planos transversais (Figura 2.1(c)) e longitudinais (Figura 2.1(d)) podem ser definidos, contendo informações relevantes da microestrutura óssea em estudo (Figura 2.1(b)), para serem analisados via método dos elementos finitos aliado a técnica de fragmentação de malha (Figura 2.1(e.1) - (e.3)).

Figura 2.1.: Etapas da metodologia proposta para análise bidimensional da microestrutura do osso cortical: (a) fêmur humano; (b) representação conceitual da diáfise do fêmur; (c) plano transversal; (d) plano longitudinal; (e) fragmentação da malha de elementos finitos.

A técnica de fragmentação da malha permite a representação da microestrutura óssea como um material composto por 4 fases: matriz intersticial, linha de cimento, ósteons e canal de Havers. As principais etapas desta técnica podem ser descritas como:

1. Leitura de um arquivo que contenha todas as informações sobre a malha de elementos finitos (elementos, nós e conectividades) criada inicialmente com base na geometria do problema contendo as diferentes fases da microestrutura óssea (Figura 2.1(e)). Detalhe da malha “padrão” de elementos finitos antes do processo de fragmentação da malha pode ser visto na Figura 2.1(e.1).
2. Diminuição do tamanho e separação dos elementos finitos (fragmentação), conforme ilustra a Figura 2.1(e.2).
3. Inserção de pares de elementos finitos sólidos com alta razão de aspecto (Figura 2.2) para preencher os vazios deixados entre os elementos da malha “padrão” e definir as possíveis regiões de iniciação e trajetórias de propagação de fissuras (Figura 2.1(e.3)).

Figura 2.2.: Par de elementos finitos com alta razão de aspecto para ser inserido entre dois elementos triangulares de deformação constante que foram separados durante o processo de fragmentação da malha.

É importante notar que a técnica de fragmentação de malha permitiu a representação explícita da linha de cimento, definida como a zona de transição interfacial (ZTI) entre a matriz intersticial e ósteons. Conforme descrito na literatura, a representação desta fase é essencial para a correta representação do comportamento mecânico de estruturas ósseas, sendo uma região propícia a propagação de fissuras e transferência de esforços entre a matriz e ósteons.

Dentre as principais vantagens da utilização da técnica, destaca-se a utilização de modelos constitutivos contínuos (relação tensão-deformação) para representar regiões com descontinuidades através de elementos finitos com alta razão de aspecto. Isto é consequência desses elementos apresentarem as mesmas condições cinemáticas da Aproximação Contínua de Descontinuidades Fortes (ACDF) (Oliver et al., 1999, 2002). Emprega-se um modelo constitutivo baseado na mecânica do dano con-

tínuo para representar o comportamento dos elementos de interface, atribuindo-se distintos valores para as diferentes fases representadas. Este modelo constitutivo é integrado utilizando um esquema de integração implícito-explicito (Impl-Ex) a fim de evitar problemas de convergência numérica usualmente encontrados em análises envolvendo múltiplas fissuras.

Destaca-se que, neste trabalho, toda a não linearidade do problema será atribuída ao surgimento e propagação de fissuras, ou seja, será descrita pelo comportamento dos elementos de interface. Desta forma, no regime elástico, todos os elementos da malha possuem comportamento elástico linear isótropo, definido pela relação:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (2.1)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é tensor das tensões, $\mathbf{C}$ é a matriz das constantes elásticas e $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o tensor das deformações. Usando notação de Voigt, pode-se escrever essa relação para problemas em estado plano de tensão (Equação 2.2) e deformação (Equação 2.3), como:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \tau_{12} \end{Bmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-\nu)}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \gamma_{12} \end{Bmatrix}, \quad (2.2)$$

e

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \tau_{12} \end{Bmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \gamma_{12} \end{Bmatrix}, \quad (2.3)$$

nas quais, E é o módulo de Young e ν é o coeficiente de Poisson, e os subscritos numerados referenciam as direções da base ortogonal do sistema de coordenadas cartesiano e_1, e_2 e e_3 . A matriz das constantes elásticas ($\mathbf{C}$) possui dimensão 3x3, é sempre simétrica e com determinante positivo (Fish e Belytschko, 2007; Vaz, 2011).

A Figura 2.3 ilustra o procedimento numérico utilizado para análise via método dos elementos finitos, composto por três fases: pré-processamento, análise e pós-processamento. A etapa de pré-processamento consiste no desenvolvimento das

geometrias dos exemplos numéricos, onde se aplicam as condições de contorno e as propriedades dos materiais, e a posterior discretização usual do domínio do problema utilizando elementos finitos triangulares de deformação constante. Ainda nesta etapa, utiliza-se o MeFS (Apêndice A) com o objetivo de fragmentar a malha de elementos finitos, utilizando como arquivo de entrada a malha de elementos finitos criada na discretização inicial do problema. Na segunda fase, o arquivo de dados criado na etapa anterior, contendo as informações da malha discretizada e fragmentada, é lido pelo solver para realizar a análise numérica via MEF. Finalmente, na etapa de pós-processamento, o arquivo de saída é utilizado para avaliação dos resultados obtidos. Neste trabalho foi utilizado um solver em elementos finitos que vem sendo desenvolvido em linguagem MATLAB®, em conjunto com o pré e pós-processador GiD® (Melendo et al., 2016) para criação e visualização dos resultados.

Figura 2.3.: Esquema para a análise numérica via MEF da microestrutura do osso cortical. O processo é dividido em três etapas: pré-processamento, análise numérica e pós-processamento.

2.1.1. Elementos finitos com alta razão de aspecto

O elemento finito com alta razão de aspecto pode ser entendido como um elemento triangular de deformação constante (elemento com 3 nós), cujo comprimento de sua base (b) é muito maior que sua altura (h), dada pela distância entre o nó (1) e sua projeção (1') na base do elemento, conforme ilustra a Figura 2.4.

Adotando um sistema de coordenadas cartesianas ($\mathbf{s}, \mathbf{n}$), o campo de deformação aproximado ($\boldsymbol{\varepsilon}$) pode ser obtido a partir dos deslocamentos nodais deste elemento ($\mathbf{u}$) pela equação:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}\mathbf{u}, \quad (2.4)$$

Figura 2.4.: Componentes geométricas do elemento finito com alta razão de aspecto.

onde $\mathbf{B}$ é a matriz que contém as derivadas das funções de forma do elemento.

Usando notação de Voigt, pode-se reescrever a Equação 2.4 da seguinte forma:

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{ss} \\ \varepsilon_{nn} \\ \gamma_{sn} \end{Bmatrix} = \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} n^2 - n^3 & 0 & n^3 - n^1 & 0 & n^1 - n^2 & 0 \\ 0 & s^3 - s^2 & 0 & s^1 - s^3 & 0 & s^2 - s^1 \\ s^3 - s^2 & n^2 - n^3 & s^1 - s^3 & n^3 - n^1 & s^2 - s^1 & n^1 - n^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_s^1 \\ u_n^1 \\ u_s^2 \\ u_n^2 \\ u_s^3 \\ u_n^3 \end{Bmatrix}, \quad (2.5)$$

ou

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{ss} \\ \varepsilon_{nn} \\ \gamma_{sn} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{(n^2 - n^3)u_s^1 + (n^3 - n^1)u_n^2 + (n^1 - n^2)u_s^3}{bh} \\ \frac{(s^3 - s^2)u_n^1 + (s^1 - s^3)u_n^2 + (s^2 - s^1)u_n^3}{bh} \\ \frac{(s^3 - s^2)u_s^1 + (n^2 - n^3)u_n^1 + (s^1 - s^3)u_s^2 + (n^3 - n^1)u_n^2 + (s^2 - s^1)u_s^3 + (n^1 - n^2)u_n^3}{bh} \end{Bmatrix}, \quad (2.6)$$

onde A é a área do elemento finito; s^i e n^i são as coordenadas do nó i ; u_s^i e u_n^i são as componentes de deslocamento do nó i nas direções s e n , respectivamente.

Definindo a base do elemento como:

$$b = s^3 - s^2, \quad (2.7)$$

suas componentes como:

$$\begin{aligned} b_1 &= s^1 - s^2 \\ b_2 &= s^3 - s^1 \end{aligned} \tag{2.8}$$

e a sua altura por:

$$h = n^1 - n^2 = n^1 - n^3, \tag{2.9}$$

podemos escrever os deslocamentos da projeção do nó (1) na base do elemento (posição (1')) nas direções $\mathbf{s}$ e $\mathbf{n}$ usando as equações:

$$u_s^{1'} = \frac{(u_s^3 b_1 + u_s^2 b_2)}{b} \tag{2.10}$$

e

$$u_n^{1'} = \frac{(u_n^3 b_1 + u_n^2 b_2)}{b}. \tag{2.11}$$

Portanto, pode-se armazenar os deslocamentos nodais relativos, horizontal ($\hat{u}_s^1$) e vertical ($\hat{u}_n^1$), entre o nó (1) e sua projeção (1') em um vetor ($\hat{\mathbf{u}}$), da seguinte forma:

$$\hat{\mathbf{u}} = \begin{Bmatrix} \hat{u}_s^1 \\ \hat{u}_n^1 \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} u_s^1 - u_s^{1'} \\ u_n^1 - u_n^{1'} \\ 0 \end{Bmatrix}. \tag{2.12}$$

Substituindo Equação 2.7, Equação 2.9 e Equação 2.12 na Equação 2.6, podemos reescrever o campo de deformações ($\boldsymbol{\varepsilon}$) em função da base e da altura do elemento

finito (Figura 2.4) como:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{ss} \\ \varepsilon_{nn} \\ \gamma_{sn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{h(u_s^3 - u_s^2)}{bh} \\ \frac{bu_n^1 - b_2 u_n^2 - b_1 u_n^3}{bh} \\ \frac{bu_s^1 - b_2 u_s^2 - hu_n^2 - b_1 u_s^3 + hu_n^3}{bh} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{u_s^3 - u_s^2}{b} \\ \frac{\hat{u}_n^1}{h} \\ \frac{\hat{u}_s^1}{h} + \frac{u_n^3 - u_n^2}{b} \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Nota-se que o campo de deformações (ε) pode ser dividido em duas componentes, uma em função da altura do elemento finito ($\hat{\varepsilon}$) e outra em função da sua base ($\tilde{\varepsilon}$):

$$\varepsilon = \hat{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}, \quad (2.14)$$

$$\hat{\varepsilon} = h^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{u}_n^1 \\ \hat{u}_s^1 \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

$$\tilde{\varepsilon} = b^{-1} \begin{pmatrix} u_s^3 - u_s^2 \\ 0 \\ u_n^3 - u_n^2 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Quando $h \rightarrow 0$ na Equação 2.14, a componente $\tilde{\varepsilon}$ (limitada) pode ser desprezada, ficando o campo de deformações definido basicamente pela parcela $\hat{\varepsilon}$ (ilimitada). Logo, o campo de deformações do elemento de interface é escrito em função do salto do campo de deslocamentos ($\hat{\mathbf{u}}$), que é o deslocamento relativo do nó (1) e sua projeção (1'), o qual se interpreta como a medição do deslocamento de uma descontinuidade.

Por fim, o tensor das deformações pode ser escrito como:

$$\varepsilon = h^{-1} (\mathbf{n} \otimes \hat{\mathbf{u}})^s + \tilde{\varepsilon}, \quad (2.17)$$

onde $(\bullet)^s$ é a parcela simétrica de $(\bullet)$ e $\otimes$ é o operador do produto diádico. Esta

equação corresponde a estrutura da cinemática da ACDF. Mais detalhes podem ser encontrados em Manzoli et al. (2012).

2.1.2. Modelo de dano contínuo

O processo de iniciação e propagação das fissuras pelos elementos com alta razão de aspecto é descrito cobinando dois modelos constitutivos baseados na teoria da mecânica do dano contínuo. Para simular a interface de cisalhamento necessária para descrever o potencial deslizamento tangencial na região representada pela linha de cimento, foi adotado um modelo similar ao proposto por Manzoli et al. (2018) definido em função da tensão cisalhante atuante no elemento de interface e a energia de fratura. Em seguida, a abertura de fissuras é representada por um modelo de dano à tração (Manzoli et al., 2016) definido em função da tensão normal atuante no elemento de interface e da energia de fratura da fase do compósito que este elemento está inserido.

É importante destacar que neste trabalho toda a não linearidade do compósito será descrita pelo comportamento dos elementos de interface, ficando sempre os elementos finitos triangulares de deformação constante convencionais representados por um modelo elástico linear.

A seguir são apresentados os dois modelos constitutivos de dano combinados.

2.1.2.1. Dano ao cisalhamento

No modelo de dano ao cisalhamento o tensor das tensões efetivas $\bar{\sigma}$ é definido como o tensor das tensões elásticas σ definido pela Equação 2.1, ou seja:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{ss} & \bar{\sigma}_{sn} \\ \bar{\sigma}_{sn} & \bar{\sigma}_{nn} \end{bmatrix}}_{\bar{\sigma}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sigma_{ss} & \sigma_{sn} \\ \sigma_{sn} & \sigma_{nn} \end{bmatrix}}_{\sigma}. \quad (2.18)$$

Decompondo o tensor das tensões efetivas em função das suas componentes normais $\bar{\sigma}^n$ e tangenciais $\bar{\sigma}^\tau$ pode-se escrever que:

$$\bar{\sigma} = \underbrace{\begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{ss} & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}_{nn} \end{bmatrix}}_{\bar{\sigma}^n} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & \bar{\sigma}_{sn} \\ \bar{\sigma}_{sn} & 0 \end{bmatrix}}_{\bar{\sigma}^\tau}. \quad (2.19)$$

Define-se o critério de falha em função da tensão de cisalhamento σ_{sn} paralela a base do elemento de interface da seguinte forma:

$$\Phi^\tau = |\sigma_{sn}| - q^\tau \leq 0, \quad (2.20)$$

onde q^τ é a variável interna de tensão. Dividindo a Equação 2.20 por $(1 - d^\tau)$, se expressa o critério de dano em função das tensões efetivas como:

$$\bar{\Phi}^\tau = |\bar{\sigma}_{sn}| - r^\tau \leq 0, \quad (2.21)$$

na qual a variável interna de deformação r^τ no espaço das tensões efetivas fica definida da seguinte forma:

$$r^\tau = \frac{q^\tau}{(1 - d^\tau)}, \quad (2.22)$$

e é atualizada em cada em cada passo de carregamento como:

$$r^\tau = \max [|\bar{\sigma}_{sn}|, r_0^\tau] \quad (2.23)$$

sendo r_0^τ inicialmente igual à tensão crítica de cisalhamento f^τ .

