UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITÉCNICA

RUDOLF DE ALMEIDA PRADO HELLMUTH

Modelo estrutural com contato entre paredes de alvéolo pulmonar

São Paulo

2010

RUDOLF DE ALMEIDA PRADO HELLMUTH

Modelo estrutural com contato entre paredes de alvéolo pulmonar

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção do título
de mestre

Área de Concentração: Dinâmica e Controle

Orientador: Raul Gonzalez Lima

São Paulo

2010

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 alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 17 de junho de 2010.

Assinatura do autor

Assinatura do orientador

FICHA CATALOGRÁFICA

Hellmuth, Rudolf de Almeida Prado

Modelo estrutural com contato entre paredes de alvéolo pulmonar / R.A.P. Hellmuth. – ed.rev. – São Paulo, 2010.

143 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1. Doença pulmonar (Especialidade) 2. Mecânica de tecidos
3. Biomecânica 4. Método dos elementos finitos I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

Aos meus pais e à minha
namorada, pelo amor, apoio
e paciência.

AGRADECIMENTOS

À minha família, meus pais Harald Hellmuth e Margarida Maria de Almeida Prado Hellmuth, meus irmãos Astrid Luise Harriet Hellmuth e Ernst de Almeida Prado Hellmuth, meus tios e primos, pelo apoio familiar que nunca me faltou.

À minha querida Ana Carolina Hatchbach Cardon, por sua extensa paciência, pelo seu amor, por sempre estar disposta a me ajudar em qualquer situação e principalmente pelo seu apoio que me conforta e me deixa mais forte para superar meus desafios.

Aos meus amigos com quem divido os melhores momentos da minha vida, André Vilela Mueller-Roger, Bruno Nicolau Nery Wittmaack, Clarissa Barbosa de Oliveira, Daniel Volkmer Prufe Mazzei, Davi Henrique, Fernando Keresztes Bigatto, Gabrielle Naumann, Leonardo Thiago Nery Wittmaack, Mauro Keresztes Bigatto, Mônica Mohrhardt, Ricardo Guidara e Tibor Keresztes Horváth.

Aos meus colegas de LAB (Laboratório de engenharia Ambiental e Biomédica) Claudia Natalia Lara Herrera, Erick Darío León Bueno de Camargo, Fernando Silva de Moura, Julio Cesar Ceballos Aya, Miguel Fernando Montoya Vallejo, Olavo Luppi Silva e Thais Samed e Sousa, pela ajuda em dúvidas técnicas e pela amizade.

À Escola Politécnica da Universidade de São Paulo pela formação de excelência, e por ter propiciado ambiente satisfatório para encontrar este caminho que sigo.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Raúl González Lima, pela sugestão desse tema tão importante e desafiador, pelos conselhos em conversas informais e como exemplo pessoal e profissional.

Aos membros da banca examinadora, cuja avaliação, conhecimento e sugestões contribuíram muito para o resultado final deste trabalho.

À CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pela bolsa de pesquisa a mim concedida para a realização deste trabalho.

"Não se pode ensinar nada a um homem; pode-se apenas ajudá-lo a encontrar a resposta dentro dele mesmo".

Galileu Galilei

RESUMO

Este trabalho é uma contribuição importante para o desenvolvimento de um modelo numérico de parênquima pulmonar capaz de simular manobras de ventilação mecânica. O pulmão é um órgão estruturalmente complexo e hierarquizado. Por isso uma revisão bibliográfica multidisciplinar foi realizada. A revisão apresenta as propriedades mecânicas do parênquima, sua morfologia e os efeitos da tensão superficial para a contração e adesão dos septos interalveolares.

Um aspecto importante para o modelo de alvéolo é um modelo de contato com adesão causada pela tensão superficial. Um modelo de contato adesivo simplificado foi desenvolvido e simulado em uma estrutura com parâmetros de mesma ordem de grandeza de um alvéolo real. A simulação foi realizada com o método dos elementos finitos não-linear e foi necessário empregar o método da corda para evitar divergência em pontos limites. Os resultados numéricos se aproximaram de resultados experimentais globais no pulmão com pressões de mesma ordem de grandeza.

Palavras-chave: Doença pulmonar (Especialidade), Mecânica de tecidos, Biomecânica, Método dos elementos finitos.

ABSTRACT

This work is an important step on the development of a computational model of lung parenchyma capable to simulate mechanical ventilation maneuvers. The lung has a complex and hierarchized structure. Therefore a multidisciplinary literature review was held. The review presents the mechanical properties of the parenchyma, its morphology and the effects of surface tension to septum's contraction and adhesion.

An important aspect for the alveolus model is a contact model which includes the adhesion caused by surface tension. Thus a simplified model was developed and then simulated in a structure with properties of the same order of magnitude of a real alveolus. The simulation was performed with the nonlinear finite element method. The implementation of the arc-length method was also necessary in order to prevent diversion at limit points. The numerical results were close to hole lung experimental results with pressure levels of the same order of magnitude.

Keywords: Lung disease, Tissue mechanics, Biomechanics, Finite element method.

LISTA DE FIGURAS

- Figura - 2.1 Esquema da malha de moléculas de elastinas, ligadas por ligação cruzada, se deformando (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 111). 25
- Figura - 2.2 Curva típica de tensão–deformação uniaxial em tecidos moles após condicionamento. $T = P_{11}$ é a tensão lagrangiana no sentido do alongamento, eq. (A.29), e λ_1 a razão de alongamento, eq. (A.24). A curva de carregamento é diferente da de descarregamento (há histerese). 27
- Figura - 2.3 Esquema do ensaio de dois eixos (FUNG, 1993, p. 296). 33
- Figura - 2.4 Propriedades mecânicas das fibras de elastina e colágeno segundo Denny e Schroter (1995). O módulo de Young da elastina é $6 \cdot 10^5 N/m^2$ e os valores das constantes da eq. (2.12) são $a_1 = 0.025$, $a_2 = 0.51$ e $m = 13$. Em vermelho está o caso em que os feixes de fibras de elastina e colágeno possuem mesma área transversal. 37
- Figura - 2.5 Relação de força comprimento par um elemento de mola e cabo em paralelo. Para comprimentos abaixo de l_k a constante de mola é k_1 e acima o cabo está esticado e a constante é k_2 . l_r é o comprimento inicial do elemento (MAKSYM et al., 1998). 38
- Figura - 2.6 Fotografias de cortes histológicos do parênquima pulmonar de macaco aranha. Os processos de confecção das lâminas (a) e (b) são diferentes (FUNG, 1993, p. 247). 40
- Figura - 2.7 Poliedro de segunda ordem, com lados em forma de quadrados e hexágonos

regulares.	42
Figura - 2.8 Agrupamento (ou colméia) de 14-edros preenchendo o espaço.	43
Figura - 2.9 Exemplo de diagrama de Voronoi formando uma tesselação em 2D.	44
Figura - 2.10 Dualidade entre a triangularização de Delaunay (preto) e diagrama de Voronoi (vermelho).	44
Figura - 2.11 Curvas de pressão–volume de pulmão de gato dissecado inflado com solução salina (linha cheia) e ar (linha tracejada) (LEVITZKY, 2003, p. 24).	46
Figura - 2.12 Lado esquerdo: microscopia de varredura de dutos alveolares de pulmões de coelho inflados com o mesmo volume relativo. Inflado com solução salina (a), ar com tensão superficial abaixo de 10 mN/m (b) e ar com surfactante removido com detergente e tensão superficial aproximadamente de 20(c) mN/m. Há um expressivo aumento de diâmetro médio dos dutos e mudança da morfologia. Lado direito: modelo no qual a tensão superficial é sustentada pelas fibras dos dutos alveolares (ou bocas dos alvéolos). γ , tensão superficial; PF, fibras do sistema periférico; AF, fibras do sistema axial. Figura de Bachofen e Schürch (2001).	47
Figura - 2.13 A: o modelo no qual o surfactante fica somente sobre uma interface líquido–ar contínua. A geometria côncava do filme líquido nos cantos sugere que a tensão superficial cria um gradiente de pressão que sugaria mais líquido para dentro do alvéolo. B: modelo mostrando que o fluido cria poças nos vales das rugas do septo e deixa seco regiões de pico e regiões planas. Nas regiões secas o surfactante se adsorve na parede. Note que neste modelo os cantos ficam convexos porque o líquido fica contido dentro de uma membrana de surfactante. Nesse caso as bombas fisiológicas de água são auxiliadas pela pressão para extrair fluido do alvéolo enquanto no modelo convencional acontece o oposto. Figura de Hills (1999).	48

Figura - 2.14	Elemento triangulo num espaço euclidiano.	50
Figura - 2.15	Modelo de instabilidade inerente de uma rede de alvéolos (LEVITZKY, 2003, p. 25).	57
Figura - 2.16	Pressão atuando no parênquima pulmonar (FUNG, 1975b).	58
Figura - 3.1	Esquema do contato adesivo entre duas superfícies. (a) Aproximação. (b) A força de atração molecular atrai o líquido para a região em que as superfícies estão mais próximas. (c) Os filmes líquidos se fundem e mais líquido é atraído para a região. (d) A aproximação termina quando a rugosidade das superfícies se encostam. (e) Afastamento das superfícies. (f) Superfícies descoladas. (g) Detalhe do contato mostrando as variáveis geométricas.	62
Figura - 3.2	Gráficos da função logística, eq. (3.7).	64
Figura - 3.3	Gráficos de pressão mostrando a Lei de Young–Laplace em azul ($\tilde{p}_{ad}$ da eq. (3.1)) o contato seco em vermelho (p_c da eq. (3.4)) e a equação constitutiva de contato com aderência em preto (p_γ da eq. (3.2)). Os parâmetros das equações são: $\gamma = 7,5 \cdot 10^{-3} N/m$, $d_1 = 3 \cdot 10^{-6} m$, $d_2 = 7 \cdot 10^{-6} m$, $p_{c_0} = 2 \cdot 10^4 Pa$	65
Figura - 3.4	Gráfico da derivada da equação constitutiva de contato com aderência (p'_γ da eq. (3.3)). Mesmos parâmetros da Fig. (3.3).	66
Figura - 3.5	Aproximação geométrica de uma circunferência para um retângulo com mesmo perímetro.	67
Figura - 4.1	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 0,0 cmH_2O$. Configuração inicial.	71
Figura - 4.2	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -1,0 cmH_2O$. ..	71

Figura - 4.3	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -4,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.	..	72
Figura - 4.4	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -8,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.	..	72
Figura - 4.5	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -12,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.	.	73
Figura - 4.6	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 0,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.		73
Figura - 4.7	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 13,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.	...	74
Figura - 4.8	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 30,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.	...	74
Figura - 4.9	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 30,5 \text{ cmH}_2\text{O}$.	...	75
Figura - 4.10	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 13,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.	...	75
Figura - 4.11	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 8,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.		76
Figura - 4.12	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 4,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.		76
Figura - 4.13	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 1,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.		77
Figura - 4.14	Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 0,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.		
	Configuração final.		77
Figura - 4.15	Gráfico de área–pressão da seção do alvéolo idealizado mostrando histerese.		78
Figura - 4.16	Curvas de pressão-deslocamento vertical dos nós de metade da membrana.		79
Figura - 4.17	Ampliação da Fig. (4.16) para evidenciar a curva do deslocamento vertical dos nós que sofreram adesão, os nós centrais 4 e 5.		79
Figura - 4.18	Gráfico de área–pressão da seção do alvéolo idealizado mostrando a trajetória de equilíbrio.		80
Figura - 5.1	Gráfico de energia potencial E_P por configuração $\mathbf{u}$ de uma estrutura		

hipotética com adesão que sofre adesão conservativa.	83
Figura - A.1 Movimento e deformação de um corpo. Configuração de referência Ω_0 à configuração atual Ω	91
Figura - A.2 Os pontos P e Q separados pelo vetor infinitesimal $d\mathbf{X}$ na configuração de referência Ω_0 , tomam as posições p e q , respectivamente, na configuração atual Ω , onde estão separados pelo vetor infinitesimal $d\mathbf{x}$	94
Figura - A.3 Planos na configuração de referência Ω_0 e na deformada Ω nos quais $d\mathbf{f}(\mathbf{X}, \hat{\mathbf{N}}) = d\mathbf{f}(\phi(\mathbf{X}), \hat{\mathbf{n}})$	98
Figura - B.1 Esquema do método de Newton–Raphson.	106
Figura - B.2 Curva de carregamento–deslocamentos destacando os pontos críticos. B indica um ponto de bifurcação e L indica um ponto limite.	107
Figura - B.3 Flambagem de coluna esbelta, um exemplo de bifurcação de configuração de equilíbrio. Isto é, sendo λ_B o fator de carregamento no ponto de bifurcação, $\lambda_1 < \lambda_B < \lambda_2$	108
Figura - B.4 Restrições para o método da corda com comprimento Δs . (a) (RIKS, 1979). (b) (CRISFIELD, 1981).	109
Figura - B.5 Esquema ilustrando a eq. (B.24). (a) $\kappa_p > 0$. (b) $\kappa_p < 0$	112
Figura - C.1 Cada pulmão é revestido por uma membrana serosa arranjada como saco fechado — a pleura — que é invaginada pelo pulmão. A figura menor no canto inferior esquerdo mostra um balão de festa não muito cheio recobrindo um punho de forma análoga como a pleura recobre o pulmão. As lâminas visceral e parietal da pleura são contínuas da mesma forma como as paredes interna e externa do balão. Se há um ferimento da parede torácica que permite ar entrar na cavidade pleural, a elasticidade do pulmão leva-o ao colapso (pneumotórax) (MOORE; DALLEY, 2001, p. 85).	116

Figura - C.2	Face mediastinal dos pulmões. Observe o hilo no centro das faces, o manguito pleural e ligamento pulmonar. Observe também a impressão cardíaca no pulmão esquerdo (MOORE; DALLEY, 2001, p. 89).	117
Figura - C.3	Vias de circulação no segmento broncopulmonar. Sangue alveolar (oxigenado) em vermelho, sangue venoso em azul escuro, vasos linfáticos em verde e vias aéreas em azul claro (MOORE; DALLEY, 2001, p. 96).	118
Figura - C.4	As principais divisões das vias respiratórias do pulmão. As proporções das estruturas foram alteradas para facilitar a visualização (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 340).	120
Figura - C.5	Segmentos broncopulmonares. (A) Vistas anterior e posterior dos pulmões salientando os segmentos em cores diferentes. (B) Observe que cada brônquio segmentar supre um segmento broncopulmonar de mesmo nome (MOORE; DALLEY, 2001, p. 94).	121
Figura - C.6	Corte histológico de pulmão mostrando um bronquíolo terminal seguido de um bronquíolo respiratório, que é contínuo com um saco alveolar e alvéolos. BAL: "bronchial-associated lymphoid tissue"(tecido linfático do brônquio) (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 348).	123
Figura - C.7	Esquema da porção terminal da árvore brônquica (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 349).	124
Figura - C.8	Parte de um septo interalveolar, mostrando a barreira entre o sangue e o ar inspirado. Para chegar até as hemácias, o O_2 atravessa uma camada líquida com surfactante lipoproteico, o citoplasma de um pneumócito tipo I, a lâmina basal, o citoplasma da célula endotelial e o plasma sanguíneo (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 352).	125

Figura - C.9	Micrografia eletrônica do septo alveolar. 30.000x. (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 352).	126
Figura - C.10	Fotografias de cortes histológicos que mostram o lençol capilar alveolar em espécies distintas.	127
Figura - C.11	Desenho da parede interalveolar do pulmão de um cão, mostrando o lençol microvascular composto de compartimento vascular (V) e postes intervasculares (A, B, C). Em (A) o corte foi feito no centro do poste, em (C) tangente ao poste e em (B) numa posição intermediária. O epitélio foi puxado para trás para dar destaque à matriz de tecido conjuntivo da parede. No poste B estão em destaque feixes de fibras colágeno contornando a parede do capilar convergem no poste. (e) representa corte seccional de elastina (ROSENQUIST et al., 1972).	128
Figura - D.1	Representação simples das forças assimétricas agindo nas moléculas da interface.	129
Figura - D.2	Inseto sustentado pela tensão superficial da água.	130
Figura - D.3	Película de sabão esticada dentro de uma estrutura de arame com um lado móvel.	131
Figura - D.4	Trabalho realizado para dividir um material.	131
Figura - D.5	Representação de um elemento infinitesimal de superfície de gota (BEHROOZI et al., 1996).	132
Figura - D.6	Surfactante adsorvido na interface de modo orientado.	133
Figura - D.7	Esquema de difusão de surfactante do meio para a interface e vice e versa. Γ é a concentração atual de surfactante na interface e Γ_0 é a concentração de equilíbrio (DUCKHIN et al., 1995).	134

Figura - D.8 Molécula de DPPC. Branco: Hidrogênio; Verde: Carbono; Vermelho: Oxigênio; Rosa: Fósforo; e Azul: Nitrogênio. 136

Figura - D.9 Recrutamento do DPPC seco, cristal-líquido oligolamelar, para a interface líquido-ar. Na interface líquido-ar o DPPC está na sua fase líquida, espalhando-se numa monocamada. Isto só é possível se o surfactante estiver acima da temperatura crítica (HILLS, 1999). 137

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Propriedades mecânicas das fibras de colágeno e de elastina		25
Tabela 2.2	Constantes materiais do parênquima pulmonar a 37°C para a eq. (2.9)		35

SUMÁRIO

1	Introdução	15
1.1	Sobre a modelagem do pulmão e da atelectasia	17
1.2	Objetivos	18
2	Revisão Bibliográfica	20
2.1	Propriedades mecânicas do parênquima pulmonar	20
2.1.1	Material do septo interalveolar	20
2.1.2	Características mecânicas dos tecidos moles	21
2.1.3	Fibras dos tecidos moles	23
2.1.4	Pseudoelasticidade	26
2.1.5	Equações constitutivas para tecidos moles	27
2.1.6	Ensaio mecânicos	31
2.1.7	Modelagem do septo alveolar a partir de sua microestrutura fibrosa	36
2.1.8	Distribuição das fibras nos alvéolos	38
2.1.9	Estado de pré-tensão do parênquima em condições fisiológicas	39
2.2	Morfologia idealizada do alvéolo pulmonar	41
2.3	Tensão superficial nos alvéolos	45
2.3.1	Efeitos mecânicos	45

2.3.2	Elemento de tensão superficial	48
2.4	Atelectasia	55
2.4.1	Modelo de bolha para instabilidade alveolar	57
2.4.2	Adesão nas membranas celulares	59
3	Metodologia	60
3.1	Função de contato com aderência	60
3.1.1	Hipóteses	61
3.1.2	Equacionamento	62
3.2	Teste para a verificação da função	65
3.2.1	Geometria idealizada para o teste	66
3.2.2	Ensaio numérico	68
4	Resultados.....	70
5	Discussão	81
6	Conclusões.....	84
	Apêndice A – Algumas noções de mecânica dos meios contínuos	86
A.1	Álgebra tensorial	87
A.1.1	Conversão da somatória.....	87
A.1.2	Operadores.....	88
A.1.3	Notação matricial e de Voigt	90
A.2	Cinemática	91

A.3	Medidas de deformação	93
A.3.1	Deformações finitas	93
A.3.2	Deformações infinitesimais	96
A.3.3	Outras medidas	97
A.4	Medidas de tensão	97
A.4.1	Tensão de Cauchy	97
A.4.2	Primeira tensão de Piola–Kirchhoff	99
A.4.3	Segunda tensão de Piola–Kirchhoff	100
A.5	Equações constitutivas	101
A.5.1	Material hiperelásticos	101
Apêndice B – Solução do método dos elementos finitos não-lineares		104
B.1	Método de Newton–Raphson	105
B.2	Método da corda	106
B.2.1	Estabilidade física do sistema	107
B.2.2	Evolução do método	108
B.2.3	Versão de Schweizerhof–Wriggers	109
Apêndice C – Anatomia do pulmão		114
C.1	Introdução	114
C.2	Caixa torácica	114
C.3	Pleura	115
C.4	Vasos sanguíneos e linfáticos	116

C.5	Enervação das vias aéreas	119
C.6	Vias aéreas condutoras	119
C.7	Porção respiratória	122
C.8	Septo interalveolar	127
Apêndice D – Tensão superficial		129
D.1	Lei de Young–Laplace	130
D.2	Surfactante	133
D.2.1	Propriedades físico-químicas	133
D.2.2	Cinética de adsorção	134
D.2.3	Surfactante pulmonar	135
Referências Bibliográficas		139

1 INTRODUÇÃO

Muitos pacientes em unidades de terapia intensiva (UTI) estão incapazes de respirar espontaneamente e, por isso, só sobrevivem por meio da ventilação mecânica. Existem diferenças mecânicas entre essas duas formas de ventilação. Para gerar o gradiente de pressão para o fluxo de ar da inspiração, a ventilação mecânica aplica pressão positiva na traqueia, enquanto na ventilação espontânea se forma pressão negativa nos alvéolos causada pela deformação do diafragma e do tórax. Em muitos casos clínicos a condição do paciente está tão debilitada que o médico intensivista precisa escolher entre uma manobra de ventilação ou outro procedimento que possa talvez ajudar na recuperação do paciente, sem ter informações completas sobre as condições atuais do pulmão nem saber ao certo o nível de eficácia que terá tal procedimento terapêutico. Então, qualquer melhora no conhecimento sobre os fenômenos físicos e fisiológicos envolvidos na dinâmica pulmonar é muito útil para decisões críticas à beira do leito e para o desenvolvimento de novas manobras de terapia pulmonar.

A função essencial do pulmão, troca de gases, depende de uma relação harmoniosa entre ventilação e perfusão, na qual o ar e o sangue são guiados por um sistema de ramificação complexo onde estão expostos a variações de pressão transmural e transpulmonares. Assim, a habilidade desse órgão realizar sua função está intimamente relacionada com seu comportamento mecânico (expansão e contração) e sua geometria, que influencia diretamente a dinâmica desses escoamentos. Ou seja, há uma forte dependência da função do pulmão com sua estrutura. Uma das características mais marcantes da maioria das doenças respiratórias (asma, enfisema, atelectasia etc.) é que elas ou afetam a estrutura pulmão ou são causadas por falhas dela, e, conseqüentemente, o agravamento das condições de um agrava as condições

do outro. Mesmo assim, modelos fisiológicos normalmente simplificam ou negligenciam a estrutura pulmonar.

A estrutura pulmonar é um sistema bastante complexo, que pode ser dividido em diversos subsistemas morfológicos (lobos, vias aéreas, vasculatura etc.) que podem ser estudados separadamente. Por sua vez, esses subsistemas podem ser separados novamente em novos subsistemas (por exemplo lobos em lóbulos, parênquima, alvéolos, septos alveolares, células, fibras conjuntivas etc.) mecanicamente ligados aos subsistemas de hierarquia de escala morfológica superior, inferior ou equivalente. Concomitantemente, fenômenos físicos e fisiológicos observados em uma escala podem causar ou ser causados por fenômenos físicos e fisiológicos que acontecem em outra escala, o que leva o sistema respiratório a ser altamente integrado e interdependente.

Alguns fenômenos observados no sistema respiratório podem ser descritos por modelos matemáticos simples, mas outros mais complexos necessitam de uma modelagem mais elaborada e uma quantidade maior de informações. Normalmente esses fenômenos mais complexos são consequência de uma cadeia de fenômenos que acontecem em níveis de escala diferentes. Porque historicamente cientistas se especializaram em descrever fenômenos predominantemente locais, atualmente fenômenos que dependem de muitas escalas ainda estão pouco estudados. Um grande desafio para as próximas gerações de fisiologistas é integrar a grande quantidade de informações biológicas (em vertiginoso crescimento) em modelos quantitativos consistentes (BASSINGTHWAIGHTE, 2000). Os modelos resumem de forma sucinta a informação e, interagindo com experimentações, demonstram propriedades e removem contradições, que não são evidentes pela simples descrição de suas partes. Outros grandes valores epistemológicos dos modelos fisiológicos são possibilitar pesquisas dirigidas por hipótese e permitir simulações que predigam efeitos de intervenções.

1.1 Sobre a modelagem do pulmão e da atelectasia

Sempre é muito útil construir modelos matemáticos idealizados para prever como vai se desenvolver um fenômeno. No caso de um sistema hierarquizado, como o pulmão, algumas hipóteses sobre o estado de seus subsistemas devem ser tomadas, pois é virtualmente impossível trabalhar com um modelo que englobe todos os detalhes do sistema, em muitas escalas de comprimento. Entretanto, é obviamente necessário que as equações do modelo satisfaçam as leis de conservação de massa, momento e energia. Também é importante que suas variáveis possam ser comparadas com dados experimentais, para ser possível validar as hipóteses e teorias em torno do funcionamento do órgão.

Para o estudo de sistemas complexos (com muitas variáveis, parâmetros e condições de contorno) é necessário seguir uma metodologia bastante criteriosa. Fung (1990, p. 401) apresentou cinco passos para se estudar a conexão entre as propriedades mecânicas do pulmão inteiro, com os dutos alveolares e alvéolos, como um exemplo para representar a relação entre a macro- e a micromecânica de um órgão. Generalizando para um órgão qualquer, esses cinco passos poderiam ser ampliados para onze:

1. Conhecer a anatomia do órgão, principalmente disposição dos tecidos que dão suporte estrutural.
2. Conhecer os mecanismos de controle fisiológicos envolvidos.
3. Identificar os materiais de função estrutural que compõem os tecidos e a configuração geométrica deles.
4. Determinar as propriedades mecânicas dos materiais.
5. Identificar as condições de contorno, como interações com órgãos vizinhos.
6. Analisar a estabilidade e as forças que agem no corpo. Muitos órgãos apresentam tensão diferente de zero em condições fisiológicas normais, isto é, estão deformados em

condições normais. Deve-se tomar cuidado para não tomar conclusões precipitadas em dissecções que mostram tecidos não tensionados.

7. Refletir sobre a relação entre a micro- e a macromecânica agindo sobre o órgão.
8. Formular equações constitutivas que descrevam as propriedades do órgão.
9. Montar um modelo que tenha um conjunto de variáveis que descrevam a movimentação e/ou deformação do órgão.
10. Validar o modelo comparando os resultados previstos por ele com dados experimentais.
11. Validar hipóteses levantadas para construir o modelo e/ou utilizá-lo para resolver problemas reais.

1.2 Objetivos

Este trabalho é uma contribuição para a modelagem do parênquima pulmonar. Um futuro modelo deve ser capaz de simular o colapso alveolar causado pela tensão superficial do líquido que molha as paredes dos alvéolos e também manobras para recrutar esses alvéolos. Os modelos atuais de parênquima pulmonar não permitem este tipo de simulação. O propósito do modelo é possibilitar uma melhor interpretação do fenômeno de colapso de alvéolos e gerar novas idéias para procedimentos de recrutamento alveolar em unidades de terapia intensiva.

No contexto da metodologia acima, parte crucial para o desenvolvimento de um modelo que descreve a dinâmica de um sistema tão complexo é conhecer a física, a geometria e os possíveis estados desse sistema. Grande parte dos fatores necessários está presente em uma literatura que abrange uma ampla gama de disciplinas. Por causa desse caráter multidisciplinar, é conveniente uma análise crítica da bibliografia que seja capaz de agregar as diversas disciplinas. Como o público alvo é abrangente, provavelmente o leitor não estará acostumado com alguns conceitos fundamentais de algumas disciplinas. Para não prejudicar a compreensão, convém a inclusão de apêndices que introduzem estes conceitos.

