UZIEL PAULO DA SILVA

**EMPREGO DO MÉTODO DE HOMOGENEIZAÇÃO
ASSINTÓTICA NO CÁLCULO DAS PROPRIEDADES
EFETIVAS DE ESTRUTURAS ÓSSEAS**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação Interunidades Bioengenharia - Escola de Engenharia de São Carlos / Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto / Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de Concentração: Bioengenharia.

Prof. Adair Roberto Aguiar, PhD.

Versão Corrigida

São Carlos,

2014

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

S586e Silva, Uziel Paulo da
Emprego do método de homogeneização assintótica no
cálculo das propriedades efetivas de estruturas ósseas
/ Uziel Paulo da Silva; orientador Adair Roberto
Aguiar. São Carlos, 2014.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação
Interunidades Bioengenharia e Área de Concentração em
Bioengenharia -- Escola de Engenharia de São Carlos;
Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto; Instituto de
Química de São Carlos, da Universidade de São Paulo,
2014.

1. Estrutura óssea. 2. Método de homogeneização
assintótica. 3. Propriedades efetivas. 4. Modelagem
multiescala. I. Título.

Programa de Pós-Graduação Interunidades em Bioengenharia
EESC / FMRP / IQSC

Uziel Paulo da Silva

Título: "Emprego do método de homogeneização assintótica no cálculo das propriedades efetivas de estruturas ósseas".

TESE APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
INTERUNIDADES BIOENGENHARIA - EESC/FMRP/IQSC DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS NA ÁREA DE BIOENGENHARIA.

Aprovado em: 28 / 05 / 2014

Prof. Dr. Adair Roberto Aguiar (Orientador)

Resultado: Aprovado

Universidade de São Paulo - USP

Assinatura: Adair R. Aguiar

Prof. Dr. Orivaldo Lopes da Silva

Resultado: Aprovado

Universidade de São Paulo - USP

Assinatura: Orivaldo

Prof. Dr. Jonas de Carvalho

Resultado: Aprovado

Universidade de São Paulo - USP

Assinatura: Jonas de Carvalho

Prof. Dr. Sergio Persival Baroncini Proença

Resultado: Aprovado

Universidade de São Paulo - USP

Assinatura: Sergio Persival Baroncini Proença

Prof. Dr. Walter Savassi

Resultado: Aprovado

Universidade de São Paulo - USP

Assinatura: Walter Savassi

Homologado em: 13 / 08 / 2014

Dedicatória

Aos meus pais, Paulo Silva (*in memoriam*) e Sebastiana Ana Silva, com amor e gratidão, a quem devo minha educação e minha formação moral.

À minha irmã, Nice Mazikina, por todo o apoio, incentivo e amizade.

À minha esposa, Rafaela Silva, com amor, admiração e gratidão por sua compreensão, carinho, presença e incansável apoio ao longo do período de elaboração deste trabalho.

Agradecimentos

À Deus por minha vida.

Aos meus pais pelo apoio incondicional às minhas decisões.

À minha esposa e acima de tudo grande amiga, Rafaela, por apoiar-me em todos os momentos.

Ao professor Adair Roberto Aguiar pela orientação, dedicação e compreensão das minhas limitações ao longo de toda esta pesquisa.

Ao Grupo de Mecânica dos Sólidos da Universidad de La Habana (UH) (Cuba), em especial, aos professores Julian Bravo-Castillero e Reinaldo Rodriguez-Ramos, pelo apoio, pelo auxílio, pessoas tão queridas e especiais.

À CAPES pelo suporte financeiro recebido durante o curso, a todos os funcionários do Departamento de Engenharia de Estruturas e do Programa de Pós-Graduação Interunidades Bioengenharia por contribuir indiretamente para a realização deste trabalho.

Aos colegas e amigos Lucas Freitas, Alessandro Hakme, Gabriel Rocha e Edmar Prado pela troca de ideias e pelo apoio nos momentos difíceis.

Aos colegas e amigos de doutorado pelo estímulo.

Epígrafe

Não existem métodos fáceis para resolver problemas difíceis.

René Descartes

Não se pode ignorar o sentimento de que as fórmulas matemáticas têm uma existência independente e uma inteligência própria e são mais sábias do que nós, mais sábias que os seus descobridores e aprendemos mais com elas do que inicialmente julgamos.

Heinrich Rudolf Hertz

Resumo

SILVA, U. P. (2014). 95f **EMPREGO DO MÉTODO DE HOMOGENEIZAÇÃO ASSINTÓTICA NO CÁLCULO DAS PROPRIEDADES EFETIVAS DE ESTRUTURAS ÓSSEAS.** Tese (Doutorado) – Programa de Pós-Graduação Interunidades Bioengenharia, Escola de Engenharia de São Carlos/ Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto/ Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

Ossos são sólidos não homogêneos com estruturas altamente complexas que requerem uma modelagem multiescala para entender seu comportamento eletromecânico e seus mecanismos de remodelamento. O objetivo deste trabalho é encontrar expressões analíticas para as propriedades elástica, piezoelétrica e dielétrica efetivas de osso cortical modelando-o em duas escalas: microscópica e macroscópica. Utiliza-se o Método de Homogeneização Assintótica (MHA) para calcular as constantes eletromecânicas efetivas deste material. O MHA produz um procedimento em duas escalas que permite obter as propriedades efetivas de um material compósito contendo uma distribuição periódica de furos cilíndricos circulares unidirecionais em uma matriz piezoelétrica linear e transversalmente isotrópica. O material da matriz pertence à classe de simetria cristalina 622. Os furos estão centrados em células de uma matriz periódica de seções transversais quadradas e a periodicidade é a mesma em duas direções perpendiculares. O compósito piezoelétrico está sob cisalhamento antiplano acoplado a um campo elétrico plano. Os problemas locais que surgem da análise em duas escalas usando o MHA são resolvidos por meio de um método da teoria de variáveis complexas, o qual permite expandir as soluções correspondentes em séries de potências de funções elípticas de Weierstrass. Os coeficientes das séries são determinados das soluções de sistemas lineares infinitos de equações algébricas. Truncando estes sistemas infinitos até uma ordem finita de aproximação, obtêm-se fórmulas analíticas para as constantes efetivas elástica, piezoelétrica e dielétrica, que dependem da fração de volume dos furos e de um fator de acoplamento eletromecânico da matriz. Os resultados numéricos obtidos a partir destas fórmulas são comparados com resultados obtidos pelas fórmulas calculadas via método de Mori-Tanaka e apresentam boa concordância. A boa concordância entre todas as curvas obtidas via MHA sugere que a expressão correspondente da primeira aproximação fornece uma fórmula muito simples para calcular o fator de acoplamento efetivo do compósito. Os resultados são úteis na mecânica de osso.

Palavras-chave: estrutura óssea; método de homogeneização assintótica; propriedades efetivas, modelagem multiescala.

Abstract

SILVA, U. P. (2014). 95f. USING THE ASYMPTOTIC HOMOGENIZATION METHOD TO EVALUATE THE EFFECTIVE PROPERTIES OF BONE STRUCTURES. Ph.D. Thesis – Programa de Pós-Graduação Interunidades Bioengenharia, Escola de Engenharia de São Carlos/ Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto/ Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

Bones are inhomogeneous solids with highly complex structures that require multiscale modeling to understand its electromechanical behavior and its remodeling mechanisms. The objective of this work is to find analytical expressions for the effective elastic, piezoelectric, and dielectric properties of cortical bone by modeling it on two scales: microscopic and macroscopic. We use Asymptotic Homogenization Method (AHM) to calculate the effective electromechanical constants of this material. The AHM yields a two-scale procedure to obtain the effective properties of a composite material containing a periodic distribution of unidirectional circular cylindrical holes in a linear transversely isotropic piezoelectric matrix. The matrix material belongs to the symmetry crystal class 622. The holes are centered in a periodic array of cells of square cross sections and the periodicity is the same in two perpendicular directions. The piezoelectric composite is under antiplane shear deformation together with in-plane electric field. Local problems that arise from the two-scale analysis using the AHM are solved by means of a complex variable method, which allows us to expand the corresponding solutions in power series of Weierstrass elliptic functions. The coefficients of these series are determined from the solutions of infinite systems of linear algebraic equations. Truncating the infinite systems up to a finite, but otherwise arbitrary, order of approximation, we obtain analytical formulas for effective elastic, piezoelectric, and dielectric properties, which depend on both the volume fraction of the holes and an electromechanical coupling factor of the matrix. Numerical results obtained from these formulas are compared with results obtained by the Mori-Tanaka approach and show good agreement. The good agreement between all curves obtained via AHM suggests that the corresponding expression of first approximation provides a very simple formula to calculate the effective coupling factor of the composite. The results are useful in bone mechanics.

Key-words: bone structure; asymptotic homogenization method; effective properties; multiscale modeling.

Lista de Figuras

Figura 1	Tetraedro infinitesimal no interior de um sólido (PIMENTA, 2006).	38
Figura 2	Esquema da matriz constitutiva para materiais de classe cristalina 622. Figura adaptada de Nye (1985).	43
Figura 3	Forma básica de um cristal de classe 622. Figura obtida em < http://www.metafysica.nl/turing/promorph_crystals_2.html >	43
Figura 4	Organização estrutural hierárquica do osso: (a) osso cortical e trabecular; (b) osteons com sistemas Haversianos; (c) lamelas; (d) fibra colágena: união de fibrilas colágenas; (e) cristais minerais de osso, moléculas de colágeno, e proteínas não colágenas. Figura adaptada de Rho, Kuhn-Spearing e Zioupos (1998).	47
Figura 5	Esquema da parede da diáfise de ossos longos. Figura adaptada de Junqueira e Carneiro (2004).	48
Figura 6	Secção transversal de sistemas haversianos. Figura à direita adaptada de Swan et al. (2003) e à esquerda obtida em: < http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Compact_bone_-_ground_cross_section.jpg >.	49
Figura 7	Estrutura trabecular do osso esponjoso do fémur: (a) osso normal, (b) osso osteoporótico. O osso osteoporótico contém grandes buracos como resultado da descalcificação. Figura obtida em: < www.brsoc.org.uk/gallery >.	50

Figura 8	(a) Estrutura periódica composta de cilindros circulares paralelos, vazios e idênticos. (b) Célula ocupa a região quadrada $R = R_1 \cup R_2$ com $R_1 \cap R_2 = \emptyset$	64
Figura 9	Constantes efetivas do compósito piezoelétrico versus a fração de área V_1 . a) Constantes elásticas e permissividade dielétrica normalizadas; b) Constantes piezoelétricas normalizadas.	83
Figura 10	Razão entre o fator de acoplamento efetivo β_e e o fator de acoplamento da matriz β versus fração de área V_1	84
Figura 11	Constantes efetivas do compósito piezoelétrico versus fator de acoplamento piezoelétrico β para $V_1 = 0.2$: a) Constante elástica e de permissividade dielétrica normalizadas; b) Constante piezoelétrica normalizada.	85
Figura 12	Constantes efetivas do compósito piezoelétrico versus fator de acoplamento piezoelétrico β para $V_1 = 0.785$: a) Constante elástica e de permissividade dielétrica normalizada; b) Constantes piezoelétricas normalizadas.	86

Lista de Tabelas

Tabela 1	Os trinta e dois grupos pontuais dispostos de acordo com a classe cristalina. Tabela adaptada de Hahn e Klapper (2006).	41
Tabela 2	Problemas Locais ${}_3L$ e ${}_iL$, $i = 1, 2$	69

Lista de Siglas

PVC	Problema de Valor de Contorno
MEF	Método dos Elementos Finitos
MT	Método de Mori-Tanaka
MHA	Método de Homogeneização Assintótica
ST1	Sistema Triclínico
SM	Sistema Monoclínico
SO	Sistema Ortorrômbico
ST3	Sistema Trigonal
ST4	Sistema Tetragonal
SC	Sistema Cúbico
SH	Sistema Hexagonal
SCC	Sistema de Coordenadas Cartesianas

Lista de Símbolos

ε	Parâmetro pequeno
β	Fator de acoplamento eletromecânico
p_e	Módulo efetivo de elasticidade ao cisalhamento
s_e	Constante piezoelétrica efetiva
t_e	Constante efetiva de permissividade dielétrica
V_1	Fração de área de um furo
$\mathbb{R}$	Conjunto dos números reais
$\mathbb{R}^+$	Conjunto dos números reais estritamente positivos
$\mathbb{E}^3$	Espaço Euclidiano tridimensional
$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$	Produto interno de dois vetores
δ_{ij}	Delta de Kronecker
γ_{ijk}	Símbolo Permutador
$\mathbf{E}$	Campo elétrico
$\mathbf{P}$	Polarização
$\mathbf{D}$	Deslocamento elétrico
χ	Suscetibilidade dielétrica
κ	Permissividade elétrica
$\nabla \cdot$	Operador diferencial divergente
$\nabla \times$	Operador diferencial rotacional
$\mathbf{E}$	Tensor deformação de Green-St.Venant
σ_{ij}	Componentes do tensor tensão
C_{ijkl}	Componentes do tensor de elasticidade

ε_{kl}	Componentes do tensor deformação
E_k	Componentes do vetor campo elétrico
κ_{ik}	Componentes do tensor de permissividade elétrica
$\frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_n}$	Componentes do gradiente de deslocamento
$\frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_k}$	Componentes do gradiente do potencial escalar
c_{ijkn}^ε	Componentes do tensor de elasticidade
e_{ijk}^ε	Componentes do tensor piezoelétrico
κ_{ij}^ε	Componentes do tensor de permissividade elétrica
Δ_x	Operador de Laplace com respeito à variável $\mathbf{x}$
∇_x	Operador gradiente com respeito à variável $\mathbf{x}$
γ_{ij}	Símbolo permutador de ordem dois
Δ	Operador de Laplace com respeito à variável $\mathbf{y}$
${}_{i3}L, {}_iL$	Problemas locais

Sumário

1	Introdução	23
1.1	Justificativa	27
1.2	Objetivo	28
1.3	Organização da Tese	28
2	Fundamentação Teórica	29
2.1	Tensores e Notação Indicial	29
2.2	Dieletricidade	33
2.3	Elasticidade	35
2.3.1	Deformação	35
2.3.2	Tensão	38
2.4	Piezoeletricidade	40
2.4.1	Simetria de Sólidos Cristalinos: A Classe hexagonal 622	42
3	Revisão Bibliográfica	45
3.1	Compósito	45
3.2	Elementos da Biofísica Óssea	46
3.2.1	Aspectos Estruturais e Classificação do Osso	47
3.3	Piezoeletricidade em Ossos	51
4	Homogeneização de Estruturas Periódicas	57
4.1	O Método de Homogeneização Assintótica	57

4.2	Homogeneização Assintótica de Estruturas Piezoelétricas	57
5	Modelagem Multiescala de Osso Cortical	63
5.1	Formulação do Problema	63
5.2	Homogeneização	65
5.3	Solução dos Problemas Locais	69
6	Cálculo das Propriedades Efetivas	75
6.1	Obtenção das Constantes Efetivas Utilizando MHA	75
6.2	Constantes Efetivas via Método de Mori-Tanaka	78
7	Resultados Numéricos	81
8	Conclusão	87
8.1	Trabalhos futuros e em progresso	87
¹	Referências	89