O critério de danificação deve atender as condições de carga e descarga de Kuhn-

Tucker:

$$\bar{\Phi}^\tau \leq 0; \dot{r}^\tau \geq 0 \text{ e } \dot{r}^\tau \bar{\Phi}^\tau = 0 \quad (2.24)$$

A lei de evolução do dano d^τ é expressa em função de r^τ :

$$d^\tau = 1 - \frac{q^\tau}{r^\tau}, \quad (2.25)$$

e a variável interna de tensão cisalhante q^τ é definida por:

$$q^\tau = f^\tau e^{Bh(1-\frac{r^\tau}{f^\tau})}, \quad (2.26)$$

sendo

$$B = \frac{(f^\tau)^2}{GG_f^{II}} \quad (2.27)$$

e

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad (2.28)$$

onde G é o módulo de elasticidade transversal, G_f^{II} é a energia de deformação em modo II de falha e h é a altura do elemento finito com alta razão de aspecto.

Por fim, pode-se então definir o tensor das tensões nominais cisalhante, no qual são danificadas somente as componentes referentes à parcela cisalhante do tensor das tensões efetivas:

$$\boldsymbol{\sigma}^\tau = \bar{\boldsymbol{\sigma}} - d^\tau \bar{\boldsymbol{\sigma}}^\tau \quad (2.29)$$

ou

$$\boldsymbol{\sigma}^\tau = \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{ss} & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}_{nn} \end{bmatrix} + (1 - d^\tau) \begin{bmatrix} 0 & \bar{\sigma}_{sn} \\ \bar{\sigma}_{sn} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.30)$$

2.1.2.2. Dano à tração

O tensor das tensões efetivas é definido pelo tensor nominal do tensor das tensões cisalhantes:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^t = \boldsymbol{\sigma}^\tau. \quad (2.31)$$

O critério de danificação é definido em função da componente normal do tensor das tensões σ_{nn} em relação à base do elemento de interface:

$$\Phi^t = \sigma_{nn} - q^t \leq 0, \quad (2.32)$$

onde q^t é a variável interna de tensão definida em função da variável interna de deformação r^t . Dividindo a Equação 2.32 por $(1 - d^t)$, pode-se escrever o critério de falha em termos de tensão efetiva, como:

$$\bar{\Phi}^t = \bar{\sigma}_{nn} - r^t \leq 0, \quad (2.33)$$

na qual a variável interna de deformação no espaço das tensões efetivas fica definida:

$$r^t = \frac{q^t}{(1 - d^t)} \quad (2.34)$$

e é atualizada em cada em cada passo de carregamento como:

$$r^t = \max[\bar{\sigma}_{nn}, r_0^t], \quad (2.35)$$

sendo r_0^t a tensão de resistência à tração do material f^t .

O critério de danificação deve atender as condições de carga e descarga de Kuhn-Tucker:

$$\bar{\Phi}^t \leq 0; \dot{r}^t \geq 0 \text{ e } \dot{r}^t \bar{\Phi}^t = 0 \quad (2.36)$$

A lei de evolução do dano d^t é expressa em função de r^t :

$$d^t = 1 - \frac{q^t}{r^t}, \quad (2.37)$$

e a variável interna de tensão à tração q^t é definida por:

$$q^t = f^t e^{Ah \left(1 - \frac{r^t}{f^t}\right)}, \quad (2.38)$$

onde h é a altura do elemento finito de interface (Figura 2.4) e A é o fator de amolecimento dado por:

$$A = \frac{(f^t)^2}{EG_f^I}, \quad (2.39)$$

na qual, G_f^I é a energia de deformação no modo I e E é o módulo de elasticidade.

Finalmente, pode-se definir o tensor das tensões nominais conjugado por:

$$\boldsymbol{\sigma}^t = (1 - d^t) \bar{\boldsymbol{\sigma}}^t = (1 - d^t) \left\{ \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{ss} & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}_{nn} \end{bmatrix} + (1 - d^r) \begin{bmatrix} 0 & \bar{\sigma}_{sn} \\ \bar{\sigma}_{sn} & 0 \end{bmatrix} \right\}, \quad (2.40)$$

ou

$$\boldsymbol{\sigma}^t = (1 - d^t) [\bar{\boldsymbol{\sigma}} - d^r \bar{\boldsymbol{\sigma}}^r] = (1 - d^t) \left\{ \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{ss} & \bar{\sigma}_{sn} \\ \bar{\sigma}_{sn} & \bar{\sigma}_{nn} \end{bmatrix} - d^r \begin{bmatrix} 0 & \bar{\sigma}_{sn} \\ \bar{\sigma}_{sn} & 0 \end{bmatrix} \right\} \quad (2.41)$$

Neste trabalho o modelo apresentados acima foram conjugados (combinados) para descrever o comportamento dos elementos de interface, aplicando primeiramente sempre o modelo de dano ao cisalhamento, assumindo como tensor das tensões efetivas o tensor das tensões elásticas, seguido pelo modelo de dano à tração, para o qual o tensor das tensões efetivas será o tensor nominal das tensões cisalhantes, obtido a partir da degradação das componentes cisalhantes do tensor das tensões efetivas. Para o modelo de dano à tração, todas as componentes do tensor das tensões efetivas são degradadas. Além disso, é importante observar que para as regiões do compósito nas quais o dano ao cisalhamento é nulo, o tensor efetivo do modelo de dano à tração é o próprio tensor das tensões elásticas.

2.1.2.3. Esquema de integração implícito-explícito (Impl-Ex)

A técnica de integração Impl-Ex, proposta por Oliver et al. (2006, 2008), é utilizada para integrar a relação tensão-deformação para evitar problemas de convergência nas análises numéricas. Ela foi utilizada recentemente para integrar problemas elastoplásticos (Prazeres et al., 2016) e modelos com materiais quase frágeis (Manzoli et al., 2016; Prazeres et al., 2016; Tayer, 2018). Algumas das características desta metodologia são:

- possui a estabilidade dos métodos implícitos;
- as propriedades constantes e positivas do operador constitutivo efetivo possuem os seguintes efeitos no procedimento iterativo:
 - estabilidade numérica e robustez da análise;
 - o procedimento de Newton-Raphson deve convergir em apenas uma iteração.

O esquema de integração Impl-Ex (Figura 2.5) é dividido em duas integrações em série em um passo de carregamento $t + 1$:

1. integração implícita, na qual o método retroativo de Euler é utilizado para calcular o tensor das tensões σ_{t+1} a partir do tensor das deformações ε_{t+1} ;
2. integração explícita, onde o tensor das tensões σ_{t+1} é calculado através de uma extrapolação explícita da variável interna de deformação $\tilde{r}_{t+1}$ que é descrita pela série de Taylor truncada no termo de primeira ordem, portanto, a extrapolação é feita em função dos valores implícitos calculados no passo anterior Δr_t .

A Tabela 2.1 resume as equações dos modelos de dano ao cisalhamento e à tração usados neste trabalho.

Tabela 2.1.: Equações do modelo de dano.

	Dano ao cisalhamento	Dano à tração
Tensões efetivas	$\bar{\sigma}_{t+1} = \mathbf{C}\varepsilon_{t+1}$	$\bar{\sigma}_{t+1}^t = \sigma_{t+1}^\tau$
Critério de dano	$\bar{\Phi}^\tau = \bar{\sigma}_{sn_{t+1}} - r_t^\tau$	$\bar{\Phi}^t = \bar{\sigma}_{nn_{t+1}}^t - r_t^t$
Variável interna de deformação (implícita)	$r_{t+1}^\tau = \max[\bar{\sigma}_{sn_{t+1}}, r_0^\tau]$	$r_{t+1}^t = \max[\bar{\sigma}_{nn_{t+1}}^t, r_0^t]$
Variável interna de deformação (explícita)	$\tilde{r}_{t+1}^\tau = r_0^\tau + (r_t^\tau - r_{t-1}^\tau)$	$\tilde{r}_{t+1}^t = r_0^t + (r_t^t - r_{t-1}^t)$
Variável interna de tensão (explícita)	$\tilde{q}_{t+1}^\tau = f^\tau e^{Bh\left(1 - \frac{\tilde{r}_{t+1}^\tau}{f^\tau}\right)}$	$\tilde{q}_{t+1}^t = f^t e^{Ah\left(1 - \frac{\tilde{r}_{t+1}^t}{f^t}\right)}$
Fator de amolecimento	$B = \frac{f^{\tau^2}}{GG_f^I}$	$A = \frac{f^{t^2}}{EG_f^I}$
Evolução do dano	$\tilde{d}_{t+1}^\tau = 1 - \frac{\tilde{q}_{t+1}^\tau}{\tilde{r}_{t+1}^\tau}$	$\tilde{d}_{t+1}^t = 1 - \frac{\tilde{q}_{t+1}^t}{\tilde{r}_{t+1}^t}$
Relação constitutiva	$\sigma_{t+1}^\tau = \bar{\sigma}_{t+1} - \tilde{d}_{t+1}^\tau \bar{\sigma}_{t+1}^\tau$	$\sigma_{t+1}^t = (1 - \tilde{d}_{t+1}^t) [\sigma_{t+1}^\tau - \tilde{d}_{t+1}^\tau \bar{\sigma}_{t+1}^\tau]$

Após a contabilização do dano, deteriora-se a matriz das constantes elásticas. Assim, deriva-se a Equação 2.18 em relação ao campo de deformações:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} = (1 - d) \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \varepsilon}. \quad (2.42)$$

$$\mathbf{C}^{tan} = (1 - d) \mathbf{C}, \quad (2.43)$$

onde $\mathbf{C}$ é a matriz das constantes elásticas e $\mathbf{C}^{tan}$ é a matriz das constantes elásticas tangente.

Inicialmente, é necessário aplicar o dano ao cisalhamento nas componentes da matriz quando escrita na configuração local do elemento finito. Portanto, para calcular a matriz das constantes elásticas local $\mathbf{C}_l$ é necessário usar a Equação 2.45 que é escrita em função das componentes do versor normal à base do elemento de interface (Equação 2.44):

$$\tilde{\mathbf{n}} = \begin{Bmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} dx \\ dy \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (2.44)$$

onde $\tilde{\mathbf{n}}$ é o versor normal à base do elemento finito com alta razão de aspecto (Figura 2.4) e θ é o ângulo entre o versor $\mathbf{n}$ e o versor $\mathbf{e}_1$ do sistema de coordenadas globais. A matriz rotação se escreve:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} dx^2 & dy^2 & 2dxdy \\ dy^2 & dx^2 & -2dxdy \\ -dxdy & dxdy & (dx^2 - dy^2) \end{bmatrix}, \quad (2.45)$$

e sua inversa:

$$\mathbf{R}^{-1} = \begin{bmatrix} dx^2 & dy^2 & -2dxdy \\ dy^2 & dx^2 & 2dxdy \\ dxdy & -dxdy & (dx^2 - dy^2) \end{bmatrix}. \quad (2.46)$$

Logo, a matriz das constantes elásticas local pode ser escrita:

$$\mathbf{C}_l = \mathbf{R}\mathbf{C}. \quad (2.47)$$

Somente a última linha da matriz local é deteriorada devido o dano ao cisalhamento:

$$\mathbf{C}_l^\tau = \begin{bmatrix} C_{l_{11}} & C_{l_{12}} & C_{l_{13}} \\ C_{l_{21}} & C_{l_{22}} & C_{l_{23}} \\ C_{l_{31}} & C_{l_{32}} & C_{l_{33}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ d^\tau C_{l_{31}} & d^\tau C_{l_{32}} & d^\tau C_{l_{33}} \end{bmatrix}, \quad (2.48)$$

Finalmente, retorna a matriz das constantes elásticas para configuração global e se calcula a matriz constitutiva elástica tangente usando a seguinte relação:

$$\mathbf{C}^\tau = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{C}_l^\tau \quad (2.49)$$

$$\mathbf{C}_{t+1}^{tan} = (1 - d^t)\mathbf{C}^\tau. \quad (2.50)$$

Figura 2.5.: Algoritmo do esquema de integração Impl-Ex.

2.2. Propriedades mecânicas

A Tabela 2.2 lista as propriedades mecânicas utilizadas neste trabalho. Estes valores foram baseados nos valores adotados por Marco et al. (2018), os quais se basearam em diversos trabalhos disponíveis na literatura (ver referências listadas na Tabela 2.2), exceto os valores adotados para o critério de danificação inicial ao cisalhamento f^τ e energia de fratura em modo II G_f^{II} , que foram definidos a partir do trabalho desenvolvido por Gustafsson et al. (2019), uma vez que no modelo proposto por Marco et al. (2018), o critério de propagação de fissuras é baseado somente nas tensões normais. Desta forma, levando em conta que no modelo proposto por Gustafsson et al. (2019), o material apresenta um comportamento elástico linear até o início do processo de degradação do material, definido pelos autores pelo valor da máxima deformação elástica ao cisalhamento ε_{max}^τ , o valor adotado como critério de danificação inicial ao cisalhamento foi calculado pela relação:

$$f^\tau = 2G\varepsilon_{max}^\tau = G\gamma_{max}, \quad (2.51)$$

na qual G é o módulo de elasticidade transversal.

O valor associado ao módulo de elasticidade da linha cimento foi baseado no trabalho desenvolvido por Budyn e Hoc (2010), os quais a consideram igual a 75% do módulo de elasticidade do ósteon.

O dano ao cisalhamento é considerado somente na zona de transição interfacial entre o ósteon e a matriz intersticial (linha de cimento). Para os ósteons e a matriz intersticial, desconsidera-se a etapa de danificação ao cisalhamento, considerando apenas o modelo de dano à tração. Além disso, o canal de Havers é modelado como um vazio estrutural, por este motivo suas propriedades mecânicas não foram quantificadas. Por fim, em todas análises, associa-se aos materiais um coeficiente de Poisson de 0,3, conforme sugerido por Marco et al. (2018).

Tabela 2.2.: Propriedades mecânicas dos constituintes do osso cortical. Módulo de Young E ; tensão crítica de tração f^t ; tensão crítica de cisalhamento f^τ ; energia de deformação em modo I G_f^I ; energia de deformação em modo II G_f^{II} .

Componente	E (MPa)	f^t (MPa)	G_f^I (N/m)	f^τ (MPa)	G_f^{II} (N/m)
Ósteon	13290 ^a	100 ^b	860 ^c	-	-
Matriz óssea	14610 ^{c,d}	55 ^e	238 ^c	-	-
Linha de cimento	9968 ^f	6 ^g	163 ^g	0,6134 ^h	200 ⁱ

^a Vercher et al. (2014);

^b Cowin (2001);

^c Li et al. (2013);

^d Rho et al. (2001);

^e Arango Villegas (2016);

^f Budyn e Hoc (2010);

^g Giner et al. (2017);

^h Gustafsson et al. (2019)

ⁱ Nalla et al. (2006); Koester et al. (2008)

Para o estudo da influência das propriedades da linha cimento, além dos valores adotados na Tabela 2.2, foram também considerados casos nos quais a linha de cimento possui as mesmas propriedades mecânicas adotadas para a matriz óssea. Desta forma, o critério de danificação inicial foi recalculado utilizando a Equação 2.51.