Uma peça fundamental e necessária para este objetivo ser atingido é o desenvolvimento de uma equação constitutiva para o contato com adesão causada pela tensão superficial. Uma equação constitutiva é proposta e avaliada numericamente em uma estrutura simples utilizando o método dos elementos finitos não-linear.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Propriedades mecânicas do parênquima pulmonar

O parênquima¹ pulmonar é o tecido da porção respiratória que ocupa a maior parcela dos pulmões em proporção volumétrica. Portanto, as características mecânicas dos pulmões estão fortemente relacionadas às propriedades mecânicas e morfológicas desse tecido. O parênquima do pulmão é formado principalmente por alvéolos e dutos alveolares (ver Fig. (C.7)). Durante o ciclo respiratório a deformação do parênquima pulmonar se deve à deformação planar das membranas dos septos alveolares e às eventuais distorções geométricas dos alvéolos. Outros componentes, como pressão sanguínea, tensão na pequena quantidade de músculo liso e resposta mecânica da substância fundamental também devem contribuir para a mecânica do parênquima, mas com menor peso (MAKSYM; BATES, 1997). Portanto, é necessário conhecer tanto as propriedades mecânicas do septo quanto a morfologia do parênquima pulmonar para compreender a dinâmica completa desse órgão.

2.1.1 Material do septo interalveolar

O parênquima pulmonar faz parte de uma classe de tecidos biológicos chamada de *tecidos moles*. A matriz extracelular desses tecidos, que lhes dá suporte estrutural, é rica em fibras de colágeno e elastina. A concentração e organização espacial das fibras de elastina e colágeno, assim como o tipo de colágeno, são os principais fatores que definem as propriedades mecânicas de cada tipo de tecido mole. Outros exemplos de tecidos dessa classe são artérias, músculos, pele, pulmão, bexiga, mesentério etc. Todos possuem um conjunto de características mecânicas

¹ Ver Apêndice C para conhecer os termos de anatomia.

em comum. Uma bela revisão bibliográfica sobre a modelagem da resposta mecânica dos tecidos moles foi feita por Humphrey (2003).

2.1.2 Características mecânicas dos tecidos moles

As características gerais dos tecidos moles são: capacidade de realizar *grandes deformações* e voltar para a configuração inicial ao ser descarregado, relação tensão–deformação *não-linear*, *relaxação*, *fluência*, *histerese*, *viscoelasticidade*, *incompressibilidade* e *anisotropia*. Os tecidos moles também são considerados inelásticos, porque materiais elásticos possuem uma única relação entre tensão e deformação, o que exclui dessa classificação os materiais que possuem relaxação e fluência. As características dos tecidos moles apresentadas aqui estão descritas abaixo.

Não-linearidade

A pequenas deformações, quando a maior parte das tensões é suportada pela elastina, pode-se considerar que os tecidos moles possuem relação de tensão e deformação linear. A partir de uma certa deformação é observada uma curva de característica exponencial, que enrijece abruptamente o tecido. Essa característica exponencial tem origem na reorientação de feixes de fibras de colágeno de diversos comprimentos, inicialmente ondulados.

Relaxamento

Quando o tecido é esticado em uma deformação fixa, é observado que a tensão diminui com o tempo. O relaxamento cessa após alguns minutos se a tensão inicial for menor que um certo valor, mas não se estabiliza se esta tensão inicial for maior.

Fluência

É observada quando um tecido mole é carregado com uma tensão constante e o comprimento do corpo de provas aumenta com o tempo.

Histerese

Quando um segmento de tecido é testado impondo variações cíclicas de deformação numa máquina de ensaio de tensão e deformação, a resposta de tensão mostra curvas de histerese a cada ciclo. No entanto, a histerese em tecidos moles diminui rapidamente nos primeiros ciclos, até um nível estável, e é sempre pouco sensível à taxa de deformação. Experiências mostram que a histerese é quase insensível à frequência, até mesmo mesmo de ultrassom. A existência de tal período de ajuste inicial, depois de grandes distúrbios, é comum em todos tecidos moles, que do ponto de vista mecânico é conhecido como *precondicionamento*. Geralmente, dados mecânicos apresentados em literatura devem provir de corpos de prova condicionados, pois os ensaios só possuem repetibilidade desta maneira, além do que somente as relações constitutivas empregadas com parâmetros de testes condicionados possuem poder de previsibilidade de deformações mecânicas reais (FUNG, 1993, p. 270).

Viscoelasticidade

Proporcionalmente em peso, a maior parte dos tecidos moles é constituída por água, presente dentro e fora das células em grande abundancia. Não é de surpreender então, que os tecidos moles tenham comportamentos mecânicos causados pela relação cinemática entre fluido e sólido. Relaxamento, fluência e histerese são comportamentos característicos de materiais viscoelásticos. No entanto, eles estão aqui dissociados da viscoelasticidade porque são efeitos observados separadamente sem dificuldade. A viscoelasticidade dos tecidos moles é muito peculiar. Teorias tradicionais de viscoelasticidade (como modelos de Maxwell, Voigt, Kelvin e Boltzmann) não são aplicáveis em geral (HUMPHREY, 2003). A rigidez dos tecidos é pouco sensível à taxa de deformação e o relaxamento é dependente do tempo.

Incompressibilidade

A maioria dos tecidos moles são aproximadamente incompressíveis, quando sofrem carregamentos em níveis fisiologicamente normais. Isso se deve também por causa da alta

fração de água nesses tecidos. Evidentemente essa condição é válida quando a intensidade do carregamento não provoca a entrada nem saída de água do tecido.

Anisotropia

A maioria dos tecidos moles apresenta anisotropia em alguma forma. Por exemplo, tendões e ligamentos apresentam isotropia transversa, artérias ortotropia cilíndrica e pele ortotropia cartesiana. Há também formas de anisotropia mais complexas em tecidos estruturalmente mais complexos, como o pericárdio.

2.1.3 Fibras dos tecidos moles

A pequenas deformações a elastina confere rigidez ao tecido e armazena a maior parte da energia de deformação. As fibras colágenas são comparativamente inextensíveis e ficam normalmente frouxas. Com o aumento da deformação do tecido o colágeno é esticado gradativamente na direção da deformação. Quando esticadas, essas fibras geram um aumento acentuado da rigidez do tecido. Esse compósito fibroso tem comportamento análogo ao do tecido de uma meia de nylon, onde a elastina faz o papel do elástico e o colágeno do nylon. A Tab. (2.1) evidencia a diferença de rigidez entre cada tipo de fibra. Nos tecidos moles o colágeno limita a deformação e protege os tecidos contra lesões.

Colágeno

O colágeno é o elemento estrutural básico para tecidos duros e moles em animais, cuja importância em termos estruturais pode ser comparada ao aço em nossa civilização. Ele carrega a maior parte das forças atuantes no corpo e está presente em várias configurações dentro de diferentes tecidos e órgãos, onde lhes proporciona integridade mecânica. O colágeno é o tipo mais abundante de proteína dos organismos animais, representando cerca de 30% do seu peso seco. Atualmente sabe-se que a família dos colágenos é composta por mais de vinte tipos de moléculas, chamadas tropocolágeno, com ligeiras diferenças de organização dos polipeptídeos, que causam variações de associação com outras moléculas (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008,

p. 103). Os tropocolágenos se ligam a outros sequencialmente, formando estruturas chamadas fibrilas de com diâmetros entre 20 e 40nm. Feixes de fibrilas formam fibras com diâmetros entre 0,2 e 12 μ m (FUNG, 1993, p. 256).

Existem variações no calibre, densidade e orientação dos feixes de fibras de colágeno em diferentes regiões do pulmão. Tecidos biológicos saudáveis se remodelam de acordo com a solicitação mecânica que recebem. Locais mais solicitados normalmente são mais reforçados estruturalmente que locais menos solicitados. O calibre dos feixes fibrosos mais solicitados se torna maior e as fibras são orientadas para a direção da tensão. Por isso, a tensão nas moléculas de mesma composição, seja colágeno ou elastina, não varia muito dentro do tecido.

Elastina

A elastina tem relação tensão–deformação linear dentro da faixa de deformação fisiológica ($\epsilon = 0,0 \sim 0,7$) (FUNG, 1993; MAKSYM; BATES, 1997) e baixa histerese (FUNG, 1993, p. 243). Carton et al. (1969) realizaram ensaios de tensão e deformação em fibras de elastina isoladas do ligamento nugal de bois. Apesar do baixo número de amostras e precariedade do equipamento de ensaio, os resultados dos testes mostram um claro aumento de rigidez a deformações superiores a $\epsilon = 1,1$.

Como a borracha, a elastina é composta por longas moléculas flexíveis que são ligadas em diversos pontos por ligações cruzadas para formar uma malha tridimensional. As moléculas, torcidas e enroladas, mudam sua conformação molecular com a deformação do material. A mudança de conformação significa uma mudança na entropia da molécula; e da alteração da entropia aparece a tensão (FUNG, 1993, p. 265). A Fig. (2.1) mostra um esquema da deformação molecular da elastina.

A elastina pode ser ensaiada separadamente do colágeno se o tecido for cozinhado, pois o colágeno é desnaturado quando aquecido temperaturas acima 66°C, enquanto a elastina pode ser aquecida até 100°C por horas e resfriada à temperatura ambiente sem mudar suas propriedades mecânicas (FUNG, 1993, p. 243).

Figura 2.1: Esquema da malha de moléculas de elastinas, ligadas por ligação cruzada, se deformando (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 111).

Rigidez das fibras

A Tab. (2.1) mostra algumas propriedades elásticas importantes do feixes de fibras de colágeno e elastina encontradas na literatura.

Tabela 2.1: Propriedades mecânicas das fibras de colágeno e de elastina

Fonte	Material	$E^{(a)}$ (Pa)	$\sigma_{rup}^{(b)}$ (Pa)	$\epsilon_{max}^{(c)}$
Fung (1993, p. 251)	Colágeno	$1 \cdot 10^9$	$5 \cdot 10^7 - 1 \cdot 10^8$	2%
	Elastina	$6 \cdot 10^5$		200%
Maksym e Bates (1997)	Colágeno	$6,8 \cdot 10^9 - 1,2 \cdot 10^{10}$		1 – 3%
	Elastina	$1 \cdot 10^5 - 8 \cdot 10^5$		>250%

^(a) E: Módulo de Young; ^(b) σ_{rup} : Tensão de ruptura; ^(c) ϵ_{max} : Elongamento máximo.

Remodelagem e crescimento

Os tecidos moles têm a capacidade de crescer e se remodelar em resposta a doenças, lesões e a mudanças nas condições de carregamento (HUMPHREY, 2003). Um exemplo desse fenômeno é a formação de calos e engrossamento das mãos de um agricultor. Células

chamadas fibroblastos produzem e secretam tropocolágenos em resposta a estímulos externos. O colágeno, por sua vez é montado na matriz extracelular próxima a esses fibroblastos estimulados. Por outro lado, um tecido mole pouco estimulado, seja mecanicamente ou quimicamente, sofre regressão. Essa remodelagem, ou crescimento cinemático, dos tecidos é bastante conhecida em ossos, conhecida como lei de Wolff, onde a relação entre tensão e produção de colágeno é a mesma.

Em algumas situações patológicas, a concentração dessas fibras estruturais pode divergir do normal. No pulmão, por exemplo, reações fisiológicas a inflamações locais podem destruir as fibras elásticas causando enfisema. Neste caso a complacência dos pulmões aumenta e há destruição do septo nas regiões mais afetadas. Em casos nos quais os pulmões se cicatrizam após sofrer algum dano mecânico há um aumento de fibras de colágeno. Pulmões fibrosados são mais rígidos que o normal.

2.1.4 Pseudoelasticidade

Fung (1993, p. 293) argumenta que apesar dos tecidos moles possuírem histerese, relaxação e escoamento, ainda se pode usar a teoria da hiperelasticidade para descrever, de forma aproximada, o comportamento de muitos tecidos. Isso é possível porque após um certo número (>3) de ciclos iguais de deformação surge repetibilidade no ensaio de tensão. Os tecidos assim *precondicionados* apresentam um estado de homeostase, no qual são observadas uma única resposta de tensão–deformação no carregamento e outra única no descarregamento, ambas relativamente insensíveis à taxa de deformação. Assim, é possível considerar o tecido biológico precondicionado como tendo *dois* comportamentos hiperelásticos², um no carregamento e outro no descarregamento, cada qual descrito por uma função energia de deformação por unidade de volume $w(\mathbf{E})$ com constantes de material determinados separadamente (ver Fig. (2.2)). Desta forma, a teoria hiperelástica é tomada emprestada para tratar um material inelástico. Para evidenciar que o material não é realmente hiperelástico, Fung chama esses tecidos de *pseudoelásticos*. Grandes deformações e comportamento mecânico não-linear podem ser

²Ver Apêndice A para entender a definição de hiperelasticidade.

consistentemente tratados por esta abordagem.

Figura 2.2: Curva típica de tensão–deformação uniaxial em tecidos moles após condicionamento. $T = P_{11}$ é a tensão lagrangiana no sentido do alongamento, eq. (A.29), e λ_1 a razão de alongamento, eq. (A.24). A curva de carregamento é diferente da de descarregamento (há histerese).

Pseudoelasticidade não é, portanto, uma propriedade intrínseca do material. Ela é uma descrição conveniente da relação entre tensão e deformação num ciclo de carregamento específico. Pelo seu emprego, as muitas propriedades complexas dos tecidos são descritas de uma forma bem mais simples.

2.1.5 Equações constitutivas para tecidos moles

Relações constitutivas descrevem a resposta de um material a carregamentos aplicados. Esta resposta depende obviamente da constituição interna do material. Como visto, a mecânica dos tecidos moles costuma ser diferente dependendo da escala na qual o tecido está sendo analisado. Por causa dessa alta complexidade tanto na microestrutura (células, proteínas etc.) quanto na macroestrutura (tecidos, órgãos etc.) costuma-se confiar principalmente em descrições fenomenológicas para o comportamento de interesse. Descrições que explicariam as causas desses comportamentos estão hoje limitadas pela atual falta de conhecimento sobre as propriedades dos elementos constitutivos de cada nível hierárquico (ou escala) do material biológico, assim como as relações entre esses níveis. Então deve-se enfatizar que as relações constitutivas, em forma de equações, descrevem o comportamento do material somente dentro

das condições de interesse, não comportando uma descrição completa do material.

É importante notar que os septos dos alvéolos que compõem o parênquima do pulmão pertencem à classe dos tecidos moles, que possuem todos um comportamento mecânico semelhante. Dependendo das condições de interesse, diferentes tecidos moles podem ser modelados com a mesma equação constitutiva alterando-se somente alguns parâmetros de material. Apesar de ser conhecido desde o século XIX que o comportamento mecânico dos tecidos moles costuma não ser linear, muitos autores usaram essa teoria para descrever alguns tecidos moles por causa de sua simplicidade e familiaridade (HUMPHREY, 2003). No entanto, como a hipótese de linearidade só pode ser válida para deformações infinitesimais, esse tipo de análise tem que se limitar a uma faixa muito restrita da capacidade mecânica dos tecidos moles se deformarem sem falhar.

Muitas formas de equação para a pseudoenergia de deformação foram propostas para descrever resultados de ensaios de tensão–deformação realizados em diferentes tipos de tecido (HUMPHREY, 2003). Será destacado aqui o modelo de Fung, porque é um modelo versátil e aparece com relativa frequência na literatura sobre mecânica do parênquima pulmonar (FUNG, 1975a; VAWTER et al., 1978; ZENG et al., 1987). É interessante também ressaltar a existência de modelos baseados em modelos constitutivos para borracha isotrópica de Rivlin & Saunders (HUMPHREY, 2003), cujas variáveis são os invariantes do tensor de Cauchy–Green direito, $\mathbf{C}$ da eq. (A.11).

Modelo Fung–elástico

Com os resultados de um ensaio uniaxial em mesotélio, Fung (1993, p. 273) observou que era obtida uma relação quase linear ao desenhar o gráfico da rigidez pela tensão, como na eq.

$$\frac{dP_{11}}{d\lambda_1} = \alpha + \beta P_{11}, \quad (2.1)$$

onde $P_{11} = \|\mathbf{T}(\hat{\mathbf{N}}_1)\|$ da eq. (A.29) é a tensão observada na configuração de referência na direção do alongamento, λ_1 da eq. (A.24) é a razão desse alongamento e α e β são parâmetros do material. Esta relação é uma equação diferencial de primeira ordem, o que imediatamente

sugere uma relação exponencial de tensão-alongamento. Fung generalizou esse resultado unidimensional postulando a existência de uma função de energia por unidade de volume de pseudodeformação tridimensional:

$$w = \frac{1}{2} \{ q + c [\exp(Q) - 1] \} , \quad (2.2)$$

onde

$$q = \alpha_{ijkl} E_{ij} E_{kl} \quad (2.3)$$

e

$$Q = a_{ijkl} E_{ij} E_{kl} \quad (2.4)$$

são funções de segunda ordem, cuja variável é o tensor GL, eq. (A.15). As eq. (2.3) e (2.4) possuem a mesma estrutura da equação constitutiva do material de Kirchhoff³, eq. (A.39). c , α_{ijkl} e a_{ijkl} são constantes do material.

Dados experimentais de tensão-deformação normalmente apresentam uma relação entre o PK1 e o tensor material GL. Uma conversão simples pode ser feita no caso de um ensaio sem cisalhamento. Já que a deformação nos eixos principais, eq. (A.17), está relacionada com as razões de alongamento nos mesmos, eq. (A.24), então

$$E_{11} = \frac{1}{2} (\lambda_1^2 - 1) , E_{22} = \frac{1}{2} (\lambda_2^2 - 1) , E_{33} = \frac{1}{2} (\lambda_3^2 - 1) . \quad (2.5)$$

Pela regra da cadeia, a eq. (A.36) com a eq. (2.5) se tem

$$P_{ii} = \frac{\partial w}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial w}{\partial E_{ii}} \frac{\partial E_{ii}}{\partial \lambda_i} = S_{ii} \lambda_i . \quad (2.6)$$

Portanto, em ensaios puramente axiais a relação entre os tensores PK1 e PK2 é direta e proporcional às razões de alongamentos axiais, que são fáceis de serem medidas.

As constantes materiais são obtidas por um método de ajuste de função, como por exemplo o método de mínimos quadrados (MMQ), entre a eq. (2.6) e os dados experimentais.

³a definição do material de Kirchhoff está presente no Apêndice A.

Para a curva resultante desse processo conseguir acompanhar bem os dados experimentais em toda faixa de deformação, é interessante aplicar o método de ajuste separadamente para as constantes α de q a baixas deformações e a de Q para grandes deformações, para que cada função não interfira na minimização do erro na faixa onde a outra predomina. Por experiência, ótimas correlações são obtidas com as eq. (2.2), (2.3) e (2.4). Também é importante lembrar que materiais pseudoelásticos possuem constantes diferentes para o carregamento e descarregamento, o que é evidente ao se observar a Fig. (2.2).

A eq. (2.2) possui 163 parâmetros; 81 da eq. (2.3), 81 da eq. (2.4) e 1 que é o parâmetro c . Por isso, qualquer simplificação que elimine algumas constantes é útil, desde que seja mantida uma boa correlação entre os dados experimentais e a nova função. Em situações onde há algum grau de simetria material, muitos parâmetros materiais podem ser desprezados usando as mesmas hipóteses da teoria de elasticidade linear. Isto é, dos 81 valores da eq. (2.3) ou eq. (2.4), somente 9 são necessários para ortotropia, 5 para isotropia transversa e 2 para isotropia (HUMPHREY, 2003).

Quando existe interesse somente na faixa de grandes tensões e deformações e, portanto, não é necessário grande precisão a baixas deformações, q pode ser desprezado na eq. (2.2). Essa é uma boa simplificação em todos os casos em que se deseja prever o comportamento de tecidos moles *in vivo*, quando eles ficam normalmente tensionados em condições fisiológicas. A eq. (2.2) é então simplificada da seguinte maneira:

$$w = \frac{1}{2}c \left(e^Q - 1 \right). \quad (2.7)$$

Para considerar a incompressibilidade do tecido a eq. (A.36) pode ser modificada para

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \tilde{w}}{\partial \mathbf{E}} - p \mathbf{C}^{-1}. \quad (2.8)$$

Um multiplicador de Lagrange p é inserido nela forçando a restrição de incompressibilidade $J = 1$, definido na eq. (A.7). $\mathbf{C}$ é o tensor de Cauchy–Green direito, definido na eq. (A.11), que carrega a restrição (HUMPHREY, 2003).

2.1.6 Ensaios mecânicos

Para analisar a mecânica estrutural dos alvéolos é preciso ter um bom conhecimento do comportamento mecânico das paredes que formam esta estrutura. Um bom conhecimento sobre um material é obtido por meio de informações de ensaios, que proporcionam a formulação de uma equação constitutiva adequada. Entretanto, existem dificuldades técnicas muito grandes em se obter dados consistentes das propriedades dos septos interalveolares, devido às suas pequenas dimensões e composição fibrosa. Apesar de não ter sido encontrado na literatura nenhuma informação sobre um ensaio direto dos septos em si, foram encontrados resultados de experimentos com pedaços de parênquima e com as fibras que compõem os septos.

Abaixo serão apresentados os ensaios mecânicos do parênquima pulmonar. Os primeiros a investigar as propriedades mecânicas do parênquima pulmonar num ensaio de tensão-deformação foram Hoppin et al. (1975). Eles desenvolveram uma máquina para ensaios de tração em três eixos de cubos de parênquima de pulmão de cães. Alguns anos depois, Vawter et al. (1978) discordaram da confiabilidade dessa metodologia e desenvolveram uma nova máquina de ensaios em dois eixos para tiras quadradas de tecido. A máquina de dois eixos de Vawter et al. (1978) foi utilizada mais tarde por Zeng et al. (1987) para ensaios com amostras de pulmão humano.

Ensaio em três eixos

Hoppin et al. (1975) ensaiaram a relação de tensão e deformação em três cubos com lados de 1cm de parênquima de cães ao longo dos seus três eixos. Dois cubos foram também ensaiados em solução salina, para excluir os efeitos de tensão superficial, e o que sobrou foi congelado em configuração deformada, para ser observado em microscópio. Foram escolhidos cubos sem brônquios, grandes vasos sanguíneos ou pleura. Para aplicar uma tensão mais ou menos uniforme, foram colocados 16 pequenos anzóis em cada um dos 6 lados, puxados por finos fios de seda em paralelo. Os fios foram ligados a placas planas conectadas a um sistema de aplicação e medição de forças. A deformação foi medida por um sistema de câmera de filmar e

fitas métricas. Resultados importantes foram:

- Os corpos de prova mostraram fluência, histerese (mais nos corpos suspensos em ar do que em solução salina) e relação de tensão–deformação não-linear.
- Não foi observada nenhuma relação entre o eixo com mais complacência e a orientação do corpo em relação à pleura ou às grandes vias aéreas.
- Carregamentos simétricos nos 3 eixos mostraram respostas com maior rigidez que carregamentos assimétricos (intensidade diferente de forças em cada eixo). Isso porque em carregamentos assimétricos há deformação por reorientação das fibras na direção dos carregamentos mais intensos.

Vawter et al. (1978) argumentaram em seu artigo que este método de ensaio é precário para medir deformações e aplicar tensões controladas.

Ensaio em dois eixos

Vawter et al. (1978) realizaram um ensaio em fatias de parênquima de cão de 5.0x5.0x0.5cm numa máquina semelhante à de Hoppin et al. (1975), mas com atuadores somente nos eixos do plano da fatia. A fatia foi ensaiada mergulhada numa solução salina para excluir os efeitos de tensão superficial. Marcadores foram desenhados no plano das fatias antes delas serem instaladas na máquina, que foram utilizados para ver e eliminar as distorções locais geradas por cada pregador em cada borda, ver Fig. (2.3). Assim foi possível tornar a deformação uniforme nas bordas do corpo de provas. Esse ajuste não era possível de ser feito no ensaio em três eixos pela dificuldade de se marcar referências dentro do volume. Então, neste caso, grandes deformações próximas aos ganchos seriam sentidas pelos sensores.

As deformações foram medidas no centro do corpo de provas por processamento de imagem computacional, que acompanharam marcadores desenhados no plano. Segundo o princípio de Saint-Venant, em um corpo de provas são obtidos resultados mais precisos quando as deformações são medidas afastadas das regiões de aplicação de carregamentos, onde há

Figura 2.3: Esquema do ensaio de dois eixos (FUNG, 1993, p. 296).

concentração de tensões (FUNG; TONG, 2001, p. 355). A deformação da altura do corpo de provas foi medida por um sensor de proximidade. A desvantagem clara deste método é que ele não é capaz de aplicar carregamentos em três eixos, o que ocorre normalmente no pulmão *in vivo*. Novos resultados importantes foram:

- Verificou-se a necessidade de condicionamento das amostras para conseguir repetibilidade nos ensaios.
- Foi observado baixa sensibilidade da taxa de deformação para a rigidez e histerese.
- Observou-se que há uma relação de temperatura e rigidez do parênquima, na qual quanto maior a temperatura maior é a complacência.
- Nenhum efeito foi observado variando o pH entre 6.7 e 8.3.
- Carregamentos biaxiais aparentaram aumentar a rigidez em pequenas deformações, mas diminuir em grandes deformações. Os autores acreditaram que isso se deve à distorção dos alvéolos e reorientação dos septos a grandes deformações.

- Entre amostras de 11 cães houve variação considerável de rigidez. A uma tensão uniaxial alta, de $\sigma_x = 6 \cdot 10^{-5} Pa$, a razão de alongamento variou dentro de uma faixa $1,52 < \lambda_x < 1,68$.

Ensaio de parênquima pulmonar humano em dois eixos

Amostras de parênquima pulmonar de humanos extraídos entre 24 e 48h após a morte foram ensaiados por Zeng et al. (1987) usando o mesmo procedimento que Vawter et al. (1978). Pela experiência dos autores com coelhos, não há alteração na rigidez do pulmão até 48h após a morte, entretanto eles admitiram desconhecer o impacto do rigor mortis no músculo liso do pulmão. Os resultados que obtiveram foram muito similares aos de Vawter et al. (1978). Novos resultados importantes foram:

- Dados de tensão–deformação de parênquima humano foram aqisitados.
- O parênquima pulmonar humano é aparentemente três vezes mais rígido que o canino.
- Foi observado o efeito de relaxação.
- A rigidez foi avaliada em amostras dos diferentes lobos (ver Apêndice C). Os lobos superiores se mostraram mais rígidos, depois os inferiores e o lobo médio o mais complacente.

Todos os dados adquiridos neste e nos testes anteriores sugeriram que o tecido pulmonar pertence à classe dos materiais de comportamento pseudoelástico. Esta constatação foi importante para a formulação de uma equação constitutiva do tipo Fung–elástica. Zeng et al. (1987) aproximaram os dados coletados no seu experimento pela eq. (2.7) usando o MMQ. Como o estado de tensão é biaxial, $P_{zz} = P_{xy} = P_{xz} = P_{yz} = 0$ e a eq. (2.7) é reduzida a

$$\rho_0 W = \frac{1}{2} c \exp \left(a_1 E_{xx}^2 + a_2 E_{yy}^2 + 2a_4 E_{xx} E_{yy} \right). \quad (2.9)$$

Zeng et al. (1987) também realizaram aproximações para a hipótese que o tecido pulmonar é intrinsecamente isotrópico ($a_1 = a_2$), mas obtiveram uma soma dos erros quadrados

muito maior desta maneira. Ao se observar que a variação da tensão é mais sensível às constantes a_1 e a_2 comparativamente às c e a_4 , foi verificado que a hipótese de isotropia intrínseca adquire boa aproximação se c e a_4 forem mantidos da aproximação anisotrópica e a_1 e a_2 forem substituídos por $a = (a_1 + a_2)/2$. A média encontrada para as constantes pode ser vista na Tab. (2.2).