1 Introdução

Compósitos bioativos, como as biocerâmicas capazes de se ligarem a tecidos vivos, são amplamente empregados em dispositivos médicos e odontológicos. Em geral, no entanto, a utilização de materiais na biomedicina é limitada pela diferença entre as propriedades eletromecânicas desses materiais e as propriedades correspondentes dos tecidos vivos. O desenvolvimento de modelos matemáticos que permitem obter analiticamente as propriedades efetivas, ou, globais destes compósitos torna-se importante para a concepção de projetos que visam o desenvolvimento de novos materiais com as propriedades desejadas. Os modelos matemáticos devem ser capazes de prever o comportamento destes materiais quando submetidos a carregamentos mecânicos, efeitos térmicos, elétricos e magnéticos. Em geral, o comportamento destes materiais é analisado por meio da formulação de um problema de valor de contorno (PVC) contendo sistemas de equações diferenciais parciais com coeficientes periódicos e rapidamente oscilantes. Busca-se uma solução que satisfaça as equações governantes deste problema no interior do domínio e condições sobre os valores das variáveis, ou, de suas derivadas na fronteira do domínio. No entanto, há alguns compósitos que apresentam geometrias complexas e, em geral, recorre-se à simulação numérica; em particular, aos modelos multiescala por elementos finitos. Métodos numéricos, como o Método dos Elementos Finitos (MEF), são muitas vezes utilizados no cálculo de soluções aproximadas de problemas complexos de engenharia. Resultados precisos para os problemas que envolvem sólidos não homogêneos com uma fina microestrutura requerem um número bastante grande de graus de liberdade, o que pode ser computacionalmente caro para determinar. Além disso, os métodos numéricos não permitem a análise paramétrica de um problema, tornando a tarefa de procurar novos e inesperados fenômenos físicos muito difícil e dispendioso. Nestas situações, os métodos de homogeneização tem sido utilizados. Dentre eles destacam-

se os seguintes métodos: a Regra das Misturas, os métodos autoconsistentes, o Método de Mori-Tanaka (MT) e o Método de Homogeneização Assintótica (MHA). A Regra das Misturas está fundamentada no princípio aditivo, o qual estabelece que as propriedades efetivas do compósito serão derivadas da soma das propriedades dos componentes constituintes, respectivamente multiplicadas por suas frações de volume. Nos métodos autoconsistentes (HILL, 1965; BUDIANSKY, 1965) e no Método de Mori-Tanaka (MORI; TANAKA, 1973; BENVENISTE, 1987) as propriedades efetivas podem ser obtidas em termos da fração de volume, geometria da inclusão e das propriedades dos componentes. Estes métodos estão fundamentados na solução de Eshelby (1957) sobre uma única inclusão fixada numa matriz infinita. O MHA (BENSOUSSAN; LION; PAPANICOLAOU, 1978; SANCHEZ-PALENCIA, 1980; BAKHVALOV; PANASENKO, 1989) pode ser usado com vantagem nessas situações, pois a homogeneização das equações governantes pode fornecer informações importantes sobre aspectos fenomenológicos das soluções, os quais podem ser utilizados na concepção de experimentos numéricos bem postos (ver, por exemplo, Aguiar, Pérez-Fernandez e Prado (2013)). Mesmo quando a análise das equações homogeneizadas é muito complexa, a solução numérica destas equações é preferível à solução numérica e direta das equações originais, porque requer um número menor de graus de liberdade para se obter resultados precisos (ver, por exemplo, Berger et al. (2003)). O MHA é um método matemático multiescala que permite encontrar com grande precisão as propriedades efetivas de um compósito a partir das propriedades físicas e geométricas de seus componentes. Para utilizar o MHA, determina-se a geometria das células periódicas distribuídas na matriz e escolhe-se um parâmetro geométrico pequeno, ε , que é utilizado na mudança de escala, a qual possibilita reescrever o problema original utilizando sistemas de equações diferenciais parciais com coeficientes efetivos constantes. O MHA utiliza uma técnica de perturbação com base na expansão em séries assintóticas em torno do parâmetro pequeno ε . Em termos matemáticos, os problemas acima podem ser formulados como segue: Seja $\mathcal{M}$ um domínio com contorno $\partial\mathcal{M}$. Para um número real fixo $\varepsilon > 0$ seja A^ε um operador diferencial parcial linear em $\mathcal{M}$ e tem-se o seguinte PVC

$$\begin{cases} A^\varepsilon u^\varepsilon = f & \text{em } \mathcal{M}, \\ u^\varepsilon & \text{sujeito a condições de contorno apropriadas sobre } \partial\mathcal{M}. \end{cases} \quad (1.1)$$

Assume-se que $\mathcal{M}$ pode ser dividido em células idênticas de medida de ordem ε . Agora, variando ε , isto é, à proporção da estrutura periódica básica, obtêm-se uma família de operadores diferenciais parciais $\{A^\varepsilon\}$ e uma família correspondente de soluções $\{u^\varepsilon\}$. A ideia básica é realizar um expansão em múltipla escala do tipo

$$u^\varepsilon = u^{(0)} + \varepsilon u^{(1)} + \varepsilon^2 u^{(2)} + \dots, \quad (1.2)$$

Define-se

$$A^\varepsilon = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) \frac{\partial}{\partial x_j} \right) + a_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon), \quad (1.3)$$

em que A^ε é um operador diferencial parcial com variação periódica e coeficientes contínuos em $\mathcal{M}$, e

$$u^\varepsilon(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon). \quad (1.4)$$

A incógnita do problema depende das duas variáveis, $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$, relativas às escalas macroscópica, ou, *global* e microscópica, ou, *local*, respectivamente, em que $\mathbf{y} \triangleq \mathbf{x}/\varepsilon$. O parâmetro ε define a razão entre as diferentes escalas presentes no problema. O método de homogeneização por expansão assintótica apoia-se no fato de que, quando $\varepsilon \rightarrow 0$, a solução exata das equações originais converge a uma função denominada *solução homogeneizada*. Isto é, se determinadas condições são satisfeitas (veja, por exemplo, em Bensoussan, Lion e Papanicolaou (1978)), então, quando $\varepsilon \rightarrow 0$, u^ε converge para u^0 , no qual u^0 é a solução única do problema

$$\begin{cases} A^0 u^{(0)} = f & \text{em } \mathcal{M}, \\ u^{(0)} & \text{sujeito a condições de contorno apropriadas sobre } \partial\mathcal{M}. \end{cases} \quad (1.5)$$

no qual os coeficientes do operador *homogeneizado* A^0 são constantes.

Neste trabalho, modela-se a estrutura óssea como um compósito bifásico contendo uma distribuição periódica e unidirecional de furos cilíndricos circulares em uma matriz transversalmente isotrópica. O material constituinte da matriz pertence à classe de simetria cristalina 622. Aqui, o compósito está sob estado acoplado de cisalhamento antiplano e campo elétrico plano. De acordo com Fukada e Yasuda (1957) a piezoeletricidade em ossos aparece somente quando *forças cisalhantes* agem sobre as fibras de colágeno orientadas. Além disto, em geral, na mecânica dos sólidos é preferível considerar um conjunto de problemas de valor de contorno semelhantes, iniciando pelo estado antiplano de deformação/tensão por ser aquele que possui

menor quantidade de variáveis independentes. Estes problemas são matematicamente mais simples, de modo que, torna-se mais fácil obter uma solução analítica e analisar as propriedades do fenômeno considerado. Frequentemente o modelo matemático utilizado para resolver o problema antiplano, será posteriormente aplicado, na solução de problemas planos e tridimensionais, os quais possuem mais variáveis independentes.

Considere um corpo infinito sob cisalhamento antiplano. Neste caso, somente um componente do deslocamento é não nulo: $u_3 = u_3(x_1, x_2)$ e $u_1 = u_2 = 0$. De acordo com as equações de Cauchy, o tensor de deformação tem as seguintes componentes não nulas

$$\varepsilon_{13} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_3}{\partial x_1}, \quad \varepsilon_{23} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_3}{\partial x_2}, \quad (1.6)$$

e

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \varepsilon_{12} = 0. \quad (1.7)$$

Substituindo (1.6) e (1.7) na Lei de Hooke, obtém-se a seguinte equação de equilíbrio

$$\frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_2} = 0. \quad (1.8)$$

Utiliza-se o MHA para obter as constantes efetivas do meio piezoelétrico. Um conjunto de problemas locais surge da análise em duas escalas. As soluções destes problemas são expandidas em séries de potências da função elíptica de Weierstrass contendo coeficientes que são determinados da solução de sistemas infinitos de equações algébricas lineares. Truncando estes sistemas infinitos em um número finito de termos e equações, obtêm-se sistemas finitos e determinados. Resolvendo-os, obtêm-se expressões fechadas para os coeficientes e fórmulas analíticas simples para as propriedades efetivas elástica, piezoelétrica e dielétrica, as quais dependem somente da fração de volume dos furos e do fator de acoplamento eletromecânico k da matriz. Aqui, o quadrado deste fator, $\beta \triangleq k^2$, é a razão entre o quadrado da energia elasto-dielétrica mútua U_m e o produto das energias elástica U_e e dielétrica U_d armazenadas, isto é, $k^2 = U_m^2 / (U_e U_d)$, onde a energia armazenada de um corpo piezoelétrico é dada por $U = U_e + 2U_m + U_d$ (IRE (1958), apud Ikeda (1990)). O fator de acoplamento β é um indicador da eficácia com que um material piezoelétrico converte energia elétrica em energia mecânica e vice-versa.

1.1 Justificativa

Com o envelhecimento da população e a baixa taxa de natalidade, o número de idosos está aumentando progressivamente. De acordo com a Organização das Nações Unidas, está ocorrendo uma transição do processo demográfico mundial, a qual é irreversível, e que resultará em populações envelhecidas em todos os lugares. Ao passo que as taxas de natalidade diminuem, a proporção de pessoas com 60 anos ou mais irá duplicar até 2050, alcançando dois bilhões de indivíduos. Na maioria dos países, o número de pessoas acima dos 80 anos deve quadruplicar para quase 400 milhões até 2050 (ONUBR, 2002). Como a população está envelhecendo, fraturas relacionadas à osteoporose tornam-se uma preocupação significativa para a comunidade mundial. A osteoporose é considerada um grave problema de saúde pública devido ao número e consequências das fraturas. De acordo com STROM et al. (2011), a perda óssea é gradual e indolor; normalmente, não há sintomas que indiquem o desenvolvimento da osteoporose em uma pessoa. Frequentemente, o primeiro sintoma da osteoporose é a fratura. Neste contexto, o estudo das propriedades mecânicas e sua relação nos processos de formação óssea e consolidação de fraturas torna-se indispensável.

A investigação sobre estruturas biológicas, tais como o osso, é complexa. Um entendimento claro do comportamento piezoelétrico e elástico da microestrutura óssea é necessário para a modelagem do comportamento macroscópico, para a investigação de relações estruturais-funcionais e o desenvolvimento de novos métodos de avaliação em vivo de qualidade óssea. Apesar de vários estudos dedicados à avaliação das propriedades eletromecânicas de ossos, algumas questões permanecem em aberto no que diz respeito aos determinantes da piezoelectricidade óssea. A análise das propriedades eletromecânicas do osso é importante para a medicina no diagnóstico e tratamento de osteoporose e na consolidação de fraturas. As propriedades efetivas de estruturas ósseas têm sido estudadas nas últimas décadas, principalmente depois das respostas positivas obtidas com estimulação elétrica e mecânica (veja, por exemplo, Duarte (1983)).

Utiliza-se o MHA para obter as constantes efetivas do meio piezoelétrico por ser um método matemático multiescala rigoroso que permite encontrar com grande precisão as propriedades efetivas de compósitos a partir das propriedades materiais e

geométricas de seus constituintes.

1.2 Objetivo

O objetivo deste trabalho é modelar estruturas ósseas como materiais piezoelétricos porosos e obter expressões analíticas para constantes efetivas destes materiais por meio do MHA.

1.3 Organização da Tese

Desenvolve-se e organiza-se o presente texto em capítulos, os quais estão descritos a seguir. No capítulo 2 contextualizam-se os conceitos apresentados no capítulo 1 e introduzem-se os principais tópicos teóricos necessários ao desenvolvimento da tese, tais como tensores, notação indicial, tensão, deformação, piezoeletricidade, elasticidade, dieletricidade, classe de simetria cristalina e modelos constitutivos. No capítulo 3 realiza-se uma revisão bibliográfica de trabalhos relevantes nas áreas de biomecânica óssea e de determinação das propriedades eletromecânicas efetivas em multiescala de materiais compósitos. No capítulo 4 aborda-se a homogeneização de estruturas periódicas por meio do MHA. No capítulo 5 encontra-se a principal contribuição deste trabalho. Nele modela-se a estrutura óssea como um compósito heterogêneo bifásico, o qual contém uma distribuição periódica de furos cilíndricos, circulares e unidirecionais em uma matriz piezoelétrica de classe de simetria cristalina 622. Supõe-se que este compósito está sob a ação de um campo elétrico plano e uma deformação cisalhante antiplana. Constroem-se soluções periódicas via MHA e calculam-se as constantes efetivas do meio homogeneizado. No capítulo 6 calculam-se as constantes elástica, piezoelétrica, e dielétrica efetivas p_e , s_e , e t_e , respectivamente, do meio homogeneizado via MHA e via método de Mori-Tanaka (MT). No capítulo 7 apresentam-se resultados numéricos para as propriedades eletromecânicas efetivas do meio piezoelétrico homogeneizado em termos da fração de área V_1 dos furos e do fator de acoplamento eletromecânico β de fêmur bovino seco. Mostram-se que as constantes efetivas normalizadas obtidas via MHA estão em boa concordância com as constantes obtidas via teoria de Mori-Tanaka. No capítulo 8 apresenta-se a conclusão do trabalho.

2 Fundamentação Teórica

Neste capítulo contextualizam-se os conceitos apresentados no capítulo 1 e introduzem-se os principais conceitos teóricos necessários ao desenvolvimento da tese, tais como tensores, notação indicial, tensão, deformação, piezoelectricidade, elasticidade, dielectricidade, classe de simetria cristalina e modelos constitutivos. Utiliza-se uma notação mista *tensorial - indicial*. De um modo geral, tensores e vetores estão em **negritos** e as componentes que os representam estão em notação indicial. A notação tensorial permite a apresentação de expressões que são válidas em qualquer sistema de coordenadas e a notação indicial permite apresentar estas expressões de forma compacta para a realização de cálculos numéricos.

2.1 Tensores e Notação Indicial

As propriedades físicas de cristais são definidas por relações entre grandezas mensuráveis, as quais são matematicamente representadas por tensores. Nesta seção apresenta-se o conceito de **tensor**. Uma exposição mais detalhada pode ser vista em Gurtin (1981).

Seja $\mathbb{R}$ o conjunto dos números reais e $\mathbb{R}^+$ o conjunto dos números reais estritamente positivos. O espaço euclidiano sob consideração é o espaço euclidiano tridimensional, $\mathbb{E}^3$. O termo **ponto** é reservado para os elementos de $\mathbb{E}^3$ e o termo **vetor** para elementos do espaço vetorial $\mathcal{V}$. A diferença de dois pontos, $\mathbf{y}$ e $\mathbf{x}$, é o vetor

$$\mathbf{v} = \mathbf{y} - \mathbf{x} \quad (2.1)$$

e a soma de um ponto $\mathbf{x}$ e um vetor $\mathbf{v}$ é o ponto

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{v} \quad (2.2)$$

O **produto interno** de dois vetores $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ é designado por $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$, e a norma do vetor $\mathbf{u}$ é dada por

$$|\mathbf{u}| = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})^{1/2}, \quad \mathbf{u}^2 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}. \quad (2.3)$$

Seja $\mathcal{V}$ um espaço vetorial com o produto interno $(\cdot)$ e $\psi : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ um funcional linear. Então existe um único vetor $\mathbf{a} \in \mathcal{V}$ tal que, para todo $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$,

$$\psi(\mathbf{v}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{v}. \quad (2.4)$$

Um sistema de coordenadas cartesianas consiste de uma base ortonormal $\{\mathbf{e}_i\} = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ juntamente com uma origem $\mathbf{o}$. Assume-se que um sistema de coordenadas cartesianas fixo e único é dado. Assim, as componentes de um vetor $\mathbf{u}$ são dadas por

$$u_i = \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_i, \quad (2.5)$$

de modo que

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_i u_i v_i, \quad (2.6)$$

e, utilizando a *convenção de soma*, escreve-se $\sum_i u_i v_i = u_i v_i$. Portanto,

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i v_i. \quad (2.7)$$

Similarmente, as coordenadas de um ponto $\mathbf{x}$ são

$$x_i = (\mathbf{u} - \mathbf{o}) \cdot \mathbf{e}_i. \quad (2.8)$$

Formalmente, define-se um **tensor** como uma *transformação linear* de um espaço vetorial nele próprio. Assim, um tensor $\mathbf{S}$ é uma aplicação que atribui para cada vetor $\mathbf{u} \in \mathcal{V}$ um vetor

$$\mathbf{v} = \mathbf{S}\mathbf{u}. \quad (2.9)$$

O conjunto de todos os tensores formam um espaço vetorial se, para dois tensores arbitrários $\mathbf{S}$ e $\mathbf{T}$ e um escalar α , $\mathbf{S} + \mathbf{T}$ e $\alpha\mathbf{S}$ são tensores definidos por

$$\begin{aligned} (\mathbf{S} + \mathbf{T})\mathbf{v} &= \mathbf{S}\mathbf{v} + \mathbf{T}\mathbf{v}, & \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \\ (\alpha\mathbf{S})\mathbf{v} &= \alpha(\mathbf{S}\mathbf{v}), & \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

O elemento nulo deste espaço é o **tensor nulo** $\mathbf{0}$, o qual atribui a todos os vetores $\mathbf{v}$ o vetor nulo

$$\mathbf{0}\mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}. \quad (2.11)$$

Outro tensor importante é o **tensor identidade** $\mathbf{I}$, definido por

$$\mathbf{I}\mathbf{v} = \mathbf{v}, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}. \quad (2.12)$$

Escreve-se $\mathbf{S}^T$ para o transposto de $\mathbf{S}$, tal que $\mathbf{S}^T$ é o único tensor com a propriedade

$$\mathbf{S}\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{S}^T\mathbf{v} \quad (2.13)$$

para todos os vetores $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ em $\mathcal{V}$.