Tabela 2.3.: Propriedades mecânicas dos constituintes do osso cortical. Módulo de Young E ; tensão crítica de tração f^t ; tensão crítica de cisalhamento f^τ ; energia de fratura em modo I G_f^I ; energia de fratura em modo II G_f^{II} .

Componente	E (MPa)	f^t (MPa)	G_f^I (N/m)	f^τ (MPa)	G_f^{II} (N/m)
Ósteon	13290 ^a	100 ^b	860 ^c	-	-
Matriz óssea	14610 ^{c,d}	55 ^e	238 ^c	-	-
Interface Ósteon-Matriz	14610 ^{c,d}	55 ^e	238 ^c	0,8996 ^f	200 ^g

^a Vercher et al. (2014);

^b Cowin (2001);

^c Li et al. (2013);

^d Rho et al. (2001);

^e Arango Villegas (2016);

^f Gustafsson et al. (2019)

^g Nalla et al. (2006); Koester et al. (2008)

2.3. Descrição dos modelos numéricos

O processo de fissuração no osso cortical possui grande influência da distribuição de seus componentes na microescala. Portanto, os exemplos numéricos implementados representam as 4 fases da microestrutura do osso cortical em 2 configurações de ensaios (teste de flexão em 3 pontos e tração uniaxial) e em diferentes planos de análise.

As hipóteses que embasaram os modelos numéricos são:

- carregamento estático;
- pequenos deslocamentos;
- análise bidimensional sob estado plano de deformação (EPD) e estado plano de tensão (EPT);
- comportamento elástico linear isotrópico para os elementos triangulares de deformação constante convencionais, e não linearidade descrita pelos modelos de dano aplicados para descrever o comportamento dos elementos de elevada razão de aspecto.

Tabela 2.4.: Resumo das informações sobre os modelos numéricos.

Modelo	EPD	EPT	Espessura (μm)	Tipo de ensaio	Plano
C1F	x		1	Flexão em 3 pontos	Transversal
C2F	x		1	Flexão em 3 pontos	Transversal
C1T1		x	100	Tração uniaxial	Longitudinal
C1T2		x	100	Tração uniaxial	Longitudinal
C1T3	x		1	Tração uniaxial	Transversal
CMT		x	300	Tração uniaxial	Transversal
EMF		x	2000	Flexão em 3 pontos	Transversal

A Tabela 2.4 resume as informações dos modelos numéricos desenvolvidos. Os modelos são nomeados utilizando a seguinte nomenclatura:

- modelo conceitual (C) ou baseado na geometria de um modelo experimental (E);
- número de ósteons 1, 2 ou múltiplos (M);
- condições de contorno de um ensaio de flexão de 3 pontos (F) ou de tração uniaxial (T);
- caso uma sequência se repita, numera-se em ordem crescente os casos analisados.

As geometrias apresentadas nesta seção estão coloridas propositalmente para identificação dos materiais da microestrutura do osso cortical:

- Verde: ósteons que passarão pelo processo de fragmentação de malha;

- Azul: matriz intersticial que passará pelo processo de fragmentação de malha;
- Cinza: região da matriz intersticial não fragmentada, ou seja, não há elementos de interface entre os elementos convencionais de deformação constante. Esta fase será utilizada no modelo em multiescala concorrente, onde se considera as propriedades homogenizadas da matriz intersticial na parcela em cinza e, na parte central da estrutura, descreve-se as 4 fases da microestrutura do material.

Os modelos numéricos desenvolvidos neste trabalho foram baseados em modelos descritos na literatura, e que foram utilizados anteriormente por outros autores no estudo da propagação de fissuras em osso cortical empregando outras abordagens numéricas. Foram desenvolvidos 7 modelos numéricos, sendo 6 representações conceituais (Subseção 2.3.1) da microestrutura do osso cortical e 1 modelo baseado em imagem (Subseção 2.3.2).

Para os dois primeiros exemplos conceituais (C1F e C2F), foram realizados estudos de convergência de malha de elementos finitos, e da influência do número de passos de carga na curva de equilíbrio estrutural, a fim de avaliar a influência do esquema de integração Impl-Ex. Posteriormente, todos exemplos foram analisados considerando por padrão malhas com tamanho de $10\mu m$, com exceção do modelo baseado em imagem, para o qual foram criados elementos com tamanho de $5\mu m$.

Descreve-se a geometria de cada exemplo e sua discretização em elementos finitos, destacando-se o número de graus de liberdade e o número de elementos finitos criados.

2.3.1. Modelos conceituais

2.3.1.1. C1F: Ensaio de flexão em 3 pontos com 1 ósteon

A microestrutura do osso cortical é conceitualmente concebida em uma configuração de viga biapoiada no plano transversal (Figura 2.6). A estrutura possui dimensões de $640 \times 240\mu m^2$, a distância entre os apoios é de $560\mu m$ e no meio do vão há um entalhe na face inferior. Centralizado na estrutura, há 1 ósteon com $200\mu m$ de diâmetro com um canal de Havers de $50\mu m$. Aplica-se um deslocamento de $3\mu m$ no topo da estrutura.

Figura 2.6.: Geometria e configuração do modelo C1F proposto por Marco et al. (2018).

O exemplo C1F foi discretizado em elementos finitos, resultando em um total de 25710 graus de liberdade e 16915 elementos finitos (Figura 2.7).

Figura 2.7.: Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1F com tamanho dos elementos finitos de $10\mu\text{m}$.

2.3.1.2. C2F: Ensaio de flexão em 3 pontos com 2 ósteons

Este ensaio foi desenvolvido em Marco et al. (2018) e é originalmente intitulado *two-osteon model*. A microestrutura do osso cortical é conceitualmente concebida em uma configuração de viga biapoiada no plano transversal (Figura 2.8). As dimensões

da estrutura são $1000 \times 400 \mu\text{m}^2$, o vão possui comprimento de $870 \mu\text{m}$ e o entalhe se encontra a $590 \mu\text{m}$ da aresta esquerda da geometria. O ósteon 1 possui $200 \mu\text{m}$ de diâmetro com um canal de Havers de $50 \mu\text{m}$, enquanto que o diâmetro do ósteon 2 é de $120 \mu\text{m}$ com um canal de Havers de $60 \mu\text{m}$. É prescrito um deslocamento vertical de $10 \mu\text{m}$ no topo da estrutura.

Figura 2.8.: Geometria e configuração do modelo C2F proposto por Marco et al. (2018).

A malha de elementos finitos do exemplo C2F (Figura 2.7) possui 61896 graus de liberdade e 40912 elementos finitos.

Figura 2.9.: Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C2F com tamanho dos elementos finitos de $10 \mu\text{m}$.

2.3.1.3. C1T1: Ensaio de tração uniaxial com 1 ósteon

Desenvolvido por Gustafsson et al. (2019), e denominado pelos autores de *Longitudinal*, o ensaio consiste em um ósteon inclinado de 10° no sentido horário em relação ao eixo vertical, embebido em uma matriz intersticial sob condição de tração uniaxial. O ósteon possui comprimento de $750\mu\text{m}$, diâmetro de $150\mu\text{m}$ e um canal de Havers de $50\mu\text{m}$ de diâmetro. O modelo é um quadrado com $1000\mu\text{m}$ de lado, restringindo o deslocamento vertical da base e prescrevendo um deslocamento de $7,3\mu\text{m}$ na face superior. A análise é realizada com a hipótese do EPT com espessura de $100\mu\text{m}$.

Figura 2.10.: Geometria e condições de contorno do modelo C1T1 idealizado por Gustafsson et al. (2019).

A Figura 2.11 ilustra a discretização em elemento finitos com 92067 elementos e 139038 graus de liberdade.

Figura 2.11.: Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1T1 com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$.

2.3.1.4. C1T2: Ensaio de tração uniaxial com 1 ósteon

Também desenvolvido primeiramente em Gustafsson et al. (2019), chamado de *transversal*, o ensaio consiste no mesmo ósteon do ensaio C1T1 inclinado a 10° em relação a horizontal (sentido anti-horário) embebido em uma matriz intersticial sob condição de carregamento de tração pura. O deslocamento prescrito é de $5\mu\text{m}$. O ensaio possui as mesmas dimensões do anterior ($1000 \times 1000 \mu\text{m}^2$), sob estado plano de tensão e espessura igual a $100\mu\text{m}$.

Figura 2.12.: Geometria e condições de contorno do modelo C1T2 idealizado por Gustafsson et al. (2019).

A malha de elementos finitos do modelo C1T2, detalhada na Figura 2.13, possui 91875 elementos finitos e 138666 graus de liberdade.

Figura 2.13.: Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1T2 com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$.

2.3.1.5. C1T3: Ensaio de tração uniaxial com 1 ósteon

Baseado em Gustafsson et al. (2019), denominado pelos autores de *radial*, o ensaio consiste no mesmo ósteon dos ensaios C1T1 e C1T2 no plano transversal sob car-

regamento de tração pura. O modelo possui formato de quadrado com o lado de $400\mu\text{m}$. O deslocamento prescrito no topo da estrutura é de $3,5\mu\text{m}$. A hipótese do estado plano de deformação é assumida.

Figura 2.14.: Geometria e condições de contorno do modelo C1T3 idealizado por Gustafsson et al. (2019).

A geometria do modelo C1T3 é discretizada em elementos finitos (Figura 2.15) com 62499 elementos e 94350 graus de liberdade.

Figura 2.15.: Malha de elementos finitos para o exemplo numérico C1T3 com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$.

2.3.1.6. CMT: Ensaio de tração uniaxial com múltiplos ósteons

Proposto por Abdel-Wahab et al. (2012), o modelo representa a microestrutura do osso cortical no plano transversal em uma configuração de tração uniaxial, restringindo os deslocamentos horizontais da face esquerda e prescrevendo deslocamentos de $10\mu\text{m}$ na face à direita (Figura 2.16). Para forçar o surgimento da fissura no centro da estrutura, dois entalhes verticais foram inseridos pelos autores. A geometria de $700 \times 525\mu\text{m}^2$ foi reproduzida a partir da imagem no artigo original usando o aplicativo WebPlotDigitizer (Rohatgi, 2019). Utiliza-se a hipótese do estado plano de tensão, configurando os elementos com uma espessura de $300\mu\text{m}$. Os ósteons estão distribuídos no centro da geometria em uma área de $540 \times 379\mu\text{m}^2$.

Figura 2.16.: Geometria e condições de contorno do modelo CMT realizado por Abdel-Wahab et al. (2012).

A malha de elementos finitos do modelo CMT é detalhada na Figura 2.17 e apresentam 38294 elementos finitos e 58212 graus de liberdade.

Figura 2.17.: Malha de elementos finitos para o exemplo numérico CMT com tamanho de elementos finitos de $10\mu\text{m}$.

2.3.2. Modelo baseado em imagem

2.3.2.1. EMF: Ensaio de flexão em três pontos com múltiplos ósteons

Trata-se de um modelo baseado em imagem de um ósteon real, o qual foi ensaiado experimentalmente por Budyn e Hoc (2010). Para extrair com precisão a geometria da microestrutura desse modelo, foi utilizado o programa computacional WebPlotDigitizer (Rohatgi, 2019), conforme ilustra a Figura 2.18. Essa amostra, denominada pelos autores de w06003, é configurada como ensaio de flexão em 3 pontos no plano transversal e possui dimensões aproximadas de $6000 \times 1960 \mu\text{m}^2$, conforme ilustra a Figura 2.19. Assume-se a hipótese do estado plano de tensão e uma espessura de $2000 \mu\text{m}$.

Figura 2.18.: Extração das geometrias a partir da imagem da viga w06003. (a) Estrutura de osso cortical original; (b) sobreposição das imagens do modelo numérico e experimental; e (c) geometria do modelo numérico. As imagens da microestrutura do osso cortical foram retiradas de Budyn e Hoc (2010).

Figura 2.19.: Geometria e condições de contorno do modelo EMF reproduzido a partir do trabalho experimental e numérico realizado por Budyn e Hoc (2010).

A Figura 2.20 ilustra a malha de elementos finitos do modelo EMF. Devido as grandes dimensões do modelo, discretizou-se a área em cinza com uma malha grosseira (tamanho do elemento finito de $200\mu\text{m}$) e não fragmentou-se esta região visando

diminuir a exigência de recurso computacional. Portanto somente a área central de $380 \times 1100 \mu\text{m}^2$ é fragmentada com tamanho do elemento finito de $5 \mu\text{m}$. O elevado refinamento é necessário devido a irregularidade da geometria do osso cortical quando representado em microescala. O modelo possui 202556 graus de liberdade e 136066 elementos finitos.

Figura 2.20.: Malha de elementos finitos para o exemplo numérico EMF adotando-se malha grosseira (a) (tamanho de elementos finitos de $200 \mu\text{m}$ em cinza) e uma malha refinada (b) (tamanho de elementos finitos de $5 \mu\text{m}$).

A Figura 2.21 ilustra os elementos de interface gerados no processo de fragmentação de malha na região central da viga. Nota-se que os elementos de interface se assemelham a linhas devido à pequena altura desses elementos.

Figura 2.21.: Malha de elemento finitos do modelo EMF (a). Mesma malha, ocultando o *layer* dos elementos CST (b).

3. Resultados

Neste capítulo, os resultados das análises numéricas (C1F, C2F, C1T1, C1T2, C1T3, CMT e EMF) são apresentados. Um estudo da influência do refinamento da malha de elementos finitos e da quantidade de passos no modelo numérico (estudo de convergência) é realizado utilizando os modelos C1F e C2F. Para todos os exemplos, são realizadas análises considerando modelo de dano conjugado, e posteriormente modelo de dano à tração a fim de estudar o efeito da influência do cisalhamento da interface representada pela linha de cimento. Por fim, estuda-se a influência das propriedades mecânicas atribuídas para a linha cimento, considerando as propriedades listadas na Tabela 2.2 e Tabela 2.3. Os resultados são apresentados no formato de gráfico força-deslocamento e imagens detalhando o padrão de fissuração.

Nas imagens que mostram a configuração deformada dos ensaios numéricos, o *layer* dos elementos finitos com alta razão de aspecto é ocultado para facilitar visualização da distribuição de fissuras, conforme ilustrado na Figura 3.1. No estudo da influência do modelo de dano e da linha de cimento, aplica-se os deslocamentos prescritos em 5000 passos e a força e o deslocamento são monitorados a cada passo no ponto de aplicação.