Tabela 2.2: Constantes materiais do parênquima pulmonar a 37°C para a eq. (2.9)

Processo	c (g/cm^2)	a_1	a_2	a_4	a
Carregamento	$11,8 \pm 1,8$	$0,43 \pm 0,05$	$0,56 \pm 0,02$	$0,32 \pm 0,06$	$0,50 \pm 0,03$
Descarregamento	$8,8 \pm 3,6$	$0,53 \pm 0,10$	$0,69 \pm 0,12$	$0,39 \pm 0,08$	$0,63 \pm 0,10$

Em testes similares em pleura visceral canina, Humphrey et al. (1987) perceberam que diferentes protocolos de carregamento aproximam constantes de material muito diferentes. Por exemplo: um carregamento equibiaxial, um uniaxial e outro com uma força constante em um dos lados, cada protocolo apresenta constantes de material muito diferentes. É possível supor que este fenômeno é universal aos tecidos moles, já que os autores o perceberam testando um material estruturalmente simples. Isso é devido aparentemente ao direcionamento das fibras em relação à deformação. Por causa disso a capacidade de uma equação semelhante a de cima descrever a relação de tensão–deformação está intrinsecamente relacionada com o protocolo de testes usado para determinar as constantes do material. Para incluir este fenômeno numa equação constitutiva, Humphrey e Yin (1987) desenvolver uma equação que inclui a direção de conjuntos de fibras. Os autores conseguiram boa aproximação para os dados experimentais de Humphrey et al. (1987) desconsiderando algumas informações sobre a distribuição das fibras, necessárias para completar a equação. Mais dados experimentais são necessários para validar esta equação constitutiva mais refinada.

2.1.7 Modelagem do septo alveolar a partir de sua microestrutura fibrosa

Outra abordagem para modelar a elasticidade do tecido pulmonar é feito reconstruindo o comportamento não-linear da matriz fibrosa dos septos por uma malha de elementos de mola não-linear. A rigidez dessas molas é proveniente de ensaios em tecidos que possuem o mesmo tipo de fibras que o septo. Em contraste com a abordagem fenomenológica, esta não ignora detalhes da microestrutura e pode em alguns casos correlacionar melhor a tensão-deformação de diferentes ensaios do que uma equação constitutiva aproximada. Também é interessante deduzir o comportamento mecânico de um tecido no caso da ausência de dados empíricos. Isso acontece com o septo interalveolar por causa dele ser pouco resistente e ter dimensões muito pequenas.

Dedução a partir de ensaio em outro tecido

A função de rigidez das molas utilizadas por Dale et al. (1980) e Kowe et al. (1986) foi conseguida a partir de um ensaio com feixes de fibras de nuca de boi feito por Carton et al. (1969). Carton et al. aproximaram os resultados por uma função, que possui uma singularidade. Levando em consideração que as redes de fibras de colágeno são funcionalmente independentes das de elastina, Denny e Schroter (1995, 2006) formularam a rigidez dos seus elementos como se fossem duas molas paralelas, uma linear para elastina e outra de forma exponencial para simular o recrutamento (esticamento) das fibras de colágeno. A vantagem da eq. (2.10), com as eq. (2.11) e (2.12), é que ela se aproxima da da equação constitutiva de Carton et al. sem apresentar singularidade.

$$\sigma = f_1(\epsilon) + f_2(\epsilon) \quad (2.10)$$

$$f_1(\epsilon) = E\epsilon \quad (2.11)$$

$$f_2(\epsilon) = 10^5 \{ \exp(a_1 \epsilon_{ln}) + \epsilon_{ln}^2 \exp([a_2 + \epsilon_{ln}]^m) - 1 \} , \quad (2.12)$$

E é o módulo de Young da elastina, a_1 , a_2 e m são constantes dos materiais, ε é a deformação infinitesimal de Cauchy, eq. (A.22), e ε_{ln} é a deformação logarítmica, eq. (A.25). A Fig. (2.4) mostra os gráficos das equações constitutivas das fibras de elastina, eq. (2.11), e de colágeno, eq. (2.12).

Figura 2.4: Propriedades mecânicas das fibras de elastina e colágeno segundo Denny e Schroter (1995). O módulo de Young da elastina é $6 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2$ e os valores das constantes da eq. (2.12) são $a_1 = 0.025$, $a_2 = 0.51$ e $m = 13$. Em vermelho está o caso em que os feixes de fibras de elastina e colágeno possuem mesma área transversal.

A equação constitutiva do colágeno, eq. (2.12), assume que inicialmente as fibras estão frouxas dentro do feixe. Quando o feixe é esticado, as fibras escorregam umas sobre as outras e se esticam desuniformemente. A curva lisa mostrada na Fig. (2.4) sugere que diferentes fibras são recrutadas (tensionadas) em momentos diferentes durante a deformação do feixe, já que, como dito anteriormente, o colágeno tem módulo de Young linear e é pouco extensível. Conhece-se com confiança somente o módulo de elasticidade de uma fibra colágeno nos dois pontos limites de deformação, por isso a escolha do autor para a eq. (2.12) é bastante arbitrária (DENNY; SCHROTER, 1995).

Dedução a partir de dados estatísticos

Maksym e Bates (1997) desenvolveram um modelo idealizado por uma série de pequenos elementos unidimensionais formulados com a rigidez em paralelo de uma fibra de elastina com outra de colágeno. A rigidez da elastina é modelada como uma mola e do colágeno como um cabo, como é visto na Fig. (2.5). O esticamento do cabo com o deslocamento de suas extremidades tenta representar o recrutamento das fibras de colágeno. Esperando explicar a curva lisa da rigidez do parênquima, a rigidez das molas e comprimento dos cabos de cada elemento da série teve um valor aleatório definido segundo distribuições probabilísticas de diâmetro e curvatura das fibras do tecido encontradas na literatura (MATSUDA et al., 1988; SOBIN et al., 1988). Também há na literatura valores das constantes de rigidez das fibras de colágeno e elastina, como as vistas na Tab. (2.1). Este modelo obteve ótima aproximação com ensaios de tensão–deformação de parênquima. Maksym et al. (1998) exploraram mais o modelo gerando malhas bidimensionais desses elementos para formar tiras de tecido.

Figura 2.5: Relação de força comprimento par um elemento de mola e cabo em paralelo. Para comprimentos abaixo de l_k a constante de mola é k_1 e acima o cabo está esticado e a constante é k_2 . l_r é o comprimento inicial do elemento (MAKSYM et al., 1998).

2.1.8 Distribuição das fibras nos alvéolos

Existem duas redes de fibras estruturais no pulmão. A primeira é proveniente do tecido conjuntivo periférico, que começa na pleura e se estende para as fissuras interlobares, os interstícios interlobulares e a vizinhança das veias pulmonares nos cantos dos alvéolos,

Fig. (C.3). Esta rede é deformada pelas mudanças de volume do pulmão. A segunda consiste de um sistema contínuo de fibras que contorna as vias aéreas e se ramifica com elas, desde a traquéia até os sacos alveolares. Ela forma o esqueleto dos dutos alveolares e contorna as bocas dos alvéolos. O septo alveolar é ligado por um lado pelas fibras terminais do sistema axial e por outro pelas fibras do sistema periférico. As fibras do septo conectam esses dois sistemas, tornando o pulmão um contínuo fibroso (WILSON; BACHOFEN, 1982; HABER et al., 1983).

A concentração de colágeno e elastina nos septos é muito menor que nos cantos e bocas dos alvéolos. A quantidade dessas fibras é aproximadamente quatro vezes menor nos septos que nas bocas dos alvéolos. A proporção de colágeno e elastina é de aproximadamente um para um em todo o alvéolo (MERCER; CRAPO, 1990).

Nos septos interalveolares a função principal da matriz extracelular é servir de suporte para o capilares alveolares, que realizam a troca dos gases. Fung e Sobin (1972) mostraram que as regiões dos postes do lençol capilar, vistas na Fig. (C.11), possuem a mesma elasticidade no plano do septo que as regiões capilarizadas. Por isso, a elasticidade da membrana é homogênea no seu plano. Isso quer dizer que a distribuição de fibras no septo é relativamente homogênea.

Muitos pesquisadores observaram que o peso do tecido pulmonar distorce os pulmões. As redes axial e periférica são tensionadas em reação ao peso dos tecidos. As simulações de West e Matthews (1972) sugerem que a maior parte do peso do pulmão deve se sustentar na rede periférica tracionada pela pressão negativa do líquido intrapleurar e somente uma parte pequena do peso chega à traquéia. Dentro do pulmão é observado que os alvéolos em maior altura em relação ao campo gravitacional ficam mais abertos e tensionados que os em menor altura.

2.1.9 Estado de pré-tensão do parênquima em condições fisiológicas

Também é conhecido que a maioria dos tecidos moles está pré-tencionada em situação fisiológica (FUNG, 1993, p. 349), pois eles se contraem, aliviando a tensão, quando são cortados no sentido transversal a suas fibras. A maior parte do parênquima pulmonar está sempre tensionada e esticada durante o ciclo respiratório, porque o líquido na pleura, que

envolve todo o pulmão, tem pressão média negativa em relação à ambiente.

(a) Fixado com glutaraldeído e deixado livre de forças externas durante a solidificação da cera (o material de impregnação).

(b) Mesmo pulmão, mas impedido de se encolher até a solidificação do material de impregnação, um plástico duro.

Figura 2.6: Fotografias de cortes histológicos do parênquima pulmonar de macaco aranha. Os processos de confecção das lâminas (a) e (b) são diferentes (FUNG, 1993, p. 247).

É comum ser visto na literatura imagens de cortes histológicos do parênquima onde ele se encontra flácido, com as paredes enrugadas (flambadas), enquanto na realidade as paredes do parênquima são planas e tensionadas no ser vivo, Fig. (2.6). Fung (1993, p. 244) diz que isso acontece porque a elastina mantém entre 40 e 70% da sua propriedade elástica quando o tecido

em que se encontra é fixado pelas substancias fixadoras usuais. A Fig. (2.6) evidencia esse fato mostrando dois cortes do parênquima pulmonar de um macaco aranha, onde o primeiro passou por um processo de fixação usual enquanto o segundo teve um tratamento especial para o tecido não contrair. Outros tecidos, como por exemplo artérias, também apresentam esse artefato em cortes histológicos, que pode dificultar a interpretação morfológica.

2.2 Morfologia idealizada do alvéolo pulmonar

Apesar da constituição geométrica do pulmão ter um padrão morfológico conhecido (ver Apêndice C), ela não é homogênea e de certa forma arbitrária. Isso torna o simples conhecimento desse padrão constitutivo insuficiente para uma análise mecânica dos seus alvéolos. Por isso, uma caracterização idealizada dos alvéolos baseada em dados morfométricos é importante.

Descrições antigas visualizavam os alvéolos como cachos de uvas, cada parede alveolar tinha uma parte “interna”, em contato com o ar, e uma “externa”, em contato com o líquido pleural que envolve o pulmão. Esta descrição foi produto da interpretação de peças moldadas a partir de metal fundido injetado nas vias aéreas (PRANGE, 2003). No século XVII, quando esta técnica foi desenvolvida, não se sabia que o peso do metal deformava o órgão e o ar não era extraído adequadamente, ficando pressionado em algumas regiões. Ainda hoje pesquisadores encontram muita dificuldade em retirar totalmente o ar dos pulmões (ZENG et al., 1987). Assim, durante a introdução do material fundido, quando ele entrava em alguma cavidade grande o suficiente para deixar o ar escapar, o seu peso deformava expandia arredondando esta cavidade e comprimia as vizinhas. O nome usado para um grupo de alvéolos próximos e interconectados por um duto alveolar é *ácino* (de cacho de uvas em latim) por causa desse artefato.

Descrições mais modernas, com base em análises histológicas (observação de cortes de tecido em microscópio) mostraram que as paredes os alvéolos dividem suas paredes com os vizinhos e formam uma estrutura similar a de favos de colméia, ver Fig. (2.6).

O ácino inclui o bronquíolo terminal e todas suas ramificações, vistas na Fig. (C.4). Como o parênquima pulmonar é a parte do pulmão onde ocorre a troca de gases, então ele é formado pelo conjunto de todos ácinos. No parênquima não é clara a diferença entre os dutos alveolares e os alvéolos. A única diferença é que os alvéolos possuem uma única entrada e os dutos mais de uma, que se ligam a outros dutos ou aos próprios alvéolos. Os dutos alveolares terminais, que só possuem saídas para alvéolos, são chamadas de sacos alveolares (HANSEN et al., 1975).

Dale et al. (1980) propuseram um modelo geométrico para o alvéolo, no qual ele tem a forma de um poliedro regular de segunda ordem com 14 faces, conhecido como tetracaidecaedro ou octaedro truncado ou simplesmente 14-edro, ver Fig. (2.7). Este poliedro possui as vantagens de ser regular, convexo e preencher o espaço quando agrupado em conjunto formando uma tesselação⁴ com outros poliedros iguais, ver Fig. (2.8). Entre os poliedros que preenchem o espaço com o mesmo volume, eles também são os que têm a menor razão entre superfície e volume (FUNG, 1988).

Figura 2.7: Poliedro de segunda ordem, com lados em forma de quadrados e hexágonos regulares.

Pode-se imaginar também que o parênquima é formado por muitos 14-edros colados uns nos outros, como na Fig. (2.8), e as vias aéreas respiratórias são formadas ao se retirar paredes para a passagem de ar. Fung (1988) demonstrou que esse modelo de parênquima com 14-edros perfurados pode imitar bem a morfometria⁵ dos ácinos, segundo as medidas de Hansen et al. (1975). A diferença estimada para a razão superfície-volume entre o parênquima assim

⁴Tesselação é a partição de um espaço num conjunto de subespaços contíguos tendo a mesma dimensão do espaço particionado. Mosaicos são exemplos de tesselação bidimensional.

⁵Morfometria é a mensuração e estudo matemático das formações e configurações dos animais e seus órgãos.

Figura 2.8: Agrupamento (ou colméia) de 14-edros preenchendo o espaço.

modelado e os valores reais encontrados na literatura é de 2,7% (TAWHAI; BURROWES, 2003). A maior falha dessa modelagem do parênquima por 14-edros é que o diâmetro e comprimento dos alvéolos e dutos são iguais para qualquer geração de ramificação, ao contrário de como é no ácino real, cujas dimensões podem cair em até 100x da primeira geração à última (aprox. 25) (HANSEN; AMPAYA, 1975).

Denny e Schroter (1996) desenvolveram um algoritmo de otimização para formar dutos alveolares e alvéolos num bloco de 14-edros e, com ele, conseguiram obter uma geometria muito semelhante aos dados de ramificação das vias no ácino encontrados na literatura morfométrica. Este algoritmo maximiza o número de alvéolos e minimiza o comprimento médio do caminho do ar até os alvéolos, utilizando *simulated annealing*.

Tawhai e Burrowes (2003) mostraram que um aglomerado de 14-edros lado a lado pode ser gerado facilmente por um diagrama de Voronoi 3D. Um diagrama de Voronoi é uma decomposição de um espaço métrico M em n regiões R associadas a n pontos $p_i \in P = [p_1, p_2, \dots, p_n]$, dado que $\bigcup R_i(p_i) = M$ e qualquer ponto $\tilde{p} \neq p_i \in R_i(p_i)$ está mais próximo de p_i do que de qualquer outro ponto $p_j \neq p_i \in P$. Um exemplo de diagrama de Voronoi pode ser visto na Fig. (2.9). O diagrama de Voronoi é um grafo dual da triangularização de Delaunay. A triangularização de Delaunay tem as propriedades que nenhum vértice de nenhum simplex⁶ pode ficar dentro de uma hipersfera de qualquer outro simplex e os conjuntos de $(n+1)$

⁶Em topologia, um simplex é uma generalização do conceito de triângulo a outras dimensões. É o invólucro

pontos não podem pertencer ao mesmo hiperplano de dimensão $(n-1)$. Em 2D a hipersfera é o círculo que passa por três pontos do simplex e em 3D é a esfera que passa por quatro pontos. A dualidade entre os dois grafos existe porque o centro das hipersferas geradoras de uma triangularização de Delaunay são os vértices de um diagrama de Voronoi e as faces de um diagrama de Voronoi bisseccionam perpendicularmente os lados de uma triangularização de Delaunay, ver Fig. (2.10). Um diagrama de Voronoi forma uma tesselação de 14-edros quando a triangularização de Delaunay forma tetraedros equiláteros.

Figura 2.9: Exemplo de diagrama de Voronoi formando uma tesselação em 2D.

(a) Com circuncírculos e seus centros.

(b) Centros dos circuncírculo conectados.

Figura 2.10: Dualidade entre a triangularização de Delaunay (preto) e diagrama de Voronoi (vermelho).

convexo de $(n+1)$ pontos independentes em $\mathbb{R}^n$.

2.3 Tensão superficial nos alvéolos

O pulmão é um trocador de massa muito eficiente, que troca moléculas entre o sangue e o ar. Apesar de trocar principalmente gases, a água presente no sangue, com pressão parcial muito maior que no ar, acaba se difundindo para fora e umedecendo as paredes dos alvéolos. A tensão superficial da película de água que reveste os alvéolos afeta significativamente a mecânica alveolar. Para diminuir o efeito da tensão superficial da película de água presente nas vias aéreas terminais, existem células nos alvéolos que produzem proteínas surfactantes muito eficientes. Uma breve descrição sobre a física da tensão superficial e o surfactante pulmonar estão presentes no Apêndice D.

2.3.1 Efeitos mecânicos

Como visto no Apêndice D, quando há surfactantes no líquido a tensão superficial depende da concentração de surfactante presente na interface ar-líquido. Durante o ciclo respiratório há alterações da área total do pulmão, o que, conseqüentemente, altera a área da superfície dos alvéolos, a concentração de surfactante na interface líquido-ar e a tensão superficial. Isto é, tensão superficial aumenta na inspiração e diminui na expiração. Na inspiração, moléculas surfactantes em excesso são recrutadas para a interface quando a concentração na superfície cai abaixo do nível de saturação, e, na expiração, a diminuição da área da interface provoca a expulsão das moléculas excedentes, como na Fig. (D.7). Esta dinâmica entre a área, concentração de surfactante na interface e tensão superficial provoca a histerese pulmonar, ver Fig. (2.11).

A tensão superficial também tem função estrutural no parênquima pulmonar, pois ela aumenta a rigidez do pulmão. Felizmente este aumento de rigidez é muito mais acentuado em volumes pulmonares próximos da CPT, já que o aumento da área superficial do parênquima reduz a concentração de surfactante na interface (SCHÜRCH et al., 2001). Por isso, a tensão superficial só contribui para a rigidez total a volumes maiores que 50% da CPT na expiração,

Figura 2.11: Curvas de pressão–volume de pulmão de gato dissecado inflado com solução salina (linha cheia) e ar (linha tracejada) (LEVITZKY, 2003, p. 24).

abaixo disso ela é muito pequena (HABER et al., 1983)⁷. Logo, a dinâmica da concentração de surfactante pulmonar na interface beneficia o pulmão duplamente, pois ela protege o pulmão com maior tensão a altos volumes e evita que o parênquima colabe com baixíssima tensão a baixos volumes.

Análises de microscopia mostraram que a tensão superficial distorce os septos alveolares no sentido dos cantos alveolares, onde a camada líquida fica arredondada. O septo se enruga nos cantos e nas bocas fica tensionado, Fig. (2.12). O reforço fibroso do esqueleto dos dutos alveolares reage ao carregamento da tensão superficial (WILSON; BACHOFEN, 1982). Apesar da tensão superficial enrugar o septo, isso não o enrijece pois ele não está tensionado. Segundo os autores, as forças da tensão superficial são transmitidas para o sistema de fibras axial dos dutos alveolares. Observe na Fig. (2.12.b) que os septos nas bocas dos alvéolos estão com suas bordas arredondadas, indicando que a força é ali transmitida radialmente. Além disso, não há correlação estatística mostrando diferença entre a complacência do pulmão ventilado com ar e solução salina (HABER et al., 1983). As dobras e enrugamentos feitos pela tensão superficial também afetam a configuração dos capilares e o movimento dos macrófagos dentro

⁷Haber et al. (1983) realizaram seus testes com intervalos de 5–10s para cada medida e o procedimento deles evitava a atelectasia, por isso seus dados diferem do que é mostrado na Fig. (2.11) para volumes menores que 50%.

dos alvéolos. Como visto na Fig. (2.12), com alta tensão superficial os septos ficam esticados e assim os capilares ficam comprimidos e não há circulação. Com os macrófagos acontece a mesma coisa, eles são achatados e têm dificuldade de se movimentarem (BACHOFEN; SCHÜRCH, 2001).

Figura 2.12: Lado esquerdo: microscopia de varredura de dutos alveolares de pulmões de coelho inflados com o mesmo volume relativo. Inflado com solução salina (a), ar com tensão superficial abaixo de 10 mN/m (b) e ar com surfactante removido com detergente e tensão superficial aproximadamente de 20(c) mN/m. Há um expressivo aumento de diâmetro médio dos dutos e mudança da morfologia. Lado direito: modelo no qual a tensão superficial é sustentada pelas fibras dos dutos alveolares (ou bocas dos alvéolos). γ , tensão superficial; PF, fibras do sistema periférico; AF, fibras do sistema axial. Figura de Bachofen e Schürch (2001).

Existe uma hipótese na literatura na qual existem regiões secas nos septos alveolares e nelas uma camada de surfactante faz interface entre o ar (apolar) e a membrana celular (polar) do epitélio alveolar (HILLS, 1999). Então os vales da rugosidade do septo formariam poças líquidas e parte da superfície do lençol capilar estaria livre do filme d'água, que é uma

resistência à difusão dos gases. Segundo o autor, a curvatura das poças líquidas fica assim convexa, o que ajuda o epitélio drenar esse líquido. Do contrário, com a curvatura concava, a tensão superficial ajudaria a sugar mais líquido do sangue, podendo causar uma reação em cadeia: mais água $\rightarrow$ menores raios $\rightarrow$ maior pressão $\rightarrow$ mais água. Talvez esse seja um efeito de superfície parecido com o efeito da pétala, que diminui a adesão nos septos, mas dificulta as gotas de água escorregarem na superfície.

Figura 2.13: A: o modelo no qual o surfactante fica somente sobre uma interface líquido-ar contínua. A geometria côncava do filme líquido nos cantos sugere que a tensão superficial cria um gradiente de pressão que sugaria mais líquido para dentro do alvéolo. B: modelo mostrando que o fluido cria poças nos vales das rugas do septo e deixa seco regiões de pico e regiões planas. Nas regiões secas o surfactante se adsorve na parede. Note que neste modelo os cantos ficam convexos porque o líquido fica contido dentro de uma membrana de surfactante. Nesse caso as bombas fisiológicas de água são auxiliadas pela pressão para extrair fluido do alvéolo enquanto no modelo convencional acontece o oposto. Figura de Hills (1999).

2.3.2 Elemento de tensão superficial

Karakaplan et al. (1982) desenvolveram um elemento finito triangular que simula a contração da interface química causada pela tensão superficial.

Considera-se um triângulo qualquer no espaço euclidiano, ver Fig. (2.14), cuja superfície é uma interface líquido-gás. As coordenadas dos vértices são

$$\mathbf{x}_i = x_{ij}\hat{\mathbf{e}}_j = x_i\hat{\mathbf{e}}_1 + y_i\hat{\mathbf{e}}_2 + z_i\hat{\mathbf{e}}_3, \quad (2.13)$$

ou seja, para o nó 1,

$$\mathbf{x}_1 = x_1\hat{\mathbf{e}}_1 + y_1\hat{\mathbf{e}}_2 + z_1\hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.14)$$

e

$$\mathbf{u}_1 = (x_1 - X_1)\hat{\mathbf{e}}_1 + (y_1 - Y_1)\hat{\mathbf{e}}_2 + (z_1 - Z_1)\hat{\mathbf{e}}_3 = u_1\hat{\mathbf{e}}_1 + v_1\hat{\mathbf{e}}_2 + w_1\hat{\mathbf{e}}_3. \quad (2.15)$$

Três vetores numéricos (não físicos) são definidos para as forças, posições e deslocamentos dos graus de liberdade do triângulo,

$$\mathbf{f} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \\ \mathbf{f}_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_{1x} \\ f_{1y} \\ f_{1z} \\ f_{2x} \\ f_{2y} \\ f_{2z} \\ f_{3x} \\ f_{3y} \\ f_{3z} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{Bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \\ x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{Bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{u} = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \\ u_2 \\ v_2 \\ w_2 \\ u_3 \\ v_3 \\ w_3 \end{Bmatrix}. \quad (2.16)$$

Com a primeira variação da energia de superfície, eq. (D.1), é possível chegar em uma relação entre força e deslocamento de cada grau de liberdade i do triângulo:

$$\delta W = \gamma \delta a = \gamma \frac{\partial a}{\partial u_i} \delta u_i = f_i \delta u_i \quad \therefore \quad f_i = \gamma \frac{\partial a}{\partial u_i}. \quad (2.17)$$

O vetor de forças internas, eq. (2.16a), é portanto

$$\mathbf{f}_{int} = \gamma \left(\frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} \right)^T. \quad (2.18)$$

Figura 2.14: Elemento triangular num espaço euclidiano.