Um tensor $\mathbf{S}$ é **simétrico** se

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^T \quad (2.14)$$

e **antissimétrico** se

$$\mathbf{S} = -\mathbf{S}^T. \quad (2.15)$$

As componentes S_{ij} de um tensor $\mathbf{S}$ são definidas por

$$S_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{S}\mathbf{e}_j. \quad (2.16)$$

Com esta definição, segue-se que as componentes de $\mathbf{v} = \mathbf{S}\mathbf{u}$ são dadas por

$$v_i = \sum_j S_{ij} u_j = S_{ij} u_j. \quad (2.17)$$

Escreve-se $[\mathbf{S}]$ para a matriz

$$[\mathbf{S}] = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix}. \quad (2.18)$$

Segue de (2.16) e (2.18) que

$$\begin{aligned} [\mathbf{S}^T] &= [\mathbf{S}]^T, \\ [\mathbf{S}\mathbf{T}] &= [\mathbf{S}][\mathbf{T}], \end{aligned} \quad (2.19)$$

e

$$[\mathbf{I}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.20)$$

O **traço** de um tensor é definido por

$$\text{tr} \mathbf{S} = \sum_i S_{ii} = S_{ii}. \quad (2.21)$$

O espaço de todos os tensores tem um **produto interno**

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{T} = \text{tr} (\mathbf{S}^T \mathbf{T}), \quad (2.22)$$

o qual, em componentes, é dado por

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{T} = \sum_{i,j} S_{ij} T_{ij} = S_{ij} T_{ij}. \quad (2.23)$$

Um tensor $\mathbf{S}$ é **invertível** se existe um tensor $\mathbf{S}^{-1}$, denominado inverso de $\mathbf{S}$, tal que

$$\mathbf{S} \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{S} = \mathbf{I}, \quad (2.24)$$

no qual $\mathbf{I}$ é o tensor identidade (2.12). Em particular, na base de vetores unitários $\{\mathbf{e}_i\}$, têm-se

$$\mathbf{I} \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{I} \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_2, \quad \mathbf{I} \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_3. \quad (2.25)$$

Logo, as componentes do tensor identidade são

$$I_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{I} \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}, \quad (2.26)$$

sendo δ_{ij} o **Delta de Kronecker** definido por

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, \text{ quando } i = j \\ 0, \text{ quando } i \neq j \end{cases}. \quad (2.27)$$

O produto vetorial de dois vetores $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ é definido por

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = \gamma_{ijk} u_j v_k \mathbf{e}_i, \quad (2.28)$$

em que γ_{ijk} é denominado símbolo permutador e definido por

$$\gamma_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{quando } (i, j, k) \text{ estiver em ordem cíclica,} \\ 0, & \text{quando } (i, j, k) \text{ forem } i = j \text{ ou } i = k \text{ ou } j = k, \\ -1, & \text{quando } (i, j, k) \text{ estiver em ordem não cíclica.} \end{cases} \quad (2.29)$$

O produto tensorial de dois vetores $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ é um tensor que atribui para cada vetor $\mathbf{v}$ o vetor $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{v})\mathbf{a}$, ou seja,

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})\mathbf{v} = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{v})\mathbf{a}. \quad (2.30)$$

Nas próximas seções serão abordadas as principais propriedades físicas dos sólidos que são de interesse neste trabalho.

2.2 Dieletricidade

Quando um sólido cristalino é submetido a um campo elétrico, seus átomos e moléculas adquirem um momento de dipolo deslocando cargas positivas e negativas. Esta polarização pode ser representada por uma equação tensorial. Se $\mathbf{E}$ é o campo elétrico, $\mathbf{P}$ a polarização, e $\mathbf{D}$ o deslocamento elétrico (ou, densidade de fluxo elétrico), então

$$\mathbf{D} = \kappa_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (2.31)$$

em que $\kappa_0 = 8,854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$ é a permissividade do vácuo.

Em um sólido *isotrópico* a polarização é dada por

$$\mathbf{P} = \kappa_0 \chi \mathbf{E}, \quad (2.32)$$

em que χ é a suscetibilidade dielétrica. Anisotropia é a característica que um ponto material possui em que uma certa propriedade física varia com a direção. Se esta propriedade for igual, não importando a direção, então o ponto material é chamado isotrópico. Por conseguinte, um corpo é chamado isotrópico se todos os pontos materiais do corpo exibirem o mesmo comportamento de um único ponto material deste corpo. Tendo em vista (2.32), a relação (2.31) pode então ser reescrita como

$$\mathbf{D} = \kappa \mathbf{E}, \quad (2.33)$$

em que $\kappa = \kappa_0(1 + \chi)$ é a permissividade. É conveniente introduzir a definição da permissividade relativa, ou constante dielétrica, a qual é dada por

$$K = \kappa / \kappa_0. \quad (2.34)$$

Em um material *anisotrópico*, as relações análogas a (2.32) e (2.33) são dadas por, respectivamente,

$$\mathbf{P} = \kappa_0 \boldsymbol{\chi} \mathbf{E}, \quad (2.35)$$

na qual $\boldsymbol{\chi}$ é o tensor de suscetibilidade de segunda ordem com componentes χ_{ij} e

$$\mathbf{D} = \boldsymbol{\kappa} \mathbf{E}, \quad (2.36)$$

em que $\boldsymbol{\kappa}$ é o tensor de permissividade cujas componentes são dadas por $\kappa_{ij} = \kappa_0(\delta_{ij} + \chi_{ij})$. Lembre-se da Seção 2.1 que δ_{ij} é o delta de Kronecker. De acordo com Nye (1985), para o tensor *constante dielétrica*, $\mathbf{K}$, as componentes são dadas por $K_{ij} = \kappa_{ij} / \kappa_0$. Mostra-se que $\kappa_{ij} = \kappa_{ji}$, logo $K_{ij} = K_{ji}$ e $\chi_{ij} = \chi_{ji}$.

De acordo com Nye (1985), as propriedades dielétricas de um cristal são caracterizadas pela magnitude e direção das permissividades, constantes dielétricas ou suscetibilidades dielétricas. Estas magnitudes e direções, em geral, dependem da frequência do campo elétrico, e devem sempre concordar com as restrições impostas pela simetria cristalina.

Em geral, um campo eletrostático no interior de um cristal anisotrópico não é uniforme. Considera-se neste trabalho que as equações fundamentais da eletrostática são satisfeitas e supõe-se a ausência de cargas de volume, $\rho = 0$. Deste modo, as duas *equações de Maxwell* envolvendo $\mathbf{D}$ e $\mathbf{E}$ são dadas por

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2.37)$$

nas quais $\nabla \cdot$ é o operador divergente e $\nabla \times$ é o operador rotacional. Uma vez que o rotacional de $\mathbf{E}$ é nulo, então $\mathbf{E}$ pode ser expressado como o gradiente de um *potencial* escalar, φ . Assim,

$$\mathbf{E} = -\nabla_x \varphi, \quad (2.38)$$

em que as componentes de $\mathbf{E}$ são dadas por

$$E_i = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}. \quad (2.39)$$

2.3 Elasticidade

De modo geral, um material elástico deforma-se ao ser submetido a ações externas, tais como forças devidas ao contato com outros corpos e forças gravitacionais, retornando à sua forma original quando as ações externas são removidas.

Para introduzir a expressão analítica da definição acima, é necessário introduzir os conceitos de tensão e deformação.

2.3.1 Deformação

Um corpo $\mathfrak{B}$ pode ser definido como um conjunto de partículas continuamente distribuídas, de modo que, para todo instante t cada partícula do conjunto ocupa um ponto de uma região regular fechada, $\mathfrak{C}_t$, em um espaço euclidiano de dimensão três, $\mathbb{E}^3$. Reciprocamente, cada ponto de $\mathfrak{C}_t$ é ocupado por uma partícula de $\mathfrak{B}$. A região $\mathfrak{C}_t$ é chamada configuração do corpo $\mathfrak{B}$ no instante t .

Seja $\mathfrak{C}_0$ uma determinada configuração de $\mathfrak{B}$ no instante $t = 0$, a qual chama-se configuração de referência. Se $\mathbf{X}$ é o vetor posição de um ponto de $\mathfrak{C}_0$, então uma partícula é unicamente determinada por $\mathbf{X}$. Assim, identifica-se a partícula com a posição do ponto correspondente em $\mathfrak{C}_0$ e descreve-se o movimento de um corpo pela posição $\mathbf{x}$ da partícula $\mathbf{X}$ no instante t por meio da equação

$$\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t), \quad (2.40)$$

na qual χ é um mapeamento contínuo cuja inversa existe e também é contínua.

O movimento de $\mathfrak{B}$ é uma família de configurações parametrizadas pelo tempo. Deste modo, o movimento pode ser definido como uma função contínua

$$\begin{aligned} \hat{\chi} : [a, b] &\longrightarrow D \\ t &\longrightarrow \mathfrak{C}_t, \end{aligned} \quad (2.41)$$

em que $[a, b]$ é um subconjunto de $\mathbb{R}$, D é o conjunto de todas as configurações possíveis para o corpo $\mathfrak{B}$.

Uma vez que (2.40) é um mapeamento contínuo cuja inversa também é contínua, então

$$\mathbf{X} = \boldsymbol{\chi}^{-1}(\mathbf{x}, t). \quad (2.42)$$

Consequentemente, em um certo tempo t , a posição de uma partícula $\mathbf{X}$ é dada por seu vetor posição $\mathbf{x}$, e as coordenadas de $\mathbf{X}$ são denominadas coordenadas materiais, ou, Lagrangianas. Por outro lado, pode-se analisar uma determinada posição no espaço, $\mathbf{x}$, e verificar qual partícula $\mathbf{X}$ que passa por este ponto em um determinado tempo t . Neste contexto, as coordenadas de $\mathbf{x}$ são denominadas coordenadas espaciais, ou, Eulerianas.

O vetor deslocamento $\mathbf{U}$ é dado por

$$\mathbf{U}(\mathbf{X}, t) = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X}, \quad (2.43)$$

ou,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{x} - \boldsymbol{\chi}^{-1}(\mathbf{x}, t). \quad (2.44)$$

Introduz-se agora o tensor gradiente de deformação $\mathbf{F}$, definido como a derivada da configuração de um corpo, $\mathfrak{B}$, em relação ao ponto material $\mathbf{X}$ para um dado tempo t , ou seja,

$$\mathbf{F} = \nabla \boldsymbol{\chi} = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial \mathbf{X}} = F_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \quad (2.45)$$

em que

$$F_{ij} \triangleq \frac{\partial x_i}{\partial X_j}. \quad (2.46)$$

Ao tensor

$$\mathbf{L} = \nabla \mathbf{U} \quad (2.47)$$

dá-se o nome de gradiente dos deslocamentos de $\mathfrak{B}$. De (2.43) e (2.47) decorre

$$\mathbf{L} = \mathbf{F} - \mathbf{I}. \quad (2.48)$$

Utilizando (2.45), introduz-se o *tensor deformação de Cauchy-Green à direita*

por

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}, \quad (2.49)$$

em que as componentes de $\mathbf{C}$ são dadas por

$$C_{ij} = F_{mi} F_{mj}. \quad (2.50)$$

O tensor $\mathbf{C}$ é uma medida lagrangiana de deformação. Introdúz-se também o *tensor de Cauchy-Green à esquerda* por

$$\mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T, \quad (2.51)$$

em que as componentes de $\mathbf{B}$ são dadas por

$$B_{ij} = F_{im} F_{jm}. \quad (2.52)$$

O tensor $\mathbf{B}$ é uma medida euleriana de deformação.

O tensor $\mathbf{E}$, denominado *tensor deformação de Green-St. Venant*, é definido por

$$2\mathbf{E} = \mathbf{C} - \mathbf{I}. \quad (2.53)$$

A expressão (2.53) é uma medida do desvio de uma dada deformação e um deslocamento de corpo rígido. Tem-se $\mathbf{C}=\mathbf{I}$ se e somente se a deformação é rígida (GURTIN, 1981).

O conjunto das hipóteses de pequenas deformações, de pequenas rotações e de pequenos gradientes de deslocamentos é denominado de *Linearidade Geométrica*. Quando as deformações são suficientemente pequenas, ou seja, da ordem de $\varepsilon \ll 1$, tem-se que o tensor das deformações infinitesimais é dado por

$$\mathbf{E}_L = \frac{1}{2} (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T). \quad (2.54)$$

As componentes do tensor das deformações infinitesimais $\mathbf{E}_L$ são dadas por

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.55)$$

Na linearidade geométrica não se faz distinção entre a configuração de referência e a configuração atual.

2.3.2 Tensão

Nesta seção, introduz-se o *tensor tensão de Cauchy*. Considere, de acordo com a Fig. 1, um tetraedro infinitesimal no interior de um sólido com três arestas segundo os vetores da base $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$. Nas superfícies infinitesimais de áreas dS_i

Figura 1: Tetraedro infinitesimal no interior de um sólido (PIMENTA, 2006).

cujas normais são os vetores unitários $-\mathbf{e}_i$, respectivamente, atuam as forças $d\mathbf{t}_i$, as quais são dadas por

$$d\mathbf{t}_i = \mathbf{t}_i dS_i, \quad \text{sem soma em } i, \quad (2.56)$$

nos quais $\mathbf{t}_i$ são denominados vetores tensões atuantes sobre as áreas dS_i . O vetor tensão também é denominado força superficial ou força por unidade de área, na configuração atual. Se $-\mathbf{t}_i$ é a força por unidade de área que atua sobre dS_i , então $\mathbf{t}_i$ é a força por unidade de área que atua na face cuja normal é $\mathbf{e}_i$. Seja $\mathbf{t}$ a força por unidade de área que atua na face inclinada com área dS e normal $\mathbf{n}$. O equilíbrio das forças atuantes sobre o tetraedro fornece

$$\mathbf{t}dS = \mathbf{t}_1dS_1 + \mathbf{t}_2dS_2 + \mathbf{t}_3dS_3 = \mathbf{t}_i dS_i. \quad (2.57)$$

Como dS_i é a projeção de dS no plano da normal $\mathbf{e}_i$, tem-se

$$dS_i = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n})dS. \quad (2.58)$$

Substituindo (2.58) em (2.57), tem-se

$$\mathbf{t} = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n})\mathbf{t}_i = (\mathbf{t}_i \otimes \mathbf{e}_i)\mathbf{n}. \quad (2.59)$$

Portanto,

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}, \quad (2.60)$$

em que

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{t}_i \otimes \mathbf{e}_i \quad (2.61)$$

é o tensor tensão de Cauchy.

Existem outros tensores como os tensores de Piola-Kirchhoff, porém, com a hipótese de linearidade geométrica da elasticidade linear, todos os tensores tensão coincidem e as *equações locais de equilíbrio* são dadas por

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = 0 \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T, \quad (2.62)$$

nas quais as componentes do tensor tensão são dadas por σ_{ij} e $\mathbf{b}$ é o vetor das forças de volume com componentes b_i .

As tensões foram estabelecidas acima como grandezas que quantificam as ações transmitidas ponto a ponto em um sólido deformável sujeito a ações externas. Além disto, as tensões foram utilizadas para definir *condições de equilíbrio* de um ponto arbitrário de um sólido. As medidas de deformação foram introduzidas e tensores foram utilizados para quantificar as mudanças de geometria que ocorrem no processo de deformação. Entretanto, nada foi mencionado sobre a relação entre tensões e deformações.

Um material é dito elástico-linear se a relação entre o tensor tensão e tensor deformação for linear. Deste modo, um material elástico-linear é aquele para o qual exista uma aplicação linear

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{E}), \quad (2.63)$$

a qual pode ser reescrita como

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}\mathbf{E}. \quad (2.64)$$

Utilizando notação indicial, escreve-se

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}, \quad (2.65)$$

em que σ_{ij} são as componentes do tensor tensão, C_{ijkl} são as componentes do tensor de elasticidade e ε_{kl} são as componentes do tensor deformação. Esta relação entre as tensões e deformações é denominada Lei de Hooke Generalizada.

As componentes do tensor de elasticidade, C_{ijkl} , podem ser escritas utilizando-se a notação reduzida

$$11 \rightarrow 1 \quad 22 \rightarrow 2 \quad 33 \rightarrow 3 \quad 23 = 32 \rightarrow 4 \quad 13 = 31 \rightarrow 5 \quad 21 = 12 \rightarrow 6.$$

A relação (2.65) pode então ser expressa, matricialmente, pelas componentes em base canônica na forma,

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}. \quad (2.66)$$

2.4 Piezoeletricidade

Piezoeletricidade é uma interação entre sistemas mecânicos e elétricos em cristais não centrossimétricos e estruturas similares. Materiais piezoelétricos produzem polarização elétrica sob a aplicação de carregamentos mecânicos e sofrem deformação sob a ação de campos elétricos. A ausência de um centro de simetria é uma condição necessária para a ocorrência de piezoeletricidade em um meio cristalino (BERLINCOURT; CURRAN; JAFFE, 1964). Meios piezoelétricos são intrinsecamente anisotrópicos.

A piezoeletricidade produz um acoplamento entre os fenômenos dielétrico e elástico, e as *relações constitutivas lineares* que descrevem este acoplamento são dadas por (IKEDA, 1990; NYE, 1985; BERLINCOURT; CURRAN; JAFFE, 1964)

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} - e_{kij}E_k, \\ D_i = e_{ikl}\varepsilon_{kl} + \kappa_{ik}E_k. \end{cases} \quad (2.67)$$

Em (2.67), as componentes do tensor tensão, σ_{ij} , e do vetor deslocamento elétrico, D_i ,

estão linearmente relacionadas com as componentes do tensor deformação, ε_{kl} , e do vetor campo elétrico, E_k . As propriedades do material são dadas pelas componentes dos tensores elástico, C_{ijkl} , piezoelétrico, e_{kij} , e de permissividade elétrica, κ_{ik} . Os tensores de elasticidade e de permissividade elétrica são obtidos experimentalmente mantendo os campos elétrico e de deformação, respectivamente, constantes.