Figura 3.1.: Visualização das configurações deformadas dos ensaios numéricos com o *layer* dos elementos finitos de interface ligado (a) e desligado (b).

3.1. C1F

A estrutura retangular com 1 ósteon localizado no centro do modelo está submetida a uma configuração de ensaio de flexão em 3 pontos. A geometria e condições de contorno são detalhadas na Figura 2.6. Este é um modelo simples onde o modo I de falha estrutural possui grande relevância na distribuição de fissuras. No trabalho original (Marco et al., 2018), a fissura se inicia no entalhe e se propaga pela linha de cimento até voltar a se propagar na matriz intersticial, a fissuração do modelo original é ilustrada na Figura 3.16.

3.1.1. Estudo de convergência

A Figura 3.2 ilustra as diferentes malhas de elementos finitos para o modelo C1F. A Figura 3.3 detalha o custo computacional em termos de graus de liberdade e número de elementos finitos para cada discretização de malha. Nota-se que a malha mais refinada (tamanho $5\mu\text{m}$) possui 92490 graus de liberdade, quase 4 vezes o valor de graus de liberdade da malha com refinamento médio que tem 25710 graus de liberdade e mais do que 10 vezes o número de graus de liberdade da malha mais grosseira (9186 graus de liberdade). A relação de elementos finitos de interface para CST é aproximadamente de 3 vezes em todos os refinamentos. A análise de maior refinamento possui 61231 elementos finitos, enquanto que as malhas $10\mu\text{m}$ e $20\mu\text{m}$ possuem 16915 e 6007, respectivamente.

Figura 3.2.: Diferentes refinamentos de malha para o modelo C1F. O refinamento da malha é descrito em função do tamanho do elemento 5, 10 e $20\mu\text{m}$.

Figura 3.3.: Número de graus de liberdade e elementos finitos CST e de interface (HAR) do ensaio C1F para cada discretização de malha (tamanho do elemento finito definido no GiD: 5, 10 e $20\mu\text{m}$). O número de graus de liberdade é calculado multiplicando o número de nós por 2.

A tangente do gráfico força-deslocamento (Figura 3.4) é inicialmente igual, mas ao longo do ensaio ela diverge entre os modelos com diferentes graus de discretização, devido a menor dimensão dos elementos de interface quando o refinamento da malha

é maior, que por consequência promove o início do dano, tanto próximo do entalhe quanto na linha de cimento, antes do que nos modelos com malhas mais grosseiras. Enquanto a fissura não atinge a linha de cimento, o gráfico apresenta uma relação próxima de linear, quando ela a alcança, muda seu comportamento e atinge valores máximos próximos de $2,0 \times 10^{-3} \text{N}$ e em seguida decresce parabolicamente até o final do ensaio.

Figura 3.4.: Gráfico força-deslocamento onde se compara os resultados de refinamento de malha com o deslocamento prescrito aplicado em 5000 passos.

Na distribuição de fissuras de cada refinamento de malha, nota-se que o refinamento não provoca relevante diferença entre os modelos. A fissura inicia no entalhe da estrutura e, ao atingir a linha de cimento, ela se desenvolve em ambos os lados do ósteon separando-o da matriz, no final do ensaio numérico, somente uma pequena parcela da linha de cimento não está totalmente danificada, conforme ilustrado na Figura 3.5.

Figura 3.5.: Distribuição de fissuras final do ensaio numérico da viga C1F para diferentes refinamentos de malha com deslocamentos aplicados em 5000 passos. A magnitude dos deslocamentos é aumentada em 10 vezes.

Analisando cada refinamento de malha, mudando somente o número de passos podemos estudar as consequências de mudar a magnitude de deslocamento prescrito a cada passo. Assim, analisa-se primeiramente o modelo com a malha de elementos finitos com tamanho $5\mu\text{m}$. A Figura 3.6 ilustra os padrões de fissuração, onde nota-se que as fissuras se comportam similarmente nos três modelos: a fissura surge no entalhe e percorre o contorno dos ósteons. Quando o deslocamento é aplicado em 5000 e 10000 passos, os deslocamentos na linha de cimento são verticalmente espelhados; entretanto, em 1000 passos, há deslocamento acentuado na linha de cimento do lado direito do ósteon. O gráfico, Figura 3.7, ilustra um comportamento mecânico similar entre as análises, a divergência entre as malhas ocorre após o regime linear.

Figura 3.6.: Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de $5\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes.

A sobreposição de malha vista no padrão de fissuração do modelo com refinamento de $5\mu m$ e com o deslocamento aplicado em 10000 passos é causada pelo aumento dos deslocamentos. A sobreposição não ocorre quando se analisa o campo de deslocamentos inalterado.

Figura 3.7.: Gráfico força-deslocamento para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de $5\mu m$.

A Figura 3.8 descreve o padrão de fissuração nos instantes (a), (b) e (c) definidos na Figura 3.7 quando aplicado o deslocamento em diferentes quantidades de passos. Nota-se que em (a), os modelos apresentam o mesmo padrão de fissuração com o deslizamento da linha de cimento nas laterais do ósteon e a pequena fissura iniciada no entalhe; a partir de (b), o padrão de fissuração começa a divergir ao apresentar diferentes comportamentos da fissura do entalhe que se propaga até a linha de cimento. No final do ensaio (c), as diferenças se evidenciam com destaque ao modelo com deslocamento aplicado em 1000 passos que apresenta padrão de fissuração mais assimétrica.

Figura 3.8.: Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de $5\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos. Deslocamentos aumentados em 20 vezes em (a) e (b) e 10 vezes em (c).

O padrão de fissuração do modelo C1F discretizado com elementos finitos de tamanho $10\mu\text{m}$ é detalhado na Figura 3.9 e o gráfico força-deslocamento é ilustrado na Figura 3.10. A grande diferença no padrão de fissuração com este refinamento está no elemento finito rotacionado próximo ao entalhe presente quando o deslocamento prescrito é aplicado em 1000 passos, considerando que os deslocamentos estão aumentados, o padrão de fissuração é similar nos exemplos com 5000 passos e 10000 passos. As curvas obtidas dos modelos com 5000 e 10000 passos são muito próximas; enquanto que o modelo com 1000 passos diverge dos outros após regime linear.

Figura 3.9.: Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de $10\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes.

Figura 3.10.: Gráfico força-deslocamento para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de $10\mu\text{m}$.

O modelo C1F discretizado com elementos finitos de tamanho $20\mu\text{m}$ tem seu padrão de fissuração detalhado na Figura 3.11 e o gráfico projetando o comportamento estrutural na Figura 3.12. Nota-se que para este refinamento de malha, a quantidade de passos proporciona resultado diferente somente para o modelo com 1000 passos, no qual se encontra uma porção de elementos finitos ligando ambos os lados da matriz. O gráfico reafirma que o comportamento do modelo com 1000 passos diverge dos outros dois modelos, visto que as curvas obtidas dos modelos com 5000 e 10000 passos se sobrepõem.

Figura 3.11.: Padrão de fissuração para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de $20\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 2000 e 5000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes.

Figura 3.12.: Gráfico força-deslocamento para o modelo C1F com o tamanho de elemento finito de $20\mu\text{m}$.

3.1.2. Influência do modelo de dano

A geometria foi discretizada por elementos finitos de $10\mu\text{m}$. A malha de elementos finitos do exemplo C1F é ilustrada na Figura 2.7. As propriedades mecânicas associadas aos materiais são da Tabela 2.2. Utiliza-se o modelo de dano à tração (DT) e, em seguida, realiza-se o mesmo modelo considerando o modelo de dano conjugado (DC) associado à linha de cimento. A Figura 3.13 detalha as curvas obtidas, o padrão de fissuração é ilustrado na Figura 3.14 e se comparam os padrões de fissuração obtidos no final da análise com o resultado obtido no trabalho original

na Figura 3.16.

Figura 3.13.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1F alterando o modelo de dano associado à linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.

O modelo de dano associado a linha de cimento possui grande relevância na resposta mecânica do modelo conforme mostrado no gráfico força-deslocamento (Figura 3.13). A tangente do gráfico se mantém constante e similar no início de ambas as análises numéricas. O modelo com dano conjugado apresenta dano ao cisalhamento na linha de cimento o que influencia na inclinação da reta, a carga de pico deste modelo é de $2,4 \times 10^{-3} \text{ N}$ com o deslocamento prescrito de $1,8 \mu\text{m}$ e acontece quando a fissura proveniente do entalhe alcança a linha de cimento. Nota-se também que a fissura percorre ambos os lados do ósteon e no final da análise, somente uma porção desta interface conecta o ósteon e a matriz. Com o dano à tração, o deslizamento causado pela danificação da interface só acontece bem próximo da carga pico e fica restringido a uma menor parcela da linha de cimento. Quando a fissura proveniente do entalhe alcança a interface entre o ósteon e a matriz intersticial surge uma concentração de tensão em dois pontos da matriz (Figura 3.15) devido a ausência de dano nos elementos de interface; por isso, desenvolvem-se fissuras tanto no ósteon quanto na matriz. A carga de pico do modelo DT é de $4,5 \times 10^{-3} \text{ N}$ em aproximadamente $2,5 \mu\text{m}$ de deslocamento.

Figura 3.14.: Padrão de fissuração do modelo C1F com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.

Figura 3.15.: Vista aproximada do padrão de fissuração do modelo DT no final da análise. Nota-se que há propagação de fissura dentro do ósteon.

Ao comparar os resultados das análises com o trabalho original (Figura 3.16), nota-se que no original a fissura percorre somente por um lado da linha de cimento até sair pela matriz intersticial diferentemente do padrão de fissuração alcançada nas análises que usam a técnica de fragmentação de malha, onde a fissura se propaga pelos dois lados da linha de cimento. Apesar do modelo com dano conjugado não demonstrar a fissura percorrendo na parte superior da matriz, esta apresenta dano no final da simulação, mas é relativamente baixo.

Figura 3.16.: Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original, o vermelho representa a fissura. Os modelos numéricos estão com os deslocamentos aumentados em 10 vezes. (Imagem retirada de Marco et al., 2018).

3.1.3. Influência da linha de cimento

As propriedades mecânicas associadas aos materiais são da Tabela 2.2 (com linha de cimento) e Tabela 2.3 (sem linha de cimento). Utiliza-se o modelo de dano conjugado para os dois exemplos. A Figura 3.17 detalha as curvas obtidas e os padrões de fissuração são ilustrados na Figura 3.18.

Figura 3.17.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1F alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.

As curvas descritas na Figura 3.17 apresentam comportamentos divergentes entre si. Quando não se considera as propriedades da linha de cimento (Sem LC) a resposta

do modelo apresenta três retas, a primeira alteração na inclinação é provocada pelo deslizamento entre o ósteon e a matriz e a última inclinação ocorre quando a fissura do entalhe alcança o ósteon. Apesar do deslizamento, as interfaces não se desconectam na maior parte da interface, por isso não é visto a carga de pico no modelo, a matriz está conectada ao ósteon até o final da análise.

Figura 3.18.: Padrão de fissuração do modelo C1F com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.

3.2. C2F

A estrutura retangular com 2 ósteons localizados na parcela central da geometria está submetida a uma configuração de ensaio de flexão em 3 pontos, a geometria e condições de contorno são detalhadas na Figura 2.6. Este é um modelo que o modo de falha I apresenta um papel relevante na falha estrutural. No trabalho original (Marco et al., 2018), a fissura se inicia no entalhe e se propaga pela linha de cimento dos dois ósteons em direção ao ponto de aplicação do deslocamento, a fissuração do modelo original é ilustrada na Figura 3.31.

3.2.1. Estudo de convergência

A Figura 3.20, detalha o custo computacional em termos de graus de liberdade e número de elementos finitos para cada discretização de malha. Nota-se que a malha mais refinada (tamanho $5\mu\text{m}$) possui 232572 graus de liberdade, quase 4 vezes o valor de graus de liberdade da malha com refinamento médio que tem 61896 graus de liberdade e mais do que 10 vezes o número de graus de liberdade da malha mais grosseira (17184 graus de liberdade). A análise de maior refinamento possui 154340 elementos finitos, enquanto que no tamanho $10\mu\text{m}$ e $20\mu\text{m}$ há 40912 e 11280, respectivamente. A Figura 3.19 ilustra as diferentes malhas de elementos finitos para o modelo C1F.

Figura 3.19.: Diferentes refinamentos de malha para o modelo C2F. O refinamento da malha é descrito em função do tamanho do elemento 5, 10 e $20\mu\text{m}$.

Figura 3.20.: Número de graus de liberdade e elementos finitos CST e elementos de interface (HAR) do ensaio C2F para cada discretização de malha (tamanho do elemento finito definido no GiD: 5, 10 e $20\mu\text{m}$). O número de graus de liberdade é calculado multiplicando o número de nós por 2.

A tangente do gráfico é inicialmente igual e se diferencia conforme se aplica mais deslocamento (Figura 3.21). O modelo com a malha mais grosseira apresenta uma rigidez e carga de pico maior. Com a malha intermediária (malha 10), a rigidez do material se aproxima de um valor médio, possui a menor carga de pico e menor reação no final da análise. O modelo mais refinado (malha 5) descreve a curva mais estável, possui a menor rigidez e descreve uma parábola com a segunda maior carga de pico e maior reação no final da análise. Em todas as análises, o final da relação linear entre força e deslocamento ocorre quando a fissura se propaga ao longo da lateral do maior ósteon (Figura 3.22), em seguida, a fissura percorre a matriz intersticial em direção ao menor ósteon com a reação no nó se estabilizando entre $3,2 \cdot 10^{-3}\text{N}$ e $3,8 \cdot 10^{-3}\text{N}$; mesmo antes da fissura atingir o segundo ósteon, linha de cimento já está danificada fazendo com que os valores de força decresçam.

Figura 3.21.: Gráfico força-deslocamento onde se compara os resultados de refinamento de malha com o deslocamento prescrito aplicado em 5000 passos.

Independente do refinamento de malha, a fissura surge no entalhe e percorre a estrutura perpendicularmente às máximas tensões principais e através das linhas de cimento, quando possível. A malha mais grosseira apresenta uma grande parcela da matriz intersticial rotacionada próximo ao entalhe diferentemente dos outros modelos. Os modelos de $5\mu\text{m}$ e $20\mu\text{m}$ apresentam um padrão de fissuração similar, tendo pequenas diferenças causadas pela disposição dos elementos de interface. O modelo com refinamento intermediário é o único que apresenta uma única fissura propagando do entalhe até o ósteon pequeno.

Figura 3.22.: Distribuição de fissuras final do ensaio numérico da viga C2F para diferentes refinamentos de malha com deslocamentos aplicados em 5000 passos.