Com a eq. (2.17) é possível obter uma matriz de rigidez tangente, pois

$$K_{Tij} = \frac{\partial f_i}{\partial u_j} = \frac{\partial}{\partial u_j} \left(\gamma \frac{\partial a}{\partial u_i} \right) = \frac{\partial \gamma}{\partial u_j} \frac{\partial a}{\partial u_i} + \gamma \frac{\partial^2 a}{\partial u_j \partial u_i}. \quad (2.19)$$

A derivada parcial $\frac{\partial \gamma}{\partial u_j}$ não é uma grandeza interessante para ser parâmetro da eq. (2.19), porque é difícil de ser obtida experimentalmente. No entanto ela pode ser transformada numa grandeza mais prática ao se definir a área relativa

$$a_* = \frac{a}{A}, \quad (2.20)$$

sendo a a área atual e A a área de referência, para aplicar a regra da cadeia

$$\frac{\partial \gamma}{\partial u_j} = \frac{\partial \gamma}{\partial a_*} \frac{\partial a_*}{\partial u_j} = \frac{1}{A} \frac{\partial \gamma}{\partial a_*} \frac{\partial a}{\partial u_j}. \quad (2.21)$$

A eq. (2.19) pode ser escrita então como

$$K_{Tij} = \frac{1}{A} \frac{\partial \gamma}{\partial a_*} \frac{\partial a}{\partial u_j} \frac{\partial a}{\partial u_i} + \gamma \frac{\partial^2 a}{\partial u_j \partial u_i} \quad \text{ou} \quad \mathbf{K}_T = \frac{1}{A} \frac{\partial \gamma}{\partial a_*} \left(\frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} \right)^T \frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} + \gamma \frac{\partial^2 a}{\partial \mathbf{u}^2}. \quad (2.22)$$

Sabe-se que o vetor área de um elemento triangular é

$$\mathbf{a} = a \hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{2} (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \times (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{e}}_1 & \hat{\mathbf{e}}_2 & \hat{\mathbf{e}}_3 \\ (x_2 - x_1) & (y_2 - y_1) & (z_2 - z_1) \\ (x_3 - x_1) & (y_3 - y_1) & (z_3 - z_1) \end{vmatrix} = a_i \hat{\mathbf{e}}_i, \quad (2.23)$$

com

$$\mathbf{a} = \begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{Bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{Bmatrix} (y_2 - y_1)(z_3 - z_1) - (z_2 - z_1)(y_3 - y_1) \\ (z_2 - z_1)(x_3 - x_1) - (x_2 - x_1)(z_3 - z_1) \\ (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (y_2 - y_1)(x_3 - x_1) \end{Bmatrix} \quad (2.24)$$

e

$$a = \|\mathbf{a}\| = \sqrt{a_i^2}. \quad (2.25)$$

Voltando para as eq. (2.18) e (2.22), ao se aplicar a regra da cadeia na primeira derivada parcial da área obtém-se

$$\frac{\partial a}{\partial u_i} = \frac{\partial a}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial u_i} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial a}{\partial \mathbf{a}} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}}. \quad (2.26)$$

Com a eq. (2.25), a primeira parcela da eq. (2.26) é

$$\frac{\partial a}{\partial \mathbf{a}} = \frac{\partial}{\partial a_k} \left(\sqrt{a_i^2} \right) \hat{\mathbf{e}}_k^T = \frac{1}{2} \frac{2}{\sqrt{a_i^2}} a_k \hat{\mathbf{e}}_k^T = \frac{\mathbf{a}^T}{a}. \quad (2.27)$$

Sabendo que $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial w}{\partial z} = 1$ e com a definição da eq. (2.24), a segunda parcela é

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial a_1}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial a_1}{\partial \mathbf{u}_2} & \frac{\partial a_1}{\partial \mathbf{u}_3} \\ \frac{\partial a_2}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial a_2}{\partial \mathbf{u}_2} & \frac{\partial a_2}{\partial \mathbf{u}_3} \\ \frac{\partial a_3}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial a_3}{\partial \mathbf{u}_2} & \frac{\partial a_3}{\partial \mathbf{u}_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial a_1}{\partial u_1} & \frac{\partial a_2}{\partial u_1} & \frac{\partial a_3}{\partial u_1} \\ \frac{\partial a_1}{\partial v_1} & \frac{\partial a_2}{\partial v_1} & \frac{\partial a_3}{\partial v_1} \\ \frac{\partial a_1}{\partial w_1} & \frac{\partial a_2}{\partial w_1} & \frac{\partial a_3}{\partial w_1} \\ \frac{\partial a_1}{\partial u_2} & \frac{\partial a_2}{\partial u_2} & \frac{\partial a_3}{\partial u_2} \\ \frac{\partial a_1}{\partial v_2} & \frac{\partial a_2}{\partial v_2} & \frac{\partial a_3}{\partial v_2} \\ \frac{\partial a_1}{\partial w_2} & \frac{\partial a_2}{\partial w_2} & \frac{\partial a_3}{\partial w_2} \\ \frac{\partial a_1}{\partial u_3} & \frac{\partial a_2}{\partial u_3} & \frac{\partial a_3}{\partial u_3} \\ \frac{\partial a_1}{\partial v_3} & \frac{\partial a_2}{\partial v_3} & \frac{\partial a_3}{\partial v_3} \\ \frac{\partial a_1}{\partial w_3} & \frac{\partial a_2}{\partial w_3} & \frac{\partial a_3}{\partial w_3} \end{bmatrix}^T = \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & (z_3 - z_2) & (y_2 - y_3) \\ (z_2 - z_3) & 0 & (x_3 - x_2) \\ (y_3 - y_2) & (x_2 - x_3) & 0 \\ 0 & (z_1 - z_3) & (y_3 - y_1) \\ (z_3 - z_1) & 0 & (x_1 - x_3) \\ (y_1 - y_3) & (x_3 - x_1) & 0 \\ 0 & (z_2 - z_1) & (y_1 - y_2) \\ (z_1 - z_2) & 0 & (x_2 - x_1) \\ (y_2 - y_1) & (x_1 - x_2) & 0 \end{bmatrix}^T = \mathbf{G}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

A derivada parcial de segunda ordem da eq. (2.22) pode ser deduzida derivando a eq. (2.26),

$$\frac{\partial^2 a}{\partial u_j \partial u_i} = \frac{\partial}{\partial u_j} \left(\frac{a_k}{a} \frac{\partial a_k}{\partial u_i} \right) = \left[\frac{\partial a^{-1}}{\partial u_j} a_k \frac{\partial a_k}{\partial u_i} + \frac{1}{a} \frac{\partial a_k}{\partial u_j} \frac{\partial a_k}{\partial u_i} + \frac{1}{a} a_k \frac{\partial^2 a_k}{\partial u_j \partial u_i} \right]$$

ou

$$\frac{\partial^2 a}{\partial \mathbf{u}^2} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left(\frac{\mathbf{a}^T}{a} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right) = \left[\frac{\partial a^{-1}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{a}^T \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} + \frac{1}{a} \left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} + \frac{1}{a} \mathbf{a}^T \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}^2} \right]. \quad (2.29)$$

A regra da cadeia é então novamente aplicada para o primeiro termo da eq. (2.29), que fica

$$\frac{\partial a^{-1}}{\partial u_j} = \frac{\partial a^{-1}}{\partial a_k} \frac{\partial a_k}{\partial u_j} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial a^{-1}}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial a^{-1}}{\partial \mathbf{a}} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}}, \quad (2.30)$$

cujo próprio primeiro termo com a eq. (2.25) é

$$\frac{\partial a^{-1}}{\partial \mathbf{a}} = \frac{\partial}{\partial a_k} (a_i^2)^{-\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{e}}_k^T = -a_k (a_i^2)^{-\frac{3}{2}} \hat{\mathbf{e}}_k^T = -a_k (a)^{-3} \hat{\mathbf{e}}_k^T = -\frac{a_k}{a^3} \hat{\mathbf{e}}_k^T = -\frac{\mathbf{a}^T}{a^3}. \quad (2.31)$$

O segundo termo tem o mesmo formato que a eq. (2.28). O terceiro termo é uma derivada parcial de segunda ordem do vetor $\mathbf{a}$ e portanto é um tensor de terceira ordem 3x9x9 obtido pela diferenciação da eq. (2.28)

$$\frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}^2} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial u_1} \left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right) \\ \frac{\partial}{\partial v_1} \left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial w_3} \left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial u_1 \partial \mathbf{u}} \\ \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial v_1 \partial \mathbf{u}} \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial w_3 \partial \mathbf{u}} \end{bmatrix}. \quad (2.32)$$

Para ser escrito aqui, o tensor da eq. (2.32), teria que ser representado por nove matrizes 3x9 dos termos diferenciados da eq. (2.28). A primeira matriz será mostrada aqui só por motivo de ilustração:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial u_1 \partial \mathbf{u}} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.33)$$

Voltando para o terceiro termo da eq. (2.29), há um vetor transposto que realiza uma

multiplicação com o tensor de terceira ordem, o que resulta em uma contração para uma matriz,

$$\mathbf{a}^T \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}^2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} & & & 0 & a_3 & -a_2 & 0 & -a_3 & a_2 \\ & [\mathbf{0}]_{3 \times 3} & & -a_3 & 0 & a_1 & a_3 & 0 & -a_1 \\ & & & a_2 & -a_1 & 0 & -a_2 & a_1 & 0 \\ 0 & -a_3 & a_2 & & & & 0 & a_3 & -a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 & & [\mathbf{0}]_{3 \times 3} & & -a_3 & 0 & a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 & & & & a_2 & -a_1 & 0 \\ 0 & a_3 & -a_2 & 0 & -a_3 & a_2 & & & \\ -a_3 & 0 & a_1 & a_3 & 0 & -a_1 & & [\mathbf{0}]_{3 \times 3} & \\ a_2 & -a_1 & 0 & -a_2 & a_1 & 0 & & & \end{bmatrix} = \mathbf{H} . \quad (2.34)$$

Com as eq. (2.30) e (2.31) a eq. (2.29) pode ser arrumada na forma

$$\frac{\partial^2 a}{\partial u_j \partial u_i} = \frac{1}{a} \left[-\frac{1}{a^2} a_k \frac{\partial a_k}{\partial u_j} a_k \frac{\partial a_k}{\partial u_i} + \frac{\partial a_k}{\partial u_j} \frac{\partial a_k}{\partial u_i} + a_k \frac{\partial^2 a_k}{\partial u_j \partial u_i} \right]$$

ou

$$\frac{\partial^2 a}{\partial \mathbf{u}^2} = \frac{1}{a} \left[-\frac{1}{a^2} \left(\mathbf{a}^T \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T \mathbf{a}^T \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} + \left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} \right)^T \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}} + \mathbf{a}^T \frac{\partial^2 \mathbf{a}}{\partial \mathbf{u}^2} \right] . \quad (2.35)$$

Então com as definições das matrizes $\mathbf{G}$ na eq. (2.28) e $\mathbf{H}$ na eq. (2.34), a eq. (2.35) pode ser simplificada para

$$\frac{\partial^2 a}{\partial \mathbf{u}^2} = \frac{1}{a} \left[-\frac{1}{a^2} (\mathbf{a}^T \mathbf{G})^T (\mathbf{a}^T \mathbf{G}) + \mathbf{G}^T \mathbf{G} + \mathbf{H} \right] . \quad (2.36)$$

Aplicando os resultados das eq. (2.26–2.28), (2.34) e (2.36) na matriz de rigidez tangente, eq. (2.22), ela é reescrita como

$$\mathbf{K}_T = \left(\frac{1}{A} \frac{\partial \gamma}{\partial a_*} \frac{1}{a^2} \right) (\mathbf{a}^T \mathbf{G})^T (\mathbf{a}^T \mathbf{G}) + \frac{\gamma}{a} \left[-\frac{1}{a^2} (\mathbf{a}^T \mathbf{G})^T (\mathbf{a}^T \mathbf{G}) + \mathbf{G}^T \mathbf{G} + \mathbf{H} \right] . \quad (2.37)$$

Da mesma forma vetor força interna, eq. (2.18), é reescrito como

$$\mathbf{f}_{int} = \frac{\gamma}{a} (\mathbf{a}^T \mathbf{G})^T . \quad (2.38)$$

2.4 Atelectasia

Atelectasia é uma condição do pulmão em que parte dele colapsa e os alvéolos ficam sem contato com ar atmosférico. A atelectasia pode ser aguda ou crônica e pode afetar todo o pulmão ou uma parte dele (GYLYS; WEDDING, 2005, p. 116). A atelectasia aguda é uma potencial complicação de alguns procedimentos cirúrgicos, especialmente os de tórax e abdome (BERSTEN; SONI, 2009, p. 466). Também pode decorrer de choques, como acidentes automotivos ou quedas de grandes alturas e de insuficiência ou dificuldade de espalhamento de surfactante (Ibid., p. 368, 1102). Atelectasia crônica pode ser causada por entupimentos de brônquios por tumores ou dobramentos da pleura. Ventilação com alta concentração de oxigênio apresenta risco de causar atelectasia por esvaziamento dos alvéolos, pois o oxigênio é absorvido pelo sangue com mais facilidade que o nitrogênio (Ibid., p. 137).

Do ponto de vista físico, a atelectasia acontece quando membranas úmidas do parênquima se tocam e as camadas líquidas que as recobrem se fundem, o que consequentemente, segundo a eq. (D.1), diminui a área superficial total e a energia de superfície. A região colabada só poderá ser recrutada se for submetida a uma tensão superior e contrária à pressão de aderência. Normalmente isso ocorre em pontos de concentração de tensão no filme líquido.

O surfactante é muito importante para descolar as membranas coladas, pois com baixa energia de superfície fica mais fácil aumentar a área da interface líquido-ar. Para isso acontecer é mais importante que o surfactante tenha um transporte rápido para a interface da nova superfície que surge repentinamente, do que uma grande redução da tensão superficial. Em muitas espécies de vertebrados, como anfíbios, répteis e mamíferos que mergulham a altas profundidades, o surfactante pulmonar não é tão poderoso em reduzir a tensão superficial da água quanto o dos mamíferos terrestres. Animais que realizam mergulhos profundos costumam expirar a maior parte do ar dos seus pulmões, autoinduzindo atelectasia, a fim de reduzir seu empuxo na água e evitar que o nitrogênio do ar preso nos pulmões se dissolva no sangue em ambientes de grande pressão hidrostática e volte a ser gás dentro dos vasos sanguíneos,

quando retornar à pressão atmosférica. Para esses animais baixa tensão superficial dificultaria a formação da atelectasia, pois o filme líquido tem menor tendência a se contrair, mas ao emergir eles precisam recrutar os pulmões para poderem respirar e o surfactante é essencial para esta atividade. Um estudo comparativo entre as propriedades tensoativas dos surfactantes de boi, ovelha e algumas espécies de pinípedes⁸ mostrou que a tensão superficial de extratos de surfactante desses animais terrestres de mesmo porte está por volta de 22 mN/m, enquanto dos pinípedes está por volta de 42 mN/m. Quando a superfície dos extratos é comprimida a tensão superficial mínima fica por volta de 1,5 e 17 mN/m, respectivamente para cada grupo de animais. A redução de área necessária para isso ocorrer é de 25 e 77%, respectivamente (MILLER et al., 2006). Quando em solo, o padrão da respiração dos pinípedes é uma breve respiração ofegante seguida de um longo período de apnéia, que é um padrão semelhante ao dos répteis. Para esses animais a principal propriedade do surfactante é a antiaderência, enquanto para os mamíferos terrestres ele também ajuda a reduzir o esforço respiratório e a tendência a formação de edema.

A contração de uma região do pulmão provoca o esticamento das regiões não afetadas pela atelectasia, o que reduz a complacência e a ventilação do pulmão como um todo. A força de adesão é proporcional à tensão superficial do líquido e à área de parênquima colabado. A distensão de outras regiões do parênquima, normalmente causada por uma pressão positiva no pulmão, pode descolar a parte colabada dependendo de sua intensidade e variação temporal. Em alguns casos algumas regiões podem se manter colabadas até altas pressões transpulmonares em torno de $30\text{cmH}_2\text{O}$ (STAMENOVIC; WILSON, 1992). Com pressões transpulmonares dessa magnitude existe um risco muito grande do intensivista causar barotrauma no pulmão de um paciente assistido por ventilação mecânica. Por isso foram desenvolvidas diferentes manobras de ventilação mecânica, com variações na aplicação de volume e pressão durante o ciclo ventilatório, para recrutar regiões com atelectasia.

⁸Ordem de mamíferos aquáticos que incluem focas, leões marinhos e focas.

2.4.1 Modelo de bolha para instabilidade alveolar

É comum encontrar em livros de fisiologia recentes (LEVITZKY, 2003, p. 24) o modelo de instabilidade alveolar baseado no fato que em um sistema com duas ou mais bolhas interconectadas por tubos, a maior pressão das menores bolhas em relação à maior, devido à eq. (D.5) da lei de Young–Laplace, gera um fluxo de gás que colapsa as menores e expande a maior ao máximo possível, como visto na Fig. (2.15). Esse modelo é usado para explicar a ocorrência de colapso alveolar e demonstrar a importância do surfactante para a estabilidade do pulmão. Segundo esse modelo, quando uma bolha diminui de volume, a concentração de surfactante na superfície aumenta e, conseqüentemente, a tensão superficial diminui. O contrário acontece quando a outra bolha aumenta de tamanho. Este efeito estabilizador da área dos alvéolos junto com a rigidez estrutural do tecido estabilizariam o pulmão intrinsicamente instável.

Figura 2.15: Modelo de instabilidade inerente de uma rede de alvéolos (LEVITZKY, 2003, p. 25).

Fung (1975b) argumenta que o pulmão não é intrinsicamente instável, como acusa o modelo de bolha, e que este modelo não representa corretamente a formação de atelectasia causada pela tensão superficial. O autor argumenta que os septos são planos, mesmo nos cantos, e a diferença de pressão entre as faces é normalmente desprezível (exceto nas faces dos alvéolos que fazem fronteira com a pleura). A imagem de uma lâmina histológica de parênquima pulmonar, vista na Fig. (2.6), mostra que as paredes alveolares são de fato planas e, portanto, as pressões transmuralis atuam como na Fig. (2.16).

Figura 2.16: Pressão atuando no parênquima pulmonar (FUNG, 1975b).

O resultado de um experimento que mede a tensão superficial em alvéolos *in situ* é outro indício de que o modelo de bolha não é adequado para explicar o colapso alveolar. O experimento consiste em depositar uma pequena gota de um líquido hidrofóbico com uma pequena agulha na superfície de um alvéolo para observar o seu diâmetro, que é proporcional à tensão superficial do filme líquido na parede do alvéolo. Em condições estáticas foi observado que a tensão superficial é a mesma para todos os alvéolos acessíveis para medição, independentemente do seu tamanho (SCHÜRCH et al., 2001). Portanto, alvéolos menores não devem ser estáveis simplesmente por terem tensão superficial menores que alvéolos maiores.

Por outro lado, há possibilidade de ocorrer atelectasia quando existir desequilíbrio de concentração de surfactante em diferentes partes do pulmão (WILSON, 1982; STAMENOVIC; WILSON, 1992). O resultado disso é o mesmo indicado pelo modelo de bolha, mas a causa não é uma diferença de curvatura ou diâmetro médio dos alvéolos, como pressupõe esse modelo. Todo o filme de camada líquida do pulmão tem a tendência de se contrair para diminuir a energia de superfície, mas esta tendência é maior na parte do pulmão com maior tensão superficial. Então a parte com maior tensão superficial deve se encolher, puxando resto do pulmão que se estende. Quando esse desequilíbrio de tensão superficial for grande as membranas da região contraída podem vir a se encostar, colabando a região.

2.4.2 Adesão nas membranas celulares

A adesão é a tendência de duas fases químicas ficarem grudadas devido às forças moleculares de atração (BUTT; KAPPL, 2010, p. 219). Apesar da literatura biomédica abordar a tensão superficial como a causa da atelectasia, não foram encontrados estudos tribológicos da superfície dos septos. O mecanismo da adesão dos septos e as forças nele envolvidas ainda não estão bem compreendidos.

Há na literatura estudos tribológicos que demonstram a relação adesiva entre células (EVANS, 1985a, 1985b) e uma célula entre superfícies rígidas (LIN; FREUND, 2007). Esses estudos mostram que no início do contato as membranas se aderem devido à atração molecular entre (principalmente) as proteínas e glicoproteínas da superfície celular. Com o tempo mais proteínas e glicoproteínas migram para a região de contato e a força de adesão é aumentada. Então existe uma adesão de curto prazo e uma de longo prazo. Dependendo da célula a adesão de longo prazo pode ter intensidade e tempo de resposta muito diferente. Um tipo de célula também pode possuir receptores específicos. Por exemplo, os macrófagos possuem concentração maior de algumas proteínas na membrana e citoesqueleto que as transporta com uma velocidade maior para a região de contato.

O que ocorre na superfície do endotélio do parênquima pulmonar é uma incógnita. É possível que o epitélio do parênquima pulmonar possua proteínas autorrepelentes e exista um mecanismo antiadesivo parecido com o que acontece entre o endotélio e as células e proteínas do sangue. Caso isso não ocorra, também é possível que um contato por um período prolongado cause um aumento significativo das forças de adesão, o que dificultaria o recrutamento. Além disso, a relação entre o surfactante e a superfície da membrana celular do epitélio também ainda não está esclarecida, como mostra a Fig. (2.13). Essas questões tribológicas precisam ser verificadas experimentalmente.

3 METODOLOGIA

A revisão bibliográfica mostrou que existe na literatura a maioria dos componentes para a construção de um modelo estrutural de alvéolo capaz de simular o parênquima estendido. No entanto, para a construção de um modelo que também seja capaz de simular o colapso e recrutamento, um modelo de contato adesivo precisa ser formulado. Devido à falta de dados experimentais, algumas hipóteses, que talvez não sejam realistas, precisam ser tomadas.

Aqui será apresentado um modelo numérico simples de contato com adesão entre superfícies úmidas. Para a validação do modelo, ele será aplicado em uma simulação de uma estrutura simplificada de membrana. A simulação será feita com o método dos elementos finitos (MEF). Como problemas que envolvem grandes deformações, rotações e, principalmente, contato não são lineares, será necessário utilizar um algoritmo de busca de solução não-linear para encontrar as configurações de equilíbrio do sistema.

3.1 Função de contato com aderência

Convencionalmente problemas de contato seco no MEF usam métodos de otimização para um funcional de energia e a reação de contato surge como uma restrição geométrica dessa otimização. Alguns exemplos de métodos de restrição são o dos multiplicadores de Lagrange, das penalidades e do lagrangiano aumentado (BANDEIRA, 2001; NETO, 2009; BELYTSCHKO et al., 2000).

Um único modelo de contato com aderência para o MEF foi encontrado na literatura, cuja aplicação é para simulações de adesão entre sólidos causada por adesivo polimérico e não

por tensão superficial (TALON; CURNIER, 2003). O modelo de contato de Talon e Curnier (2003) tem a vantagem de reunir em um conjunto de equações os fenômenos de contato, adesão normal e tangencial, atrito, dano no adesivo e descolamento, mas tem a desvantagem de ser muito complexo. Ele também surge como uma série de equações de restrição para um funcional de energia e os métodos das penalidades e do lagrangiano aumentado são empregados num problema de otimização. Este modelo também mostrou ter aplicação na simulação de propagação de trincas (LORENTZ, 2008).

O modelo de contato adesivo desenvolvido aqui é muito mais simples. A formulação dele se baseia em uma série de hipóteses apresentadas a seguir e ilustradas na Fig. (3.1).

3.1.1 Hipóteses

- h1. O filme líquido é contínuo sobre as duas superfícies de cada membrana. A uma altura h da superfície as forças de atração molecular são percebidas (ver Fig. (3.1g)). A distâncias maiores do que esta, $d > 2h$, as forças de atração são desprezíveis.
- h2. A uma distância $d \approx 2h \doteq d_2$ os filmes líquidos começam a se atrair (ver Fig. (3.1b)) e um menisco é formado entre as duas superfícies (ver Fig. (3.1c)).
- h3. Na região do menisco, ou de contato, existe uma pressão de aderência conforme a Lei de Young–Laplace, eq. (D.4).
- h4. A superfície do menisco possui dois raios de raio de curvatura, mas somente o raio proporcional à distância é considerado $r = r_1 = d/2$ (ver Fig. (3.1d)). O segundo raio é desprezado na eq. (D.4), por ser muito maior ($r_2 \gg r_1$). Então pressão de aderência fica

$$\tilde{p}_{ad}(d) = -\frac{2\gamma}{d}. \quad (3.1)$$

- h5. A uma distância d_1 as rugosidades da superfície se encostam e aparece uma força de reação ao contato (ver Fig. (3.1d)). Nesta distância a pressão de adesão é máxima, ou seja, $\max(p_{ad}(d)) = p_{ad}(d_1)$. A força de reação de contato cresce com maior intensidade que a de adesão, quando a distância se aproxima de zero.

Figura 3.1: Esquema do contato adesivo entre duas superfícies. (a) Aproximação. (b) A força de atração molecular atrai o líquido para a região em que as superfícies estão mais próximas. (c) Os filmes líquidos se fundem e mais líquido é atraído para a região. (d) A aproximação termina quando a rugosidade das superfícies se encostam. (e) Afastamento das superfícies. (f) Superfícies descoladas. (g) Detalhe do contato mostrando as variáveis geométricas.

h6. O trabalho da adesão é reversível. Ou seja, o trabalho para descolar as superfícies é igual ao trabalho que as forças de atração fizeram para aderir.

3.1.2 Equacionamento

A eq. (3.1) possui alguns problemas práticos. Ela é uma hipérbole sempre negativa, pois $d \in \mathbb{R}_+$. É necessário que a aderência aja somente dentro da faixa $d_1 < d < d_2$, para estar de acordo com as hipóteses h1 e h5. Também é preciso incluir a condição de contato que evita a interpenetração

das superfícies. Foi decidido formular uma equação de pressão $p_\gamma(d)$, que fosse $p_\gamma(d > d_2) \approx 0$, se aproximasse da eq. (3.1) em $d_1 < d < d_2$, crescesse com uma taxa alta quando $d \rightarrow 0$ e $p_\gamma(0) > 0$ e tivesse primeira derivada lisa.

Há algumas possibilidades para a função $p_\gamma(d)$, que pode ser separada em porção de contato $p_c(d)$ e porção de aderência $p_{ad}(d)$,

$$p_\gamma(d) = p_c(d) + p_{ad}(d) , \quad (3.2)$$

$$p'_\gamma(d) = p'_c(d) + p'_{ad}(d) . \quad (3.3)$$

A equação de reação de contato foi escolhida como

$$p_c(d) = p_{c_0} e^{-\alpha d} , \quad (3.4)$$

onde $p_{c_0} = p_c(0)$. É definido que na distância d_1 a pressão do contato é um por cento da mesma em $d = 0$, então α é uma constante assim calculada:

$$p_c(d_1) = 0,01 p_c(0) \quad \Leftrightarrow \quad \alpha = \ln \frac{100}{d_1} . \quad (3.5)$$

A derivada da pressão de contato é

$$p'_c(d) = -\alpha p_{c_0} e^{-\alpha d} . \quad (3.6)$$

A classe das funções sigmoidais possui propriedades interessantes para aproximar a eq. (3.1) em $d_1 < d < d_2$, elas formam um degrau liso (forma de “S” mostrada na Fig. (3.2)) dentro do intervalo e são assintoticamente constantes fora dele. São exemplos de função sigmoideal as funções logística, arcotangente, tangente hiperbólica e a função erro *erf*. Por praticidade, será usada a função logística

$$p_{lg}(t) = \frac{1}{1 + e^{-t}} , \quad (3.7)$$

cuja derivada é

$$p'_{lg}(t) = \frac{e^{-t}}{(1+e^{-t})^2} = p_{lg}(1-p_{lg}) , \quad (3.8)$$

cujos gráficos podem ser vistos na Fig. (3.2).

Figura 3.2: Gráficos da função logística, eq. (3.7).

Para a eq. (3.7) aproximar a eq. (3.1) algumas adaptações precisam ser feitas.

Transformando o intervalo $d : [d_1, d_2]$ para $t : [-5, 5]$ da eq. (3.7), obtém-se

$$t(d) = \frac{10}{d_2 - d_1} \left[d - \left(\frac{d_1 + d_2}{2} \right) \right] \quad (3.9)$$

$$t'(d) = \frac{10}{d_2 - d_1} . \quad (3.10)$$

Para $p_{ad}(d_1) \approx \tilde{p}_{ad}(d_1)$ e $p_{ad}(d_2) \approx 0$, as eq. (3.7) e (3.8) são transformadas em

$$p_{ad}(d) = \frac{2\gamma}{d_1} [1 - p_{lg}(t(d))] \quad (3.11)$$

$$p'_{ad}(d) = \frac{2\gamma}{d_1} t'(d) p'_{lg}(t(d)) . \quad (3.12)$$

Finalmente, é escolhido um valor para a p_{c_0} da eq. (3.4), tal que $p_\gamma(0) = \tilde{p}_{c_0}$, com $\tilde{p}_{c_0}$

sendo um valor desejado. Com a as eq. (3.4) e (3.11) na eq. (3.2) e $d = 0$,

$$p_\gamma(0) = p_{c_0} - \frac{2\gamma}{d_1} = \tilde{p}_{c_0} \quad \Leftrightarrow \quad p_{c_0} = \tilde{p}_{c_0} + \frac{2\gamma}{d_1} \quad (3.13)$$

e as eq. (3.2) e (3.3) estão completas, e podem ser respectivamente visualizadas nas Fig. (3.3) e (3.4). A eq. (3.3) é a tangente da eq. (3.2), que é necessária para a solução do método de Newton–Raphson.

Figura 3.3: Gráficos de pressão mostrando a Lei de Young–Laplace em azul ($\tilde{p}_{ad}$ da eq. (3.1)) o contato seco em vermelho (p_c da eq. (3.4)) e a equação constitutiva de contato com aderência em preto (p_γ da eq. (3.2)). Os parâmetros das equações são: $\gamma = 7,5 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$, $d_1 = 3 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, $d_2 = 7 \cdot 10^{-6} \text{ m}$, $p_{c_0} = 2 \cdot 10^4 \text{ Pa}$.

3.2 Teste para a verificação da função

Para avaliar a viabilidade da eq. (3.2) com as eq. (3.4) e (3.11) é necessário realizar uma simulação com parâmetros de material e geometria com as mesmas ordens de grandeza de

Figura 3.4: Gráfico da derivada da equação constitutiva de contato com aderência (p'_γ da eq. (3.3)). Mesmos parâmetros da Fig. (3.3).

um alvéolo, já que a tensão superficial é um fenômeno com grande intensidade nessa escala. É importante frisar, que o interesse aqui é no contato e as ordens de grandeza elásticas e geométricas do septo alveolar, não sendo necessário haver precisão geométrica.