Matricialmente as componentes do tensor piezoelétrico, e_{kij} , em notação reduzida são dadas por (IKEDA, 1990; NYE, 1985)

$$\begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & e_{14} & e_{15} & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & e_{24} & e_{25} & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & e_{34} & e_{35} & e_{36} \end{bmatrix}. \quad (2.68)$$

Os trinta e dois grupos pontuais podem ser agrupados em sete sistemas cristalinos: Triclínico (ST1), Monoclínico (SM), Ortorrômico (SO), Trigonal (ST3), Tetragonal (ST4), Cúbico (SC) e Hexagonal (SH). Dos trinta e dois grupos pontuais, vinte e um não possuem centro de simetria; no entanto, um deles é altamente simétrico e, deste modo, não piezoelétrico. Portanto, apenas vinte grupos pontuais são piezoelétricos. Os grupos pontuais estão dispostos de acordo com seu respectivo sistema cristalino (classe cristalina) e podem ser vistos na Tabela 1, a qual também pode ser consultada em (NYE, 1985, p. 296).

Símbolo Geral	Sistema Cristalino						
	ST1	SM (Topo) (Base)	SO	ST4	ST3	SH	SC
n	1	2		4	3	6	23
$\bar{n}$	$\bar{1}$	$m \equiv \bar{2}$		$\bar{4}$	$\bar{3}$	$\bar{6} \equiv 3/m$	$-$
n/m		$2/m$		$4/m$	$-$	$6/m$	$2/m\bar{3}$
$n22$		222		422	32	622	432
nmm		$mm2$		$4mm$	$3m$	$6mm$	$-$
$\bar{n}2m$		$-$		$\bar{4}2m$	$\bar{3}2/m$	$\bar{6}2m$	$\bar{4}3m$
$n/m\ 2/m\ 2/m$		$2/m\ 2/m\ 2/m$		$4/m\ 2/m\ 2/m$	$-$	$6/m\ 2/m\ 2/m$	$4/m\ \bar{3}\ 2/m$

Tabela 1: Os trinta e dois grupos pontuais dispostos de acordo com a classe cristalina. Tabela adaptada de Hahn e Klapper (2006).

2.4.1 Simetria de Sólidos Cristalinos: A Classe hexagonal 622

As relações constitutivas lineares que modelam os efeitos piezoelétricos, dielétricos e elásticos dos materiais de classe cristalina 622, de acordo com as relações constitutivas (2.67), utilizando a notação reduzida, podem ser expressas como seguem

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & -e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}, \quad (2.69)$$

$$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \kappa_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}, \quad (2.70)$$

em que

$$c_{66} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}).$$

As relações constitutivas expressas em (2.69) e (2.70) são apresentadas na Fig. 2 de forma reduzida. Na Fig. 2, os pontos $\cdot$ representam as componentes nulas, os círculos $\bullet$ correspondem às componentes não nulas, os círculos ligados $\bullet \longleftrightarrow \bullet$ representam as componentes de mesmo valor e mesmo sinal, enquanto que $\bullet \longleftrightarrow \circ$ representam as componentes numericamente iguais, porém, de sinais opostos. O símbolo $\mathbf{x}$ corresponde a $\frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$. A ‘matriz’ completa 9×9 é simétrica sobre a diagonal principal. Os grupos pontuais 6 , $\bar{6}$, 622 , $6mm$, $\bar{6}2m$, $6/m$, e $6/m\bar{2}/m$ definem o sistema hexagonal. Na Fig. 3 apresenta-se a forma básica de um cristal de classe 622.

622	ε	E
σ		
D		

Figura 2: Esquema da matriz constitutiva para materiais de classe cristalina 622. Figura adaptada de Nye (1985).

Figura 3: Forma básica de um cristal de classe 622. Figura obtida em <http://www.metafysica.nl/turing/promorph_crystals_2.html>

3 Revisão Bibliográfica

Neste capítulo realiza-se uma revisão bibliográfica de trabalhos relevantes nas áreas da biomecânica óssea e de determinação das propriedades eletromecânicas efetivas em multiescala de materiais compósitos e que estão relacionados a esta tese.

3.1 Compósito

Compósitos são materiais constituídos de dois ou mais tipos de materiais, distintos fisicamente, separados mecanicamente, quimicamente compatíveis, não miscíveis que, ao serem combinados, proporcionam propriedades ao material resultante que nenhum dos componentes apresenta isoladamente. O desenvolvimento de compósitos oferece aos engenheiros e cientistas grandes oportunidades para aperfeiçoar projetos estruturais. Hoje é possível desenvolver compósitos com baixa densidade, alta rigidez mecânica e alta resistência à abrasão, ao impacto e à corrosão. Na engenharia aeroespacial, compósitos termoestruturais são empregados nas gargantas de tubeira de foguetes e nas proteções térmicas. Nas áreas de interface da engenharia de estruturas com as ciências biológicas e da saúde, compósitos ganham importância em aplicações médicas, principalmente no desenvolvimento de próteses e na criação de materiais odontológicos (QUEIROZ, 2008; MORAES, 2004). Projetos de engenharia cuja ênfase está no desenvolvimento de compósitos para aplicações em engenharia biomédica utilizam materiais piezoelétricos (MIARA et al., 2005). Materiais piezoelétricos sofrem polarização em resposta a uma deformação mecânica e exibem deformação em resposta à aplicação de um campo elétrico (IKEDA, 1990). Compósitos piezoelétricos são utilizados na construção de sensores e atuadores (TEBALDI; JUNIOR; COELHO, 2006), na construção de microfones, hidrofones e, na medicina, são utilizados na construção de transdutores de ultrassom. Indústrias automotivas utilizam sensores

piezoelétricos para medir a força de amortecimento em suspensões. Acelerômetros piezoelétricos são utilizados no sensoriamento de movimentos em sistemas mecânicos e na análise de vibrações em estruturas (TEBALDI; JUNIOR; COELHO, 2006).

Existem compósitos artificiais e funcionais como o concreto (compósito agregado: agregado grosso (brita) e agregado fino (areia) em cimento e água) e naturais como a madeira (formada por fibras de celulose resistentes e flexíveis em uma matriz rígida de lignina) e o osso (formado, em massa, por colágeno a 22%, uma proteína mole, elástica e flexível, mas de elevada resistência, junto com apatita a 70%, mineral duro e rígido, mas frágil, e água a 8%) (AUGAT; SCHORLEMMER, 2006). O osso possui uma estrutura hierárquica que se estende ao longo de vários níveis organizacionais. Esta estrutura hierárquica proporciona ao osso excepcional eficiência mecânica. Na Fig. 4 observa-se a organização hierárquica do osso cortical, a nomenclatura e uma possível classificação multinível com as escalas correspondentes. De acordo com esta classificação, a macroestrutura representa a estrutura vista sem o auxílio de instrumentos (a olho nú), a microestrutura ($10 - 50\mu m$) representa a rede de osteons (sistema Haversiano), a sub-microestrutura ($3 - 7\mu m$) representa as lamelas, a nanoestrutura a rede de fibras ($0.50\mu m$) e a sub-nanoestrutura ($1nm$) as moléculas de colágeno e os cristais. Na próxima seção serão apresentados os elementos da biofísica óssea. Do ponto de vista da mecânica, faz-se uma distinção entre as propriedades estruturais e materiais. Neste trabalho, distinguir-se-á a estrutura óssea (denominada *osso*) do material que a constitui (denominado *tecido ósseo*).

3.2 Elementos da Biofísica Óssea

Em um ser vivo o osso é um compósito piezoelétrico heterogêneo altamente poroso. Ele responde e adapta-se a carregamentos aplicados e possui a capacidade de se remodelar. O remodelamento ósseo é um processo contínuo de retirada de osso para o sangue e formação de osso novo. Por estar devidamente organizado em uma estrutura o tecido ósseo atua respectivamente, como uma unidade esquelética mecanicamente qualificada e como unidade fisiológica (BEHARI, 2009).

Figura 4: Organização estrutural hierárquica do osso: (a) osso cortical e trabecular; (b) osteons com sistemas Haversianos; (c) lamelas; (d) fibra colágena: união de fibrilas colágenas; (e) cristais minerais de osso, moléculas de colágeno, e proteínas não colágenas. Figura adaptada de Rho, Kuhn-Spearing e Zioupos (1998).

3.2.1 Aspectos Estruturais e Classificação do Osso

Estruturas ósseas podem ser classificadas de acordo com o aspecto morfológico e anatômico, com critérios histológicos e com relação à geometria e à densidade do tecido ósseo (JUNQUEIRA; CARNEIRO, 2004). Neste trabalho interessa-se pela classificação de acordo com a densidade do osso, na qual os ossos são classificados como cortical, ou, compacto e trabecular, ou, esponjoso. De acordo com Junqueira e Carneiro (2004) essa classificação é macroscópica e não histológica, uma vez que o tecido compacto e os tabiques as cavidades do esponjoso têm a mesma estrutura histológica básica. Detalhes sobre esta classificação também encontram-se em Silva (2009) e estão resumidos abaixo.

Osso Cortical

O osso cortical é uma estrutura densa, de baixa porosidade, e que parece ser compacto em escala macroscópica. A sua estrutura é extremamente densa e

está disposta em torno dos sistemas haversianos, os quais são formados por lamelas dispostas concentricamente ao redor de um canal vascular longitudinal, e dos canais de Volkmann, os quais são responsáveis por prover nutrição celular. Geralmente, o osso cortical é encontrado na diáfise de ossos longos. Os ossos longos apresentam duas extremidades chamadas epífises, uma parte central chamada diáfise e uma parte intermediária entre as duas partes anteriores chamada metáfise. Ele forma um córtex, ou, concha em volta de corpos vertebrais e outros ossos esponjosos. O osso cortical contém aproximadamente 10% de porosidade e 80% de tecido ósseo. Na Fig. 5 é apresentado um esquema da parede da diáfise de ossos longos. Nela aparecem três tipos de tecido ósseo lamelar: os sistemas de Haversian, as lamelas circunferenciais externas e as internas. O sistema de Haversian desenhado em três dimensões, no alto e à esquerda, mostra a orientação das fibras colágenas nas lamelas. O sistema de Haversian saliente, à esquerda, mostra a direção das fibras colágenas em cada lamela. À direita observe um sistema de Haversian isolado, mostrando um capilar sanguíneo central (há também nervos, que foram omitidos no desenho) e muitos osteócitos com seus prolongamentos. Na Fig. 6, à esquerda, apresenta-se

Figura 5: Esquema da parede da diáfise de ossos longos. Figura adaptada de Junqueira e Carneiro (2004).

uma fotomicrografia da secção transversal de sistemas haversianos e, à direita, uma

idealização periódica destes sistemas. A qual é realizada na tentativa de capturar as características microestruturais do osso Haversiano e possibilitar a utilização das técnicas de análise microestrutural, como o MHA e o método de Mori-Tanaka, numa célula unitária .

Figura 6: Secção transversal de sistemas haversianos. Figura à direita adaptada de Swan et al. (2003) e à esquerda obtida em: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Compact_bone_-_ground_cross_section.jpg.

Osso Trabecular

O osso trabecular é uma estrutura esponjosa de alta porosidade, podendo chegar a 95%. Normalmente encontrada em ossos cuboidais, planos, e na parte interna da epífise de ossos longos. Diferentemente do osso compacto, o osso esponjoso não se organiza em sistemas haversianos. Na Fig. 7, apresenta-se imagens feitas por microscopia eletrônica mostrando, à direita, uma estrutura óssea normal da terceira vértebra lombar de uma mulher de trinta anos e, à esquerda, uma estrutura óssea osteoporótica.

Osteoporose

De acordo com Behari (2009), a performance mecânica do osso é determinada pela densidade, pela arquitetura e pelas propriedades materiais intrínsecas do tecido, e pode ser afetada quando há presença de doenças osteometabólicas, tal como a osteoporose. Osteoporose é uma doença óssea caracterizada pela descalcificação progressiva dos ossos e causa a diminuição da massa óssea. Os ossos tornam-se frágeis, aumenta-se o risco de fraturas e, conseqüentemente, há piora da qualidade de

Figura 7: Estrutura trabecular do osso esponjoso do fêmur: (a) osso normal, (b) osso osteoporótico. O osso osteoporótico contém grandes buracos como resultado da descalcificação. Figura obtida em: <www.brsoc.org.uk/gallery>.

vida. Embora a ocorrência seja maior no sexo feminino, os homens também podem ter a doença. Em geral, torna-se mais frequente com o envelhecimento. Os ossos crescem até os 20 anos e a densidade aumenta até os 35 anos; a partir daí, há perda de massa progressiva. O processo é mais rápido nas mulheres, principalmente após a menopausa.

Constituintes Elementares do Tecido Ósseo

De acordo com Behari (2009), macroscopicamente, o osso consiste de tecido e uma fase mineral amorfa não cristalina e anisotrópica. Além dos osteócitos, os principais elementos do tecido ósseo consistem de uma fase cristalina mineral (hidroxiapatita), uma fase mineral amorfa, uma fase cristalina orgânica (colágeno), uma fase orgânica amorfa e líquidos. A parte orgânica do tecido ósseo contém aproximadamente 95% de colágeno por volume. Colágeno engloba uma classe de proteínas que compõem a maior parte dos tecidos do corpo e são encontradas em ossos e cartilagens. Na parte inorgânica, cristais de apatita são os principais constituintes, constituem 65% do tecido, e fornecem a maior parte da resistência e rigidez do osso.

3.3 Piezoeletricidade em Ossos

A pesquisa sobre regeneração e propriedades de remodelamento do tecido ósseo, considerando o comportamento elástico, elétrico e eletromecânico, tem recebido considerável interesse de pesquisadores de diferentes áreas nas últimas seis décadas. O interesse desses pesquisadores tem sido investigar as causas e os resultados do remodelamento e adaptação do tecido ósseo para suas formas funcionais fisiológicas sob os efeitos eletromecânicos.

Guzelsu e Demiray (1979) observam que as propriedades piezoelétricas em osso seco e em osso úmido são os principais fatores em remodelação óssea. Sabe-se que pequenas deformações podem afetar a formação e reabsorção óssea. De acordo com Bikle, Sakata e Halloran (2003), a osteogênese pode ser estimulada por pequenas deformações na arquitetura óssea, provocadas por tensões durante a atividade física. O mecanismo pelo qual a formação e reabsorção óssea é afetado não é completamente compreendido. As propriedades eletromecânicas do osso, como elasticidade e piezoeletricidade, são resultantes da arquitetura hierárquica óssea, ainda não é bem entendida. Fukada e Yasuda (1957) foram os primeiros a identificar e quantificar as constantes piezoelétricas em ossos. Estes autores utilizam amostras secas retiradas de fêmur humano e bovino para medir a piezoeletricidade. Neste caso, eles mostram que a piezoeletricidade aparece somente quando *forças cisalhantes* agem sobre as fibras de colágeno orientadas. Analisando os resultados experimentais, eles concluem que o tensor das constantes piezoelétricas pertence à classe de simetria cristalina 622. Convencidos de que a piezoeletricidade óssea originava-se a partir das fibras de colágeno contidas no osso, Fukada e Yasuda (1964) por meio de uma análise experimental realizada em tendão de *Achilles* comprovaram a presença da piezoeletricidade em colágeno. Estes autores determinam as constantes piezoelétricas bem como a classe de simetria 6 para o tensor piezoelétrico das fibras de colágeno, e, deste modo, são incluídas constantes piezoelétricas adicionais no tensor de classe 622, o qual foi previamente determinado para o osso em Fukada e Yasuda (1957).

Marino e Becker (1971) mediram piezoeletricidade em osso desmineralizado, mas não puderam medir piezoeletricidade em osso sem colágeno. A estrutura cristalina aceita para hidroxapatita no momento quando as medidas destes autores foram realizadas era similar à estrutura de classe $P6_3/m$ (KATZ; UKRAINCİK, 1971) – uma

estrutura centrossimétrica destituída de qualquer piezoeletricidade (ZHANG et al., 2012). Em vista da ausência de piezoeletricidade na hidroxiapatita, a conclusão natural foi de que a piezoeletricidade originava-se da natureza colagenosa do osso. Desde então, houve uma aceitação crescente de que o colágeno era o único componente do osso responsável pelos fenômenos piezoelétricos observados em ossos. A crença de que a hidroxiapatita, (HA), era um material centrossimétrico, levou vários pesquisadores a postular que o osso pertencia à classe de simetria **6** e, em vários artigos, seus autores partiram desta hipótese. Recentemente, entretanto, resultados teóricos e experimentais mostraram que a hidroxiapatita tem uma estrutura monoclinica não centrossimétrica, a qual pertence ao grupo especial $P2_1$ (HAVERTY et al., 2005; TOFAIL et al., 2005). Lang et al. (2011), por meio de medidas experimentais, relatam forte piezoeletricidade e piroeletricidade em filmes finos de hidroxiapatita não polarizados. Por outro lado, ainda existe uma grande discussão em relação à simetria macroscópica geral do osso obtida a partir de medições de tensores piezoelétricos. O único consenso é de que a simetria do tensor das constantes elásticas de osso pertence a uma classe hexagonal, que pode ser: 6 , $\bar{6}$, 622 , $6mm$, $\bar{6}2m$, $6/m$, $6/m\ 2/m\ 2/m$.