Estuda-se o padrão de fissuração do exemplo C2F mantendo a mesma malha de $5\mu\text{m}$ e alterando o número de passos (Figura 3.24). O processo de iniciação e propagação das fissuras é similar nas três situações, nota-se que, quando o deslocamento é aplicado em 1000 e 5000 passos, a fissura proveniente do ósteon maior não alcança a linha de cimento do ósteon menor. Na Figura 3.23, os modelos apresentam a mesma inclinação inicialmente, mas, após o comportamento linear, a curva de 1000 passos diverge dos outros modelos. Quando se aplica o deslocamento em 5000 e 10000 passos, as curvas obtidas se assemelham, porém no final da análise a curva de 10000 passos apresenta uma queda na reação não captada pelos outros modelos.

Figura 3.23.: Gráfico força-deslocamento para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $5\mu\text{m}$.

O padrão de fissuração obtido nas três análises (Figura 3.24) é similar, entretanto, há diferenças que explicam as diferentes curvas obtidas nas análises. Aplicando o deslocamento em 1000 passos, o padrão de fissuração apresenta uma descontinuidade separando o ósteon maior da matriz, porém a fissura não alcança o ósteon menor. No modelo com deslocamento aplicado em 5000 passos, há uma porção da matriz intersticial rotacionada e a fissura não alcança o ósteon menor. No modelo com 10000 passos, há uma porção da matriz rotacionada também, entretanto, é o único modelo que apresenta uma única fissura percorrendo a linha de cimento do ósteon maior até a linha de cimento do ósteon menor.

Figura 3.24.: Padrão de fissuração para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $5\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos.

O gráfico força-deslocamento (Figura 3.25) mostra que, quando o deslocamento é aplicado em 10000 passos, a curva é mais estável e possui carga pico maior (em torno de $3,5 \times 10^{-3}\text{N}$). Todos os modelos apresentam o mesmo comportamento, eles divergem quanto ao regime não linear, onde há uma parábola que provoca a diminuição de caráter exponencial da reação.

Figura 3.25.: Padrão de fissuração para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $10\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 2000 e 5000 passos. Deslocamentos aumentados em 10 vezes.

Os modelos com elementos finitos de tamanho $10\mu\text{m}$ apresentam padrões de fissuração semelhantes Figura 3.26, sendo uma porção dos elementos finitos da matriz intersticial rotacionados próximo ao entalhe o ponto de divergência. Em todos os casos, a fissura se propaga do ósteon maior até o ósteon menor.

Figura 3.26.: Gráfico força-deslocamento para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $10\mu\text{m}$.

O modelo C2F discretizado com elementos finitos de tamanho $20\mu\text{m}$ tem o gráfico

projetando o comportamento estrutural na Figura 3.27 e seu padrão de fissuração detalhado na Figura 3.28. O gráfico força-deslocamento indica que com esse nível de discretização, o número de passos não provoca uma grande diferença na resposta mecânica da estrutura, diferentemente do modelo C1F com o mesmo refinamento.

Figura 3.27.: Gráfico força-deslocamento para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $20\mu\text{m}$.

Figura 3.28.: Padrão de fissuração para o modelo C2F com o tamanho de elemento finito de $20\mu\text{m}$ para o mesmo deslocamento prescrito aplicados em 1000, 5000 e 10000 passos.

3.2.2. Influência do modelo de dano

Utiliza-se a geometria discretizada com elementos finitos de $10\mu\text{m}$. No modelo, pelo fato da fissura se propagar a partir do entalhe que está deslocado do centro, o dano ao cisalhamento não desempenha papel tão relevante quanto no modelo C1F no comportamento mecânico. As propriedades mecânicas associadas aos materiais são da Tabela 2.2. No gráfico (Figura 3.29), observa-se, que neste exemplo, os modelos possuem comportamentos semelhantes, se diferenciam pela carga de pico e tenacidade superiores quando usado somente o dano à tração da linha de cimento.

Figura 3.29.: Gráfico força-deslocamento do modelo C2F alterando o modelo de dano associado à linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.

Os padrões de fissuração dos modelos são similares, conforme a Figura 3.30 ilustra, a fissura inicia no entalhe e percorre a linha de cimento dos dois ósteons em direção ao ponto de aplicação da carga. Em ambos os modelos mesmo antes da fissura proveniente do entalhe alcançar a linha de cimento, esta já apresenta dano. No modelo com dano conjugado (DC), a fissura se desenvolve rapidamente o que explica a diferença na reação presente no gráfico força-deslocamento entre os modelos. Nota-se, também, que no modelo com dano à tração (DT) há um elemento rotacionado próximo do entalhe que trabalha como uma ponte entre as duas parcelas da matriz intersticial divididas pela fissura.

Figura 3.30.: Padrão de fissuração do modelo C2F com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para o deslocamento prescrito de 2 μm e em 5 vezes para o de 5 μm .

Comparando-se os padrões de fissuração com o trabalho original, evidencia-se que resposta permanece coerente visto que a fissura se propaga pelas linhas de cimento na vertical em direção ao ponto de aplicação da carga, conforme o resultado obtido originalmente (Figura 3.31).

Figura 3.31.: Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original, o vermelho representa a fissura (Imagem retirada de Marco et al., 2018).

3.2.3. Influência da linha de cimento

Utiliza-se a geometria discretizada por elementos finitos de $10\mu m$. As propriedades mecânicas associadas aos materiais são da Tabela 2.2 (com LC) e da Tabela 2.3 (sem LC).

Figura 3.32.: Gráfico força-deslocamento do modelo C2F alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.

O gráfico força-deslocamento ilustrado na Figura 3.32 descreve o comportamento

dos modelos com (com LC) e sem a linha de cimento (sem LC). Destaca-se que o modelo sem LC apresenta comportamento linear até a carga de pico e então descreve uma acentuada perda na reação. Esse comportamento é explicado através do padrão de fissuração, Figura 3.33, o modelo sem LC não apresenta fissuração entre o ósteon e a matriz óssea antes que a fissura do entalhe alcance a interface. Assim, o padrão de fissuração visto no final da análise ocorre subitamente após atingir a carga pico.

Figura 3.33.: Padrão de fissuração do modelo C2F com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para o deslocamento prescrito de $2\mu\text{m}$ e em 5 vezes para o de $5\mu\text{m}$.

3.3. C1T1

O modelo C1T1 é uma representação conceitual da microestrutura do osso cortical contendo apenas 1 ósteon em um corte longitudinal. No trabalho original, mudou-se as propriedades da linha de cimento até que a fissura conseguisse contornar o ósteon sem atravessá-lo. Assim, objetiva-se obter um comportamento similar.

3.3.1. Influência do modelo de dano

Realizou-se a discretização da geometria do modelo C1T1 com elementos finitos de $10\mu\text{m}$. Utiliza-se as propriedades descritas na Tabela 2.2. O comportamento

mecânico da estrutura é descrito no gráfico força-deslocamento (Figura 3.34) e o padrão de fissuração na Figura 3.35.

As análises numéricas do exemplo C1T1, quando os modelos DT e DC são associados à linha de cimento, não possuem grandes discrepâncias entre si. Ambos os ensaios apresentam uma tangente similar enquanto o dano nas interfaces é desprezível, entretanto o modelo numérico com o dano conjugado demonstra uma mudança na rigidez primeiro e descreve sua curva sempre abaixo do modelo que considera somente o dano à tração. A curva extraída de Gustafsson et al., 2019 descreve um comportamento linear até a carga pico, a qual é aproximadamente 2 vezes maior do que a do modelo DT, apresenta uma diminuição na reação linear e, então, tende a se manter próximo de 0,4N.

Figura 3.34.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1T1 alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.

O padrão de fissuração nos fornece os motivos para mudança de comportamento da estrutura. Nota-se que o dano se desenvolve em três locais antes da carga pico: próximo ao entalhe e nas 2 extremidades do ósteon. A carga pico é caracterizada pela chegada da fissura na linha de cimento. A partir deste momento, os resultados divergem, visto que o modelo DT não consegue simular o deslizamento entre a matriz e o ósteon, conforme detalhado na Figura 3.36, a matriz intersticial permanece conectada ao ósteon através da linha de cimento causando surgimento de microfissuras dentro dessa estrutura; entretanto, o modelo com DC consegue descrever o deslizamento.

Figura 3.35.: Padrão de fissuração do modelo C1T1 com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para os deslocamentos prescritos de 2,56 μm e 3,65 μm e 3 vezes para o deslocamento prescritos de 7,3 μm .

Apesar do trabalho original possuir somente uma fissura que percorre a estrutura da esquerda para a direita, o padrão de fissuração se assemelha com o modelo que usa dano conjugado na linha de cimento, visto que a fissura divide a estrutura em dois blocos sem se propagar dentro do ósteon.

Figura 3.36.: Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. Os modelos estão coloridos de acordo com a magnitude dos deslocamentos verticais que se estende de 0 (azul) até $7,3\mu m$ (vermelho). O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem retirada de Gustafsson et al., 2019).

3.3.2. Influência da linha de cimento

O comportamento mecânico da estrutura é descrito no gráfico força-deslocamento, Figura 3.37, onde o modelo sem linha de cimento possui um comportamento similar ao do modelo com a linha de cimento. Inicialmente, o gráfico mantém uma relação linear até próximo da carga pico. Em seguida, a reação monitorada apresenta decaimento exponencial.

Figura 3.37.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1T1 alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.

Os padrões de fissuração, Figura 3.38, se assemelham, justificando o comportamento similar visto no gráfico força-deslocamento. Entretanto, fissuras surgem nas extremidades internas do ósteon quando não se considera a linha de cimento. O grande destaque entre os dois modelos é a porção da matriz rotacionada no modelo com linha de cimento.

Figura 3.38.: Padrão de fissuração do modelo C1T1 com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes para o deslocamento prescrito de 2,56 μ m e 3,65 μ m.

3.4. C1T2

O modelo C1T2 apresenta o mesmo ósteon da análise C1T1 configurado horizontalmente. O modelo numérico foi criado com o objetivo de forçar a propagação da fissura no contorno do ósteon mudando as propriedades da linha de cimento.

3.4.1. Influência do modelo de dano

A geometria do modelo C1T2 é discretizada em elementos finitos triangulares de 10 μ m de tamanho. As propriedades associadas nos modelos estão descritas na Tabela 2.2. O comportamento mecânico da estrutura é descrito no gráfico força-deslocamento na Figura 3.39 e o padrão de fissuração na Figura 3.40.

A resposta estrutural é muito similar se compararmos os valores de reação quando usado dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Esse fenômeno é causado pela

relevância do dano à tração na falha da estrutura. A tensão de cisalhamento só atinge valores críticos na linha de cimento que está localizada nas extremidades do ósteon, por isso a reação do modelo DC é constantemente inferior, porém não exerce grande influência no comportamento mecânico do modelo. A curva extraída de Gustafsson et al., 2019 apresenta um comportamento destoante das análises realizadas neste trabalho e, também, o padrão de fissuração obtido diverge do extraído na análise numérica original.

Figura 3.39.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1T2 alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.

Obtém-se padrões de fissuração parecidos ao usar os dois modelos de dano. Inicialmente, a linha de cimento se deteriora em ambas extremidades do ósteon, em seguida, surge uma fissura do entalhe da estrutura que se propaga em direção a porção da linha de cimento mais próxima. Então, a linha de cimento se deteriora conforme deslocamento prescrito é aplicado, porém o dano na interface se mantém e surge a fissura na matriz intersticial, no lado oposto ao entalhe, que se propaga até o limite da matriz intersticial. Em nenhum dos ensaios há separação total da estrutura, o ósteon trabalha como uma ponte conectando a parte superior e inferior da matriz intersticial. Por isso, fissuras surgem nas arestas internas do ósteon.

Figura 3.40.: Padrão de fissuração do modelo C1T2 com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes. .

Analisando o campo de deslocamentos dos modelos numéricos na Figura 3.41, evidencia-se que a estrutura não está desconectada diferentemente do trabalho original que possui a fissura atravessando o corpo de prova e dividindo-o em dois. O resultado original descreve a fissura contornando o ósteon e, então, dividindo a estrutura. Entretanto, usando os modelos constitutivos com as propriedades mecânicas adotadas neste trabalho, observou-se um padrão de fissuração distinto, visto que a fissura se propagou no interior do ósteon.

Figura 3.41.: Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. Os modelos estão coloridos de acordo com a magnitude dos deslocamentos verticais que se estende de 0 (azul) até $5\mu m$ (vermelho). O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem adaptada de Gustafsson et al., 2019).

3.4.2. Influência da linha de cimento

Utiliza-se as propriedades descritas na Tabela 2.2 para o modelo com linha de cimento (com LC) e a Tabela 2.3 para o modelo sem linha de cimento (sem LC). O comportamento mecânico da estrutura é descrito no gráfico força-deslocamento, Figura 3.39, que ilustra o comportamento similar dos dois modelos. A resposta mecânica pode ser descrita em 3 etapas: inicialmente, a resposta mantém uma relação próxima de linear, então descreve uma parábola aonde atinge a carga pico e, em seguida, apresenta um leve decaimento exponencial. A curva sem a linha de cimento sempre se posta acima da do modelo com linha de cimento.

Figura 3.42.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1T2 alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.

O padrão de fissuração, Figura 3.40, do modelo que desconsidera as propriedades da linha de cimento é inicialmente semelhante; entretanto, a fissura não percorre a porção superior e inferior da interface entre ósteon e matriz intersticial. A distribuição de fissuras no final da análise se distingue por desenvolver duas fissuras dentro do ósteon maiores do que as vistas no modelo que considera a linha de cimento.

Figura 3.43.: Padrão de fissuração do modelo C1T2 com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes. .

3.5. C1T3

O modelo C1T3 apresenta o mesmo ósteon da análise C1T1 no plano transversal, o estudo realizado por Gustafsson et al., 2019 tinha como objetivo alcançar a propagação da fissura do entalhe esquerdo, atravessando a linha de cimento no contorno do ósteon e alcançando a outra extremidade da geometria.

3.5.1. Influência do modelo de dano

A geometria do modelo C1T3 é discretizada em uma malha de elementos finitos de 10 μ m de tamanho. As propriedades mecânicas dos materiais descritos na Tabela 2.2 são usadas. O comportamento mecânico da estrutura é descrito no gráfico força-deslocamento na Figura 3.44 e o padrão de fissuração na Figura 3.45.

As curvas obtidas das análises demonstram resultados coerentes entre si. Nota-se que o modelo com dano conjugado descreve uma curva sempre inferior à curva do modelo que possui somente dano à tração. O modelo com dano à tração apresenta maior instabilidade com uma queda brusca na reação e um pico no final da análise.

Figura 3.44.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1T3 alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.