3.2.1 Geometria idealizada para o teste

Uma geometria muito simples foi utilizada para aproximar um alvéolo. Como pode ser visto no Apêndice C, os alvéolos humanos possuem diâmetro médio de $D \approx 0,3mm$. Simplificando para 2D, uma seção central de uma esfera com este diâmetro é uma circunferência com perímetro $P = \pi D \approx 0,9mm$. Pode-se então tomar um retângulo com mesmo perímetro $P = 2(l_1 + l_2) \approx 2(0,30 + 0,15)mm$, como mostra a Fig. (3.5). Esta é uma aproximação bastante razoável já que algumas porções do pulmão costumam se deformar de maneira não uniforme.

Figura 3.5: Aproximação geométrica de uma circunferência para um retângulo com mesmo perímetro.

Em duas dimensões, a membrana do septo interalveolar é simulada com elementos de barra não-linear de primeira ordem isoparamétricos (FELIPPA, 2001, p. 8–1). A equação constitutiva é o modelo de material de Kirchhoff. O valor do módulo de Young do colágeno $E = 10^9 Pa$, apresentado na Tab. (2.1), foi escolhido para a constante de material da eq. (A.38). É sabido que apesar do módulo de Young (E) e a constante de material (C^{SE}) serem constantes que relacionam medidas diferentes, quando as deformações são pequenas essas medidas se aproximam (isto é, $P_{11} \approx S_{11}$ e $\varepsilon_{11} \approx E_{11}$). A Tab. (2.1) indica que a deformação máxima do colágeno é $\varepsilon_{max} = 2\%$. O erro da aproximação de E para C^{SE} com esta deformação é de 1%, o que torna esta aproximação aceitável. Usar a constante do colágeno é razoável, pois é esta fibra que resiste a grandes deformações, como é o caso deste experimento numérico.

A espessura da seção estrutural de colágeno é difícil de ser estimada, já que nessa escala o colágeno é visto em feixes de fibras, que não formam um contínuo. No entanto, como visto anteriormente, os feixes de colágeno costumam ter diâmetro médio entre 0,2 e $12 \mu m$ (FUNG, 1993, p. 256). Considerando a seção da membrana da geometria da Fig. (3.5), que por um lado tem o comprimento do alvéolo (l_1) e do outro uma altura (h) equivalente à espessura das fibras de colágeno, uma área razoável para a seção para a barra poderia ser $A_{barra} = l_1 \cdot h = 3 \cdot 10^{-4} \cdot 1,3 \cdot 10^{-6} \approx 4 \cdot 10^{-10} mm$.

Foi definido arbitrariamente que a altura do filme líquido é de $3,5 \mu m$, o que significa pela hipótese h2 que a adesão começa a uma distância $d_2 = 7 \cdot 10^{-6} m$ entre as membranas.

A distância da interferência da rugosidade, hipótese h5, também foi escolhida arbitrariamente, com o valor de $d_1 = 3 \cdot 10^{-6}m$.

3.2.2 Ensaio numérico

Algumas observações sobre o algoritmo do ensaio numérico para testar a eq. (3.2) estão presentes na seguinte lista:

- Diferentes níveis de pressão transmural p_{tm} podem ser aplicadas na estrutura a cada passo da simulação.
- A não-linearidade da pressão atuando na estrutura que se deforma é negligenciada. A pressão transmural é aproximada por um carregamento distribuído no sentido vertical e de mesma intensidade para todos os elementos, independentemente do comprimento atual de cada um.
- A malha é flexível somente na parede alveolar superior, com oito elementos de barra. Cada nó livre possui um nó par de contato a $l_2 = 0,15mm$ abaixo dele. Juntos fazem um elemento de contato com geometria de linha, cuja equação constitutiva é a eq. (3.2).
- Por sua característica, ver Fig. (3.4), os elementos de contato apresentam instabilidades em pontos limite. Por isso, foi necessário aplicar o método da corda¹.
- Para a solução do método da corda o fator de carregamento (λ da eq. (B.10)) equivale à pressão transmural na unidade cmH_2O .
- Como o interesse está em encontrar as pressões com que o sistema colapsa e recruta, o método da corda é inicializado para a pressão subir ou descer em direção a um nível de pressão transmural desejado. O trajeto que a solução percorre para encontrar o nível de pressão desejado só é de interesse para a convergência do método. Na prática, somente a configuração de equilíbrio final interessa.

¹Ver Apêndice B.

- A tensão superficial escolhida para a simulação é de $\gamma = 7,5 \text{ mN/m}$, que está dentro da faixa de valores encontrados *in vivo*.
- Os elementos de barra são inicializados com uma pré-tensão diferente de zero, mas desprezível em comparação com as tensões encontradas nos elementos sobre um carregamento de $p_{tm} = 1 \text{ cmH}_2\text{O}$. Uma malha em série de elementos de barra é singular, pois apresenta deslocamentos de corpo rígido, a menos que a estrutura esteja tracionada.

4 RESULTADOS

Nas Fig. (4.1–4.14) estão apresentadas as deformações causadas por uma sequência de pressões transmuralis p_{tm} . As linhas vermelhas cheias representam os elementos de barra nas suas configurações atuais e as tracejadas nas suas posições de referência. A linha traço-ponto azul indica a posição vertical onde começa e termina a adesão e a preta contínua representa a parede estática da membrana inferior.

A pressão transmural é diminuída gradualmente entre as Fig. (4.1) e (4.5). A primeira figura a apresentar adesão (do nó 5) foi a Fig. (4.4). A região em adesão aumenta (para os nós 4 e 6) na Fig. (4.5). A partir da Fig. (4.6) a pressão transmural aumenta gradualmente até as forças de adesão serem vencidas na Fig. (4.9). Da Fig. (4.10) à Fig. (4.14) a pressão transmural diminui gradualmente até retornar a zero.

Figura 4.1: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 0,0 \text{ cmH}_2\text{O}$. Configuração inicial.

Figura 4.2: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -1,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.3: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -4.0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.4: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -8.0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.5: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = -12,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.6: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 0,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.7: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 13,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.8: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 30,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.9: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 30,5 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.10: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 13,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.11: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 8,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.12: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 4,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.13: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 1,0 \text{ cmH}_2\text{O}$.

Figura 4.14: Simulação do colapso e recrutamento do modelo. $p_{tm} = 0,0 \text{ cmH}_2\text{O}$. Configuração final.

A Fig. (4.15) é um gráfico de pressão–área da seção do alvéolo e mostra claramente a histerese causada pela adesão. O valor da área da seção do alvéolo idealizado foi calculada pelo método de integração dos trapézios (HUMES et al., 1984, p. 159). Os pontos em evidência coincidem com as configurações mostradas nas Fig. (4.1–4.14).

Figura 4.15: Gráfico de área–pressão da seção do alvéolo idealizado mostrando histerese.

É interessante observar a trajetória vertical dos nós livres. Na Fig. (4.16) é vista a trajetória de uma metade simétrica da membrana. Na Fig. (4.17) é mostrado em detalhe os nós que sofrem aderência e descolamento.

Figura 4.16: Curvas de pressão-deslocamento vertical dos nós de metade da membrana.

Figura 4.17: Ampliação da Fig. (4.16) para evidenciar a curva do deslocamento vertical dos nós que sofreram adesão, os nós centrais 4 e 5.

A Fig. (4.15) apresenta somente a transição entre as configurações mostradas nas Fig. (4.1–4.14), não mostra nenhuma informação sobre a trajetória de equilíbrio do sistema, como faz a Fig. (4.16). Um gráfico similar à Fig. (4.15), mas mostrando a trajetória de equilíbrio resultante dos passos do método da corda é mostrado na Fig. (4.18).

Figura 4.18: Gráfico de área–pressão da seção do alvéolo idealizado mostrando a trajetória de equilíbrio.

5 DISCUSSÃO

Houve dois grandes avanços em relação ao trabalho desenvolvido anteriormente (HELLMUTH, 2006; HELLMUTH et al., 2007): (1) o modelo atual apresenta resultados cujas grandezas físicas possuem a mesma ordem de grandeza das observadas experimentalmente e (2) a adesão e o descolamento são claramente observados com o novo modelo de contato adesivo. O modelo anterior não utilizava um método adequado para simular fenômenos não-lineares. Ele empregava o método dos elementos finitos linear com a não linearidade corrigida no vetor das forças externas e a trajetória dos nós da estrutura não era computado.

As Fig. (4.1–4.14) são uma sequência de imagens que remontam a mecânica esperada intuitivamente. Cada ponto em evidência na Fig. (4.15) corresponde a uma figura da sequência (4.1–4.14) em sentido anti-horário, partindo e terminando em $p_{tm} = 0,0 \text{ cmH}_2\text{O}$. A curva da Fig. (4.15) possui a mesma morfologia da histerese observada experimentalmente no pulmão que é colapsado e em seguida recrutado, Fig. (2.11). O recrutamento na Fig. (2.11) não é tão abrupto quanto na Fig. (4.15), porque ali está demonstrado o recrutamento de um pulmão inteiro e não somente de um único alvéolo. No pulmão inteiro diferentes alvéolos são recrutados em diferentes níveis de pressão. O fenômeno da variação da concentração de surfactante, e consequentemente da tensão superficial, também é observado na Fig. (2.11) mas não na Fig. (4.15).

A Fig. (4.16) mostra a trajetória vertical que os nós da estrutura de barras percorrem em função da pressão transmural. O movimento horizontal não foi apresentado, porque os efeitos de contato agem só na vertical e a amplitudes dos movimentos verticais são muito maiores que as dos horizontais. É possível observar dois níveis de picos de pressão, que correspondem ao

grudar ou desgrudar do nó central (nó 5) e o dos nós ao lado dele (nó 4 e seu par simétrico, nó 6). O nível de pressão transmural menor $p_{tm} \approx 14 \text{ cmH}_2\text{O}$ corresponde à pressão de aderência do nó central e o nível de pressão maior $p_{tm} \approx 30 \text{ cmH}_2\text{O}$ à pressão de aderência dos primeiros nós a cada lado do central. A Fig. (4.17) está presente para destacar o movimento dos nós centrais, os que sofrem o efeito da aderência. É importante lembrar que a condição de aderência é reversível, que em outras palavras quer dizer que o trabalho necessário para grudar e desgrudar é conservativo.

Do ponto de vista de estabilidade estrutural, são observados pontos limite na condição de aderência, e por isso foi necessário utilizar o método da corda. Sem o método da corda, a posição dos nós entrando ou saindo da configuração de aderência apresentava saltos de configuração (“snaps”) intermediários à solução do algoritmo de Newton–Raphson, o que arrastava indevidamente outros nós para posições de instabilidade e, conseqüentemente, levava à divergência do algoritmo ou a resultados errados.

A solução controlada torna possível encontrar resultados intermediários aos saltos de configuração, que normalmente são muito breves para serem observados experimentalmente. Para conciliar os resultados numéricos com o que é observável experimentalmente, a Fig. (4.15) mostra somente a configuração de equilíbrio encontrada para a pressão transmural desejada (pontos em evidência) e desconsidera a trajetória de equilíbrio percorrida. Caso as trajetórias fossem desconsideradas, a morfologia da Fig. (4.15) seria parecida com a da Fig. (4.16). Ela não seria uma curva fechada e as barreiras de energia do contato adesivo estariam presentes, como mostra a Fig. (4.18).

A curva aberta da Fig. (4.18) indica que o trabalho da adesão com tensão superficial constante é conservativo, que está de acordo com a hipótese h6 da função de contato, eq. (3.2). A histerese é uma característica de sistemas não-conservativos e só aparece nos resultados do modelo quando há saltos de atravessamentos do sistema, das condições descolado para colado e colado para descolado. Os saltos acontecem quando o equilíbrio do sistema não é controlado. O trabalho realizado nos saltos não é conservativo. As condições de colado e descolado são

condições de mínimo de energia potencial, que possuem uma barreira de energia entre elas, ver Fig. (5.1). É possível ver na Fig. (4.17) os nós 4 e 5 subindo e descendo uma barreira, mas de pressão transmural, que tem pico nas proximidades de $y = -1,43 \cdot 10^{-4} m$.

Figura 5.1: Gráfico de energia potencial E_P por configuração u de uma estrutura hipotética com adesão que sofre adesão conservativa.

6 CONCLUSÕES

A revisão bibliográfica multidisciplinar realizada neste trabalho serve de base para o desenvolvimento de modelos de alvéolos propriamente ditos. Um modelo capaz de simular a dinâmica do colapso e recrutamento alveolar próxima do real necessita dessas informações devido à sua complexidade. Um elemento imprescindível para a construção de um modelo de alvéolo, mas que não foi encontrada na literatura, é um modelo de contato que inclui o efeito adesivo da tensão superficial. A revisão permitiu também o desenvolvimento de um modelo de contato desse tipo, porque ajudou na escolha dos parâmetros do modelo e de uma estrutura para verificar sua viabilidade.

O modelo de contato adesivo aqui proposto consegue reproduzir a curva de histerese observada no colapso e recrutamento de uma população de alvéolos, inclusive em concordância com as ordens de grandezas das unidades físicas envolvidas. O recrutamento é provocado em pressões maiores que as do colapso, que é uma assimetria observada experimentalmente. No entanto ele não reproduz os aspectos dissipativos da dinâmica pulmonar, como o escoamento viscoso do filme líquido e da variação da concentração de surfactante na superfície.

A maior vantagem deste modelo é que ele pode ser incorporado ao método dos elementos finitos estrutural, permitindo assim que grandes populações de alvéolos possam ser analisadas de forma um pouco mais realista. Outra grande vantagem desse modelo é que seus parâmetros podem ser ajustados com medidas experimentais. A magnitude da adesão na superfície dos alvéolos ainda precisa ser medida experimentalmente. A relação tribológica entre o surfactante, o filme líquido e a superfície da membrana celular do epitélio também precisa ser melhor compreendida.

Mesmo sem ter parâmetros confiáveis para uma avaliação mais precisa da intensidade das forças de adesão, o modelo de contato com parâmetros aproximados já possibilita simular aspectos não encontrados na literatura.

APÊNDICE A – ALGUMAS NOÇÕES DE MECÂNICA DOS MEIOS CONTÍNUOS

A mecânica dos meios contínuos estuda a cinemática e a dinâmica interna de sólidos, líquidos e gases e a deformação espacial desses materiais. Para simplificar esse tipo de análise é assumido que a matéria é distribuída continuamente, sem espaços vazios (isto é, desconsiderando a estrutura molecular da matéria). Esta matéria hipotética é chamada de *contínuo*. Em essência, dentro do contínuo todas grandezas, como densidade, deslocamentos, velocidades, tensões etc., podem variar continuamente, de forma que suas derivadas espaciais existem e são contínuas. A hipótese do contínuo permite que um volume arbitrário infinitesimal seja reduzido a um ponto, de forma que as medidas de interesse possam ser definidas neste ponto.

O domínio da mecânica dos meios contínuos é imprescindível para a análise de elementos finitos de grandes deformações. Quando um corpo sofre uma grande deformação, a hipótese de deslocamentos infinitesimais, utilizada na formulação de elementos finitos convencional, não é mais razoável, e então se torna necessário aplicar a teoria de *deformações finitas* presente na mecânica de meios contínuos. Nesta sessão serão apresentados somente os conceitos básicos necessários para a compreensão do restante do texto. Definições e explicações mais aprofundadas são encontradas na literatura específica de mecânica de meios contínuos e elementos finitos não-linear. Alguns títulos dessa literatura: Belytschko et al. (2000), Fung e Tong (2001), Reddy (2008), Wriggers (2008).

A.1 Álgebra tensorial

As equações da mecânica dos meios contínuos utilizam a álgebra tensorial, que é uma generalização da álgebra vetorial para entidades com dimensão maior que a do vetor. Existem grandezas físicas que não são nem grandezas escalares nem vetoriais, mas relacionam conjuntos de vetores. Por exemplo, o tensor das tensões toma um vetor normal unitário e produz um vetor de tensão, portanto ele relaciona o conjunto dos vetores unitários com o conjunto dos vetores de tensão. Grandezas encontradas em descrições analíticas de fenômenos físicos podem ser classificadas de acordo com a quantidade de vetores linearmente independentes (ou dimensões) que elas relacionam. Escalares não possuem nenhum valor vetorial (ou dimensão), vetores possuem um tamanho relacionado a uma direção e tensores de segunda ordem um valor de tamanho relacionados a dois de direção. Assim, na álgebra tensorial, um escalar é um tensor de ordem zero, um vetor é um tensor de primeira ordem e uma matriz um tensor de segunda ordem. Em mecânica dos meios contínuos é comum utilizar tensores até de ordem quatro.

Na literatura recente não existe uma notação padrão para diferenciar a ordem dos tensores. Na notação aqui empregada um escalar sempre será representado por uma letra simples e um tensor de ordem um ou maior por uma letra em negrito, com sua ordem explicitada no texto. Alguns que aparecem no texto: escalar densidade ρ (ordem 0), vetor posição $\mathbf{x}$ (ordem 1), tensor de deformações de Green–Lagrange $\mathbf{E}$ (ordem 2) e tensor de módulos tangenciais elásticos $\mathbf{C}^{SE}$ (ordem 4).

A.1.1 Convenção da somatória

As equações dos meios contínuos possuem, especialmente em três dimensões, longas expressões somando muitos termos. Geralmente esses termos possuem estrutura similar, porque representam os componentes de um tensor. Por exemplo, o vetor $\mathbf{x}$ é representado por:

$$\mathbf{x} = x_1 \hat{\mathbf{e}}_1 + x_2 \hat{\mathbf{e}}_2 + x_3 \hat{\mathbf{e}}_3 = \sum_{i=1}^3 x_i \hat{\mathbf{e}}_i ,$$

onde $\{\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3\}$ é uma base ortonormal. A *convenção da somatória* (ou *convenção de Einstein*) considera implícito o operador somatório e somente os índices são escritos. Na maioria dos casos a somatória é de 1 até 3 dimensões, mas em modelagens de cascas e membranas costuma ser avisado que a somatória vai até duas dimensões. Por exemplo, com a convenção da somatória o vetor $\mathbf{x}$ pode ser simplesmente escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{x} = x_i \hat{\mathbf{e}}_i .$$

Quando o índice aparece dos dois lados da equação, ela representa a igualdade do valor da quantidade do lado esquerdo para qualquer que seja o valor do índice. Por exemplo, a seguinte equação

$$a_i = b_i c_j d_j$$

vale para qualquer valor de i . Isto é,

$$a_1 = b_1 (c_1 d_1 + c_2 d_2 + c_3 d_3)$$

$$a_2 = b_2 (c_1 d_1 + c_2 d_2 + c_3 d_3) .$$

$$a_3 = b_3 (c_1 d_1 + c_2 d_2 + c_3 d_3)$$

A.1.2 Operadores

Produto tensorial

Um tensor é definido pelo produto tensorial entre vetores, representado pelo operador $(\otimes)$ (WRIGGERS, 2008, p. 509). O tensor de segunda ordem, também chamado de díade, é definido como dois vetores de espaços diferentes lado a lado agindo como uma unidade (REDDY, 2008, p. 42). Dados os vetores $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$, $\mathbf{z} \in W$, a díade

$$\mathbf{T} = \mathbf{z} \otimes \mathbf{y}$$

é formada, tal que

$$\mathbf{T}\mathbf{x} = (\mathbf{y} \cdot \mathbf{x})\mathbf{z}.$$

É comum um tensor ser definido por uma combinação linear entre os vetores das bases dos espaços vetoriais. Por exemplo, dadas as bases $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ de V e $\{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \mathbf{w}_3\}$ de W , um tensor que transforma qualquer vetor da primeira em outro de outro tamanho e orientação, mas na segunda base é

$$\mathbf{T} = T_{ij}\mathbf{w}_i \otimes \mathbf{v}_j = T_{11}\mathbf{w}_1 \otimes \mathbf{v}_1 + T_{12}\mathbf{w}_1 \otimes \mathbf{v}_2 + \dots + T_{33}\mathbf{w}_3 \otimes \mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix},$$

com T_{ij} sendo constantes do tensor.

Produto escalar entre vetores

O operador ponto ($\cdot$) representa uma contração de uma ordem de direções dos índices internos.

Por exemplo,

$$r^2 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = x_i x_i \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_i = x_i x_i,$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = K_{ij} u_j \hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_j = K_{ij} u_j \hat{\mathbf{e}}_i = f_i \hat{\mathbf{e}}_i$$

e

$$w = \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \frac{1}{2} u_i K_{ij} u_j \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_j = \frac{1}{2} u_i K_{ij} u_j.$$

Produto escalar entre tensores

O operador dois pontos ($:$) representa uma contração de duas ordens, ou de um par de índices.

O produto escalar tensorial entre duas díades é definido como

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) : (\mathbf{c} \otimes \mathbf{d}) = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{d}).$$

Por exemplo,

$$\mathbf{S} = \mathbf{C}^{SE} : \mathbf{E} = (C_{ijkl}^{SE} \hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{e}}_j \otimes \hat{\mathbf{e}}_k \otimes \hat{\mathbf{e}}_l) : (E_{kl} \hat{\mathbf{e}}_k \otimes \hat{\mathbf{e}}_l) = C_{ijkl}^{SE} E_{lk} \hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{e}}_j = S_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{e}}_j .$$

Normalmente os operadores ponto e dois pontos não precisam estar explícitos, com excessão dos casos em que a ausência deles cause confusão ou para explicitar uma operação de produto interno.

A.1.3 Notação matricial e de Voigt

Na programação de métodos de elementos finitos é geralmente utilizada a notação matricial. Ela é parecida com a notação tensorial, mas não utiliza os símbolos dos operadores que conectam os tensores. Na notação matricial, todo vetor definido é um vetor coluna e os vetores linhas são transpostos dos colunas.

$$r^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} .$$

Tensores simétricos de segunda e quarta ordem podem ser respectivamente armazenados em vetores e matrizes, seguindo as regras de Voigt (BELYTSCHKO et al., 2000, p. 615) (REDDY, 2008, p. 180). Neste caso, as operações entre tensores de 4ª e 2ª ordens podem ser programadas como operações entre matrizes e vetores. Na notação de Voigt–Kelvin, o tensor de segunda ordem é escrito entre chaves (ex.: $\{\mathbf{E}\}$), para mostrar que está representado como vetor, e o de quarta ordem entre colchetes (ex.: $[\mathbf{C}^{SE}]$), para mostrar que está representado como matriz. Por exemplo,

$$\{\mathbf{S}\} = [\mathbf{C}^{SE}] \{\mathbf{E}\} .$$

A.2 Cinemática

As relações cinemáticas envolvem a descrição da *deformação* e do *movimento* de um corpo, como a definição das medidas de deformação e das derivadas temporais das grandezas cinemáticas.

Considerando um corpo em seu *estado inicial*, seu domínio Ω_0 é chamado de *configuração de referência*. A configuração de referência é importante porque qualquer outra configuração Ω é definida em respeito a esta configuração, ver Fig. (A.1). A configuração de referência não necessariamente coincide com a configuração indeformada, mas a atual quase sempre é uma configuração deformada. O domínio pode ter 1, 2 ou 3 dimensões, que faz Ω se referir a uma linha, superfície ou volume, respectivamente. Por motivo de simplicidade, todas configurações mostradas aqui ocupam espaços euclidianos com a mesma origem e orientação.

Figura A.1: Movimento e deformação de um corpo. Configuração de referência Ω_0 à configuração atual Ω .

O vetor posição de um ponto material do corpo na configuração de referência é denominado por $\mathbf{X}$; tal que $\mathbf{X} \in \Omega_0$. As coordenadas de $\mathbf{X}$ não variam nem no tempo nem com o estado de deformação e, por isso, é dito que elas estão definidas em *coordenadas materiais* ou *lagrangianas*. A posição de um ponto na configuração atual é denominado por $\mathbf{x}$; tal que $\mathbf{x} \in \Omega$. As coordenadas de $\mathbf{x}$ mostram a posição espacial do ponto e, por isso, é dito que elas

são *coordenadas espaciais* ou *eulerianas*.

As bases dos espaços vetoriais da configuração de referência e da atual são respectivamente $\{\hat{\mathbf{E}}_1, \hat{\mathbf{E}}_2, \hat{\mathbf{E}}_3\}$ e $\{\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3\}$, tal que

$$\mathbf{X} = X_i \hat{\mathbf{E}}_i \quad \text{e} \quad \mathbf{x} = x_i \hat{\mathbf{e}}_i . \quad (\text{A.1})$$

O movimento do corpo é descrito pela função

$$\mathbf{x} \doteq \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}, t) \quad \text{ou} \quad x_i \doteq \phi_i(\mathbf{X}, t) , \quad (\text{A.2})$$

tal que $\boldsymbol{\phi}$ mapeia univocamente todos os pontos de Ω em função dos pontos de Ω_0 . Linhas retas definidas com coordenadas materiais X_i se deformam junto com o material e, quando vistas pela configuração deformada, não são mais retas. Visto desta maneira, as coordenadas materiais também podem ser chamadas de coordenadas convectivas, porque elas seguem o movimento e a deformação do corpo.

O deslocamento de um ponto material é dado pela diferença entre as posições atual e inicial, de tal forma que

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) \doteq \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}, t) - \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}, 0) = \mathbf{x} - \mathbf{X} . \quad (\text{A.3})$$

Gradiente de deformação

A medida da deformação é uma parte essencial da mecânica dos meios contínuos não-linear. Uma variável importante para a caracterização da deformação é o gradiente de deformação. O gradiente de deformação é definido por

$$\mathbf{F} \doteq (\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\phi})^T = \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} . \quad (\text{A.4})$$

Em termos matemáticos, $\mathbf{F}$ é a matriz jacobiana da função vetorial $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}, t)$. Portanto, em três dimensões ela a matriz é

$$\mathbf{F} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} \hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{E}}_j = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial X_1} & \frac{\partial x_1}{\partial X_2} & \frac{\partial x_1}{\partial X_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial X_1} & \frac{\partial x_2}{\partial X_2} & \frac{\partial x_2}{\partial X_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial X_1} & \frac{\partial x_3}{\partial X_2} & \frac{\partial x_3}{\partial X_3} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Ao considerar qualquer segmento infinitesimal $d\mathbf{X}$ em torno de um ponto $P \in \Omega_0$, $\mathbf{F}$ o transforma em um segmento $d\mathbf{x}$ em torno de $p \in \Omega$:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} d\mathbf{X} \quad \text{ou} \quad dx_i = F_{ij} dX_j. \quad (\text{A.6})$$

Então $\mathbf{F}$ é um tensor com informações de rotação e dilatação do volume infinitesimal em torno de P . O determinante do jacobiano

$$J = \det(\mathbf{F}) \quad (\text{A.7})$$

é sempre positivo. Quando a região em torno de P se contrai, $0 < J < 1$; quando se expande, $J > 1$; e quando se mantém constante, $J = 1$. Materiais incompressíveis possuem sempre $J = 1$ em todo o domínio.

A.3 Medidas de deformação

A.3.1 Deformações finitas

Mudanças geométricas que um meio contínuo sofre podem ser medidas de muitas formas diferentes. Uma medida de deformação para deformações finitas precisa ser nula para movimentos de corpo rígido, em particular para rotações de corpo rígido. Caso a medida falhe nesses requisitos, ela poderá prever deformações não nulas, e logo também tensões não nulas, em corpos descarregados. Para criar uma medida de deformação consistente com estas necessidades, considere a deformação com translação e rotação do corpo material Ω_0 na Fig. (A.2).