Estudos teóricos e experimentais para aplicação clínica do efeito piezoelétrico estão em desenvolvimento. A partir do trabalho de Fukada e Yasuda (1957), inúmeros estudos foram desenvolvidos para reduzir o tempo de reabilitação de um indivíduo, acelerando o processo de consolidação de fraturas, e para a criação de materiais biocompatíveis com propriedades mecânicas, elétricas, químicas e de superfície parecidas com as do tecido ósseo. As propriedades efetivas do osso têm sido exaustivamente estudadas, principalmente, nas últimas décadas devido às respostas obtidas com estimulação elétrica e mecânica (DUARTE, 1983; FYHRIE et al., 1989; SILVA et al., 2001). Duarte (1983) utilizou ultrassom pulsado para acelerar o processo de consolidação de fraturas. De acordo com este autor as cargas elétricas necessárias ao reparo ósseo são produzidas por meio do efeito piezoelétrico. A partir da estimulação elétrica, a geração de cargas elétricas nas células altera os potenciais de membrana dos osteoblastos, permitindo bombeamento de íons e maior captação de nutrientes (BASSET, 1962). Segundo Silva (1987), o mecanismo que estimula o crescimento ósseo induzido por ultrassom foi estabelecido a partir das propriedades piezoelétricas do osso. A propagação de um campo ultrassônico através do tecido ósseo desenvolve um potencial elétrico gerado pela deformação mecânica. Estas características já são

utilizadas em terapias ortopédicas e tratamentos de osteoporose.

Os mecanismos de potenciais gerados por tensão em ossos secos foram estudados e são bem compreendidos. Aceita-se que a piezoeletricidade é o principal mecanismo de potenciais gerados por tensão em ossos secos (FRIEDENBERG; TBRIGHTON, 1966). Entretanto, os mecanismos em ossos úmidos não são completamente entendidos. Ahn e Grodzinsky (2009) trazem uma nova perspectiva para o papel fisiológico do osso úmido atribuindo à piezoeletricidade do colágeno em osso úmido trabalho conjunto com *streaming potencial* para obter o potencial gerado por tensão, o que, segundo os autores, tem sido fortemente correlacionado com o crescimento de osso.

Em boa parte dos trabalhos encontrados na literatura as propriedades piezoelétricas e elásticas são calculadas separadamente. O acoplamento entre os campos de deslocamento mecânico e elétrico é considerado sem importância e omitido. Devido à ausência de padronização, ou, unificação de métodos experimentais, abordagens e objetivos, os dados relatados na literatura sobre as propriedades mecânicas do tecido ósseo estão dispersos.

Em relação ao emprego de modelos matemáticos no estudo de ossos, boa parte dos pesquisadores modelam estruturas ósseas como compósitos porosos. O comportamento destas estruturas é governado por um sistema de equações diferenciais parciais. Por este motivo, diferentes métodos de homogeneização são aplicados no cálculo das constantes piezoelétricas e elásticas destes materiais (AOUBIZA; CROLET, 1991; CROLET; AOUBIZA; MEUNIER, 1993; FYHRIE et al., 1989; HOLLISTER et al., 1991; AOUBIZA; CROLET; MEUNIER, 1996; SEVOSTIANOV; KACHANOV, 1998, 2000). Dentre estes, o Método de Homogeneização Assintótica (MHA) permite obter com grande precisão as propriedades efetivas do material a partir das propriedades físicas e geométricas dos seus constituintes (BENSOUSSAN; LION; PAPANICOLAOU, 1978; SANCHEZ-PALENCIA, 1980; BAKHVALOV; PANASENKO, 1989). Este método consiste em buscar a solução de um problema de valor de contorno (PVC) original governado por equações diferenciais, com coeficientes periódicos e rapidamente oscilantes na forma de uma série de potências de um parâmetro geométrico pequeno, ε , o qual é a razão entre comprimentos característicos da estrutura. Os coeficientes da série dependem de uma variável lenta, ou, global, $\mathbf{x}$, e de uma variável rápida,

ou local, $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$. Por meio deste método, obtém-se do PVC original um problema homogeneizado com coeficientes constantes. O MHA garante que a solução do PVC original com coeficientes periódicos e rapidamente oscilantes convirja para a solução do problema homogeneizado à medida que ε tende a zero (BAKHVALOV; PANASENKO, 1989; KALAMKAROV; ANDRIANOV; DANISHEVS'KYY, 2009).

O processo de homogeneização descrito acima é utilizado na literatura para resolver uma grande classe de problemas envolvendo distribuições periódicas de inclusões cilíndricas unidirecionais, tais como furos e fibras, contidas em um meio homogêneo. O caso de interesse deste trabalho diz respeito a uma distribuição uniforme de cilindros paralelos idênticos contidos em um meio piezoelétrico, conforme ilustrado na Fig. 8.a. A seção transversal de um cilindro consiste de um círculo, correspondendo a seção transversal da inclusão cilíndrica, centrado em um quadrado, o qual corresponde à seção transversal do meio homogêneo que envolve a inclusão, conforme ilustrado na Fig. 8.b. Bravo-Castillero et al. (2001) consideram que as inclusões são fibras piezoelétricas em contato perfeito com a matriz do compósito. Utilizando o MHA e admitindo que ambos os materiais das inclusões e do meio pertencem à classe de simetria $6mm$, a qual é uma classe de materiais piezoelétricos que possuem simetria cristalina hexagonal, estes autores obtêm fórmulas simples para as propriedades efetivas do compósito homogeneizado resultante. Em Bravo-Castillero et al. (2009) as propriedades efetivas de um material piezoelétrico poroso de classe $6mm$ são determinadas resolvendo-se problemas locais de fronteira-livre. Em ambos os artigos citados acima, os problemas locais que resultam da formulação do MHA são resolvidos por meio de métodos utilizados na teoria de funções de variáveis complexas, os quais empregam funções elípticas de Weierstrass e outras funções relacionadas.

Em geral, as soluções dos problemas locais são utilizadas para calcular as constantes efetivas do compósito. No trabalho dos autores citados no parágrafo anterior, além destas soluções, foram utilizadas as relações universais de Schulgasser-Benveniste-Dvorak entre as propriedades efetivas, resultando na redução do número de problemas locais a serem resolvidos.

Em outro trabalho relacionado, Lopez-Lopez et al. (2005) investigam compósitos reforçados por fibras sob um estado de deformação antiplana. Aqui também,

as fibras estão centradas em células cilíndricas com secções transversais quadradas e os materiais das fibras e da matriz pertencem à classe de simetria 622. Os autores utilizam o MHA para encontrar expressões para duas constantes efetivas: elástica e piezoelétrica. Para isto, apenas um de quatro problemas locais é resolvido e a relação de compatibilidade de Milgrom-Shtrikman (MILGROM; SHTRIKMAN, 1989) é usada para obter as propriedades restantes. Eles usam fórmulas obtidas via MHA para calcular as constantes efetivas de um compósito constituído de uma matriz de colágeno contendo fibras de colágeno-hidroxiapatita. Nenhum resultado para o caso limite de fibras ocas é apresentado.

Diferente de Lopez-Lopez et al. (2005), neste trabalho considera-se o caso de um material piezoelétrico poroso sob cisalhamento antiplano acoplado a um campo elétrico plano e condições de fronteira livre. Objetiva-se encontrar expressões analíticas para as propriedades elástica, piezoelétrica e dielétrica efetivas de osso cortical modelando-o em duas escalas: microscópica e macroscópica. Admite-se que a microestrutura óssea pode ser modelada como um material piezoelétrico composto de duas fases: matriz e poros. A matriz mineralizada contém uma distribuição periódica de furos cilíndricos circulares unidirecionais. Utiliza-se o MHA para calcular as constantes eletromecânicas efetivas deste material. O MHA é um método multiescala que permite obter as propriedades efetivas de um material compósito contendo uma distribuição periódica de furos unidirecionais numa matriz piezoelétrica linear e transversalmente isotrópica. O material da matriz pertence à classe de simetria cristalina 622. Os furos estão centrados em células de uma matriz periódica de secções transversais quadradas e a periodicidade é a mesma em duas direções perpendiculares. Os problemas locais que surgem da análise multiescala usando o MHA são resolvidos por meio de um método da teoria de variáveis complexas, o qual permite expandir as soluções correspondentes em séries de potências de funções elípticas de Weierstrass. Os coeficientes das séries são determinados das soluções de sistemas lineares infinitos de equações algébricas. Truncando estes sistemas infinitos até uma ordem finita, porém arbitrária, de aproximação, obtêm-se fórmulas analíticas para as constantes efetivas elástica, piezoelétrica e dielétrica, as quais dependem da fração de volume dos furos e de um fator de acoplamento eletromecânico da matriz. Os resultados numéricos obtidos a partir destas fórmulas são comparados com resultados obtidos pelo método de Mori-Tanaka. Os resultados obtidos pelo método de Mori-Tanaka, isto

é, as constantes elástica, piezoelétrica e dielétrica efetivas calculadas para materiais com simetria hexagonal de classe cristalina 622 também são inéditas. Os resultados publicados em Aguiar et al. (2013) estão estreitamente vinculados aos resultados apresentados nesta tese, os quais são úteis na mecânica de osso e têm potencial aplicação no estudo de qualidade ósseas.

4 Homogeneização de Estruturas Periódicas

O tópico abordado neste capítulo é a homogeneização de estruturas periódicas por meio do MHA.

4.1 O Método de Homogeneização Assintótica

Em diferentes campos da ciência e tecnologia, tais como aqueles relacionados ao estudo de compósitos, a modelagem matemática do fenômeno físico relacionado pode levar à formulação de um problema de valor de contorno (PVC) definido em um domínio com estrutura periódica. Segundo Parton e Kudryavtsev (1993), o comportamento físico de um meio não homogêneo, tal como um compósito provido de uma estrutura periódica é governado por equações diferenciais com coeficientes rapidamente oscilantes, os quais representam as propriedades materiais de cada constituinte do meio. Devido a estes coeficientes, o PVC é extremamente difícil de ser resolvido, mesmo com a ajuda de métodos numéricos implementados em supercomputador. O MHA pode ser usado com vantagem nessas situações. O MHA é um método matemático multiescala que permite encontrar com grande precisão os coeficientes homogeneizados, ou seja, permite obter as propriedades efetivas de um sólido heterogêneo a partir das propriedades físicas e geométricas de seus constituintes. A seguir, aplica-se o MHA na determinação das propriedades eletromecânicas efetivas de um sólido piezoelétrico.

4.2 Homogeneização Assintótica de Estruturas Piezoelétricas

Suponha que a estrutura a ser estudada seja um meio piezoelétrico periódico não homogêneo ocupando uma região fechada $\mathcal{M}$ em $\mathbb{R}^3$, a qual possui contorno

suave. Assume-se que esta região é composta de células unitárias, R , contendo as inhomogeneidades, periodicamente distribuídas no meio. Seja ε um parâmetro pequeno, definido pela razão entre os comprimentos característicos da célula e da região fechada, e considere um Sistema de Coordenadas Cartesianas (SCC) (x_1, x_2, x_3) . Define-se aqui funções da forma $f^\varepsilon(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}/\varepsilon)$ na qual f é uma função R -periódica em $\mathcal{M}$, e $\varepsilon > 0$ toma valores em uma sucessão que tende a zero. Estas funções frequentemente aparecem como coeficientes de equações diferenciais em modelos matemáticos de compósitos.

Um período de referência, R , em $\mathbb{R}^n$ é definido pelo conjunto

$$R =]0, l_1[\times \cdots \times]0, l_n[$$

em que $l_1, \dots, l_n$ são números reais positivos.

Em geral, uma função $f : \mathcal{B} \subseteq \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$, com n inteiro e positivo, é denominada R -periódica se, e somente se,

$$f(\mathbf{x} + kl_i \mathbf{e}_i) = f(\mathbf{x}) \quad \forall k \in \mathbb{Z}, \quad \forall i \in \{1 \cdots n\}, \quad (4.1)$$

em que $\{\mathbf{e}_1 \cdots \mathbf{e}_n\}$ é a base canônica de $\mathbb{R}^n$.

Note que

1. Se $R =]0, 1[^n$ então $\varepsilon R =]0, \varepsilon[^n$.
2. Se f é uma função R -periódica, então $f^\varepsilon(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}/\varepsilon)$ é εR -periódica.

Deseja-se investigar o comportamento de uma estrutura óssea em equilíbrio na ausência de forças de corpo e sob um campo eletrostático. Segue-se das expressões (2.62), (2.37) e (2.38) que as equações governantes são dadas por (2.39) e

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^\varepsilon}{\partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial D_i^\varepsilon}{\partial x_i} = 0, \quad (4.2)$$

em que as componentes de tensão σ_{ij}^ε e de deslocamento elétrico D_i^ε satisfazem relações constitutivas lineares de materiais piezoelétricos, as quais são dadas por

$$\begin{cases} \sigma_{ij}^\varepsilon &= c_{ijkn}^\varepsilon \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_n} + e_{ijk}^\varepsilon \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_k}, \\ D_i^\varepsilon &= e_{ikn}^\varepsilon \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_n} - \kappa_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_j}, \end{cases} \quad (4.3)$$

lembrando da Seção 2.1, o emprego da convenção usual de somatório sobre os índices, os quais variam de um a três. Além disso, $\frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_n}$ são as componentes do gradiente de deslocamento e $\frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_k}$ as componentes do gradiente do potencial escalar. As propriedades do material são dadas pelas componentes dos tensores elástico, c_{ijkn}^ε , piezoelétrico, e_{ijk}^ε , e de permissividade elétrica, κ_{ij}^ε . O sobrescrito ε nas componentes acima significa que estas estão definidas em uma célula periódica R . Neste caso, têm-se que $c_{ijkn}^\varepsilon(\mathbf{x}) = c_{ijkn}(\mathbf{x}/\varepsilon)$, $e_{ijk}^\varepsilon(\mathbf{x}) = e_{ijk}(\mathbf{x}/\varepsilon)$, $\kappa_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \kappa_{ij}(\mathbf{x}/\varepsilon)$ são funções periódicas com respeito a $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$.

Objetiva-se utilizar o MHA para obter as propriedades eletromecânicas efetivas de uma estrutura periódica. Para isto, deseja-se encontrar soluções das equações diferenciais (4.2) juntamente com as relações constitutivas (2.67). Seguindo-se o desenvolvimento apresentado por Parton e Kudryavtsev (1993), expandem-se os deslocamentos u_k^ε e o potencial φ^ε em séries de potências de ε na forma

$$\begin{aligned} u_k^\varepsilon(\mathbf{x}) &= u_k^{(0)}(\mathbf{x}) + \varepsilon u_k^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 u_k^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \cdots, \\ \varphi^\varepsilon(\mathbf{x}) &= \varphi^{(0)}(\mathbf{x}) + \varepsilon \varphi^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 \varphi^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \cdots, \end{aligned} \quad (4.4)$$

em que as funções $u_k^{(1)}, u_k^{(2)}, \varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \dots$ são R -periódicas com respeito a variável $\mathbf{y}$ e diferenciáveis até segunda ordem. Substituindo (4.4) em (4.3), têm-se

$$\begin{cases} \sigma_{ij}^\varepsilon &= \sigma_{ij}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon \sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \cdots, \\ D_i^\varepsilon &= D_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon D_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \cdots, \end{cases} \quad (4.5)$$

em que

$$\begin{cases} \sigma_{ij}^{(n)} &= c_{ijkh}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(n)}}{\partial x_h} + e_{kij}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(n)}}{\partial x_k} + c_{ijkh}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(n+1)}}{\partial y_h} + e_{kij}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(n+1)}}{\partial y_k}, \\ D_i^{(n)} &= e_{ikh}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(n)}}{\partial x_h} - \kappa_{ik}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(n)}}{\partial x_k} + e_{ikh}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(n+1)}}{\partial y_h} - \kappa_{ik}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(n+1)}}{\partial y_k}, \end{cases} \quad (4.6)$$

para $n = 0, 1, 2, \dots$.