O exemplo numérico C1T3 apresenta um padrão de fissuração similar nas duas análises. Inicialmente a linha de cimento é danificada na parte superior e inferior do ósteon. Então, surge uma fissura no entalhe que se propaga em direção ao ósteon. Antes dessa fissura o alcançar, surge uma descontinuidade na matriz próxima ao ósteon do lado direito. No final, as fissuras se conectam e dividem a geometria. Entretanto, nota-se que, no modelo com dano à tração (DT), uma pequena porção da matriz intersticial inferior continua conectada ao ósteon.

Figura 3.45.: Padrão de fissuração do modelo C1T3 com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.

O campo de deslocamentos é ilustrado na Figura 3.46, percebe-se que o ósteon continuou conectado às duas porções da matriz intersticial quando se usou o modelo de dano à tração na linha de cimento.

Figura 3.46.: Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. Os modelos estão coloridos de acordo com a magnitude dos deslocamentos verticais que se estende de 0 (azul) até $3,5\mu m$ (vermelho). O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem retirada de Gustafsson et al., 2019).

3.5.2. Influência da linha de cimento

As propriedades mecânicas dos materiais estão descritas na Tabela 2.3 para o modelo que não considera a linha de cimento e na Tabela 2.2 para o modelo que considera as propriedades da linha de cimento. A Figura 3.47 ilustra as reações dos modelos com e sem a linha de cimento. A curva do modelo que não considera a linha de cimento apresenta comportamento que diverge de quando se considera a linha de cimento: inicialmente, há uma relação linear, então a curva descreve uma parábola que atinge a carga de pico e, em seguida, apresenta o decaimento na resposta da estrutura. O modelo sem a linha de cimento (sem LC) se apresenta sempre com uma reação maior para o mesmo deslocamento aplicado.

Figura 3.47.: Gráfico força-deslocamento do modelo C1T3 alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.

A divergência entre as respostas é consequência do padrão de fissuração (Figura 3.48). A fissura proveniente do entalhe não divide a estrutura em duas porções no modelo sem a linha de cimento (sem LC). Assim, surge uma fissura próximo a base onde se restringiu os deslocamentos verticais. Portanto, destoa do padrão de fissuração visto no modelo que considera a linha de cimento e do que se espera para esse exemplo numérico.

Figura 3.48.: Padrão de fissuração do modelo C1T3 com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 10 vezes.

3.6. CMT

Este modelo foi inicialmente elaborado em Abdel-Wahab et al. (2012) com o objetivo de estudar a influência da presença da linha de cimento na propagação de fissuras. Entretanto, o autor não consegue atingir o padrão de fissuração esperado, visto que as fissuras atravessam os ósteons.

3.6.1. Influência do modelo de dano

A malha de elementos finitos do modelo CMT é detalhada na Figura 2.17, a qual é discretizada em elementos finitos de $10\mu m$ de tamanho. As propriedades mecânicas associadas aos materiais são da Tabela 2.2. O comportamento da estrutura é ilustrado na Figura 3.49 e o padrão de distribuição de fissuras na Figura 3.50.

A resposta estrutural de ambos os modelos é inicialmente similar, mas o modelo com dano conjugado na linha de cimento apresenta uma mudança na tangente antes do modelo de dano à tração. A carga pico do modelo de dano à tração é aproximadamente 2,7N enquanto que, com dano conjugado, a estrutura estabiliza por volta de 2,4N. A resposta estrutural decresce com uma maior inclinação quando há somente o dano à tração na interface entre ósteons e matriz, esse fenômeno pode ser explicado pela distância percorrida pela fissura nos dois modelos. Em nenhuma análise, a fissura divide a geometria por completo ou há fissuração dentro dos ósteons.

Figura 3.49.: Gráfico força-deslocamento do modelo CMT alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano à tração e cisalhamento.

Na Figura 3.50, o padrão de fissuração do exemplo numérico com os modelos de dano à tração (DT) e conjugado (DC) são detalhados no instante em que o deslocamento aplicado é de 2; 3 e 10 μ m. As fissuras se iniciam nos entalhes e percorrem a matriz intersticial em direção aos ósteons mais próximos. Com o aumento do deslocamento aplicado, a fissura percorre de ósteon para ósteon sempre se propagando pela linha de cimento, entretanto no modelo DC surge uma fissura na interface dos ósteons posicionados mais à esquerda devido o deslizamento da matriz em relação ao ósteon. No final da simulação, as fissuras provenientes dos entalhes se aproximam através de caminhos diferentes: as fissuras se propagam ortogonalmente ao deslocamento aplicado com o modelo de dano à tração (DT), porém no conjugado (DC) elas alcançam os ósteons localizados a esquerda que tiveram suas linhas de cimento danificadas devido o cisalhamento.

Figura 3.50.: Padrão de fissuração do modelo CMT com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 2 e 3 μm .

Os campos de deslocamentos expostos nas Figura 3.51 e Figura 3.52 fornecem mais informações e detalhes sobre a descontinuidade dos deslocamentos, facilitando a visualização das fissuras.

Figura 3.51.: Visualização do campo de deslocamentos horizontais no final da análise do modelo numérico CMT com dano à tração.

Figura 3.52.: Visualização do campo de deslocamentos horizontais no final da análise do modelo numérico CMT com dano conjugado.

A análise numérica original, ver Figura 3.53, não capta a influência da linha de cimento na processo de fissuração da estrutura, assim, diverge das 2 análises numéricas ao apresentar fissuras dentro dos ósteons.

Figura 3.53.: Comparação do padrão de fissuração das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original (imagem retirada de Abdel-Wahab et al., 2012).

3.6.2. Influência da linha de cimento

As propriedades mecânicas dos materiais estão descritas na Tabela 2.3 para o modelo que não considera a linha de cimento e na Tabela 2.2 para o modelo que considera as propriedades da linha de cimento. O comportamento da estrutura, Figura 3.54, ilustra que a carga de pico no modelo sem a linha de cimento (sem LC) é mais do que 2 vezes maior do que quando usado as propriedades da linha de cimento (com LC). Nota-se que, quando a linha de cimento é desconsiderada, a tangente do curva permanece próxima de constante até a carga pico e que a perda de reação é mais acentuada.

Figura 3.54.: Gráfico força-deslocamento do modelo CMT alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.

O padrão de fissuração, Figura 3.55, obtido na análise numérica do exemplo CMT sem a linha de cimento apresenta uma distribuição diferente do modelo com a linha. Evidencia-se que o deslizamento da matriz intersticial em relação aos osteons não desempenha um papel relevante na distribuição de fissuras do modelo sem a linha de cimento (sem LC), visto que as fissuras percorrem ortogonalmente ao deslocamento prescrito e se aproximam de dividir a estrutura em dois blocos. Nenhuma das fissuras atravessa os ósteons.

Figura 3.55.: Padrão de fissuração do modelo CMT com a linha de cimento associada (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 2 e 3 μm .

3.7. EMF

O ensaio realizado com o osso cortical apresenta uma geometria irregular e uma variação nas propriedades dos materiais que são difíceis de serem reproduzidas. Por isso, a modelagem numérica desta estrutura atinge um nível de dificuldade acima dos modelos conceituais e funciona como um parâmetro (*benchmark*) para o modelo numérico por ter resultados experimentais. Espera-se que a fissura se propague a

partir do entalhe pela matriz e, quando possível, pela linha de cimento em direção ao ponto de aplicação da carga.

3.7.1. Influência do modelo de dano

A Tabela 2.2 contém os valores das propriedades mecânicas usadas. O comportamento mecânico da estrutura é descrito no gráfico força-deslocamento na Figura 3.56 e o padrão de fissuração na Figura 3.57.

Os modelos numéricos apresentam comportamento similares até a carga pico, então descrevem a perda na reação com curvas diferentes. O modelo de dano conjugado apresenta uma queda na reação mais sutil até o momento que cai abruptamente para, em seguida, se estabilizar, enquanto que o modelo com dano à tração, embora apresente leves instabilidades, descreve uma queda na reação antes e mais suave.

Figura 3.56.: Gráfico força-deslocamento do modelo EMF alterando o modelo de dano associado a linha de cimento: dano à tração e dano conjugado.

O padrão de fissuração das análises diverge entre os modelos de dano, o deslizamento, causado pela deterioração causada pelo dano cisalhante, entre ósteons e matriz intersticial modifica a propagação de fissuras. Nas duas análises, as fissuras se iniciam na matriz intersticial próximo ao entalhe e nas linhas de cimento dos 3 ósteons mais próximos ao entalhe. A carga pico é alcançada no momento que o ósteon que se estende de uma aresta até a outra é dividido por uma fissura. Em ambos os modelos, a fissura proveniente do entalhe não alcança este ósteon. Entre-

tanto, a fissura que surge acima percorre caminhos diferentes explicando, assim, os diferentes comportamentos após a carga pico.

Figura 3.57.: Padrão de fissuração do modelo EMF com a linha de cimento associada a um modelo que captura o dano à tração (DT) e o dano conjugado (DC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 14,95 e 20,15µm.

O padrão de fissuração do trabalho original descreve a fissura se propagando do entalhe até o topo da seção. Nota-se que o caminho que a fissura percorre se aproxima das respostas numéricas: a fissura só atravessa o osteon que está disposto horizontalmente e tende a percorrer a linha de cimento quando possível. Sendo que o modelo

com dano conjugado descreve uma distribuição de fissuras coerente com o modelo experimental.

Figura 3.58.: Comparação dos campos de deslocamento das análises numéricas realizadas neste estudo com o trabalho original. A coloração nas geometrias detalha o deslocamento horizontal. O vermelho na imagem à direita representa a fissura (imagem adaptada de Budyn e Hoc, 2010).

3.7.2. Influência da linha de cimento

As Tabela 2.2 e Tabela 2.3 contêm os valores das propriedades mecânicas usadas. A Figura 3.59 ilustra as reações dos modelos com (com LC) e sem a linha de cimento (sem LC). As curvas apresentadas possuem comportamentos inicialmente semelhantes que divergem com o desenvolvimento da análise. O modelo sem a linha de cimento apresenta uma carga de pico maior; entretanto, contém uma queda brusca na reação e, em seguida, um decaimento exponencial na resposta.

Figura 3.59.: Gráfico força-deslocamento do modelo EMF alterando as propriedades mecânicas da linha de cimento.

O padrão de fissuração do modelo sem linha de cimento se distingue por não apresentar dano nas interfaces entre ósteons e matriz óssea antes que a fissura proveniente do entalhe as alcance. Nota-se também que somente a fissura do entalhe é visível e esta se propaga até o topo da geometria por uma caminho diferente do modelo que considera as propriedades da linha de cimento. Nota-se, também, que o modelo sem a linha de cimento apresenta uma fissura no ósteon que está localizado no centro.

Figura 3.60.: Padrão de fissuração do modelo EMF com a linha de cimento (C LC) e sem a linha de cimento (S LC). Os deslocamentos estão aumentados em 5 vezes para o deslocamento prescrito de 14,95 e 20,15 μm .

4. Conclusão

Neste trabalho, um modelo numérico da microestrutura do osso cortical é analisado via método dos elementos finitos usando a técnica de fragmentação de malha. O comportamento dos elementos de interface é descrito por um modelo de dano, capaz de descrever a falha devido o cisalhamento e à tração, baseado na teoria da mecânica do dano contínuo. Realiza-se simulações numéricas em 6 exemplos com representações conceituais e 1 baseado em uma imagem da microestrutura do osso cortical. Estuda-se a influência do refinamento de malha e do número de passos de carregamento. Além disso, é investigada a influência do deslizamento tangencial na interface entre ósteons e matriz óssea (linha de cimento) através da consideração ou não das tensões de cisalhamento atuantes nessas regiões. Por fim, é investigada a influência das propriedades mecânicas adotadas para a linha de cimento.

Os resultados obtidos através do estudo de convergência de malha demonstram que o refinamento da malha é um fator relevante na resposta da estrutura visto que influencia no comportamento após a iniciação de fissuras, como visto em Figura 3.4 e Figura 3.21. Contudo, os padrões de fissuração obtidos são coerentes, porém apresentam certa influência do refinamento, como em Figura 3.5 e Figura 3.22. O número de passos também se destaca como um fator que influencia na resposta mecânica dos modelos, entretanto, tanto nos padrões de fissuração quanto nas curvas força-deslocamento, o resultado tende a convergir com o aumento do número de passos de carregamento. Isto é uma característica própria do método de integração Impl-Ex. Os resultados convergiram para análises com número de passos superior a 5000.

O modelo de dano associado à interface entre matriz e ósteon (linha de cimento) interfere no comportamento da estrutura, principalmente quando o cisalhamento possui elevado destaque na falha estrutural. Os modelos numéricos apresentam carga de pico superior quando se utiliza o modelo de dano à tração, este fenômeno é explicado através dos padrões de fissuração obtidos, uma vez que o modelo de dano conjugado apresenta além da abertura e fechamento de fissuras o deslizamento

tangencial entre ósteons e matriz óssea. Nos exemplos C2F, C1T2 e C1T3, o modo I de falha conduz a falha estrutural e, assim, a resposta obtida usando os dois modelos de dano é similar tanto em suas curvas força-deslocamento quanto nos padrões de fissuração obtidos. Nos exemplos C1T1, CMT e EMF, apesar das curvas se assemelharem, os padrões de fissuração apresentam divergência causados pelo deslizamento da linha de cimento. O modelo C1F apresenta curvas e distribuição de fissuras divergentes mostrando uma grande influência do modelo de dano na resposta da estrutura. Portanto, simular o modo II de falha na linha de cimento se mostra como um fator relevante para a simulação da fissuração na microestrutura do osso cortical, visto que, quando considerado, o modelo numérico é capaz de reproduzir o deslizamento entre ósteons e matriz. Este resultado é consonante com a conclusão de Gustafsson et al. (2019).

O estudo da influência das propriedades mecânicas associadas à linha de cimento demonstrou que o modelo numérico é sensível às mudanças de propriedades nesta interface ao apresentar mudanças no comportamento da estrutura e padrões de fissurações divergentes. Esta conclusão está de acordo com estudos numéricos (Nobakhti et al., 2014) e experimentais (Budyn e Hoc, 2010) disponíveis na literatura.

Por fim destaca-se que o modelo numérico baseado na técnica de fragmentação de malha de elementos finitos proposta por Manzoli et al. (2016) é capaz de descrever o processo de fissuração na microestrutura do osso cortical. Esta metodologia aliada ao esquema de integração Impl-Ex demonstrou ser promissora para modelagem de múltiplas fissuras, apresentando resultados coerentes aos disponíveis na literatura para estrutura estudada.