A diferença no comprimento dos vetores infinitesimais $d\mathbf{X}$, material, e $d\mathbf{x}$, espacial,

Figura A.2: Os pontos P e Q separados pelo vetor infinitesimal $d\mathbf{X}$ na configuração de referência Ω_0 , tomam as posições p e q , respectivamente, na configuração atual Ω , onde estão separados pelo vetor infinitesimal $d\mathbf{x}$.

pode ser quantificada da seguinte maneira:

$$ds^2 - dS^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \quad \text{ou} \quad ds^2 - dS^2 = dx_i dx_i - dX_i dX_i. \quad (\text{A.8})$$

Os quadrados das distâncias material e espacial podem ser escritos de acordo com a transformação mostrada na eq. (A.6),

$$ds^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = (\mathbf{F} d\mathbf{X})^T (\mathbf{F} d\mathbf{X}) = d\mathbf{X}^T \mathbf{F}^T \mathbf{F} d\mathbf{X} = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{X} \quad (\text{A.9})$$

e

$$dS^2 = d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} = (\mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x})^T (\mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x}) = d\mathbf{x}^T \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x} = d\mathbf{x} \cdot \mathbf{B}^{-1} d\mathbf{x}, \quad (\text{A.10})$$

tal que

$$\mathbf{C} \doteq \mathbf{F}^T \mathbf{F} \quad (\text{A.11})$$

é o chamado *tensor de Cauchy–Green direito* e

$$\mathbf{B} \doteq \mathbf{F} \mathbf{F}^T \quad (\text{A.12})$$

é chamado *tensor de Cauchy–Green esquerdo* (REDDY, 2008, p. 77). Com as relações das eq. (A.9) e (A.10) a eq. (A.8) pode ser reescrita como

$$ds^2 - dS^2 = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{X} - d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} = d\mathbf{X} \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{I}) d\mathbf{X} = 2d\mathbf{X} \cdot \mathbf{E} d\mathbf{X} \quad (\text{A.13})$$

ou

$$ds^2 - dS^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x} \cdot \mathbf{B}^{-1} d\mathbf{x} = d\mathbf{x} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{B}^{-1}) d\mathbf{x} = 2d\mathbf{x} \cdot \mathbf{e} d\mathbf{x}, \quad (\text{A.14})$$

sendo

$$\mathbf{E} \doteq \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (\text{A.15})$$

o *tensor de deformações de Green–Lagrange* (GL), também chamado somente por *tensor de deformações de Green*, introduzido por Green e St. Venant, e

$$\mathbf{e} \doteq \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{B}^{-1}) \quad (\text{A.16})$$

o *tensor de deformações de Almansi*, introduzido por Almansi e Hamel (FUNG; TONG, 2001, p. 99). $\mathbf{E}$ é também conhecido como o tensor de deformações em coordenadas lagrangianas e $\mathbf{e}$ como o tensor de deformações em coordenadas eulerianas.

A física das deformações normais de $\mathbf{e}$ e $\mathbf{E}$ pode ser interpretada ao considerar uma linha infinitesimal na configuração desejadas paralela a um eixo de coordenada, por exemplo $\hat{\mathbf{e}}_1$. Isto é, na configuração de referência $d\mathbf{X} = dX_1 \hat{\mathbf{e}}_1$ para $\mathbf{E}$ e na configuração deformada $d\mathbf{x} = dx_1 \hat{\mathbf{e}}_1$. Então, com a eq. (A.10), a eq. (A.13) fica

$$\begin{aligned} ds^2 - dS^2 &= 2dX_1 E_{11} dX_1 = 2dS^2 E_{11} \\ \Leftrightarrow E_{11} &= \frac{1}{2} \frac{ds^2 - dS^2}{dS^2} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

e analogamente, com a eq. (A.9), a eq. (A.14) fica

$$e_{11} = \frac{1}{2} \frac{ds^2 - dS^2}{ds^2}. \quad (\text{A.18})$$

Também é possível visualizar o tensor $\mathbf{E}$ em função dos deslocamentos, pois inserindo

a eq. (A.3) em (A.4) se tem

$$\mathbf{F} = \frac{\partial(\mathbf{u} + \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \mathbf{I}, \quad (\text{A.19})$$

que por sua vez inserido na eq. (A.15) tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \mathbf{I} \right)^T \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \mathbf{I} \right) - \mathbf{I} \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \right] \\ \text{ou} \quad E_{ij} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Analogamente, pode-se escrever a eq. (A.16) como

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \right] \quad \text{ou} \quad e_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right]. \quad (\text{A.21})$$

A.3.2 Deformações infinitesimais

Ao se observar as eq. (A.20) e (A.21) é fácil notar que quando as derivadas do deslocamento são pequenas (infinitesimais), os termos não-lineares (de segunda ordem) podem ser desprezados e, como os vetores $\mathbf{X}$ e $\mathbf{x}$ se tornam quase coincidentes, $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{X} \approx \partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{x}$. No caso linear, ambos os tensores de Green e Almansi se aproximam do *tensor de deformações de Cauchy*:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{u}^T}{\partial \mathbf{x}} \right] \quad \text{ou} \quad \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right]. \quad (\text{A.22})$$

A física das deformações normais infinitesimais pode ser visualizada, como mostrada para as deformações normais finitas nas eq. (A.17) e (A.18), considerando $ds + dS \approx 2dS$. Portanto,

$$\left. \begin{aligned} ds^2 - dS^2 &= (ds + dS)(ds - dS) \approx 2dS(ds - dS) \\ ds^2 - dS^2 &= 2dX_1 \varepsilon_{11} dX_1 = 2dS^2 \varepsilon_{11} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \varepsilon_{11} = \frac{ds - dS}{dS}. \quad (\text{A.23})$$

Todos os três tensores de deformação ($\mathbf{E}$, $\mathbf{e}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}$) são simétricos, mas somente os não-lineares ($\mathbf{E}$ e $\mathbf{e}$) tornam todos seus componentes nulos em movimentos de translação e/ou rotação sem deformação. Isto está provado em Reddy (2008, p. 91). Esta é razão principal porque a teoria das deformações lineares é abandonada quando o meio sofre grandes

deformações.

A.3.3 Outras medidas

A razão de alongamento

$$\lambda \doteq \frac{ds}{dS} \quad (\text{A.24})$$

é uma medida bastante encontrada na literatura. Ela é bastante utilizada na medida de deformações normais de materiais que sofrem grandes deformações antes de falhar, como elastômeros.

A deformação logarítmica ou deformação verdadeira

$$\epsilon_{ln} \doteq \int_{dS}^{ds} \frac{d(ds)}{ds} = \ln \left(\frac{ds}{dS} \right) = \ln \lambda = \ln(\epsilon + 1) \quad (\text{A.25})$$

é uma medida normalmente usada em teorias de deformação plástica. Ela fornece a medida da deformação tomada por uma série de incrementos e por isso leva em consideração a influência do caminho percorrido (FUNG; TONG, 2001, p. 529).

A.4 Medidas de tensão

Todos os materiais conseguem suportar forças até um limite, além do qual ele falha em realizar a sua devida função. A força por unidade de área, chamada de *tensão*, é uma medida da capacidade do material suportar carregamentos. Assim como para as medidas de deformação, diferentes medidas de tensão podem ser definidas dependendo do sistema de referencia a partir do qual o corpo é observado.

A.4.1 Tensão de Cauchy

A *tensão de Cauchy* ou *tensão verdadeira*, é a tensão na configuração deformada Ω definida como a força por uma unidade de área da configuração Ω . Por isso é a medida de tensão mais natural e fisicamente consistente do estado da tensão. A força agindo na superfície de

Figura A.3: Planos na configuração de referência Ω_0 e na deformada Ω nos quais $d\mathbf{f}(\mathbf{X}, \hat{\mathbf{N}}) = d\mathbf{f}(\phi(\mathbf{X}), \hat{\mathbf{n}})$.

um pequeno elemento de área depende não somente do tamanho da área, mas também da sua orientação. Então o vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$, visto na Fig. (A.3), normal ao plano da área, é tomado como referência. Se denominarmos $d\mathbf{f}(\hat{\mathbf{n}})$ o vetor força numa pequena área $\hat{\mathbf{n}} da$ localizada em torno da posição $\mathbf{x}$, um vetor de tensão pode ser definido como

$$\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}}) \doteq \lim_{\Delta a \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{f}(\hat{\mathbf{n}})}{\Delta a} = \frac{d\mathbf{f}(\hat{\mathbf{n}})}{da}. \quad (\text{A.26})$$

Em um ponto fixo $\mathbf{x}$, para cada vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$ existe um vetor de tensão $\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})$ agindo no plano ortogonal a $\hat{\mathbf{n}}$. Deve-se notar que $\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})$ em geral não tem a mesma direção que $\hat{\mathbf{n}}$. A parcela de $\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})$ paralela a $\hat{\mathbf{n}}$ é chamada de *tensão normal* e a parcela perpendicular é chamada de *tensão de cisalhamento*. Existe portanto um tensor de segunda ordem que transforma os vetores unitários $\hat{\mathbf{n}}$ em um vetor de tensão $\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})$, como mostra

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{n}} \quad \text{ou} \quad t_i = \sigma_{ij} \hat{n}_j, \quad (\text{A.27})$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ é o *tensor de tensões de Cauchy*.

O tensor das tensões de Cauchy é um tensor de tensões descrito em coordenadas espaciais. Entretanto, como a priori a geometria da configuração deformada não é conhecida, as equações de movimento e equilíbrio precisam ser escritas em termos da configuração de

referência e transformadas para a situação atual. Fazendo isso, outras medidas de tensão são definidas. Elas surgem de uma forma natural quando áreas e volumes são transformados da configuração deformada para a de referência. Estas medidas são puramente matemáticas, mas facilitam a análise.

A.4.2 Primeira tensão de Piola–Kirchhoff

Voltando à Fig. (A.3), o elemento de área da da configuração deformada correspondente ao elemento dA da configuração de referência. O vetor de força $d\mathbf{f}$ é independente da referência e pode ser expressado em função do vetor de tensão tanto na configuração deformada $\mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})$, quanto na de referência $\mathbf{T}(\hat{\mathbf{N}})$:

$$d\mathbf{f} = \mathbf{t}(\hat{\mathbf{n}})da = \mathbf{T}(\hat{\mathbf{N}})dA . \quad (\text{A.28})$$

Analogamente, como na eq. (A.27), existe uma relação linear que transforma o vetor normal unitário da configuração de referência $\hat{\mathbf{N}}$ no vetor de tensão $\mathbf{T}$:

$$\mathbf{T} = \mathbf{P}\hat{\mathbf{N}} \quad \text{ou} \quad T_i = P_{ij}\hat{N}_j . \quad (\text{A.29})$$

Na eq. (A.29) o tensor de transformação $\mathbf{P}$ é chamado de *tensor de tensões de Piola–Kirchhoff de primeira ordem* (ou PK1). O tensor PK1 também é chamado de *tensor de tensões nominal* ou de *tensor de tensões lagrangiano*. Ele é um tensor misto, já que relaciona uma força na configuração deformada a uma direção da configuração de referência. Por isso, ao contrário do tensor de tensões de Cauchy, em geral o PK1 não é simétrico.

Para relacionar PK1 com o tensor de tensões de Cauchy, deve-se utilizar a relação de Nanson (BELYTSCHKO et al., 2000, p. 102)

$$\hat{\mathbf{n}}da = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-T}\hat{\mathbf{N}}dA . \quad (\text{A.30})$$

A eq. (A.30) relaciona as áreas entre duas configurações. Então utilizando as eq. (A.27), (A.29)

e (A.30) faz com que a eq. (A.28) se torne

$$\mathbf{P}\hat{\mathbf{N}}dA = \boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{n}}da = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T}\hat{\mathbf{N}}dA \quad (\text{A.31})$$

e, portanto,

$$\mathbf{P} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \quad \text{ou} \quad P_{ij} = J\sigma_{ik}\frac{\partial X_j}{\partial x_k}. \quad (\text{A.32})$$

A.4.3 Segunda tensão de Piola–Kirchhoff

O tensor $\mathbf{P}$ não é simétrico porque é um tensor misto, que relaciona uma variável de uma configuração a outra de outra configuração. Naturalmente seria mais simples trabalhar na configuração de referência com um tensor de tensões simétrico. Um tensor assim resulta da completa transformação do tensor de tensões de Cauchy para coordenadas materiais, ao transformar também a componente da força. Isto é, o vetor força da eq. (A.28) é transformado, como ilustrado na Fig. (A.3):

$$\mathbf{F}^{-1}d\mathbf{f} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{T}(\hat{\mathbf{N}})dA. \quad (\text{A.33})$$

A eq. (A.29) então se torna

$$\mathbf{F}^{-1}\mathbf{T} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P}\hat{\mathbf{N}} = \mathbf{S}\hat{\mathbf{N}}, \quad (\text{A.34})$$

que define $\mathbf{S}$ como o *segundo tensor de Piola–Kirchhoff* (PK2). $\mathbf{S}$ não representa uma tensão que pode ser interpretada fisicamente, é uma medida puramente matemática. No entanto ela é bastante utilizada em equações constitutivas, por ser conjugado no trabalho com o tensor de deformações de Green–Lagrange, eq. (A.15) (WRIGGERS, 2008, p. 37).

Os tensores de tensão de Cauchy e o PK1 podem ser diretamente transformados no PK2 pela transformação da eq. (A.32) como feita na eq. (A.34), ou seja

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} = J\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} \quad \text{ou} \quad S_{ij} = \frac{\partial X_i}{\partial x_k}P_{kj} = J\frac{\partial X_i}{\partial x_k}\sigma_{kl}\frac{\partial X_j}{\partial x_l}. \quad (\text{A.35})$$

A.5 Equações constitutivas

As leis cinemáticas e de balanço não são suficientes para resolver um problema de mecânica dos meios contínuos e uma equação constitutiva que caracteriza a resposta do material precisa ser empregada. As equações constitutivas não são essencialmente leis físicas, mas sim modelos matemáticos do comportamento dos materiais, validados por resultados experimentais. Discrepâncias entre as previsões teóricas dessas equações e os dados experimentais são quase sempre atribuídas a uma representação imprecisa do comportamento constitutivo. Aqui somente a classe dos materiais hiperelásticos será brevemente discutida, porque facilitará a compreensão de partes da revisão bibliográfica.

A.5.1 Material hiperelásticos

Um material pode ser chamado de hiperelástico quando as propriedades mecânicas são definidas por uma função de energia de deformação por unidade de volume $w(\mathbf{E})$, positiva–definida, que depende somente do estado de deformação e independe do histórico dessa deformação. A existência de $w(\mathbf{E})$ exclui, portanto, a possibilidade de comportamento viscoelástico.

Foi dito na definição do tensor PK2, que ele é conjugado no trabalho com o tensor GL. Isso significa que para a energia acumulada na deformação de um volume infinitesimal existe a relação

$$S_{ij} = \frac{\partial w}{\partial E_{ij}}. \quad (\text{A.36})$$

Material de Kirchhoff

Muitas aplicações de engenharia envolvem pequenas deformações do material e grandes rotações, como uma vara de pesca, um filme plástico de embalagem ou um cabo submarino. Nestas situações os materiais podem ser modelados sem grandes discrepâncias por uma simples

extensão da lei de Hooke,

$$\sigma_1 \doteq E \varepsilon_1 , \quad (\text{A.37})$$

para os tensores PK1 e GL da teoria das deformações finitas

$$\mathbf{S} \doteq \mathbf{C}^{SE} : \mathbf{E} \quad \text{ou} \quad S_{ij} \doteq C_{ijkl}^{SE} E_{kl} . \quad (\text{A.38})$$

Note que E é o módulo de Young e não o tensor GL $\mathbf{E}$, escrito em negrito. O tensor de quarta ordem $\mathbf{C}^{SE}$ contém as constantes do *material de Kirchhoff* ou *material de St. Venant–Kirchhoff* (BELYTSCHKO et al., 2000, p. 225). Como o material de Kirchhoff é uma generalização da lei de Hooke, a energia de deformação por unidade de volume é

$$w = \int S_{ij} dE_{ij} = \int C_{ijkl}^{SE} E_{kl} dE_{ij} = \frac{1}{2} C_{ijkl}^{SE} E_{ij} E_{kl} \quad \text{ou} \quad w = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathbf{C}^{SE} : \mathbf{E} . \quad (\text{A.39})$$

A princípio o tensor $\mathbf{C}^{SE}$ poderia possuir um número de componentes igual ao número de dimensões elevado ao grau do tensor, ou seja, $3^4 = 81$. No entanto, pela simetria dos tensores de tensão e deformação existe uma *simetria menor* do tensor das constantes materiais

$$\left. \begin{array}{l} S_{ij} = S_{ji} \\ E_{kl} = E_{lk} \end{array} \right\} \Rightarrow C_{ijkl}^{SE} = C_{jikl}^{SE} = C_{ijlk}^{SE} . \quad (\text{A.40})$$

A simetria menor reduz o número de constantes independentes necessárias para a equação, pois antes cada tensor de segunda ordem necessitava de nove constantes e agora necessitam somente de seis, isto é, $6 \times 6 = 36$.

Para a eq. (A.39) ser positiva definida é necessário que $\mathbf{C}^{SE}$ seja um tensor de quarta ordem positivo definido. Então segue que para $w(\mathbf{E})$ ter derivada lisa, o tensor das constantes materiais deve possuir *simetria maior*, ou seja

$$C_{ijkl}^{SE} = \frac{\partial^2 w}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} = \frac{\partial^2 w}{\partial E_{kl} \partial E_{ij}} \Rightarrow C_{ijkl}^{SE} = C_{lkij}^{SE} . \quad (\text{A.41})$$

A simetria maior reduz o número de constantes independentes de 36 para 21. Isso pode ser

visualizado ao colocar a eq. (A.38) na notação de Voigt

$$\begin{Bmatrix} S_{11} \\ S_{22} \\ S_{33} \\ S_{23} \\ S_{13} \\ S_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ & & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ & & & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ & & & & C_{1313} & C_{1312} \\ & & & & & C_{1212} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ 2E_{23} \\ 2E_{13} \\ 2E_{12} \end{Bmatrix}. \quad (\text{A.42})$$

Com 21 constantes de material independentes a serve para modelar um material de Kirchhoff totalmente anisotrópico. Ao considerar simetrias do material outras constantes independentes podem ser retiradas. Por exemplo, para um material ortotópico a eq. (A.5.1) fica

$$\begin{Bmatrix} S_{11} \\ S_{22} \\ S_{33} \\ S_{23} \\ S_{13} \\ S_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{2323} & 0 & 0 \\ & & & & C_{1313} & 0 \\ & & & & & C_{1212} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ 2E_{23} \\ 2E_{13} \\ 2E_{12} \end{Bmatrix}. \quad (\text{A.43})$$

Das 9 constantes não nulas da ortotropia, algumas se repetem e deixam de ser independentes em outros níveis de simetria. Para isotropia transversa são necessárias 5 e somente 2 para isotropia.

APÊNDICE B – SOLUÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS NÃO-LINEARES

O MEF é uma forma de resolução numérica de um sistema de equações diferenciais parciais. Aproximações dessas equações são integradas em pequenos subdomínios do sistema chamados de elementos. Depois das equações do elementos finitos serem estabelecidas nos elementos e as condições de contorno aplicadas, um conjunto de equações lineares é montado para cada grau de liberdade livre do sistema. Em geral o MEF recai na solução numérica de

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f} , \quad (\text{B.1})$$

em que $\mathbf{K}$ é a matriz de coeficientes resultante da montagem das equações dos elementos para cada grau de liberdade livre, $\mathbf{f}$ é um vetor coluna conhecido e $\mathbf{u}$ é um vetor coluna de incógnitas. Para a solução de problemas de mecânica dos sólidos e estruturas, $\mathbf{K}$, $\mathbf{f}$ e $\mathbf{u}$ são chamados de *matriz de rigidez*, *vetor de forças* e *vetor de deslocamentos*, respectivamente.

A formulação do MEF não-linear recai em um conjunto de equações na qual a matriz de rigidez é uma função do deslocamento (ou da configuração atual do sistema), isto é,

$$\mathbf{K}(\mathbf{u})\mathbf{u} = \mathbf{f} . \quad (\text{B.2})$$

A solução então não é mais direta, como para a eq. (B.1). Há alguns métodos que podem ser empregados para a solução da eq. (B.2), entre eles o *método de Newton–Raphson* (NR), que será discutido a seguir. Outros métodos podem ser encontrados em Belytschko et al. (2000, p. 309), Reddy (2004, p. 439) e Wriggers (2008, p. 152). Quando a resolução iterativa de um

problema não-linear se torna instável é preciso restringir a procura da solução. Para isso será usado o *método da corda* discutido adiante.

B.1 Método de Newton–Raphson

O método de NR é usado para encontrar iterativamente a raiz, ou o zero, de uma função. Em sistemas mecânicos quase-estático é interessante encontrar o equilíbrio entre as forças internas e externas. Por isso é definido o vetor resíduo

$$\mathbf{r}(\mathbf{u}) = \mathbf{f}_{int}(\mathbf{u}) - \mathbf{f}_{ext} . \quad (\text{B.3})$$

Expandindo a eq. (B.3) em uma série de Taylor em torno de uma configuração de equilíbrio conhecido para um ponto em que o resíduo é zero, tem-se

$$\mathbf{r}(\mathbf{u} + \Delta\mathbf{u}) = 0 = \mathbf{r}(\mathbf{u}) + \frac{\partial \mathbf{r}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \Delta\mathbf{u} + \mathcal{O}^2 , \quad (\text{B.4})$$

com $\mathcal{O}^2$ contendo os termos de derivada de ordem maior que um, que são desprezados. A derivada do resíduo da eq. (B.4) é obtida a partir da eq. (B.3) e define a matriz de rigidez tangente

$$\frac{\partial \mathbf{r}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{f}_{int}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \doteq \mathbf{K}_T . \quad (\text{B.5})$$

Com as eq. (B.4) e (B.5) é então obtido o incremento

$$\Delta\mathbf{u}_i = -\mathbf{K}_{T_i}^{-1} \mathbf{r}_i(\mathbf{u}_i) \quad (\text{B.6})$$

para cada iteração

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i + \Delta\mathbf{u}_i . \quad (\text{B.7})$$

O método de NR encontra o número de soluções onde o resíduo é igual a zero para a quantidade de carregamentos diferentes desejada. Cada passo que leva o sistema de uma configuração de equilíbrio p para outra $p + 1$, ver Fig. (B.1). Para garantir a convergência de

um passo é necessário um critério de convergência. Dois critérios serão apresentados. Quando a rigidez próxima da configuração da solução é alta, é interessante o seguinte critério

$$\text{se } \|\mathbf{r}_{i+1}\| \leq \varepsilon \max(\|\mathbf{f}_{int,i+1}\|, \|\mathbf{f}_{ext}\|) \Rightarrow \text{convergência}, \quad (\text{B.8})$$

com ε sendo um fator de tolerância escolhido. Quando a rigidez próxima da configuração da solução é baixa, é interessante o seguinte critério

$$\text{se } \|\Delta \mathbf{u}_i\| \leq \varepsilon \|\mathbf{u}_{i+1}\| \Rightarrow \text{convergência}. \quad (\text{B.9})$$

Figura B.1: Esquema do método de Newton–Raphson.

B.2 Método da corda

O método de NR falha em encontrar todas soluções quando o sistema passa por pontos onde perde estabilidade.

B.2.1 Estabilidade física do sistema

Considerando um padrão de carregamento $\mathbf{P}$ aplicado no sistema em diferentes graus controlado por um fator de carregamento λ , tal que $\mathbf{f}_{ext} = \lambda \mathbf{P}$, a eq. (B.3) se torna

$$\mathbf{r}(\mathbf{u}, \lambda) = \mathbf{f}_{int}(\mathbf{u}) - \mathbf{f}_{ext}(\lambda). \quad (\text{B.10})$$

Ao variar continuamente o parâmetro de carregamento de alguns sistemas, eventualmente é possível que o comportamento do sistema tenha uma mudança de configuração abrupta. Isso acontece quando o sistema passa por pontos críticos, que são onde a matriz tangente $\mathbf{K}_T$ se torna singular, ver Fig. (B.2). Os pontos críticos podem ser do tipo limite ou bifurcação.

Figura B.2: Curva de carregamento–deslocamentos destacando os pontos críticos. B indica um ponto de bifurcação e L indica um ponto limite.

Em pontos de bifurcação as trajetórias de equilíbrio se ramificam em caminhos secundários. Um exemplo de bifurcação da configuração de equilíbrio é quando se passa o ponto crítico de flambagem, pois a trajetória anterior se torna instável e surgem duas novas trajetórias estáveis, ver Fig. (B.3).

Na Fig. (B.2) os pontos L_1 e L_4 são, respectivamente, pontos de máximo e mínimo local de λ e, por isso, $\det \mathbf{K}_T = 0$. Da mesma forma, os pontos L_2 e L_3 são, respectivamente,

Figura B.3: Flambagem de coluna esbelta, um exemplo de bifurcação de configuração de equilíbrio. Isto é, sendo λ_B o fator de carregamento no ponto de bifurcação, $\lambda_1 < \lambda_B < \lambda_2$.

pontos de máximo e mínimo local de $\mathbf{u}$, então $\det \mathbf{K}_T = \infty$. O método de NR diverge nos pontos críticos L_1 e L_4 e falha ao encontrar qualquer ponto de equilíbrio pós-crítico (isto é, entre L_1 e L_4). É dito que, controlando o carregamento, as estruturas que passam por pontos limite do tipo L_1 e L_4 realizam um *salto de atravessamento* (ou “snap-through”) e, controlando os deslocamentos, as que passam por pontos limite do tipo L_2 e L_3 realizam um *salto de retorno* (ou “snap-back”)¹.

B.2.2 Evolução do método

Para encontrar configurações de estabilidade pós-críticos, Riks (1972) desenvolveu o método da corda (ou “arc-length method”). No método de Riks, a cada passo uma restrição plana é definida a uma distância Δs no sentido da tangente da solução do passo anterior, ver Fig. (B.4a). Crisfield (1981) modificou o método de Riks e alterou o formato da restrição para uma esfera de raio pré-definido Δs , ver Fig. (B.4b). O método da corda de Crisfield costuma convergir com mais facilidade, mas em contrapartida ele encontra duas soluções, uma que avança e outra que retorna na trajetória de equilíbrio, para somente a do avanço ser escolhida. Ambos métodos

¹Os termos *salto de atravessamento* e *salto de retorno* são traduções livres. Não foram encontradas traduções para os termos técnicos “snap-through” e “snap-back”.

da corda seguem controladamente passo a passo a trajetória de equilíbrio. Outras restrições também poderiam ser usadas, como uma que limita somente o carregamento ou somente o deslocamento de um grau de liberdade.

Figura B.4: Restrições para o método da corda com comprimento Δs . (a) (RIKS, 1979). (b) (CRISFIELD, 1981).

Para evitar o cálculo de duas soluções por passo Schweizerhof e Wriggers (1986) reformularam o método da corda de Crisfield. Este formato permite também que qualquer restrição possa ser utilizada no mesmo algoritmo, contanto que ela possua derivada de primeira ordem. A única desvantagem com o método de Crisfield tradicional é que a versão de Schweizerhof–Wriggers é singular nos pontos críticos. Entretanto, num processo de iteração numérica é muito improvável que alguma iteração coincida exatamente com um ponto crítico, a menos que a convergência nele seja forçada (WRIGGERS, 2008, p. 162).