Substituindo as expressões (4.5) nas equações (4.2), igualando os termos com iguais potências de ε e fazendo $\varepsilon \rightarrow 0$, têm-se

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_j} = 0, \quad \frac{\partial D_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_i} = 0, \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_j} = 0, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial D_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_i} + \frac{\partial D_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_i} = 0. \quad (4.9)$$

Agora, substituindo as expressões (4.6) com $n = 0$ nas equações (4.7), têm-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y_i} \left[c_{ijkh}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_h} + e_{kij}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_k} \right] \\ = - \frac{\partial c_{ijkh}(\mathbf{y})}{\partial y_i} \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_h} - \frac{\partial e_{kij}(\mathbf{y})}{\partial y_i} \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y_i} \left[e_{ikh}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_h} - \kappa_{ik}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_k} \right] \\ = - \frac{\partial e_{ikh}(\mathbf{y})}{\partial y_i} \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_h} + \frac{\partial \kappa_{ik}(\mathbf{y})}{\partial y_i} \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Para resolver (4.10)-(4.11), utiliza-se o método de separação de variáveis e busca-se uma solução escrevendo $u_n^{(1)}$ e $\varphi^{(1)}$ na forma

$$u_n^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = N_n^{kl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l} + W_{nl}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l}, \quad (4.12)$$

$$\varphi^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi_{kl}(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l} + \Psi_l(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l}. \quad (4.13)$$

Substituindo as expressões (4.12) e (4.13) nas equações (4.10) e (4.11), obtêm-se *problemas locais*, os quais consistem em determinar as funções R -periódicas $N_n^{kl}(\mathbf{y})$, $W_{nl}(\mathbf{y})$, $\Phi_{kl}(\mathbf{y})$ e $\Psi_l(\mathbf{y})$ que satisfaçam as equações diferenciais

$$\frac{\partial \tau_{ij}^{kl}}{\partial y_j} = - \frac{\partial c_{ijkl}(\mathbf{y})}{\partial y_j} \quad \frac{\partial \mu_i^{kl}}{\partial y_i} = - \frac{\partial e_{ikl}(\mathbf{y})}{\partial y_i}, \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial \zeta_{ij}^l}{\partial y_j} = \frac{\partial e_{lij}(\mathbf{y})}{\partial y_j} \quad \frac{\partial \lambda_{il}}{\partial y_i} = - \frac{\partial \kappa_{il}(\mathbf{y})}{\partial y_i}, \quad (4.15)$$

nas quais

$$\tau_{ij}^{kl} = c_{ijnh}(\mathbf{y}) \frac{\partial N_n^{kl}(\mathbf{y})}{\partial y_h} + e_{nij}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Phi^{kl}(\mathbf{y})}{\partial y_h}, \quad (4.16)$$

$$\mu_i^{kl} = e_{inh}(\mathbf{y}) \frac{\partial N_n^{kl}(\mathbf{y})}{\partial y_h} - \kappa_{ih}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Phi_{kl}(\mathbf{y})}{\partial y_h}, \quad (4.17)$$

$$\zeta_{ij}^l = c_{ijkh}(\mathbf{y}) \frac{\partial W_{kl}(\mathbf{y})}{\partial y_h} + e_{hij}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_l(\mathbf{y})}{\partial y_h}, \quad (4.18)$$

$$\lambda_{il} = e_{ikh}(\mathbf{y}) \frac{\partial W_{kl}(\mathbf{y})}{\partial y_h} - \kappa_{ih}(\mathbf{y}) \frac{\partial \Psi_l(\mathbf{y})}{\partial y_h}. \quad (4.19)$$

Por outro lado, utilizam-se as equações (4.12) e (4.13) em (4.6) com $n = 0$ e obtêm-se

$$\sigma_{ij}^{(0)} = [c_{ijkl}(\mathbf{y}) + \tau_{ij}^{kl}(\mathbf{y})] \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l} + [e_{lij}(\mathbf{y}) + \zeta_{ij}^l(\mathbf{y})] \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l}, \quad (4.20)$$

$$D_i^{(0)} = [e_{ipl}(\mathbf{y}) + \mu_i^{pl}(\mathbf{y})] \frac{\partial u_p^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l} - [\kappa_{il}(\mathbf{y}) - \lambda_{il}(\mathbf{y})] \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l}.$$

Assim, as equações de equilíbrio e as equações da eletrostática de um meio piezoelétrico homogeneizado podem ser obtidas aplicando o *operador média*, dado por

$$\langle \cdot \rangle = \frac{1}{\|R\|} \int (\cdot) dy, \quad (4.21)$$

em que $\|R\|$ é a *área* da célula periódica, nas equações (4.7)-(4.9) e utilizando a periodicidade de $\sigma_{ij}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ e $D_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ em $\mathbf{y}$. Em particular, segue de (4.7) que

$$\frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial \bar{D}_i^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_i} = 0, \quad (4.22)$$

sendo

$$\bar{\sigma}_{ij}^{(0)}(\mathbf{x}) = \left\langle \sigma_{ij}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \right\rangle \quad \text{e} \quad \bar{D}_i^{(0)}(\mathbf{x}) = \left\langle D_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \right\rangle.$$

Aplica-se o operador média (4.21) nas equações (4.20) sobre uma célula unitária, R , e obtêm-se as relações constitutivas do meio piezoelétrico homogeneizado, as quais são dadas por

$$\bar{\sigma}_{ij}^{(0)} = (c_{ijkl})_e \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l} + (e_{lij})_e \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l}, \quad (4.23)$$

$$\bar{D}_i^{(0)} = (e_{ipl})_e \frac{\partial u_p^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l} - (\kappa_{il})_e \frac{\partial \varphi^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_l}.$$

Em (4.23), os coeficientes

$$\begin{aligned}
 (c_{ijkl})_e &= \langle c_{ijkl}(\mathbf{y}) + \tau_{ij}^{kl}(\mathbf{y}) \rangle, \\
 (e_{lij})_e &= \langle e_{lij}(\mathbf{y}) + \zeta_{ij}^l(\mathbf{y}) \rangle, \\
 (e_{ipl})_e &= \langle e_{ipl}(\mathbf{y}) + \mu_i^{pl}(\mathbf{y}) \rangle, \\
 (\kappa_{il})_e &= \langle \kappa_{il}(\mathbf{y}) + \lambda_{il}(\mathbf{y}) \rangle
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

são as constantes efetivas do meio homogeneizado e são calculadas a partir das soluções dos problemas locais dados pelas equações (4.14) e (4.15).

Neste capítulo o MHA foi empregado no cálculo das propriedades efetivas de um meio piezoelétrico não homogêneo constituído de células periodicamente distribuídas. Note que as fórmulas obtidas em (4.24) são válidas para meios piezoelétricos com qualquer simetria cristalina.

As condições de contorno serão introduzidas no próximo capítulo, no qual, modela-se o osso cortical como um sólido piezoelétrico cuja microestrutura é um meio poroso com simetria cristalina 622 e obtém-se expressões analíticas para as propriedades eletromecânicas efetivas deste sólido.

5 Modelagem Multiescala de Osso Cortical

Modela-se a estrutura óssea como um compósito bifásico, o qual contém uma distribuição periódica de furos cilíndricos circulares unidirecionais em uma matriz piezoelétrica de classe de simetria cristalina 622. Considera-se que o compósito está sob um estado acoplado de cisalhamento antiplano e campo elétrico plano. Utiliza-se o MHA para formular problemas locais cujas soluções são utilizadas no cálculo das constantes efetivas do meio homogeneizado.

5.1 Formulação do Problema

Considera-se que a estrutura óssea é um compósito bifásico constituído de uma matriz piezoelétrica que ocupa uma região $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^3$ e de uma distribuição periódica nas direções x_1 e x_2 de furos cilíndricos paralelos, idênticos e de comprimento infinito na direção x_3 , conforme ilustrado na figura Fig. 8.a. Cada furo da distribuição periódica está centrado em um cilindro cuja secção transversal tem a forma da célula ilustrada na Fig. 8.b. Observe desta figura que a célula periódica é composta de um círculo $R_1 \subset \mathbb{R}^2$ com contorno Σ e raio r centrado na origem e de uma parte complementar $R_2 \subset \mathbb{R}^2$ com contorno interno Σ e contorno externo dado por $(-l/2, l/2) \times (-l/2, l/2)$. Tem-se então que a célula ocupa a região quadrada, $R \subset \mathbb{R}^2$, tal que $R = R_1 \cup R_2$ e cujos lados têm comprimento l . Obviamente, $R_1 \cap R_2 = \emptyset$.

O sólido modelado possui um eixo de simetria material paralelo à direção x_3 . Lembre-se que as equações governantes dos problemas de interesse neste trabalho são as equações de equilíbrio e as equações da eletrostática em (4.2) juntamente com as relações constitutivas (4.3), as quais são resolvidas para, respectivamente, o deslocamento mecânico $\mathbf{u} : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}^3$, suposto pequeno, e o potencial elétrico

Figura 8: (a) Estrutura periódica composta de cilindros circulares paralelos, vazios e idênticos. (b) Célula ocupa a região quadrada $R = R_1 \cup R_2$ com $R_1 \cap R_2 = \emptyset$

$\varphi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$.

Para um estado de cisalhamento antiplano de deformação, em que há apenas uma componente de deslocamento não nula, e considerando um campo elétrico plano, segue de (4.2) que as equações governantes não-nulas são dadas por

$$\frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_2} = 0, \quad \frac{\partial D_1}{\partial x_1} + \frac{\partial D_2}{\partial x_2} = 0 \quad \text{em } \mathcal{M}, \quad (5.1)$$

As componentes de tensão, σ_{i3} , e do deslocamento elétrico, D_i , $i = 1, 2$, estão relacionadas à componente antiplana w do deslocamento $\mathbf{u}$, $w = u_3$, e ao potencial elétrico φ por meio das relações

$$\begin{aligned} \sigma_{13} &= p \frac{\partial w}{\partial x_1} - s \frac{\partial \varphi}{\partial x_2}, & \sigma_{23} &= p \frac{\partial w}{\partial x_2} + s \frac{\partial \varphi}{\partial x_1}, \\ D_1 &= s \frac{\partial w}{\partial x_2} - t \frac{\partial \varphi}{\partial x_1}, & D_2 &= -s \frac{\partial w}{\partial x_1} - t \frac{\partial \varphi}{\partial x_2}, \end{aligned} \quad (5.2)$$

respectivamente, nas quais w e φ são independentes da variável x_3 , $p = C_{1313}$ é o módulo de elasticidade ao cisalhamento, $t = \kappa_{11}$ é a permissividade dielétrica transversa, e $s = e_{123}$ é o coeficiente piezoelétrico da tensão cisalhante. Utilizando a expressão $k^2 = U_m^2 / (U_e U_d)$ introduzida no Capítulo 1, tem-se que o fator de acoplamento eletromecânico β é dado por

$$\beta = s^2 / (pt). \quad (5.3)$$

As condições de contorno sobre as superfícies cilíndricas com secções circulares de $\mathcal{M}$, $\partial\mathcal{M}$, são dadas por

$$\sigma_{13}n_1 + \sigma_{23}n_2 = 0, \quad D_1n_1 + D_2n_2 = 0 \quad \text{sobre } \partial\mathcal{M}, \quad (5.4)$$

em que n_i , $i = 1, 2$, são as componentes da normal unitária $\mathbf{n}$ sobre uma superfície cilíndrica.

Substituindo as relações constitutivas (5.2) nas equações diferenciais governantes (5.1) e nas condições de contorno (5.4), obtêm-se

$$\begin{cases} p \Delta_x w = 0, & t \Delta_x \varphi = 0, & \text{em } \mathcal{M}, \\ (p \nabla_x w + s \mathbf{e}_3 \times \nabla_x \varphi) \cdot \mathbf{n} = 0, & (-t \nabla_x \varphi - s \mathbf{e}_3 \times \nabla_x w) \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\mathcal{M}, \end{cases} \quad (5.5)$$

respectivamente, em que $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ é a base ortonormal introduzida após (2.4) e que está associada ao SCC, (x_1, x_2, x_3) , $\Delta_x \triangleq \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$ é o operador de Laplace com respeito à variável $\mathbf{x}$ e $\nabla_x \triangleq \frac{\partial}{\partial x_1} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} \mathbf{e}_2 + \frac{\partial}{\partial x_3} \mathbf{e}_3$ é o operador gradiente com respeito a variável $\mathbf{x}$.

O PVC consiste em encontrar o deslocamento $w : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ e o potencial elétrico $\varphi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ que satisfaçam as equações diferenciais (5.5.a), as condições de contorno (5.5.b) e as condições de periodicidade sobre a fronteira de $\mathcal{M}$ no infinito.

5.2 Homogeneização

Nesta seção, aplica-se o MHA apresentado na Seção 4.2. Seja $\varepsilon = l/L$ um parâmetro geométrico pequeno definido como a razão entre os comprimentos característico l da célula R e o comprimento característico L do compósito bifásico, conforme ilustrado na Fig. 8. Lembra-se do Capítulo 1 a existência de duas escalas espaciais; uma das quais é global e está relacionada à variável *lenta* $\mathbf{x}$ e a outra é local e está relacionada à variável *rápida* $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$. Busca-se uma solução para o PVC enunciado no final da Seção 5.1 para uma microestrutura refinada, $\varepsilon \ll 1$, utilizando expansões em séries de potências de ε dadas por

$$w(\mathbf{x}) = w_0(\mathbf{x}) + \varepsilon^k w_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \varphi(\mathbf{x}) = \varphi_0(\mathbf{x}) + \varepsilon^k \varphi_k(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (5.6)$$

em que há soma implícita sobre $k = 1, 2, \dots$, e ambas $w_0(\mathbf{x})$ e $\varphi_0(\mathbf{x})$ são funções diferenciáveis de segunda ordem com respeito a $\mathbf{x}$ e representam o deslocamento e o potencial elétrico, respectivamente, de um corpo homogeneizado. Além disso, w_k e φ_k para $k > 0$ são funções diferenciáveis de segunda ordem com respeito a ambas as variáveis $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$, funções $\mathbf{y}$ - periódicas na célula unitária R , altamente oscilantes, e representam os termos de correção das aproximações de ordem zero w_0 e φ_0 , respectivamente. Substituindo ambas $w(\mathbf{x})$ e $\varphi(\mathbf{x})$ em (5.2), obtém-se

$$\begin{cases} \sigma_{i3}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \varepsilon^k \sigma_{i3}^{(k)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), & \sigma_{i3}^{(k)} \triangleq p \left(\frac{\partial w_k}{\partial x_i} + \frac{\partial w_{k+1}}{\partial y_i} \right) - \gamma_{ij} s \left(\frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j} + \frac{\partial \varphi_{k+1}}{\partial y_j} \right), \\ D_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \varepsilon^k D_i^{(k)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), & D_i^{(k)} \triangleq \gamma_{ij} s \left(\frac{\partial w_k}{\partial x_i} + \frac{\partial w_{k+1}}{\partial y_i} \right) - t \left(\frac{\partial \varphi_k}{\partial x_j} + \frac{\partial \varphi_{k+1}}{\partial y_j} \right), \end{cases} \quad (5.7)$$

em que há soma implícita sobre $k = 0, 1, \dots$, e γ_{ij} é o símbolo permutador de ordem dois. As expressões (5.7) são casos particulares das expressões (4.5) e (4.6).

Seguindo os passos que levam de (4.5) e (4.6) a (4.12) e (4.13), chega-se aqui a

$$\begin{cases} w_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = {}_{13}M(\mathbf{y}) \frac{\partial w_0(\mathbf{x})}{\partial x_1} + {}_{23}M(\mathbf{y}) \frac{\partial w_0(\mathbf{x})}{\partial x_2} + {}_1M(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi_0(\mathbf{x})}{\partial x_1} + {}_2M(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi_0(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \\ \varphi_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = {}_{13}N(\mathbf{y}) \frac{\partial w_0(\mathbf{x})}{\partial x_1} + {}_{23}N(\mathbf{y}) \frac{\partial w_0(\mathbf{x})}{\partial x_2} + {}_1N(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi_0(\mathbf{x})}{\partial x_1} + {}_2N(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi_0(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \end{cases} \quad (5.8)$$

em que ${}_{i3}M, {}_iM, {}_{i3}N, {}_iN$, $i = 1, 2$, são funções diferenciáveis de segunda ordem em relação somente a $\mathbf{y}$ e satisfazem condições de periodicidade no contorno externo de R_2 .

Substituem-se as funções definidas em (5.8) nas expressões de ambas $\sigma_{i3}^{(0)}$ e $D_i^{(0)}$ definidas em (5.7) com $k = 0$ para obter

$$\begin{cases} \sigma_{i3}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = {}_{i3}\sigma_{j3}(\mathbf{y}) \frac{\partial w_0(\mathbf{x})}{\partial x_j} + {}_i\sigma_{j3}(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi_0(\mathbf{x})}{\partial x_j}, \\ D_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = {}_{i3}D_j(\mathbf{y}) \frac{\partial w_0(\mathbf{x})}{\partial x_j} + {}_iD_j(\mathbf{y}) \frac{\partial \varphi_0(\mathbf{x})}{\partial x_j}, \end{cases} \quad (5.9)$$

em que

$$\begin{cases} {}_{i3}\sigma_{j3} \triangleq p {}_{i3}M_{,y_j} - \gamma_{jk} s {}_{i3}N_{,y_k}, \\ {}_i\sigma_{j3} \triangleq p {}_iM_{,y_j} - \gamma_{jk} s {}_iN_{,y_k}, \end{cases} \quad \begin{cases} {}_{i3}D_j \triangleq \gamma_{jk} s {}_{i3}M_{,y_k} - t {}_{i3}N_{,y_j}, \\ {}_iD_j \triangleq \gamma_{jk} s {}_iM_{,y_k} - t {}_iN_{,y_j}. \end{cases} \quad (5.10)$$

Comparando as expressões (5.10) com as relações constitutivas em (5.2), observa-se que as funções $({}_{i3}\sigma_{j3}, {}_i\sigma_{j3})$ e $({}_{i3}D_j, {}_iD_j)$ podem ser interpretadas como tensões e deslocamentos elétricos locais, respectivamente, que estão linearmente relacionados aos campos locais de deslocamentos $({}_{i3}M_{j3}, {}_iM_{j3})$ e potenciais elétricos $({}_{i3}N_{j3}, {}_iN_{j3})$.