4.1. Recomendações para pesquisas futuras

O recurso computacional exigido pela técnica de fragmentação de malha é relativamente alto. Ao fragmentar uma malha de elementos finitos, nós e elementos são acrescentados e, por isso, a análise se torna computacionalmente mais exigente. O tempo das análises não é contabilizado devido à imprecisão deste parâmetro, visto que o computador utilizado neste trabalho (com processador Intel i7-7700HQ 2.8GHz) realizava outras funções que afetavam seu desempenho. Entretanto, calculando-se o tempo em situações próximas das ideais, chega-se em uma estimativa de mais de uma semana para que as análises mais pesadas fossem finalizadas enquanto que as mais leves duravam em torno de 1 dia. Portanto, recomenda-se

o uso de artifícios que otimizem as análises numéricas como a utilização do Pardiso (De Coninck et al., 2016; Verbosio et al., 2017; Kourounis et al., 2018), pacote de alta performance para solução de grandes sistemas simétricos e não simétricos, e/ou a realização das análises através do uso de malhas adaptativas de elementos finitos (Ortiz e Quigley, 1991; Rodrigues et al., 2017).

Outro processo que afeta a rapidez das análises e a exigência computacional é a geração do arquivo de saída. As informações de força e deslocamento dos nós com deslocamentos prescrito são coletadas em todos os passos e não afetam o tempo da análise de maneira perceptível, porém o armazenamento das informações sobre o campo de deslocamento, campo de tensão, campo de deformações e outros dados exigem uma parcela considerável do processamento e de espaço disponível na memória, por isso que não se armazena todas as informações de cada passo. Recomenda-se o uso de arquivos que sejam escritos em maiores intervalos (se possível), a otimização da função que gera o arquivo de saída e o uso de SSD (*solid state drive*), visto que possui velocidades muito superiores aos da tecnologia mais disseminada (disco rígido). A Figura 4.1 ilustra o tamanho dos arquivos, considerando refinamento descrito na Tabela 2.4, 5000 passos e armazenamento de informações a cada 50 passos.

Figura 4.1.: Tamanho dos arquivos de saída gerados pelo solver de elementos finitos nas análises de cada modelo.

Quando o processo de fissuração se inicia, os elementos finitos com alta razão de aspecto vão progressivamente degradando até se comportarem aproximadamente como vazios estruturais.

Este trabalho se posiciona como um primeiro passo para o estudo do comportamento mecânico do osso cortical. O próximo passo nessa linha de pesquisa é aplicar a técnica de fragmentação de malha em modelos tridimensionais da microestrutura do

osso cortical para captar fenômenos característicos de modelos em 3D. Finalmente, no futuro, desenvolver modelos multiescala que consigam descrever a influência das menores escalas na macroescala e que levem em consideração a geometria e as propriedades mecânicas extraídas a partir de uma tomografia computadorizada.

Referências Bibliográficas

- Abdel-Wahab, A. A.; Alam, K.; Silberschmidt, V. V. Analysis of anisotropic viscoelastoplastic properties of cortical bone tissues. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 4(5):807 – 820, 2011. ISSN 1751-6161. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2010.10.001>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1751616110001396>. Special Issue on Natural Materials / Papers from the Third International Conference on the Mechanics of Biomaterials and Tissues.
- Abdel-Wahab, A. A.; Maligno, A. R.; Silberschmidt, V. V. Micro-scale modelling of bovine cortical bone fracture: Analysis of crack propagation and microstructure using x-fem. *Computational Materials Science*, 52(1):128 – 135, 2012. ISSN 0927-0256. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.01.021>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025611000450>. Proceedings of the 20th International Workshop on Computational Mechanics of Materials - IWCMM 20.
- Amorim, P.; Moraes, T.; Silva, J.; Pedrini, H. Invesalius: An interactive rendering framework for health care support. In Bebis, G.; Boyle, R.; Parvin, B.; Koracin, D.; Pavlidis, I.; Feris, R.; McGraw, T.; Elendt, M.; Kopper, R.; Ragan, E.; Ye, Z.; Weber, G., editors, *Advances in Visual Computing*, pages 45–54, Cham, 2015. Springer International Publishing. ISBN 978-3-319-27857-5.
- Aoubiza, B.; Crolet, J.; Meunier, A. On the mechanical characterization of compact bone structure using the homogenization theory. *Journal of Biomechanics*, 29(12):1539 – 1547, 1996. ISSN 0021-9290. doi: [https://doi.org/10.1016/S0021-9290\(96\)80005-4](https://doi.org/10.1016/S0021-9290(96)80005-4). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929096800054>.
- Arango Villegas, C. *Study of the mechanical behavior of cortical bone microstructure by the finite element method*. PhD thesis, Universitat Politècnica de València, 2016.

- Aziziyeh, R.; Amin, M.; Habib, M.; Perlaza, J. G.; Szafranski, K.; McTavish, R. K.; Disher, T.; Lüdke, A.; Cameron, C. The burden of osteoporosis in four latin american countries: Brazil, mexico, colombia, and argentina. *Journal of Medical Economics*, 22(7):638–644, 2019. doi: 10.1080/13696998.2019.1590843. URL <https://doi.org/10.1080/13696998.2019.1590843>. PMID: 30835577.
- Boruah, S.; Subit, D. L.; Paskoff, G. R.; Shender, B. S.; Crandall, J. R.; Salzar, R. S. Influence of bone microstructure on the mechanical properties of skull cortical bone a combined experimental and computational approach. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 65:688 – 704, 2017. ISSN 1751-6161. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2016.09.041>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1751616116303496>.
- Boyce, T. M.; Fyhrie, D. P.; Glotkowski, M. C.; Radin, E. L.; Schaffler, M. B. Damage type and strain mode associations in human compact bone bending fatigue. *Journal of Orthopaedic Research*, 16(3):322–329, 1998. doi: 10.1002/jor.1100160308. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jor.1100160308>.
- Brekelmans, W. A.; Poort, H. W.; Sloof, T. J. A new method to analyze the mechanical behavior of skeletal parts. *Acta Orthopaedica Scandinavica*, 43:301–317, 1972. doi: <http://dx.doi.org/10.3109/17453677208998949>.
- Budyn, E.; Hoc, T. Multiple scale modeling for cortical bone fracture in tension using x-fem. *European Journal of Computational Mechanics*, 16(2):213–236, 2007. doi: 10.3166/remn.16.213-236. URL <https://doi.org/10.3166/remn.16.213-236>.
- Budyn, E.; Hoc, T. Analysis of micro fracture in human haversian cortical bone under transverse tension using extended physical imaging. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 82(8):940–965, 2010. doi: 10.1002/nme.2791. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.2791>.
- Burczyński, T.; Kuś, W.; Brodacka, A. Multiscale modeling of osseous tissues [modelowanie wieloskalowe tkanki kostnej]. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 48(4):855–870, 2010. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-78649826426&partnerID=40&md5=573ee38bf88641a5211084488093de60>. cited By 14.
- Burr, D. B.; Schaffler, M. B.; Frederickson, R. G. Composition of the cement line and its possible mechanical role as a local interface in human compact bone. *Journal of Biomechanics*, 21(11):939 – 945, 1988. ISSN 0021-9290. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-9290\(88\)90045-5](https://doi.org/10.1016/0021-9290(88)90045-5).

- doi.org/10.1016/0021-9290(88)90132-7. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021929088901327>.
- Chapra, S. C. *Métodos numéricos aplicados com matlab para engenheiros e cientistas*. McGraw Hill, 2013.
- Cowin, S. C., editor. *Bone Mechanics Handbook*. Taylor & Francis Group, 2nd edition, 2001. ISBN 9781420036589.
- Currey, J. D. The structure and mechanics of bone. *Journal of Materials Science*, 47(1):41–54, Jan 2012. ISSN 1573-4803. doi: 10.1007/s10853-011-5914-9. URL <https://doi.org/10.1007/s10853-011-5914-9>.
- De Coninck, A.; De Baets, B.; Kourounis, D.; Verbosio, F.; Schenk, O.; Maenhout, S.; Fostier, J. Needles: Toward large-scale genomic prediction with marker-by-environment interaction. 203(1):543–555, 2016. ISSN 0016-6731. doi: 10.1534/genetics.115.179887. URL <http://dx.doi.org/10.1534/genetics.115.179887>.
- Donaldson, F.; Ruffoni, D.; Schneider, P.; Levchuk, A.; Zwahlen, A.; Pankaj, P.; Müller, R. Modeling microdamage behavior of cortical bone. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, 13(6):1227–1242, Nov 2014. ISSN 1617-7940. doi: 10.1007/s10237-014-0568-6. URL <https://doi.org/10.1007/s10237-014-0568-6>.
- Fish, J.; Belytschko, T. *A First Course in Finite Elements*. John Wiley and Sons, Ltd, 2007.
- Giner, E.; Belda, R.; Arango, C.; Vercher-Martínez, A.; Tarancón, J. E.; Fuenmayor, F. J. Calculation of the critical energy release rate G_c of the cement line in cortical bone combining experimental tests and finite element models. *Engineering Fracture Mechanics*, 184:168 – 182, 2017. ISSN 0013-7944. doi: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2017.08.026>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013794417305878>.
- Gold, D. T. The nonskeletal consequences of osteoporotic fractures: Psychologic and social outcomes. *Rheumatic Disease Clinics of North America*, 27(1):255 – 262, 2001. ISSN 0889-857X. doi: [https://doi.org/10.1016/S0889-857X\(05\)70197-6](https://doi.org/10.1016/S0889-857X(05)70197-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0889857X05701976>.
- Gottesman, T.; Hashin, Z. Analysis of viscoelastic behaviour of bones on the basis of microstructure. *Journal of Biomechanics*, 13(2):89 – 96, 1980. ISSN 0021-

9290. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-9290\(80\)90182-7](https://doi.org/10.1016/0021-9290(80)90182-7). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021929080901827>.
- Gustafsson, A.; Khayyeri, H.; Wallin, M.; Isaksson, H. An interface damage model that captures crack propagation at the microscale in cortical bone using xfem. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 90:556–565, 2019. ISSN 1751-6161. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.09.045>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1751616118310543>.
- Hamed, E.; Jasiuk, I. Multiscale damage and strength of lamellar bone modeled by cohesive finite elements. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 28:94 – 110, 2013. ISSN 1751-6161. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2013.05.025>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1751616113001963>.
- Hansbo, A.; Hansbo, P. A finite element method for the simulation of strong and weak discontinuities in solid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(33):3523 – 3540, 2004. ISSN 0045-7825. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.041>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782504000507>.
- Heripre, E.; Dexet, M.; Crepin, J.; Gélebart, L.; Roos, A.; Bornert, M.; Caldemaison, D. Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *International Journal of Plasticity*, 23(9):1512–1539, January 2007. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00149310>.
- Heřt, J.; Fiala, P.; Petrtýl, M. Osteon orientation of the diaphysis of the long bones in man. *Bone*, 15(3):269 – 277, 1994. ISSN 8756-3282. doi: [https://doi.org/10.1016/8756-3282\(94\)90288-7](https://doi.org/10.1016/8756-3282(94)90288-7). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/8756328294902887>.
- Hogan, H. A. Micromechanics modeling of haversian cortical bone properties. *Journal of Biomechanics*, 25(5):549 – 556, 1992. ISSN 0021-9290. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-9290\(92\)90095-I](https://doi.org/10.1016/0021-9290(92)90095-I). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002192909290095I>.
- Huiskes, R.; Chao, E. Y. S. A survey of finite element analysis in orthopedic biomechanics: The first decade. *Journal of Biomechanics*, 16(6):385 – 409, 1983. ISSN 0021-9290. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-9290\(83\)90072-6](https://doi.org/10.1016/0021-9290(83)90072-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021929083900726>.

- Junqueira, L. C.; Carneiro, J. *Histologia Básica*. Guanabara Koogan S.A., décima edition, 2013.
- Kalache, A. Envelhecimento populacional no brasil: uma realidade nova. *Cad. Saúde Pública [online]*, 3:217 – 220, 09 1987. ISSN 0102-311X. doi: <http://dx.doi.org/10.1590/S0102-311X1987000300001>. URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0102-311X1987000300001&nrm=iso.
- Kanis, J. A.; Johnell, O. Requirements for dxa for the management of osteoporosis in europe. *Osteoporosis International*, 16(3):229–238, Mar 2005. ISSN 1433-2965. doi: 10.1007/s00198-004-1811-2. URL <https://doi.org/10.1007/s00198-004-1811-2>.
- Koch, J. C. The laws of bone architecture. *American Journal of Anatomy*, 21(2): 177–298, 1917. doi: 10.1002/aja.1000210202. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aja.1000210202>.
- Koester, K. J.; Ager III, J. W.; Ritchie, R. O. The true toughness of human cortical bone measured with realistically short cracks. *Nature Materials*, 7:672, June 2008. URL <https://doi.org/10.1038/nmat2221>.
- Kourounis, D.; Fuchs, A.; Schenk, O. Towards the next generation of multiperiod optimal power flow solvers. *IEEE Transactions on Power Systems*, PP(99):1–10, 2018. ISSN 0885-8950. doi: 10.1109/TPWRS.2017.2789187. URL <https://doi.org/10.1109/TPWRS.2017.2789187>.
- Li, S.; Abdel-Wahab, A.; Demirci, E.; Silberschmidt, V. V. Fracture process in cortical bone: X-fem analysis of microstructured models. *International Journal of Fracture*, 184(1):43–55, Nov 2013. ISSN 1573-2673. doi: 10.1007/s10704-013-9814-7. URL <https://doi.org/10.1007/s10704-013-9814-7>.
- Loures, M. A. R.; Zerbini, C. A. F.; Danowski, J. S.; Pereira, R. M. R.; Moreira, C.; de Paula, A. P.; Castro, C. H. M.; Szejnfeld, V. L.; Mendonça, L. M. C.; Radominiski, S. C.; Bezerra, M. C.; Simões, R.; Bernardo, W. M. Diretrizes da sociedade brasileira de reumatologia para diagnóstico e tratamento da osteoporose em homens. *Revista Brasileira de Reumatologia*, 57:497 – 514, 2017. ISSN 0482-5004. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rbr.2017.06.002>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0482500417301808>.
- Manzoli, O.; Gamino, A.; Rodrigues, E.; Claro, G. Modeling of interfaces in two-dimensional problems using solid finite elements with high aspect ratio. *Computers and Structures*, 94-95(0):70–82, 2012. ISSN 0045-7949. doi: 10.