B.2.3 Versão de Schweizerhof–Wriggers

Adicionando uma nova equação ao sistema não-linear da eq. (B.10) é obtido um novo vetor resíduo

$$\tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{u}, \lambda) = \begin{Bmatrix} \mathbf{r}(\mathbf{u}, \lambda) \\ a(\mathbf{u}, \lambda) \end{Bmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

A equação $a(\mathbf{u}, \lambda)$ é uma equação de restrição. Então a eq. (B.11) é expandida em uma série de Taylor, como já foi demonstrado para a eq. (B.4),

$$\tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{u} + \Delta\mathbf{u}, \lambda + \Delta\lambda) = \mathbf{0} = \begin{Bmatrix} \mathbf{r}(\mathbf{u}, \lambda) \\ a(\mathbf{u}, \lambda) \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial a}{\partial \lambda} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\mathbf{u} \\ \Delta\lambda \end{Bmatrix} + \mathcal{O}^2. \quad (\text{B.12})$$

Logo, derivando a eq. (B.10) e reorganizando a eq. (B.12) surge uma equação linear para o incremento do passo do método de NR,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_T & -P \\ \frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial a}{\partial \lambda} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\mathbf{u} \\ \Delta\lambda \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} \mathbf{r}(\mathbf{u}, \lambda) \\ a(\mathbf{u}, \lambda) \end{Bmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

Apesar de ser possível inverter a matriz da eq. (B.13), isso não é interessante do ponto de vista do custo computacional porque ela não é simétrica, por causa dos coeficientes ligados à restrição. Em vez disso, a eq. (B.13) é fatorada. Colocando em evidência o incremento dos deslocamentos na parcela do resíduo das forças

$$\mathbf{K}_T \Delta\mathbf{u} - P \Delta\lambda = -\mathbf{r} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta\mathbf{u} = \mathbf{K}_T^{-1}(-\mathbf{r} + \Delta\lambda \mathbf{P}) \quad (\text{B.14})$$

e definindo os vetores

$$\Delta\mathbf{u}_r = -\mathbf{K}_T^{-1} \mathbf{r} \quad \text{e} \quad \Delta\mathbf{u}_P = \mathbf{K}_T^{-1} \mathbf{P}, \quad (\text{B.15})$$

o incremento dos deslocamentos fica na forma

$$\Delta\mathbf{u} = \Delta\mathbf{u}_r + \Delta\lambda \mathbf{u}_P. \quad (\text{B.16})$$

Com a eq. (B.16) na parcela da restrição, o incremento do fator de carregamento fica

$$\Delta\lambda = - \frac{\left(a + \frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} \Delta\mathbf{u}_r \right)}{\left(\frac{\partial a}{\partial \lambda} + \frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} \Delta\mathbf{u}_P \right)}. \quad (\text{B.17})$$

Essa forma tem a grande vantagem de possuir praticamente a mesma eficiência computacional do método de NR simples. Como para o método de NR, a etapa de maior custo computacional é a inversão da matriz $\mathbf{K}_T$, na eq. (B.15).

Outra vantagem é a forma genérica da eq. (B.17). Qualquer equação de restrição $a(\mathbf{u}, \lambda)$ pode ser empregada nela. Por exemplo a restrição de Crisfield, na Fig. (B.4b),

$$a(\mathbf{u}, \lambda) = \sqrt{(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0)^T \boldsymbol{\alpha} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_0) + \beta (\lambda - \lambda_0)^2} - \Delta s = w - \Delta s, \quad (\text{B.18})$$

com suas derivadas parciais

$$\frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} = \frac{(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0)^T \boldsymbol{\alpha}}{w} \quad \text{e} \quad \frac{\partial a}{\partial \lambda} = \frac{\beta (\lambda - \lambda_0)}{w}. \quad (\text{B.19})$$

As equações de restrição de carregamento controlado, deslocamento controlado e Riks podem ser encontradas em Wriggers (2008, p. 165). Como os graus de liberdade do sistema podem ser de grandezas físicas diferentes, por exemplo forças e momentos, a matriz $\boldsymbol{\alpha}$, que possui valores diferentes de zero somente na diagonal, balanceia e/ou dá peso a essas variáveis. Quando isso não é necessário, $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{I}$. O escalar β é um fator de escala entre $(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0)$ e $(\lambda - \lambda_0)$, que também pode ser usado como peso entre essas variáveis na restrição. Diferentes critérios para definir β podem ser definidos dependendo do problema em análise (SCHWEIZERHOF; WRIGGERS, 1986), por exemplo, se $\beta = 0$ somente os deslocamentos ficam restringidos e a topologia da restrição passa a ser cilíndrica em vez de elipsoidal. Uma forma de limitar o grau de liberdade λ é definindo um incremento máximo $\Delta \lambda_{max}$ e

$$\beta = \left(\frac{\Delta s}{\Delta \lambda_{max}} \right)^2. \quad (\text{B.20})$$

Como no início de cada passo o sistema está em equilíbrio (isto é, $\mathbf{r}_{i=0} = \mathbf{0}$) e no centro da restrição ($\frac{\partial a}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{0}$ e $\frac{\partial a}{\partial \lambda} = 0$), logo o sistema está num ponto fixo. Para o algoritmo encontrar uma solução é preciso então fornecer um outro ponto inicial — que seria um “chute inicial”. Entre os infinitos pontos iniciais possíveis é interessante escolher um que esteja sobre a restrição. Em uma iteração preditiva, $\Delta \mathbf{u}_{r0} = \mathbf{0}$ na eq. (B.16) e $a = 0$ na eq. (B.18), portanto se tem um incremento para o carregamento

$$\left. \begin{aligned} \Delta \mathbf{u}_0 &= \Delta \lambda \Delta \mathbf{u}_P \\ \Delta s^2 &= \Delta \mathbf{u}_0^T \Delta \mathbf{u}_0 + \beta (\Delta \lambda_0)^2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \Delta \lambda_0 = \pm \sqrt{\frac{\Delta s^2}{\Delta \mathbf{u}_P^T \Delta \mathbf{u}_P + \beta}} \quad (\text{B.21})$$

e para o deslocamento, ao aplicar a eq. (B.21) na eq. (B.16).

Obviamente a eq. (B.21) possui duas soluções por causa da eq. (B.18). Uma dessas soluções segue a trajetória do sistema e a outra retorna, dependendo do sinal. Para seguir sempre um sentido na trajetória, um sinal $\kappa_1 = \pm 1$ para a eq. (B.21) deve ser escolhido no início do primeiro passo e somente deve ser invertido depois que algum passo passar por um ponto limite de $\det \mathbf{K}_T = 0$. Há diversas formas para encontrar um ponto crítico (WRIGGERS, 2008, p. 163). A forma mostrada aqui é seguinte: para os passos $p > 1$ o sinal é desejado obter o sinal da projeção da tangente do deslocamento no início do passo atual com o deslocamento realizado no passo anterior (FARAD; MASSICOTTE, 1993),

$$\kappa_p = \frac{(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_{p-1})^T \Delta \mathbf{u}_{Pp}}{\|(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_{p-1})^T \Delta \mathbf{u}_{Pp}\|}. \quad (\text{B.22})$$

Este valor então é comparado com o sentido inicial

$$\kappa_p = \kappa_1 \kappa_p. \quad (\text{B.23})$$

Figura B.5: Esquema ilustrando a eq. (B.24). (a) $\kappa_p > 0$. (b) $\kappa_p < 0$.

O tamanho do passo (Δs) pode variar durante a trajetória da solução. Em regiões mais lineares, isto é, com a solução mais próxima da tangente do ponto inicial, os passos podem ser maiores, que em regiões menos lineares. Logo, “abrir” ou “crescer” Δs em regiões mais lineares e “fechar” ou “diminuir” em regiões menos lineares permite racionalizar o uso do processador e diminuir o tempo da simulação. Uma forma de se fazer isso é após a convergência do passo,

com a eq. (B.8) ou eq. (B.9), calcular o tamanho do passo seguinte com

$$\Delta s_{p+1} = \Delta s_p \frac{i_d}{i_p}, \quad (\text{B.24})$$

onde Δs_{p+1} e Δs_p são o tamanho do próximo passo e do atual, respectivamente, i_p é o número de iterações que o passo atual necessitou para convergir e i_d é o número de iterações desejado (normalmente por volta de 5). Para evitar que uma região não-linear repentina passe despercebida ou o sistema acabe convergindo em outra trajetória, por causa do tamanho exagerado de Δs , é recomendável ter um limite superior do tamanho do passo. Também é recomendável limitar a quantidade máxima de iterações dentro de um passo e reiniciar o passo com tamanho reduzido caso este limite seja atingido. Muitas iterações indicam que a região é de grande não-linearidade (CRISFIELD, 1981).

APÊNDICE C – ANATOMIA DO PULMÃO

C.1 Introdução

A estrutura pulmonar é bastante complexa. Nesta seção é apresentada somente uma visão geral da anatomia do sistema respiratório e abaixo a estrutura do alvéolo será melhor detalhada.

O pulmão é o órgão responsável pelas trocas gasosas entre o corpo e a atmosfera. Durante o ciclo ventilatório — inspiração e expiração — os pequenos vasos sanguíneos presentes nos alvéolos pulmonares recebem oxigênio e removem gás carbônico do corpo humano. Os alvéolos, pequenos sacos enrugados, que se localizam nos últimos ramos das vias aéreas do pulmão, constituem o parênquima¹ pulmonar.

C.2 Caixa torácica

A cavidade da caixa torácica possui três compartimentos. A central é chamada mediastino, que acomoda o coração, partes torácicas dos grandes vasos, parte torácica da traquéia, esôfago, timo e outras estruturas, e se estende da abertura superior do tórax até o diafragma. As cavidades pulmonares ficam cada uma de um lado do mediastino e são completamente separadas uma da outra (MOORE; DALLEY, 2001, p. 84). O diafragma é o músculo mais importante para a ventilação dos pulmões e é a camada inferior do tórax.

¹Os órgãos podem ser divididos em dois componentes: o *parênquima*, composto pelas células responsáveis pelas principais funções do órgão e o *estroma*, tecido de sustentação, ou conjuntivo (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 66).

C.3 Pleura

O pulmão direito possui três lobos (superior, médio e inferior) e o esquerdo apenas dois (superior e inferior), separados por fissuras interlobulares. O pulmão esquerdo é menor e tem menos lobos, porque o coração se abaúla mais para este lado e forma uma incisura cardíaca profunda (ver Fig. (C.2)). Os lobos, incluindo as fissuras horizontal e oblíqua, são recobertos por uma serosa² contínua chamada pleura. As pleuras não só recobrem os pulmões, como também a parede torácica, o mediastino e o diafragma. Para visualizar a relação do pulmão com a pleura observe a Fig. (C.1). A cavidade do saco pleural é preenchida por uma camada muito fina de líquido, que atua como lubrificante para o deslizamentos das camadas parietal e visceral. Os pulmões não ocupam as cavidades pulmonares completamente durante a expiração. Existem espaços pleurais potenciais, valetas revestidas de pleura, para onde se movem os pulmões durante a inspiração profunda. Observe na Fig. (C.1) que a parte diafragmática da pleura está em contato com a parte inferior da parte costal. Esses espaços pleurais são chamados de recessos costodiafragmáticos e circundam a convexidade superior do diafragma. Semelhantes porém menores são os recessos pleurais onde a parte costal e mediastinal se encontram, chamados recessos costomediastinais.

A raiz do pulmão é formada por brônquios principais, nervos e vasos pulmonares e bronquiais e linfáticos, que emergem no hilo³ do pulmão. Pelas estruturas que envolvem a raiz do pulmão, os pulmões se fixam à traquéia e ao coração. A transição da parte parietal e visceral da pleura acontece no manguito pleural e no ligamento pulmonar (ver Fig. (C.2)). O manguito pleural é uma estrutura pertencente à raiz do pulmão e o ligamento pulmonar pende inferiormente do manguito pleural.

²A serosa é formada por uma camada delgada de tecido conjuntivo frouxo, que contém fibras colágenas e elásticas, revestida por um epitélio pavimentoso simples chamado mesotélio (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 83).

³O *hilo* é uma pequena saliência, abertura ou depressão que se forma no local onde penetram, num órgão, seus vasos e nervos (HOUAISS et al., 2001).

Figura C.1: Cada pulmão é revestido por uma membrana serosa arranjada como saco fechado — a pleura — que é invaginada pelo pulmão. A figura menor no canto inferior esquerdo mostra um balão de festa não muito cheio recobrindo um punho de forma análoga como a pleura recobre o pulmão. As lâminas visceral e parietal da pleura são contínuas da mesma forma como as paredes interna e externa do balão. Se há um ferimento da parede torácica que permite ar entrar na cavidade pleural, a elasticidade do pulmão leva-o ao colapso (pneumotórax) (MOORE; DALLEY, 2001, p. 85).

C.4 Vasos sanguíneos e linfáticos

Existem dois circuitos de circulação sanguínea no pulmão, os vasos funcionais (vasos pulmonares) e vasos nutridores (vasos bronquiais) (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008; MOORE; DALLEY, 2001).

As artérias pulmonares trazem sangue venoso do coração, para serem oxigenadas nos alvéolos. As artérias pulmonares são elásticas, com paredes delgadas e acompanham a ramificação dos brônquios, Fig. (C.3). Na altura dos dutos alveolares, os ramos alveolares originam uma rede capilar nos septos interalveolares, onde ocorre a oxigenação e a liberação do gás carbônico do sangue. Da rede capilar originam-se vênulas, com sangue arterial, que correm

(a) Pulmão esquerdo.

(b) Pulmão direito.

Figura C.2: Face mediastinal dos pulmões. Observe o hilo no centro das faces, o manguito pleural e ligamento pulmonar. Observe também a impressão cardíaca no pulmão esquerdo (MOORE; DALLEY, 2001, p. 89).

isoladas do parênquima e das vias aéreas até penetrarem nos septos interlobulares. As veias pulmonares se encontram no hilo, após saírem dos lobos (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 356).

Figura C.3: Vias de circulação no segmento broncopulmonar. Sangue alveolar (oxigenado) em vermelho, sangue venoso em azul escuro, vasos linfáticos em verde e vias aéreas em azul claro (MOORE; DALLEY, 2001, p. 96).

As artérias bronquiais fornecem sangue para a nutrição do tecido do pulmão, exceto a parte alveolar. As veias bronquiais drenam apenas uma parte do sangue proveniente das artérias bronquiais. As veias bronquiais mais periféricas se ligam a ramos das artérias pulmonares situados nas paredes dos bronquíolos da pleura visceral (MOORE; DALLEY, 2001, p. 96).

Existem duas redes linfáticas no pulmão, a profunda e a superficial (JUNQUEIRA;

CARNEIRO, 2008, p. 356). Os vasos linfáticos da rede profunda acompanham a árvore brônquica, pela subcamada mucosa, e também estão presentes no tecido conjuntivo dos septos interlobulares (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008; MOORE; DALLEY, 2001). A rede profunda está amplamente envolvida com a drenagem das estruturas que formam a raiz do pulmão. A rede superficial envolve vasos presentes na pleura visceral em toda sua extensão. Estes vasos possuem ligações nos septos interlobulares com os vasos linfáticos interiores do pulmão. Nos alvéolos e porções terminais da árvore brônquica não existem vasos linfáticos.

C.5 Enervação das vias aéreas

Não há nervos de sensibilidade dolorosa nem de controle motor voluntário nas vias aéreas e parênquima. Os nervos que penetram pelo hilo têm função de controlar a contração involuntária dos músculos presentes nas vias aéreas condutoras, para regular sua área de seção, e para ativar reflexos, como tosse e taxa de produção de muco (LEFF; SCHUMACKER, 1996, p. 174). A pleura visceral também é insensível à dor, mas a parietal é muito sensível, especialmente na parte costal (MOORE; DALLEY, 2001, p. 100).

C.6 Vias aéreas condutoras

A porção mais externa das vias aéreas conduz o ar, mas não participa da troca gasosa. A Fig. (C.4) mostra as principais divisões das vias respiratórias dentro do pulmão. A porção condutora compreende as fossas nasais, nasofaringe, laringe, traquéia, brônquios e bronquíolos, e a porção respiratória é constituída pelos bronquíolos respiratórios, dutos alveolares e alvéolos (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 339).

Outro importante papel das vias aéreas condutoras, além de possibilitar a entrada e saída de ar, é o de umedecer, limpar e aquecer o ar inspirado, para proteger os delicados alvéolos pulmonares. A mucosa da parte condutora é revestida por um epitélio⁴ especializado, com

⁴O *tecido epitelial* é um dos quatro tipos básicos de tecido. Os outros três são o *conjuntivo*, o *muscular* e o *nervoso*. As células do epitélio são células de revestimento e selecionam a entrada e saída de substâncias nos órgãos (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, pág 66).

Figura C.4: As principais divisões das vias respiratórias do pulmão. As proporções das estruturas foram alteradas para facilitar a visualização (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 340).

muitas células ciliadas e células secretoras de muco. As células ciliadas carregam o muco com poeira e microorganismos invasores para o esôfago, onde são ingeridos pelo sistema digestivo.

A traquéia é um nível das vias aéreas que possui duto único. Ela faz a ligação entre as vias aéreas superiores (nariz, faringe e laringe) e os brônquios principais esquerdo e direito. A traquéia e os brônquios possuem anéis de cartilagem em forma de C para conferir rigidez. Ligamentos fibroelásticos e feixes de músculo liso unem as porções abertas dos anéis cartilagosos em forma de C. Os ligamentos impedem o aumento excessivo do calibre da via e os feixes musculares possibilitam a sua regulação (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008; LEFF;

SCHUMACKER, 1996).

Figura C.5: Segmentos broncopulmonares. (A) Vistas anterior e posterior dos pulmões salientando os segmentos em cores diferentes. (B) Observe que cada brônquio segmentar supre um segmento broncopulmonar de mesmo nome (MOORE; DALLEY, 2001, p. 94).

Os brônquios principais entram nos hilos dos pulmões, dividem-se em brônquios lobares (secundários), dois do lado esquerdo e três do direito, cada um suprindo um lobo do pulmão (MOORE; DALLEY, 2001, p. 92). Cada brônquio lobar divide-se em brônquios segmentares, ou terciários, que suprem segmentos broncopulmonares. Os segmentos broncopulmonares são subdivisões dos lobos, independentes umas das outras em suprimento de ar e sangue venoso. Eles têm formato piramidal, com ápice olhando a raiz do pulmão e base na face pleural, e são separados dos segmentos adjacentes por septos de tecido conjuntivo. As veias pulmonares se situam no tecido conjuntivo interposto dos segmentos. A Fig. (C.5) mostra os segmentos broncopulmonares e seus nomes.

A partir da terceira ramificação a cartilagem passa a gradualmente se distribuir

em placas descontínuas ao longo da superfície dos brônquios. Essas peças cartilaginosas são envoltas por tecido conjuntivo rico em fibras elásticas, que é contínua com o tecido pulmonar vizinho. O conteúdo cartilaginoso diminui ao longo das ramificações das vias aéreas (LEFF; SCHUMACKER, 1996, p. 170). Abaixo da lâmina própria⁵ do epitélio dos brônquios e bronquíolos, existem feixes contínuos de músculo liso dispostos em espiral, que circundam completamente estas vias (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 344). Reações alérgicas e asmáticas acionam esses músculos, que provocam a bronquioconstrição (LEFF; SCHUMACKER, 1996, p. 174).

Nas últimas porções da árvore brônquica estão os bronquíolos terminais. Semelhante aos bronquíolos, porém tendo parede mais delgada. Cada bronquíolo terminal se ramifica em dois ou mais bronquíolos respiratórios, que constituem a transição entre a porção condutora e a respiratória (Fig. (C.6)). O bronquíolo respiratório possui estrutura semelhante à do bronquíolo terminal, porém a camada de músculo liso e de fibras elásticas é mais delgada. No bronquíolo respiratório começam a aparecer alvéolos (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 347).

C.7 Porção respiratória

A frequência do aparecimento de alvéolos nos bronquíolos respiratórios vai aumentando até o ponto em que a parede passa a ser constituída apenas de alvéolos, e o canal passa a ser chamado de duto alveolar. Veja o esquema da Fig. (C.7).

Pode-se notar que o músculo liso está presente apenas até os dutos alveolares e não se estendem aos alvéolos. Os feixes de músculo liso estão presentes nas bordas de entrada dos alvéolos proximais, mas não nos distais. Os dutos alveolares e os alvéolos são revestidos por epitélio pavimentoso simples, isto é, uma só camada de células achatadas. O suporte dos dutos alveolares é uma matriz rica em fibras elásticas e reticulares. As fibras elásticas são importantes porque se distendem durante a inspiração e se contraem passivamente durante a expiração. As fibras reticulares são fibras colágenas que dão resistência estrutural a órgãos sujeitos a mudanças

⁵A *lâmina própria* é uma camada muito fina de tecido conjuntivo frouxo que prende as células epiteliais das mucosas (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 67)

Figura C.6: Corte histológico de pulmão mostrando um bronquíolo terminal seguido de um bronquíolo respiratório, que é contínuo com um saco alveolar e alvéolos. BALT: "bronchial-associated lymphoid tissue"(tecido linfático do brônquio) (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 348).

fisiológicas de forma e volume. Nos dutos alveolares elas fazem a estrutura de suporte para os delicados capilares sanguíneos e para o epitélio, protegendo as células de distensões excessivas.

Por se tratar de um trocador de massa, cada pulmão possui uma grande área superficial (aproximadamente $70m^2$) compactada num pequeno volume. Esta área é entre 20 e 50 vezes maior que a área externa do corpo (pele). Estima-se 300 milhões de alvéolos por pulmão com cada um com aproximadamente $0,3mm$ de diâmetro (MCARDLE et al., 2006, p. 261). Nenhum outro tecido do corpo é tão irrigado quanto o alveolar. Milhões de pequenos capilares com parede bastante fina estão presentes nos alvéolos para otimizar a difusão dos gases. A parede entre o lúmen⁶ alveolar e o capilar tem espessura entre $0,1$ e $1,5\mu m$ (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008; FUNG, 1996) e se mantém praticamente constante durante qualquer atividade física exercida pelo indivíduo. A cada minuto aproximadamente $250ml$ de oxigênio se difunde do alvéolo para o sangue e $200ml$ de dióxido de carbono toma a direção contrária.

O ar está separado do sangue capilar por quatro camadas, que formam a parede

⁶Lúmen, lume ou luz é o espaço no interior de um órgão tubular, como artérias, intestinos e vias aéreas (HOUAISS et al., 2001).

Figura C.7: Esquema da porção terminal da árvore brônquica (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 349).

alveolar: o citoplasma de uma célula epitelial, a lâmina basal desta célula, a lâmina basal do capilar e o citoplasma da célula endotelial⁷ (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 352). Geralmente, as duas lâminas basais se fundem, formando uma única membrana basal (ver Fig. (C.8) e (C.9)), mas em alguns locais existe um tecido intersticial frouxo entre elas. A célula epitelial dos alvéolos é chamada pneumócito tipo I. O citoplasma é muito delgado, exceto sobre o núcleo achatado, onde a célula faz uma ligeira saliência para o interior do alvéolo. As

⁷O endotélio é um epitélio simples e pavimentoso especializado. As células do epitélio possuem glicoproteínas na membrana celular que impedem a coagulação do sangue, filtram a entrada e saída de substâncias do plasma sanguíneo e também atuam no controle do tônus dos vasos. Quando sinalizadas, permitem a passagem de glóbulos brancos.

células endoteliais dos capilares são mais numerosas e têm núcleo mais alongado que o dos pneumócitos tipo I. Os capilares presentes dentro da parede alveolar geralmente trocam gases com dois ou três alvéolos.

Figura C.8: Parte de um septo interalveolar, mostrando a barreira entre o sangue e o ar inspirado. Para chegar até as hemácias, o O_2 atravessa uma camada líquida com surfactante lipoproteico, o citoplasma de um pneumócito tipo I, a lâmina basal, o citoplasma da célula endotelial e o plasma sanguíneo (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 352).

Outras células pertencentes ao tecido alveolar são o pneumócito tipo II, os macrófagos e fibroblastos. Os pneumócitos tipo II são células arredondadas pertencentes ao epitélio. Aparecem de preferência em grupos de duas ou três células nos cantos das paredes alveolares. Sua principal característica é secretar surfactante pulmonar, composto por proteínas e fosfolípídios (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 352).

Os macrófagos alveolares são encontrados no interior dos septos inter alveolares e na superfície dos alvéolos. Os macrófagos na superfície alveolar fagocitam microorganismos e outras partículas estranhas e são transportados para a faringe, de onde são deglutidos. Os macrófagos encontrados no tecido conjuntivo dos alvéolos fagocitam as partículas estranhas

que passaram dos alvéolos para o interstício, pela atividade pinocitótica dos pneumócitos tipo I. Estes macrófagos, carregando partículas de carbono e poeira, se acumulam durante a vida da pessoa no tecido conjuntivo, em volta dos vasos sanguíneos e no conjuntivo da pleura. A pleura visceral de pessoas mais velhas é mais escura por conta disso (MOORE; DALLEY, 2001, p. 100).

A lâmina basal presente nos alvéolos é sintetizada principalmente pelos fibroblastos. Estas células são as células mais comuns do tecido conjuntivo. Elas sintetizam proteínas colágeno e elastina, além dos glicoaminoglicanos, proteoglicanos e glicoproteínas multiadesivas que farão parte da matriz extracelular (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 91). Todas as células dos órgãos do corpo, exceto no sistema nervoso central, obtêm suporte estrutural na matriz extracelular. Um fibroblasto pode ser observado dentro do septo interalveolar na Fig. (C.9).

Figura C.9: Micrografia eletrônica do septo alveolar. 30.000x. (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2008, p. 352).

C.8 Septo interalveolar

O septo interalveolar é a parede que separa um alvéolo dos vizinhos. Como dito acima, o septo interalveolar possui uma rede muito densa de capilares, com espessura por volta de $4\mu m$. A topologia desta rede é similar nos mamíferos adultos e em outras espécies. A rede de capilares do septo interalveolar possui morfologia diferente em comparação às redes de outras partes do corpo, onde os capilares se ramificam em forma de árvore. Para caracterizar a morfologia dos capilares do septo, imagina-se o espaço vascular como um lençol de sangue (FUNG; SOBIN, 1969) entre duas membranas pregadas uma à outra por várias junções mais ou menos igualmente espaçadas, chamadas de postes por Rosenquist et al. (1972) para enfatizar sua relação estrutural. Esta configuração pode ser vista na Fig. (C.10). Fung e Sobin (1972) demonstraram que a espessura do lençol capilar é dependente da diferença de pressão entre o sangue no capilar e o ar no alvéolo. Em condições em que a pressão do alvéolo é maior que a do lençol capilar, este pode colabar, impedindo o fluxo de sangue no local.

Figura C.10: Fotografias de cortes histológicos que mostram o lençol capilar alveolar em espécies distintas.

Rosenquist et al. (1972) descreveu o septo a partir de cortes histológicos. O desenho mostrado na Fig. (C.11) esquematiza bem a topologia da parede interalveolar. Observa-se que a matriz extracelular dá forma ao septo e está presente em maior proporção que o epitélio e o

endotélio. Os capilares se entrelaçam com as fibras da matriz.

Figura C.11: Desenho da parede interalveolar do pulmão de um cão, mostrando o lençol microvascular composto de compartimento vascular (V) e postes intervasculares (A, B, C). Em (A) o corte foi feito no centro do poste, em (C) tangente ao poste e em (B) numa posição intermediária. O epitélio foi puxado para trás para dar destaque à matriz de tecido conjuntivo da parede. No poste B estão em destaque feixes de fibras colágeno contornando a parede do capilar convergem no poste. (e) representa corte seccional de elastina (ROSENQUIST et al., 1972).

APÊNDICE D – TENSÃO SUPERFICIAL

Tensão superficial, ou energia de superfície, é uma resistência elástica que aparece na interface entre duas fases de um sistema químico. Ela ocorre porque nas moléculas da interface não há o mesmo equilíbrio de forças moleculares que aparece nas moléculas afastadas dela. As moléculas afastadas da interface se equilibram entre forças que atuam em todas as direções. Estas forças são as de atração molecular (Van der Waals, polaridade e pontes de hidrogênio) e a força de dispersão termocinética (ADAMSON; GAST, 1997). Como na interface as forças intermoleculares não são compensadas simetricamente, o equilíbrio se dá pelo aparecimento da tensão superficial (DUCKHIN et al., 1995), ilustrado na Fig. (D.1). Sólidos também têm tensão superficial, mas, diferentemente dos líquidos, a forma das interfaces não são determinadas pela tensão superficial, porque as forças intermoleculares são muito fortes.