Por outro lado, substituem-se as expansões (5.7) nas equações diferenciais (5.1) e utiliza-se a *regra da cadeia* para obter duas series infinitas de potências de ε iniciando com ε^{-1} . Multiplicando ambas as séries por ε^1 e fazendo $\varepsilon \rightarrow 0$, obtêm-se as equações diferenciais

$$\varepsilon^{-1} : \frac{\partial \sigma_{i3}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_i} = 0, \quad \frac{\partial D_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_i} = 0 \quad \text{em } R_2. \quad (5.11)$$

Substituindo as equações (5.9) nas equações (5.11) acima, resulta

$$\begin{cases} \frac{\partial {}_{i3}\sigma_{j3}}{\partial y_j} \frac{\partial w_0}{\partial x_i} + \frac{\partial {}_i\sigma_{j3}}{\partial y_j} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} = 0, \\ \frac{\partial {}_{i3}D_j}{\partial y_j} \frac{\partial w_0}{\partial x_i} + \frac{\partial {}_iD_j}{\partial y_j} \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} = 0, \end{cases} \quad \text{em } R_2, \quad (5.12)$$

em que os termos do divergente em (5.12) são dados por $\partial {}_{i3}\sigma_{j3}/\partial y_j = \Delta {}_{i3}M$, $\partial {}_i\sigma_{j3}/\partial y_j = \Delta {}_iM$, $\partial {}_{i3}D_j/\partial y_j = \Delta {}_{i3}N$ e $\partial {}_iD_j/\partial y_j = \Delta {}_iN$. O símbolo Δ é o operador de Laplace com respeito à variável $\mathbf{y}$, isto é, $\Delta \triangleq \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2}$. Como estratégia de resolução, neste trabalho buscam-se funções ${}_{i3}M, {}_iM, {}_{i3}N, {}_iN$, $i = 1, 2$, na classe das funções harmônicas¹, ou seja, na classe das funções que satisfazem as equações de Laplace em $\mathbb{R}^2$. Deste modo, todos os coeficientes em (5.12) devem ser iguais a zero. Assim, assume-se que as componentes dos divergentes em (5.12) correspondem localmente às componentes dos divergentes nas equações (5.1), ou seja,

¹Neste contexto, veja os problemas locais definidos em (BRAVO-CASTILLERO et al., 2009).

para $i = 1, 2$,

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta_{i3}M = \frac{\partial_{i3}\sigma_{j3}}{\partial y_j} = 0, & \Delta_iM = \frac{\partial_i\sigma_{j3}}{\partial y_j} = 0, \\ \Delta_{i3}N = \frac{\partial_{i3}D_{j3}}{\partial y_j} = 0, & \Delta_iN = \frac{\partial_iD_{j3}}{\partial y_j} = 0, \end{array} \right. \quad \text{em } R_2. \quad (5.13)$$

Uma vez que as equações governantes locais foram obtidas em (5.13), para definir os *problemas locais*, necessita-se definir as condições de contorno locais. Neste sentido, substituem-se as expansões (5.6) nas relações constitutivas (5.2) e então substituindo as expressões resultantes em conjunto com as expressões (5.8) nas condições de contorno (5.4), obtêm-se

$$\left\{ \begin{array}{l} [{}_{i3}\sigma_{j3}n_j + pn_j] \frac{\partial w_0}{\partial x_i} + [{}_i\sigma_{j3}n_j - s\gamma_{jk}n_k] \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} = 0, \\ [{}_{i3}D_jn_j - s\gamma_{jk}n_k] \frac{\partial w_0}{\partial x_i} + [{}_iD_{j3}n_j + tn_j] \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_i} = 0, \end{array} \right. \quad \text{sobre } \Sigma. \quad (5.14)$$

Lembre-se da equação (2.29) que γ_{jk} é o símbolo permutador em duas dimensões e ${}_{i3}\sigma_{j3}$, ${}_i\sigma_{j3}$, ${}_{i3}D_{j3}$, e ${}_iD_{j3}$, $i, j = 1, 2$, estão definidas em (5.10). As expressões dentro dos colchetes em (5.14) podem ser interpretadas como condições de contorno locais sobre o contorno Σ de um furo e, conseqüentemente, anulam-se.

Tendo em vista as considerações acima, as equações (5.13) e (5.14) possibilitam a definição dos *problemas locais*, aqui simbolizados por ${}_{i3}L$, ${}_iL$, $i = 1, 2$, os quais consistem em encontrar as funções harmônicas ${}_{i3}M$, ${}_{i3}N$, ${}_iM$, ${}_iN$, $i = 1, 2$, que satisfazem as equações de Laplace em (5.13) juntamente com a condição de que os coeficientes das equações (5.14), os quais estão dentro dos colchetes, sejam nulos. Para obter soluções únicas para estes problemas locais, é suficiente impor *média* nula às funções harmônicas sobre R_2 , isto é, são impostas as condições $\langle {}_{i3}M \rangle = 0$, $\langle {}_{i3}N \rangle = 0$, $\langle {}_iM \rangle = 0$, $\langle {}_iN \rangle = 0$, $i = 1, 2$.

Resumem-se na tabela Tab. 2 as equações governantes e as condições de contorno relacionadas aos problemas locais ${}_{i3}L$ and ${}_iL$, $i = 1, 2$, escritos em termos das tensões locais (${}_{i3}\sigma_{j3}$, ${}_i\sigma_{j3}$) e dos deslocamentos elétricos locais (${}_{i3}D_j$, ${}_iD_j$), os quais estão linearmente relacionados aos campos locais de deslocamentos (${}_{i3}M_{j3}$, ${}_iM_{j3}$) e de potencial elétrico (${}_{i3}N_{j3}$, ${}_iN_{j3}$) por meio das expressões (5.10).

Tabela 2: Problemas Locais ${}_{i3}L$ e ${}_iL$, $i = 1, 2$.

Problema Local ${}_{i3}L$		Problema Local ${}_iL$	
$\frac{\partial {}_{i3}\sigma_{j3}}{\partial y_j} = 0$	em R_2	$\frac{\partial {}_i\sigma_{j3}}{\partial y_j} = 0$	em R_2
$\frac{\partial {}_{i3}D_j}{\partial y_j} = 0$	em R_2	$\frac{\partial {}_iD_j}{\partial y_j} = 0$	em R_2
${}_{i3}\sigma_{j3}n_j = -p n_i$	sobre Σ	${}_i\sigma_{j3}n_j = -s \gamma_{ij}n_j$	sobre Σ
${}_{i3}D_jn_j = s \gamma_{ij}n_j$	sobre Σ	${}_iD_jn_j = t n_i$	sobre Σ

Na próxima seção apresentam-se os principais passos do procedimento utilizado para construir as funções ${}_{13}M$ e ${}_{13}N$ e encontrar a solução do problema local ${}_{13}L$. Procedimentos análogos ao descrito nesta seção são utilizados para obter as soluções dos problemas locais ${}_2L$, ${}_{23}L$ e ${}_1L$. As soluções destes problemas possibilitam determinar as constantes efetivas elásticas, piezoelétricas e dielétricas, as quais são as propriedades eletromecânicas do meio homogeneizado. Aproximações destas soluções são obtidas na próxima seção e o cálculo aproximado das constantes efetivas é apresentado no Capítulo 6.

5.3 Solução dos Problemas Locais

Para resolver o problema local ${}_{13}L$, buscam-se funções harmônicas *duplamente periódicas*² ${}_{13}M$ e ${}_{13}N$ sob a forma de expansões em séries dadas por

$${}_{13}M(z) = \operatorname{Re} \left(\frac{A}{r} z + f(z) \right), \quad {}_{13}N(z) = \operatorname{Im} \left(\frac{B}{r} z + g(z) \right), \quad (5.15)$$

²Funções duplamente periódicas (ou funções elípticas) são funções periódicas em relação a dois períodos não colineares no *plano complexo*, $\mathbb{C}$, o qual é o conjunto dos números complexos. A estrutura topológica de $\mathbb{C}$ (*conjuntos abertos e/ou fechados, interior, fronteira, exterior, fecho, conexidade e compacidade*) é considerada a mesma de $\mathbb{R}^2$ e, justifica-se, pela existência de uma correspondência biunívoca entre os conjuntos *abertos* de $\mathbb{R}^2$ e $\mathbb{C}$ que preserva as propriedades destes conjuntos.

em que $z = y_1 + i y_2$ é uma variável complexa, $Re(\cdot)$ e $Im(\cdot)$ são, respectivamente, as partes real e imaginária de $(\cdot)$ e

$$f(z) = \sum_{k=1}^{\infty} {}^o a_k r^k \frac{\zeta^{(k-1)}(z)}{(k-1)!}, \quad g(z) = \sum_{k=1}^{\infty} {}^o b_k r^k \frac{\zeta^{(k-1)}(z)}{(k-1)!}, \quad (5.16)$$

$$A = -V_1 a_1, \quad B = V_1 b_1, \quad V_1 + V_2 = l^2, \quad \text{e} \quad V_1 = \pi r^2, \quad (5.17)$$

em que V_1 e V_2 são as frações de área do furo e do material, respectivamente, na célula periódica R . A função $\zeta(z)$ é a função quase-periódica *Zeta de Weierstrass* (ARMITAGE J.; EBERLEIN W., 2006), e $\zeta^{(k)}(z)$ é a k -ésima derivada de $\zeta(z)$ com respeito a z . Os coeficientes a_k e b_k em (5.16) são determinados das condições de contorno sobre Σ mostradas na tabela Tab. 2. As derivadas de $\zeta(z)$ são duplamente periódicas de períodos $\omega_1 = l$ e $\omega_2 = il$ no plano complexo, em que deve-se lembrar da Seção 5.1 que l é o comprimento do lado da célula quadrada. O símbolo o sobrescrito próximo ao símbolo de somatório significa que k varia somente sobre o conjunto dos inteiros ímpares. Visto que $\zeta(z)$ é uma função ímpar de z , segue-se de (5.15) e (5.16) que ambas ${}_{13}M(z)$ and ${}_{13}N(z)$ também são funções ímpares de z (MARKUSHEVICH, 1970, Vol. II). Examinando as condições de contorno na tabela Tab. 2, e lembrando que $\Sigma = \{z = r e^{i\theta}, 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$ no plano complexo, verifica-se que ${}_{13}M(z)$ é uma função par de θ e ${}_{13}N(z)$ é uma função ímpar de θ . Substituindo (5.15) nestas condições de contorno, obtêm-se

$$(p + p \frac{A}{r} - s \frac{B}{r}) \frac{z - \bar{z}}{2i} + Im(p f(z) - s g(z)) = 0, \quad (5.18)$$

$$(s - s \frac{A}{r} + t \frac{B}{r}) \frac{z + \bar{z}}{2} + Re(s f(z) + t g(z)) = 0,$$

em que $z \in \Sigma$ e $\bar{z}$ é o conjugado de z .

Para determinar os coeficientes a_k e b_k que aparecem em (5.16), expandem-se em séries de Laurent as funções $f(z)$ e $g(z)$, definidas em (5.16), em torno de $z = 0$ e obtém-se

$$f(z) = \sum_{l=1}^{\infty} {}^o a_l \left(\frac{r}{z}\right)^l + \sum_{l=1}^{\infty} {}^o \sum_{k=1}^{\infty} {}^o a_k \eta_{kl} \left(\frac{z}{r}\right)^l, \quad (5.19)$$

$$g(z) = \sum_{l=1}^{\infty} {}^o b_l \left(\frac{r}{z}\right)^l + \sum_{l=1}^{\infty} {}^o \sum_{k=1}^{\infty} {}^o b_k \eta_{kl} \left(\frac{z}{r}\right)^l,$$

respectivamente, em que η_{kl} é definida por

$$\eta_{kl} = -C_{l+k-1}^l r^{l+k} S_{k+l}, \quad (5.20)$$

com

$$C_k^l = \frac{k!}{l!(k-l)!}, \quad (5.21)$$

$$S_{k+l} \triangleq \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (m\omega_1 + n\omega_2)^{-(k+l)}, \quad m^2 + n^2 \neq 0, \quad k+l \geq 3, \quad (5.22)$$

e $S_2 = 0$ (GRIGOLYUK; FIL'SHTINSKII, 1970) e (POBEDRYA, 1984, p. 202). As séries S_{k+l} são absolutamente e uniformemente convergentes (MARKUSHEVICH, 1970, p. 335). Para o arranjo de células quadradas contendo furos considerado neste modelamento, $\eta_{kl} \neq 0$ se $k+l = 4n$. Caso contrário, $\eta_{kl} = 0$. Note de (5.20)-(5.22) que, em geral, $\eta_{kl} \neq \eta_{lk}$.

Substituindo as expansões em séries de Laurent (5.19) nas condições de contorno da tabela Tab. 2, obtém-se um sistema de equações para a determinação dos coeficientes a_k e b_k , $k = 1, 3, \dots$, $l = 1, 3, \dots$, o qual é dado por

$$\begin{cases} -pa_l + sb_l + p \left(-\pi a_1 r^2 \delta_{1l} + \sum_{k=1}^{\infty} {}^o a_k \eta_{kl} \right) - s \left(\pi b_1 r^2 \delta_{1l} + \sum_{k=1}^{\infty} {}^o b_k \eta_{kl} \right) = -pr \delta_{1l}, \\ sa_l + tb_l + s \left(-\pi a_1 r^2 \delta_{1l} + \sum_{k=1}^{\infty} {}^o a_k \eta_{kl} \right) + t \left(\pi b_1 r^2 \delta_{1l} + \sum_{k=1}^{\infty} {}^o b_k \eta_{kl} \right) = -sr \delta_{1l}. \end{cases} \quad (5.23)$$

O sistema (5.23) é um sistema infinito regular³ (KANTAROVICH; KRILOV, 1964), o qual possui uma solução exata dada na forma de uma série. A convergência de métodos iterativos para sistemas infinitos regulares de equações lineares são discutidos por Yingzhen, Minggen e Yi (2005), Kantarovich e Krilov (1964), entre outros. O sistema (5.23) pode ser decomposto em três subsistemas fixando $l = 1$, $l = 4g + 1$, $l = 4g - 1$,

³Seja

$$x_i = \sum_{k=1}^{\infty} a_{ik} x_k + b_i, \quad i = 1, 2, \dots, \quad (5.24)$$

um sistema infinito linear com um número infinito de incógnitas. Uma sequência de números $x_k, x_k, \dots$ é denominada solução do sistema (5.24) se depois da substituição destes números no lado direito obtém-se séries convergentes e todas as equações do sistema são satisfeitas. O sistema (5.24) é denominado sistema regular se

$$1 - \sum_{k=1}^{\infty} |a_{ik}| > 0, \quad i = 1, 2, \dots$$

com $g = 1, 2, \dots$. Os três subsistemas são dados por

$$\begin{cases} -p a_1 (1 + V_1) + s b_1 V_2 = -pr + \sum_{k=1}^{\infty} (-p a_{4k-1} + s b_{4k-1}) \eta_{4k-11}, \\ s a_1 V_2 + t b_1 (1 + V_1) = -sr - \sum_{k=1}^{\infty} (s a_{4k-1} + t b_{4k-1}) \eta_{4k-11}, \end{cases} \quad l = 1, \quad (5.25)$$

$$\begin{cases} -p a_{4g+1} + s b_{4g+1} = \sum_{m=1}^{\infty} (-p a_{4m-1} + s b_{4m-1}) \eta_{4m-1 \ 4g+1}, \\ s a_{4g+1} + t b_{4g+1} = - \sum_{m=1}^{\infty} (s a_{4m-1} + t b_{4m-1}) \eta_{4m-1 \ 4g+1}, \end{cases} \quad l = 4g + 1, \quad (5.26)$$

$$\begin{cases} -p a_{4g-1} + s b_{4g-1} = (-p a_1 + s b_1) \eta_{1 \ 4g-1} + \sum_{t=1}^{\infty} (-p a_{4t+1} + s b_{4t+1}) \eta_{4t+1 \ 4g-1}, \\ s a_{4g-1} + t b_{4g-1} = - (s a_1 + t b_1) \eta_{1 \ 4g-1} - \sum_{t=1}^{\infty} (s a_{4t+1} + t b_{4t+1}) \eta_{4t+1 \ 4g-1}, \end{cases} \quad (5.27)$$

em que, no terceiro subsistema $l = 4g - 1$.

Os coeficientes $a_k, b_k, k = 1, 3, \dots$, podem ser calculados de forma aproximada truncando as séries infinitas em somas finitas com N_0 termos, em que $N_0 > 0$. Assim, obtêm-se um sistema de equações finito e determinado que substitui (5.25) - (5.27). Trocando os índices $g \leftrightarrow t$ na versão truncada de (5.26) e substituindo a expressão resultante na versão truncada de (5.27), obtêm-se

$$\begin{cases} (-p a_1 + s b_1) \eta_{1 \ 4g-1} = \sum_{t=1}^{N_0} \sum_{m=1}^{N_0} (-p a_{4m-1} + s b_{4m-1}) \\ \quad (\delta_{4m-1 \ 4g-1} - \eta_{4m-1 \ 4t+1} \eta_{4t+1 \ 4g-1}), \\ - (s a_1 + t b_1) \eta_{1 \ 4g-1} = \sum_{t=1}^{N_0} \sum_{m=1}^{N_0} (s a_{4m-1} + t b_{4m-1}) \\ \quad (\delta_{4m-1 \ 4g-1} - \eta_{4m-1 \ 4t+1} \eta_{4t+1 \ 4g-1}), \\ g = 1, \dots, N_0. \end{cases} \quad (5.28)$$

A partir deste ponto da apresentação, os coeficientes $a_k, b_k, k = 1, 2, \dots$, devem ser entendidos como aproximações dos coeficientes correspondentes em (5.16). Agora, utiliza-se (5.28) para calcular os coeficientes $a_k, b_k, k > 1$, em termos dos coeficientes

a_1, b_1 , produzindo

$$\left\{ \begin{array}{l} (-pa_{4m-1} + sb_{4m-1}) = (-pa_1 + sb_1) \sum_{g=1}^{N_0} \eta_{1 \ 4g-1} \\ \quad \left(\delta_{4g-1 \ 4m-1} - \sum_{t=1}^{N_0} \eta_{4g-1 \ 4t+1} \eta_{4t+1 \ 4m-1} \right)^{-1}, \\ \\ (sa_{4m-1} + tb_{4m-1}) = -(sa_1 + tb_1) \sum_{g=1}^{N_0} \eta_{1 \ 4g-1} \\ \quad \left(\delta_{4g-1 \ 4m-1} - \sum_{t=1}^{N_0} \eta_{4g-1 \ 4t+1} \eta_{4t+1 \ 4m-1} \right)^{-1}. \end{array} \right. \quad (5.29)$$

Substituindo (5.29) em (5.25), obtém-se

$$\left\{ \begin{array}{l} -pa_1 (1 + V_1 - L) + sb_1 (V_2 - L) = -pr, \\ sa_1 (V_2 - L) + tb_1 (1 + V_1 - L) = -sr, \end{array} \right. \quad (5.30)$$

em que V_1 e V_2 são dados em (5.17) e

$$L \triangleq \sum_{g=1}^{N_0} \sum_{i=1}^{N_0} \eta_{1 \ 4g-1} \left(\delta_{4g-1 \ 4i-1} - \sum_{t=1}^{N_0} \eta_{4g-1 \ 4t+1} \eta_{4t+1 \ 4i-1} \right)^{-1} \eta_{4i-11}. \quad (5.31)$$

Resolvendo o sistema de equações (5.30) para os coeficientes a_1 e b_1 , obtém-se as expressões

$$a_1 = \frac{r [1 + V_1 - L - \beta (V_2 - L)]}{\chi}, \quad b_1 = -\frac{2sr(1 - L)}{t \chi}, \quad (5.32)$$

em que

$$\chi \triangleq (1 + V_1 - L)^2 + \beta(V_2 - L)^2. \quad (5.33)$$

Os coeficientes a_1 e b_1 obtidos nesta seção são utilizados no próximo capítulo para o cálculo das constantes elástica, piezoelétrica e dielétrica efetivas.