- 1016/j.compstruc.2011.12.001. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045794911002938>.
- Manzoli, O.; Sánchez, M.; Maedo, M.; Hajjat, J.; Guimarães, L. J. N. An orthotropic interface damage model for simulating drying processes in soils. *Acta Geotechnica*, 13(5):1171–1186, October 2018. ISSN 1861-1133. URL <https://doi.org/10.1007/s11440-017-0608-3>.
- Manzoli, O. L.; Maedo, M. A.; Bitencourt, L. A.; Rodrigues, E. A. On the use of finite elements with a high aspect ratio for modeling cracks in quasi-brittle materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 153:151–170, 2016.
- Marco, M.; Belda, R.; Miguélez, M. H.; Giner, E. A heterogeneous orientation for crack modelling in cortical bone using phantom-node approach. *Finite Element in Analysis and Design*, 146:107–117, 2018. doi: <https://doi.org/10.1016/j.finel.2018.04.009>.
- MATLAB. *version 9.40.0 (R2018a)*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2018.
- Melendo, A.; Coll, A.; Pasenau, M.; Escolano, E.; Monros, A. www.gidhome.com, 2016. [Online; accessed Jun-2016].
- Nalla, R.; Kruzic, J.; Kinney, J.; Balooch, M.; Ager, J.; Ritchie, R. Role of microstructure in the aging-related deterioration of the toughness of human cortical bone. *Materials Science and Engineering: C*, 26(8):1251 – 1260, 2006. ISSN 0928-4931. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2005.08.021>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0928493105002249>. Proceedings of the First TMS Symposium on Biological Materials Science.
- Nobakhti, S.; Limbert, G.; Thurner, P. J. Cement lines and interlamellar areas in compact bone as strain amplifiers - contributors to elasticity, fracture toughness and mechanotransduction. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 29:235 – 251, 2014. ISSN 1751-6161. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2013.09.011>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1751616113003123>.
- O'Brien, F. J.; Taylor, D.; Lee, T. C. The effect of bone microstructure on the initiation and growth of microcracks. *Journal of Orthopaedic Research*, 23(2):475 – 480, 2005. ISSN 0736-0266. doi: <https://doi.org/10.1016/j.orthres.2004.08.005>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0736026604001743>.

- Oliver, J.; Cervera, M.; Manzoli, O. L. Strong discontinuities and continuum plasticity models: the strong discontinuity approach. *Int. J. of Plasticity*, 15(3): 319–351, 1999.
- Oliver, J.; Huespe, A.; Pulido, M.; Chaves, E. From continuum mechanics to fracture mechanics: the strong discontinuity approach. *Engineering Fracture Mechanics*, 69(2):113–136, 2002. ISSN 0013-7944. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0013-7944\(01\)00060-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0013-7944(01)00060-1). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013794401000601>.
- Oliver, J.; Huespe, A.; Blanco, S.; Linero, D. Stability and robustness issues in numerical modeling of material failure with the strong discontinuity approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(52):7093–7114, 2006. ISSN 0045-7825. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2005.04.018>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782505003920>. Computational Modelling of Concrete.
- Oliver, J.; Huespe, A.; Cante, J. An implicit/explicit integration scheme to increase computability of non-linear material and contact/friction problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(21-24):1865–1889, 2008. ISSN 0045-7825. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2007.11.027>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782507004756>.
- Ortiz, M.; Quigley, J. J. Adaptive mesh refinement in strain localization problems. *Computer Methods in Appl. Mech. and Engng.*, 90:781–804, 1991.
- Prazeres, P. G. C.; Bitencourt Jr., L. A. G.; Bittencourt, T. N.; Manzoli, O. L. A modified implicit-explicit integration scheme: an application to elastoplasticity problems. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 38(1):151–161, 2016. ISSN 1678-5878. doi: 10.1007/s40430-015-0343-3. URL <http://dx.doi.org/10.1007/s40430-015-0343-3>.
- Prendergast, P. J. Finite element models in tissue mechanics and orthopaedic implant design. *Clinical Biomechanics*, 12:343–366, 1997. doi: [https://doi.org/10.1016/S0268-0033\(97\)00018-1](https://doi.org/10.1016/S0268-0033(97)00018-1).
- Réthoré, J.; Hild, F.; Roux, S. Extended digital image correlation with crack shape optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 73(2): 248–272, 2008. doi: 10.1002/nme.2070. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.2070>.

- Rho, J.-Y.; Currey, J.; Zioupos, P.; Pharr, G. The anisotropic young's modulus of equine secondary osteones and interstitial bone determined by nanoindentation. *Journal of Experimental Biology*, 204(10):1775–1781, 2001. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0035746185&partnerID=40&md5=8842c87097766ae930d99450cb2a5a09>. cited By 56.
- Rho, J.-Y.; Kuhn-Spearing, L.; Zioupos, P. Mechanical properties and the hierarchical structure of bone. *Medical Engineering & Physics*, 20(2):92 – 102, 1998. ISSN 1350-4533. doi: [https://doi.org/10.1016/S1350-4533\(98\)00007-1](https://doi.org/10.1016/S1350-4533(98)00007-1). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1350453398000071>.
- Rodrigues, E. A.; Manzoli, O. L.; Bitencourt Jr, L. A.; Bittencourt, T. N. 2D mesoscale model for concrete based on the use of interface element with a high aspect ratio. *International Journal of Solids and Structures*, 94:112–124, 2016.
- Rodrigues, E. A.; Manzoli, O. L.; Bitencourt Jr., L. A. G.; Bittencourt, T. N.; Sánchez, M. An adaptive concurrent multiscale model for concrete based on coupling finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017. ISSN 0008-8846. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2017.08.048>.
- Rohatgi, A. *WebPlotDigitizer*. San Francisco, California, USA, 4.2 edition, April 2019. URL <https://automeris.io/WebPlotDigitizer>.
- Rydell, M. Forces acting on the femoral head. *Acta Orthopaedica Scandinavica*, pages 88–96, 1966.
- Sánchez, M.; Manzoli, O.; Guimarães, L. Modeling 3-D desiccation soil crack networks using a mesh fragmentation technique. *Computers and Geotechnics*, 62(0):27–39, 2014. ISSN 0266-352X. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.compgeo.2014.06.009>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0266352X14001177>.
- Schileo, E.; Taddei, F.; Malandrino, A.; Cristofolini, L.; Viceconti, M. Subject-specific finite element models can accurately predict strain levels in long bones. *Journal of Biomechanics*, 40(13):2982 – 2989, 2007. ISSN 0021-9290. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jbiomech.2007.02.010>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929007000711>.
- Skedros, J. G.; Holmes, J. L.; Vajda, E. G.; Bloebaum, R. D. Cement lines of secondary osteons in human bone are not mineral-deficient: New data in a historical perspective. *The Anatomical Record Part A: Discoveries in Molecular, Cellular,*

- and Evolutionary Biology*, 286A(1):781–803, 2005. doi: 10.1002/ar.a.20214. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ar.a.20214>.
- Sugimoto, Shin-ichiro; Takei, A.; Ogino, M. Finite element analysis with tens of billions of degrees of freedom in a high-frequency electromagnetic field. *Mechanical Engineering Letters*, 3:16–00667–16–00667, 2017. doi: 10.1299/mel.16-00667.
- Sutton, M. A.; Turner, J. L.; Bruck, H. A.; Chae, T. A. Full-field representation of discretely sampled surface deformation for displacement and strain analysis. *Experimental Mechanics*, 31(2):168–177, Jun 1991. ISSN 1741-2765. doi: 10.1007/BF02327571. URL <https://doi.org/10.1007/BF02327571>.
- Tayer, A. D. N. Modelagem numérica de juntas de argamassa em estruturas de alvenaria utilizando elementos finitos com alta razão de aspecto. Master thesis, Universidade de São Paulo, 2018.
- Taylor, D.; Prendergast, P. J. A model for fatigue crack propagation and remodelling in compact bone. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine*, 211(5):369–375, 1997. doi: 10.1243/0954411971534494. URL <https://doi.org/10.1243/0954411971534494>. PMID: 9427832.
- Taylor, D.; Hazenberg, J. G.; Lee, T. C. Living with cracks: Damage and repair in human bone. *Nature Materials*, 6:263, April 2007. URL <http://dx.doi.org/10.1038/nmat1866>.
- Ural, A.; Mischinski, S. Multiscale modeling of bone fracture using cohesive finite elements. *Engineering Fracture Mechanics*, 103:141 – 152, 2013. ISSN 0013-7944. doi: <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2012.05.008>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013794412002032>. Advances in Failure Assessment Using Fracture and Damage Mechanics.
- Vaz, L. E. *Metodo dos Elementos Finitos em Analise de Estruturas*. Elsevier, 2011.
- Verbosio, F.; Coninck, A. D.; Kourounis, D.; Schenk, O. Enhancing the scalability of selected inversion factorization algorithms in genomic prediction. *Journal of Computational Science*, 22(Supplement C):99 – 108, 2017. ISSN 1877-7503. URL <https://doi.org/10.1016/j.jocs.2017.08.013>.
- Vercher, A.; Giner, E.; Arango, C.; Tarancón, J. E.; Fuenmayor, F. J. Homogenized stiffness matrices for mineralized collagen fibrils and lamellar bone using unit cell finite element models. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, 13

(2):437–449, Apr 2014. ISSN 1617-7940. doi: 10.1007/s10237-013-0507-y. URL <https://doi.org/10.1007/s10237-013-0507-y>.

Weindereich, F. *Mollendorf Handbuch der mikroskopischen Anatomie des Menschen*, volume 2, chapter Das knorpelgewebe, pages 391–520. Berlin: Verlag Julius Springer, 1930.

Zysset, P. K.; Dall’Ara, E.; Varga, P.; Pahr, D. H. Finite element analysis for prediction of bone strength. *BoneKEy Reports* 2, (386), 2013. doi: 10.1038/bonekey.2013.120.

Zysset, P.; Curnier, A. A 3d damage model for trabecular bone based on fabric tensors. *Journal of Biomechanics*, 29(12):1549 – 1558, 1996. ISSN 0021-9290. doi: [https://doi.org/10.1016/S0021-9290\(96\)80006-6](https://doi.org/10.1016/S0021-9290(96)80006-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929096800066>.

A. Mesh Fragmentation Software (MeFS)

A fragmentação de malha de elementos finitos é realizada no aplicativo Mesh Fragmentation Software (MeFS) construído no ambiente App Designer do MATLAB®. O programa carrega arquivos de texto com extensão ".mfl", que são os arquivos de entrada do solver de elementos finitos usados neste trabalho, e gera arquivos de texto com a nova malha de elementos finitos e a nova matriz de conectividade. A atualização do arquivo de entrada do solver é realizada manualmente pelo usuário.

Figura A.1.: Programa MeFS, aba que detalha as informações da malha de elementos finitos antes e depois de carregar o arquivo.

Na aba "File Overview" (Figura A.1), ao carregar o arquivo ".mfl", as informações do modelo são detalhadas: dimensões do problema, número de nós, número de elementos finitos, número de materiais e número de elementos finitos associados a cada material.

Figura A.2.: Programa MeFS, aba em que o usuário define os materiais a serem fragmentados, altura do elemento finito com alta razão de aspecto.

O usuário define os dados de entrada do processo de fragmentação na aba "Fragmentation" (Figura A.2). Os valores de altura do elemento finito com alta razão de aspecto ("HARFE Height") e Scale Multiplier são por padrão 0,01 e 1, respectivamente; para alterá-los, basta modificar as informações contidas na caixa de texto. Ao carregar o arquivo ".mfl", a tabela dispõe os materiais em uma coluna e, na outra, caixas de checagem. O usuário seleciona os materiais que serão fragmentados. Finalmente, após todos os acertos terem sido definidos, clica-se na opção "Fragmentate" e em alguns segundos o arquivo de saída está disponível no mesmo endereço do arquivo de entrada.

A.1. Fragmentação de malha

O programa é baseado em uma versão do algoritmo desenvolvido por Luís Bitencourt Jr., o qual estava restrito a análises com determinadas características. Este software generaliza o código anterior e fornece uma interface amigável ao usuário. Destaca-se que a função que determina as interfaces que serão fragmentadas é vetorizada, fazendo com que o código seja executado, em determinadas análises, em torno de 5% do tempo em que o código original executaria a mesma tarefa.

A fragmentação de malha é realizada pelo programa MeFS seguindo as etapas:

1. Carrega-se o arquivo contendo as informações do pré-processamento.
2. No MeFS, as informações sobre o número de materiais na malha e o número de CST definidos para cada material é detalhado.

3. O usuário define quais materiais devem ser fragmentados e, também, pode definir a altura para os elementos finitos com alta razão de aspecto (por padrão é 0,01) e mudar a unidade de distância.
4. Após o usuário ter definido os dados de entrada, o processo de fragmentação começa ao selecionar a botão "Fragmentate":
5. Finalmente, o usuário atualiza manualmente o arquivo para que seja compatível com o solver de elementos finitos.

A.1.1. Algoritmo da função de fragmentação

Quando se seleciona a botão "Fragmentate", as opções definidas pelo usuário e as informações da malha de elementos finitos são passadas para a função de fragmentação. O algoritmo desta função é dividido em 4 etapas:

1. Obter as arestas que compõem os elementos dos materiais que serão fragmentados e identificar qual o outro elemento que é composto por ela. Assim, o material associado aos elementos de interface depende dos dois materiais das fronteiras.
2. Cria-se novos nós em função da quantidade de linhas que serão fragmentadas e renumera a conectividade, as coordenadas dos nós recém-inseridos são calculadas em função da altura do elemento de interface. Assim, a área dos elementos finitos CST diminui (Figura A.3).
3. Definição da conectividade dos elementos finitos com alta razão de aspecto e dos materiais associados a eles (Figura A.4). No final desta etapa, as coordenadas dos nós são armazenadas em uma matriz e a conectividade em outra, a ordem da conectividade é conferida para que se certifique que esteja no sentido anti-horário.
4. Finalmente, o arquivo de saída é gerado. Na última versão do programa, o arquivo de saída contém: número de elementos finitos criados (HAR), condições de contorno atualizadas, identificação de cada material associado a um elemento de interface (quais interfaces que representam), coordenadas atualizadas e conectividade atualizada.

Figura A.3.: Separação dos elementos finitos CST e criação de novos nós. Neste exemplo, somente os elementos em azul passam pelo processo de fragmentação. (A) Malha de elementos finitos CST. (B) Criação de novos nós e separação dos elementos finitos CST. A variável h é a altura do elemento finito de interface definida pelo usuário.

Figura A.4.: Inserção dos elementos finitos com alta razão de aspecto. Cada cor representa um material, o amarelo é o material associado ao elemento de interface que conecta dois materiais azuis e o vermelho conecta o azul e o verde.

O programa ainda está em desenvolvimento e algumas das funções implementadas ainda precisam passar por testes para que possíveis erros de programação sejam encontrados. Alguns dos recursos que estão em desenvolvimento e podem aparecer em atualizações são:

- opção para gerar um arquivo compatível com a entrada do solver de elementos finitos;

- opção para definir a propriedades dos materiais associados às interfaces;
- atualização do código para que funcione caso a malha de elementos finitos contenha elementos de treliça;
- fragmentação de malhas tridimensionais;
- otimização de funções que ainda não foram revisadas;