Figura D.1: Representação simples das forças assimétricas agindo nas moléculas da interface.

Fenômenos como formação de bolhas, capilaridade e imiscibilidade entre substâncias acontecem por causa da tensão superficial. Insetos que deslizam sobre a água utilizam este

fenômeno para não afundar (HIEMENZ; RAJAGOPALAN, 1997), como mostra a Fig. (D.2). Se a tensão provocada pelo inseto não for suficientemente grande para romper a camada da interface, ele não se molha.

Figura D.2: Inseto sustentado pela tensão superficial da água.

D.1 Lei de Young–Laplace

Tensão superficial e energia livre de superfície possuem a mesma grandeza física. A única diferença entre elas está no ponto de vista pelo qual o fenômeno é observado (ADAMSON; GAST, 1997).

Um experimento simples que mostra bem o fenômeno de tensão superficial está exemplificado na Fig. (D.3). Considere uma película de sabão entre uma estrutura quadrada de arame, cujo um lado é móvel na direção perpendicular. O lado móvel sofre uma força devido à resistência ao estiramento da película.

O trabalho realizado para esticar a película é

$$dW = f dx = \gamma L dx = \gamma dA, \quad (\text{D.1})$$

onde γ é o valor de força por unidade de comprimento ou energia por unidade de área. Em

Figura D.3: Película de sabão esticada dentro de uma estrutura de arame com um lado móvel.

sistema internacional (SI) de unidades, γ é expresso em N/m ou J/m^2 .

Sempre é necessário realizar trabalho para aumentar a área de interface química, como na Fig. (D.4). O trabalho seria conservativo, se não houvesse mudanças físico-químicas dessa interface. Em um caso ideal, sem escoamento viscoso, plasticidade ou reações químicas, a energia de superfície seria reavida quando a nova superfície fosse destruída.

Figura D.4: Trabalho realizado para dividir um material.

Em uma gota de água ou bolha de sabão a tensão superficial está em equilíbrio com a pressão do conteúdo interno. Para obter as equações que governam a forma e tamanho de uma gota, Fig. (D.5) que não sofrem ação de forças externas considera-se um elemento de área dS expresso na eq. (D.2) em termos de dois raios de curvatura principais R_1 e R_2 , dos ângulos infinitesimais $d\phi_1$ e $d\phi_2$ e do ângulo de contato da gota com a superfície sólida θ_c . O ângulo de contato é uma medida de afinidade entre o líquido e o sólido.

Figura D.5: Representação de um elemento infinitesimal de superfície de gota (BEHROOZI et al., 1996).

$$dS = (R_1 d\phi_1)(R_2 d\phi_2) \quad (\text{D.2})$$

A pressão exercida no elemento de superfície dS é equilibrada pela tensão superficial existente nas bordas do elemento. Portanto,

$$p dS = \gamma d\phi_1 (R_2 d\phi_2) + \gamma d\phi_2 (R_1 d\phi_1), \quad (\text{D.3})$$

onde p é a pressão interna da superfície relativa com a pressão externa. Substituindo a eq. (D.2) na eq. (D.3), obtém-se

$$p = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (\text{D.4})$$

que é conhecida como a equação de Young–Laplace. Em esferas $R_1 = R_2 = R$ e a eq. (D.4) torna-se

$$p = \frac{2\gamma}{R}. \quad (\text{D.5})$$

D.2 Surfactante

D.2.1 Propriedades físico-químicas

Regiões de interface costumam ter elevados níveis de energia livre de superfície, porque as fases têm baixa afinidade entre si. Caso as substâncias possuíssem alta afinidade entre si, elas se atrairiam, adeririam ou misturariam. Surfactantes, ou tensoativos, são agentes químicos que reduzem a tensão superficial entre um líquido e outra fase química, seja ela sólida, líquida ou gasosa. O termo surfactante foi criado no final da década de 1940 a partir de “surface active agent” ou, traduzindo, agente ativo de superfície (HOUAISS et al., 2001).

Este tipo de substância é normalmente um composto orgânico que contém tanto grupos polares (hidrofílicos) quanto apolares (hidrofóbicos) em sua molécula. Portanto, as partes polares procuram meio aquoso ou superfícies polares e as apolares procuram gorduras, ar ou superfícies hidrofóbicas, ver Fig. (D.6). A parte apolar da molécula de surfactante é comprida e por isso é chamada de cauda, enquanto a polar é mais compacta e é chamada de cabeça. Quando o surfactante encontra uma interface, ele é adsorvido à interface de modo orientado, pois cada lado da molécula possui um tipo de afinidade. Esta disposição do surfactante na interface reduz drasticamente a energia livre na interface, porque ambas as fases ficam em contato com uma camada que possuem afinidade (HILLS, 1999).

Figura D.6: Surfactante adsorvido na interface de modo orientado.

Surfactantes podem causar emulsificação entre dois líquidos imiscíveis. A emulsificação acontece quando o surfactante passa a envolver totalmente porções de uma fase, separando-as da maior parte da fase em pequenas partes chamadas micelas. O surfactante que

envolve toda a superfície da micela permite que ela se misture dentro da fase externa à micela. A forma geométrica na qual a micela se apresenta depende de fatores físico-químicos e das dimensões das partes polar e apolar das moléculas surfactantes. A propriedade de emulsificação permite, por exemplo, que óleo seja dissolvido em água. Por isso, surfactantes estão presentes em detergentes e são utilizados em larga escala em vários processos da indústria química.

D.2.2 Cinética de adsorção

Normalmente a ação tensoativa dos surfactantes acontece dentro de sistemas dinâmicos, onde há gradientes de velocidade, temperatura, concentração, tensão etc. Nesses casos há difusão das moléculas surfactantes, que precisam de um certo tempo para se equilibrar dinamicamente em uma região de interface. A cinética da adsorção de surfactante na interface, entre *solução iônica – ar* ou *solução iônica – solução orgânica*, pode ser descrita por modelos quantitativos. O primeiro modelo físico para interfaces de área constante foi descrito por Ward e Tordai (apud DUCKHIN et al., 1995). A Fig. (D.7) ilustra a dinâmica de concentração. Quando a concentração da interface estiver abaixo da saturação a difusão é em direção à interface, não há difusão na saturação e a difusão é em direção ao substrato quando a concentração estiver acima da saturação. A concentração de saturação pode variar no tempo em situações transientes.

Figura D.7: Esquema de difusão de surfactante do meio para a interface e vice e versa. Γ é a concentração atual de surfactante na interface e Γ_0 é a concentração de equilíbrio (DUCKHIN et al., 1995).

D.2.3 Surfactante pulmonar

Na década de 1920 von Neergaard compreendeu claramente a propriedade do surfactante em reduzir a tensão superficial e aumentar assim a complacência pulmonar, mas a significância de sua descoberta não foi entendida pela comunidade científica e médica daquela época. Von Neergard também percebeu a importância de se ter baixa tensão superficial em pulmões recém nascidos. Então no meio da década de 1950 Clements e Pattle redescobriram a importância do surfactante e da baixa tensão superficial nos pulmões. No final desta mesma década descobriu-se que a insuficiência de surfactante causava a síndrome da angústia respiratória do recém-nascido (SARRN) (VELDHUIZEN et al., 1998).

Por reduzir a tensão superficial do pulmão, o surfactante reduz o esforço respiratório durante a inspiração, estabiliza o pulmão na expiração, previne que gotas d'água entupam as vias aéreas, evitam que ocorra uma redução da área total do pulmão por retração do meio líquido e o colapso dos alvéolos menores, previsto na eq. (D.4), de Young-Laplace.

A tensão superficial da água é por volta de 70 mN/m a 25°C (ADAMSON; GAST, 1997). Com o surfactante pulmonar ela cai para aproximadamente 25 mN/m em equilíbrio. Na capacidade pulmonar total (CPT, condição de máximo volume de ar) o líquido pulmonar pode chegar a até 30 mN/m e ventilando por volta da capacidade residual funcional (CRF, volume do pulmão em repouso), entre 40 e 60% do CPT, a tensão fica varia entre 1 e 6 mN/m (SCHÜRCH et al., 1992; VELDHUIZEN et al., 1998; SCHÜRCH et al., 2001).

O surfactante pulmonar é uma mistura de lipídeos e proteínas (VELDHUIZEN et al., 1998), basicamente:

1. $\sim 40\%$ dipalmitoil fosfatidilcolina (DPPC) (dipalmitoylphosphatidylcoline em inglês);
2. $\sim 40\%$ outros fosfolipídios (PC);
3. Proteínas (SP-A, B, C e D);
4. Colesterol (lipídeos neutros);

5. Traços de outras substâncias.

A exata proporção de água no pulmão não é conhecida.

O DPPC é um bom surfactante e se compacta melhor que outros fosfolipídios porque a parte apolar é reta e não toda dobrada, mas é muito lento para se espalhar e tem dificuldade em se adsorver, o que o torna sua adsorção lenta. Isto ocorre principalmente porque a temperatura de transição entre a fase gel para cristal-líquido do DPPC puro é de 41 °C, que é maior que a temperatura do corpo humano. Se estiver adsorvido a um sólido a temperatura de transição sobe para 46 °C. Vale ressaltar que essas temperaturas quase coincidem com a temperatura em que a mecânica pulmonar muda significativamente, 47 °C (HILLS, 1999).

A estrutura molecular do DPPC pode ser vista na Fig. (D.8). A parte polar carregada positivamente está na região do nitrogênio e a negativamente no oxigênio com ligação simples com o fósforo. Cátions presentes no líquido pulmonar conseguem atrair a parte negativa das moléculas de DPPC para junto deles, permitindo uma maior compactação de DPPC na interface. O efeito dos cátions na redução da área por molécula depende da carga e a concentração dele no líquido (HILLS, 1999).

Figura D.8: Molécula de DPPC. Branco: Hidrogênio; Verde: Carbono; Vermelho: Oxigênio; Rosa: Fósforo; e Azul: Nitrogênio.

As proteínas SP (“surfactant-associated protein”) reduzem a temperatura crítica de transição de fase do DPPC para menor que 37 °C (HILLS, 1999), melhoram a adsorção e a velocidade de espalhamento na interface ar-líquido (SCHÜRCH et al., 1992; POSSMAYER et al., 2001). A pressão de compressão da interface provoca uma mudança de fase nas moléculas de surfactante para líquido-gel e até mesmo para gel-sólido. A Fig. (D.9) mostra o mecanismo de recrutamento de DPPC gel-sólido para a fase líquida na interface. A rápida velocidade de

adsorção é imprescindível para manter a integridade da região de troca de gases do pulmão. Cada proteína SP possui funções distintas e que atuam sinergeticamente para manter uma interface rica em DPPC durante a expansão e retração do pulmão. Mudanças na composição da mistura surfactante alteram as condições de pressão e temperatura para as mudanças de fase e também a forma do empacotamento (geometria do cristal) dos fosfolipídeos (VELDHUIZEN et al., 1998). Somente na fase líquida que o surfactante consegue se espalhar livremente na superfície, formando uma monocamada na interface. Mesmo assim, foi observado que se a área do pulmão aumentar de forma brusca, os cristais boiando na superfície do líquido se quebram de uma forma parecida como a ruptura de um iceberg. Durante esse período transitório, parte dos cristais se separam formando “icebergs”, que flutuam em cima de uma superfície líquida sem surfactante. As proteínas SP atraem seletivamente mais o DPPC para a interface do que os outros fosfolipídios e o colesterol, que não possuem propriedades surfactantes tão boas quanto o DPPC. Elas também seguram o DPPC na interface, impedindo que ele seja expremido para fora quando a superfície diminui (POSSMAYER et al., 2001), o que também reduz a compressibilidade da interface (SCHÜRCH et al., 2001).

Figura D.9: Recrutamento do DPPC seco, cristal-líquido oligolamelar, para a interface líquido-ar. Na interface líquido-ar o DPPC está na sua fase líquida, espalhando-se numa monocamada. Isto só é possível se o surfactante estiver acima da temperatura crítica (HILLS, 1999).

Também foi observado que o surfactante não é encontrado exclusivamente nas pequenas vias aéreas (bronquíolos e alvéolos), mas também nas grandes vias (traquéia e brônquios). A tensão superficial nestas vias também é menor do que a da água e fica entre 30 e 32mN/m, pois a mistura é outra. Gebhart et al. (apud SCHÜRCH et al., 1992, p. 1748)

sugeriram que gradientes de tensão superficial cíclicos devem criar um mecanismo de transporte para partículas sólidas inaladas. Neste caso, as zonas periféricas das vias aéreas são importantes em estabilizar o filme de surfactante, que transporta partículas dos alvéolos e bronquíolos até a região mucosa do sistema respiratório (brônquios e traquéia), onde há um sistema de transporte de partículas pelos cílios presentes no epitélio dessas vias.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ADAMSON, A. W.; GAST, A. P. **Physical Chemistry of Surfaces**. 6. ed. Nova Iorque, EUA: John Wiley & Sons Inc., 1997. 808 p.
- BACHOFEN, H.; SCHÜRCH, S. Alveolar surface forces and lung architecture. **Comparative Biochemistry and Physiology Part A**, v. 129, p. 183–193, February 2001.
- BANDEIRA, A. A. **Análise de problemas de contato com atrito em 3D**. Tese (Doutorado) — Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, 2001.
- BASSINGTHWAIGHTE, J. B. Strategies for the physiome project. **Annals of Biomedical Engineering**, Biomedical Engineering Society, v. 28, p. 1043–1058, 2000.
- BEHROOZI, F. et al. The profile of a dew drop. **American Journal of Physics**, v. 64, n. 9, p. 1120–1125, September 1996.
- BELYTSCHKO, T.; LIU, W. K.; MORAN, B. **Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures**. 1. ed. Chichester, Inglaterra: Ed. John Wiley & Sons, Ltd, 2000. 666 p.
- BERSTEN, A. D.; SONI, N. **Oh's Intensive Care Manual**. 6. ed. Philadelphia, USA: Elsevier Limited, 2009. 1271 p.
- BUTT, H.-J.; KAPPL, M. **Surface and Interfacial Forces**. Weinheim, Alemanha: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010. 421 p.
- CARTON, R. W.; DAINAUSKAS, J.; CLARK, J. W. Elastic properties of single elastic fibers. **Journal of Applied Physiology**, v. 17, n. 3, p. 547–551, 1969.
- CRISFIELD, M. A. A fast incremental/iterative solution procedure that handles “snap-through”. **Computer & Structures**, v. 13, p. 55–62, 1981.
- DALE, P. J.; MATTHEWS, F. L.; SCHROTER, R. C. Finite element analysis of lung alveolus. **Journal of Biomechanics**, Great Britain, v. 13, p. 865–873, 1980.
- DENNY, E.; SCHROTER, R. C. The mechanical behavior of a mammalian lung alveolar duct model. **Journal of Biomechanical Engineering**, v. 117, p. 254–261, August 1995.
- DENNY, E.; SCHROTER, R. C. A mathematical model for the morphology of the pulmonary acinus. **Journal of Biomechanical Engineering**, v. 118, p. 210–215, May 1996.
- DENNY, E.; SCHROTER, R. C. A model of non-uniform lung parenchyma distortion. **Journal of Biomechanics**, v. 39, p. 652–663, 2006.
- DUCKHIN, S. S.; KRETZSCHMAR, G.; MILLER, R. **Dynamics of Adsorption at Liquid Interfaces**. 1. ed. Amsterdam, Holanda: Elsevier Science, 1995. 581 p.

EVANS, E. A. Detailed mechanics of membrane–membrane adhesion and separation. i. continuum of molecular cross–bridges. **Biophysical Journal**, v. 48, p. 175–183, 1985.

EVANS, E. A. Detailed mechanics of membrane–membrane adhesion and separation. ii. discrete kinetically trapped molecular cross–bridges. **Biophysical Journal**, v. 48, p. 185–192, 1985.

FARAD, M.; MASSICOTTE, B. Geometrical interpretation of the arc-length method. **Computer & Structures**, v. 46, p. 603–615, 1993.

FELIPPA, C. **Nonlinear Finite Element Method**. Boulder, Colorado, USA: Department of Aerospace Engineering Sciences and Center for Space Structures and Controls: University of Colorado, 2001. Disponível em: <<http://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/NFEM.d/Home.html>>.

FUNG, Y.-C. Stress, deformation, and atelectasis of the lung. **Circulation Research**, v. 37, p. 481–496, October 1975a.

FUNG, Y.-C. Does the surface tension make the lung inherently unstable? **Circulation Research**, v. 37, p. 497–502, October 1975b.

FUNG, Y.-C. A model of the lung structure and its validation. **Journal of Applied Physiology**, v. 64, p. 2132–2141, 1988.

FUNG, Y.-C. **Biomechanics: Motion, Flow, Stress, and Growth**. 1. ed. New York, EUA: Springer-Verlag, 1990. 569 p.

FUNG, Y.-C. **Biomechanics: Mechanical Properties of Living Tissues**. 2. ed. New York, EUA: Springer-Verlag, 1993. 568 p.

FUNG, Y.-C. **Biomechanics: Circulation**. 2. ed. New York, EUA: Springer-Verlag, 1996. 571 p.

FUNG, Y.-C.; SOBIN, S. S. Theory of sheet flow in lung alveoli. **Journal of Applied Physiology**, v. 26, n. 4, p. 472–488, 1969.

FUNG, Y.-C.; SOBIN, S. S. Elasticity of the pulmonary alveolar sheet. **Circulation Research**, v. 30, p. 451–469, April 1972.

FUNG, Y.-C.; TONG, P. **Classical and Computational Solid Mechanics**. 1. ed. Singapore: World Scientific, 2001. 930 p.

GEBHART, K. F.; RENSCH, H.; SEEFELD, H. v. 1984. 2234–2243 p.

GYLYS, B. A.; WEDDING, M. E. **Medical Terminology Systems: A Body Systems Approach**. 5. ed. Philadelphia, USA: F. A. Davis Company, 2005. 278 p.

HABER, P. S.; COLEBATCH, H. J. H.; NG, C. K. Y.; GREAVES, I. A. Alveolar size as a determinant of pulmonary distensibility in mammalian lungs. **Journal of Applied Physiology**, v. 54, n. 3, p. 837–845, 1983.

HANSEN, J. E.; AMPAYA, E. P. Human air space shapes, sizes, areas, and volumes. **Journal of Applied Physiology**, v. 38, n. 6, p. 990–995, 1975.

HANSEN, J. E.; AMPAYA, E. P.; BRYANT, G. H.; NAVIN, J. J. The branching pattern of airways and air spaces of a single human terminal bronchiole. **Journal of Applied Physiology**, v. 38, n. 6, p. 983–989, 1975.

HELLMUTH, R. de A. P. **Modelo de alvéolo pulmonar incluindo efeitos de tensão superficial**. São Paulo, SP, 2006. Trabalho de formatura na Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

HELLMUTH, R. de A. P.; AMATO, M.; LIMA, R. G. Pulmonary alveolus' model including surface tension effects. In: **Proceedings of the 19th International Congress on mechanical Engineering**. Brasília, DF: ABCM, 2007.

HIEMENZ, P. C.; RAJAGOPALAN, R. **Principles of Colloid and Surface Chemistry**. 3. ed. [S.l.]: Marcel Dekker Inc., 1997. 650 p.

HILLS, B. A. An alternative view of the role(s) of surfactant and the alveolar model. **Journal of Applied Physiology**, v. 87, p. 1567–1583, November 1999.

HOPPIN, F. G.; LEE, G. C.; DAWSON, S. V. Properties of lung parenchyma in distortion. **Journal of Applied Physiology**, v. 39, n. 5, p. 742–751, 1975.

HOUAISS, A.; VILLAR, M. de S.; FRANCO, F. M. de M. **Dicionário Houaiss da língua portuguesa**. 1. ed. Rio de Janeiro: Editora Objetiva, 2001.

HUMES, A. F. P. de C.; MELO, I. S. H. de; YOSHIDA, L. K.; MARTINS, W. T. **Noções de cálculo numérico**. São Paulo, Brasil: McGraw–Hill do Brasil Ltda., 1984. 201 p.

HUMPHREY, J. D. Continuum biomechanics of soft biological tissues. **Proceedings of the Royal Society of London A**, The Royal Society, v. 459, p. 3–46, 2003.

HUMPHREY, J. D.; VAWTER, D. L.; VITO, R. P. Pseudoelasticity of excised visceral pleura. **Journal of Biomechanical Engineering**, v. 109, p. 115–120, May 1987.

HUMPHREY, J. D.; YIN, F. C. P. A new constitutive formulation for characterizing the mechanical behavior of soft tissues. **Biophysical Journal**, v. 52, p. 563–570, October 1987.

JUNQUEIRA, L. C.; CARNEIRO, J. **Histologia Básica**. 11. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 2008. 524 p.

KARAKAPLAN, A. D.; BIENIEK, M. P.; SKALAK, R. Finite element analyses of lung parenchyma. In: GALLAGHER, R. H.; SIMON, B. R.; JOHNSON, P. C.; GROSS, J. F. (Ed.). **Finite Elements in Biomechanics**. 1. ed. Binghamton, EUA: Ed. John Wiley & Sons, Ltd, 1982. cap. 7, p. 111–126.

KOWE, R.; SCHROTER, R. C.; MATTHEWS, F. L.; HITCHINGS, D. Analysis of elastic and surface tension effects in the lung alveolus using finite element methods. **Journal of Biomechanics**, v. 19, n. 7, p. 541–549, 1986.

LEFF, A. R.; SCHUMACKER, P. T. **Fisiologia Respiratória**. 1. ed. Rio de Janeiro: Interlivros, 1996.

LEVITZKY, M. G. **Pulmonary Physiology**. 6. ed. New York, USA: Mc-Hill, 2003. 278 p.

LIN, Y.; FREUND, L. Forced detachment of a vesicle in adhesive contact with a substrate. **International Journal of Solids and Structures**, v. 48, p. 1927–1938, 2007.

LORENTZ, E. A mixed interface finite element for cohesive zone models. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, v. 198, p. 302–317, 2008.

MAKSYM, G. N.; BATES, J. H. T. A distributed nonlinear model of lung tissue elasticity. **Journal of Applied Physiology**, v. 82, n. 1, p. 32–41, 1997.

MAKSYM, G. N.; FREDBERG, J. J.; BATES, J. H. T. Force heterogeneity in a two-dimensional network model of lung tissue elasticity. **Journal of Applied Physiology**, v. 85, p. 1223–1229, 1998.

MATSUDA, M.; FUNG, Y.-C.; SOBIN, S. S. Collagen and elastin fibers in human pulmonary alveolar mouths and ducts. **Journal of Applied Physiology**, v. 63, n. 3, p. 1659–1675, 1988.

MCARDLE, W. D.; KATCH, F. I.; KATCH, V. L. **Exercise Physiology: Energy, Nutrition, and Human Performance**. 6. ed. Baltimore, EUA: Lippincott Williams & Wilkins, 2006. 1068 p.

MERCER, R. R.; CRAPO, J. D. Spatial distribution of collagen and elastin fibers in the lungs. **Journal of Applied Physiology**, v. 69, n. 2, p. 756–765, 1990.

MILLER, N. J. et al. The surface activity of pulmonary surfactant from diving mammals. **Respiratory Physiology & Neurobiology**, v. 150, p. 220–232, March 2006.

MOORE, K. L.; DALLEY, A. F. **Anatomia orientada para a clínica**. 4. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 2001.

NETO, D. P. **Sobre estratégias de resolução numérica de problemas de contato**. Dissertação (Mestrado) — Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, 2009. Disponível em: <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/18/18134/tde-14072009-165646/>>.

POSSMAYER, F. et al. Surface activity in vitro: role of surfactant proteins. **Comparative Biochemistry and Physiology Part A**, v. 129, p. 209–220, February 2001.

PRANGE, H. D. Laplace's law and the alveolus: A misconception of anatomy and a misapplication of physics. **Journal of Applied Physiology**, v. 27, p. 34–40, 2003.

REDDY, J. N. **An Introduction to Nonlinear Finite Element Analysis**. Oxford, Reino Unido: Oxford University Press, 2004. 463 p.

REDDY, J. N. **An Introduction to Continuum Mechanics**. Cambridge, Reino Unido: Cambridge University Press, 2008. 354 p.

RIKS, E. **The application of Newton's method to the problem of elastic stability**. [S.l.]: ASME, 1972. 1060–1066 p.

RIKS, E. An incremental approach to the solution of snapping and buckling problems. **International Journal of Solids and Structures**, v. 15, p. 529–551, 1979.

- ROSENQUIST, T. H.; BERNICK, S.; SOBIN, S. S.; FUNG, Y.-C. The structure of the pulmonary interalveolar microvascular sheet. **Microvascular Research**, v. 5, p. 199–212, September 1972.
- SCHÜRCH, S.; BACHOFEN, H.; GOERKE, J.; POSSMAYER, F. Surface activity in situ, in vivo, and in the captive bubble surfactometer. **Comparative Biochemistry and Physiology Part A**, v. 129, p. 195–207, February 2001.
- SCHÜRCH, S.; LEE, M.; GEHR, P. Pulmonary surfactant: Surface properties and function of alveolar and airway surfactant. **Pure and Applied Chemistry**, v. 64, p. 1745–1750, November 1992.
- SCHWEIZERHOF, K. H.; WRIGGERS, P. Consistent linearization for path following methods in nonlinear FE analysis. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 59, p. 261–279, 1986.
- SOBIN, S. S.; FUNG, Y.-C.; TREMER, H. M. Collagen and elastin fibers in human pulmonary alveolar walls. **Journal of Applied Physiology**, v. 64, n. 4, p. 1659–1675, 1988.
- STAMENOVIĆ, D.; WILSON, T. A. Parenchymal stability. **Journal of Applied Physiology**, v. 73, n. 2, p. 596–602, 1992.
- TALON, C.; CURNIER, A. A model of adhesion coupled to contact and friction. **European Journal of Mechanics A/Solids**, v. 22, p. 545–565, 2003.
- TAWHAI, M. H.; BURROWES, K. S. Developing integrative computational models of pulmonary structure. **The Anatomical Record Part B: The New Anatomist**, Wiley-Liss, v. 275B, p. 207–218, 2003.
- VAWTER, D. L.; FUNG, Y.-C.; WEST, J. B. Elasticity of excised dog lung parenchyma. **Journal of Applied Physiology**, v. 45, n. 2, p. 261–269, 1978.
- VELDHUIZEN, R.; NAG, K.; ORGEIG, S.; POSSMAYER, F. The role of lipids in pulmonary surfactant. **Biochim Biophys Acta**, v. 1408, p. 90–108, 1998.
- WARD, A. F. H.; TORDAI, L. **Time-dependence of boundary tension of solutions. I. The role of diffusion in time-effects**. [S.I.]: Springer-Verlag, 1946. 453 p.
- WEST, J. B.; MATTHEWS, F. L. Stress, strain, and surface pressures in the lung caused by its weight. **Journal of Applied Physiology**, v. 32, n. 3, p. 332–345, 1972.
- WILSON, T. A. Surface tension-surface area curves calculated from pressure-volume loops. **Journal of Applied Physiology**, v. 53, n. 6, p. 1512–1520, 1982.
- WILSON, T. A.; BACHOFEN, H. A model for mechanical structure of the alveolar duct. **Journal of Applied Physiology**, v. 52, n. 4, p. 1064–1070, 1982.
- WRIGGERS, P. **Nonlinear Finite Element Methods**. Berlin, Alemanha: Springer-Verlag, 2008. 559 p.
- ZENG, Y. J.; YAGER, D.; FUNG, Y.-C. Measurement of mechanical properties of the human lung parenchyma. **Journal of Biomechanical Engineering**, v. 109, p. 169–174, May 1987.