6 Cálculo das Propriedades Efetivas

Uma vez que as funções ${}_{13}M$ e ${}_{13}N$ foram determinadas no capítulo anterior, realiza-se aqui o cálculo das constantes efetivas, as quais representam as propriedades elásticas, piezoelétricas e dielétricas do meio homogeneizado.

6.1 Obtenção das Constantes Efetivas Utilizando MHA

Para calcular as constantes elástica, piezoelétrica e dielétrica efetivas p_e , s_e , e t_e , respectivamente, do meio homogeneizado, aplica-se o operador média local definido em (4.21), em ambas as componentes de tensão σ_{i3} , $i = 1, 2$, e ambas as componentes do deslocamento elétrico D_i , $i = 1, 2$, dadas por (5.7)-(5.10), no limite quando $\varepsilon \rightarrow 0$. Lembrando que os termos de ordem maior que zero em (5.7) são y-periódicos, este procedimento é equivalente a tomar a média dos termos de ordem zero em (5.7), ou seja,

$$\begin{aligned} \langle \sigma^{(0)}_{13} \rangle &= {}_{13}p_e w_{0,1} - {}_2s_e \varphi_{0,2}, & \langle D^{(0)}_1 \rangle &= {}_{23}s_e w_{0,2} - {}_1t_e \varphi_{0,1}, \\ \langle \sigma^{(0)}_{23} \rangle &= {}_{23}p_e w_{0,2} + {}_1s_e \varphi_{0,1}, & \langle D^{(0)}_2 \rangle &= -{}_{13}s_e w_{0,1} - {}_2t_e \varphi_{0,2}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

em que

$$\begin{aligned} {}_{i3}p_e &\triangleq \langle p + p {}_{i3}M_{,i} - s \gamma_{ij} {}_{i3}N_{,j} \rangle, & {}_{i3}s_e &\triangleq \langle s + s {}_{i3}M_{,i} + \gamma_{ij} t {}_{i3}N_{,j} \rangle, \\ {}_is_e &\triangleq \langle s + s {}_iN_{,i} + p \gamma_{ij} {}_iM_{,j} \rangle, & {}_it_e &\triangleq \langle t + t {}_iN_{,i} - s \gamma_{ij} {}_iM_{,j} \rangle, \end{aligned} \quad (6.2)$$

$i=1,2$. As expressões (6.1) e (6.2) correspondem às expressões (4.23) e (4.24), respectivamente.

Comparando as expressões (6.1) com as relações constitutivas (5.2), observa-se que estas expressões são análogas entre si no caso da existência das igualdades ${}_{13}p_e = {}_{23}p_e$, ${}_{13}s_e = {}_{23}s_e = {}_1s_e = {}_2s_e$, ${}_1t_e = {}_2t_e$. De fato, mostra-se

abaixo que estas igualdades existem. Utilizando-se as expressões (6.2), considera-se primeiramente o cálculo das constantes efetivas ${}_{13}p_e = \langle p + p {}_{13}M_{,1} - s {}_{13}N_{,2} \rangle$ e ${}_{13}s_e = \langle s + s {}_{13}M_{,1} + t {}_{13}N_{,2} \rangle$, em que ${}_{13}M(z)$ e ${}_{13}N(z)$ são dadas por (5.15)-(5.17). Usando a definição do operador média (4.21) e aplicando o *Teorema de Green* para integrais de área, obtêm-se

$$\begin{cases} {}_{13}p_e = p \int_{R_2} dy - p \oint_{\Sigma} {}_{13}M dy_2 - s \oint_{\Sigma} {}_{13}N dy_1, \\ {}_{13}s_e = s \int_{R_2} dy - s \oint_{\Sigma} {}_{13}M dy_2 + t \oint_{\Sigma} {}_{13}N dy_1. \end{cases} \quad (6.3)$$

Para calcular as integrais de linha em (6.3), utilizam-se $dy_1 = -r \sin \theta d\theta$ e $dy_2 = r \cos \theta d\theta$ para $\mathbf{y} = (y_1, y_2) \in \Sigma$ e substitui $z = r e^{i\theta}$ e (5.19) em (5.15). A primeira expressão de (6.3) então torna-se

$$\begin{aligned} {}_{13}p_e = & p \int_{R_2} dy + \\ & p \int_0^{2\pi} \left(-\pi a_1 r^2 \cos \theta + \sum_{l=1}^{\infty} {}^o a_l \cos(l\theta) + \sum_{k=1}^{\infty} {}^o \sum_{l=1}^{\infty} {}^o a_k \eta_{kl} \cos(l\theta) \right) r \cos \theta d\theta \\ & + s \int_0^{2\pi} \left(\pi b_1 r^2 \sin \theta - \sum_{l=1}^{\infty} {}^o b_l \sin(l\theta) + \sum_{k=1}^{\infty} {}^o \sum_{l=1}^{\infty} {}^o b_k \eta_{kl} \sin(l\theta) \right) r \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Lembre-se do Capítulo 5 que as séries em (5.20) são absolutamente e uniformemente convergentes, logo as séries em (6.4) também são absolutamente e uniformemente convergentes, o que torna possível permutar a integração e somatório nesta expressão. Visto que as funções trigonométricas $\cos(l\theta)$ e $\sin(l\theta)$, $l = 1, 2, \dots$, são funções ortogonais no intervalo $(0, 2\pi)$, a única integral não nula na expressão resultante corresponde a $l = 1$. Segue então de (6.4) que

$${}_{13}p_e = p(1 - 2\pi r a_1), \quad (6.5)$$

sendo o coeficiente a_1 dado pela primeira equação de (5.32). Para o cálculo de ${}_{13}s_e$, utiliza-se a segunda expressão de (6.3) juntamente com o procedimento delineado acima, resultando em

$${}_{13}s_e = s \left(1 + \frac{2\pi r t b_1}{s} \right), \quad (6.6)$$

em que o coeficiente b_1 é dado pela segunda expressão de (5.32). Substituindo (5.32.a,

b) em (6.5) e (6.6), respectivamente, chega-se finalmente a

$$\frac{{}_{13}p_e}{p} = \frac{[(1 + V_1 - L)(V_2 - L)(1 + \beta)]}{\chi}, \quad \frac{{}_{13}s_e}{s} = \frac{(V_2 - L)^2(1 + \beta)}{\chi}, \quad (6.7)$$

em que χ é dado por (5.33), β é o fator de acoplamento eletromecânico dado por (5.3) e lembre-se de (5.17) que $V_1 = \pi r^2$ é a área de um furo e $V_1 + V_2 = l^2$ é a área de uma célula quadrada.

O procedimento apresentado na Seção 5.3 para a solução do problema ${}_{13}L$ juntamente com o procedimento apresentado acima para a obtenção das expressões aproximadas de ambas as constantes efetivas ${}_{13}p_e$ e ${}_{13}s_e$ podem agora ser aplicados na solução dos outros problemas ${}_{23}L$ e ${}_iL$, $i = 1, 2$, e na obtenção das expressões aproximadas para as outras constantes efetivas ${}_{23}p_e$, ${}_{23}s_e$, ${}_1s_e$, ${}_2s_e$, ${}_1t_e$, ${}_2t_e$. Os problemas ${}_{23}L$, ${}_1L$ e ${}_2L$ são resolvidos de modo análogo ao problema ${}_{13}L$; em particular, a solução do problema local ${}_2L$ fornece as funções duplamente periódicas ${}_2M(z)$ e ${}_2N(z)$, as quais são usadas nas expressões (6.2) para calcular as constantes efetivas ${}_2s_e$ e ${}_2t_e$, fornecendo

$$\frac{{}_2s_e}{s} = \frac{(V_2 - L)^2(1 + \beta)}{\chi}, \quad \frac{{}_2t_e}{t} = \frac{(1 + V_1 - L)(V_2 - L)(1 + \beta)}{\chi}. \quad (6.8)$$

Observe de ambas as expressões, (6.7) e (6.8), que ${}_{13}s_e = {}_2s_e$ e que ${}_{13}p_e/p = {}_2t_e/t$. Usando as soluções dos problemas remanescentes ${}_{23}L$ e ${}_1L$, obtêm-se, finalmente, a constante elástica efetiva $p_e \triangleq {}_{13}p_e = {}_{23}p_e$, a constante piezoelétrica efetiva $s_e \triangleq {}_{13}s_e = {}_{23}s_e = {}_1s_e = {}_2s_e$ e a constante dielétrica efetiva $t_e \triangleq {}_1t_e = {}_2t_e$. Além disso, observe de (6.7) e (6.8) que

$$\frac{p_e}{p} = \frac{t_e}{t} = \frac{(1 + V_1 - L)}{(V_2 - L)} \frac{s_e}{s}. \quad (6.9)$$

Segue do exposto acima e, em particular, da relação entre constantes efetivas (6.9) que, para obter todas as constantes efetivas em problemas de cisalhamento antiplano e campo elétrico plano, não é necessário resolver quatro problemas locais; basta resolver somente um problema local.

Na próxima seção calculam-se as constantes efetivas do meio piezoelétrico utilizando o método de Mori-Tanaka (MORI; TANAKA, 1973). No Cap. 7, estas constantes são comparadas com as constantes calculadas utilizando o MHA e dadas

por (6.7)-(6.9).

6.2 Constantes Efetivas via Método de Mori-Tanaka

Nesta seção utiliza-se o método de Mori-Tanaka para determinar as constantes eletromecânicas efetivas.

Por mais de três décadas, pesquisadores tais como Benveniste (1987) e Dunn e Taya (1993b, 1993a) empregaram o trabalho combinado de Eshelby (1957) e Mori e Tanaka (1973) na investigação do comportamento efetivo de compósitos. Uma descrição muito clara da clássica aproximação micro-macro mecânica envolvendo os resultados de Eshelby e a teoria de Mori-Tanaka pode ser encontrada no Capítulo 4 de Zohdi e Wriggers (2008). A hipótese essencial no método de Mori-Tanaka (MT) refere que cada inclusão comporta-se como uma inclusão isolada em uma matriz infinita. Kar-Gupta e Venkatesh (2006) utilizam um modelo analítico com base no método de Mori-Tanaka e um código computacional baseado no Método dos Elementos Finitos para investigar a resposta eletromecânica de um compósito piezoelétrico pertencente à classe de simetria $6mm$, cuja matriz é composta de poros cilíndricos unidirecionais. O modelo analítico baseia-se no caso geral de um poro com seção transversal elíptica estudado por (DUNN; TAYA, 1993a). As relações constitutivas de um material piezoelétrico dadas em (2.67) são reescritas a seguir

$$\Sigma_{iJ} = F_{iJMn} Z_{Mn}, \quad (6.10)$$

nas quais

$$\Sigma_{iJ} = \begin{cases} \sigma_{ij} & \text{se } J(=j) = 1, 2, 3, \\ D_i & \text{se } J = 4, \end{cases} \quad (6.11)$$

$$F_{iJMn} = \begin{cases} C_{ijmn} & \text{se } J = M = 1, 2, 3, \\ e_{nij} & \text{se } J = 1, 2, 3; M = 4, \\ e_{imn} & \text{se } J = 4; M = 1, 2, 3, \\ -\kappa_{in} & \text{se } J = M = 4, \end{cases} \quad (6.12)$$

$$Z_{Mn} = \begin{cases} \varepsilon_{mn} & \text{se } M(=m) = 1, 2, 3, \\ -E_n & \text{se } M = 4. \end{cases} \quad (6.13)$$

Para um compósito piezoelétrico bifásico as propriedades efetivas podem ser determinadas por um processo de homogeneização simples sobre uma célula unitária, ou seja,

$$\bar{\Sigma} = V_2 \bar{\Sigma}_1 + V_1 \bar{\Sigma}_2 \quad (6.14)$$

$$\bar{Z} = V_2 \bar{Z}_1 + V_1 \bar{Z}_2 \quad (6.15)$$

$$\bar{\Sigma} = \mathbf{F} \bar{Z} \quad (6.16)$$

nas quais a barra superior indica que as equações estão sobre o meio homogeneizado, os subscritos 1 e 2 referem-se as duas fases e $\mathbf{F}$ são as propriedades efetivas da matriz (módulos eletroelásticos efetivos), as quais podem ser representadas por

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 + V_2(\mathbf{F}_2 - \mathbf{F}_1)\mathbf{A} \quad (6.17)$$

em que $V_1 + V_2 = 1$, V_1 é a fração de área do furo circular, e $\mathbf{A}$, de acordo com a Teoria Mori-Tanaka, pode ser definido por

$$\mathbf{A} = [\mathbf{I} + V_2 \mathbf{S} \mathbf{F}_1^{-1} (\mathbf{F}_2 - \mathbf{F}_1)]^{-1}, \quad (6.18)$$

em que $[\cdot]^{-1}$ denota a inversa da matriz $[\cdot]$. Em (6.18) $\mathbf{S}$ é o tensor generalizado de Eshelby (ESHELBY, 1957), o qual depende da geometria da inclusão e dos módulos eletroelásticos da matriz. Uma vez que a matriz é porosa $\mathbf{F}_2 = 0$ e $\mathbf{F}$ se reduz a

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 \{ \mathbf{I} - V_1 [\mathbf{I} - V_2 \mathbf{S}]^{-1} \}. \quad (6.19)$$

Para um compósito piezoelétrico sob cisalhamento antiplano e um campo elétrico plano, a matriz

$$\mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} p & 0 & -s & 0 \\ 0 & p & 0 & s \\ s & 0 & -t & 0 \\ 0 & -s & 0 & -t \end{pmatrix} \quad (6.20)$$

contêm as propriedades materiais da matriz do meio piezoelétrico e

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & -s/4p & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 & s/4p \\ -s/2t & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & s/2t & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

contêm as componentes do tensor de Eshelby. As componentes de $\mathbf{S}$ calculadas neste trabalho para um material piezoelétrico com simetria hexagonal 622 foram obtidas seguindo o procedimento descrito em (MIKATA, 2000) para o caso de um material piezoelétrico com simetria hexagonal $6mm$. Substituindo ambas as expressões (6.20) e (6.21) em (6.19), obtém-se a matriz

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \bar{p}_1 & 0 & -\bar{s}_1 & 0 \\ 0 & \bar{p}_2 & 0 & \bar{s}_2 \\ \bar{s}_3 & 0 & -\bar{t}_1 & 0 \\ 0 & -\bar{s}_4 & 0 & -\bar{t}_2 \end{pmatrix}, \quad (6.22)$$

em que $\bar{p}_i$, $\bar{t}_i$, $i = 1, 2$, $\bar{s}_j$, $j = 1, \dots, 4$, são as constantes efetivas do meio piezoelétrico e, então, $\bar{p} \triangleq \bar{p}_1 = \bar{p}_2$, $\bar{t} \triangleq \bar{t}_1 = \bar{t}_2$, $\bar{s} \triangleq \bar{s}_1 = \bar{s}_2 = \bar{s}_3 = \bar{s}_4$. As constantes elástica, piezoelétrica e dielétrica efetivas normalizadas do meio homogeneizado são dadas, respectivamente, por

$$\frac{\bar{p}}{p} = \zeta [3(1 + V_1) - (1 + 3V_1)\beta], \quad \frac{\bar{s}}{s} = \zeta [3 - V_1 - V_2\beta], \quad (6.23)$$

$$\frac{\bar{t}}{t} = \zeta [3 + V_1 - (1 + V_1)\beta],$$

em que $\zeta \triangleq V_2 / [(3 + V_1)(1 + V_1) - V_2^2\beta]$, e lembrando de (5.3) que β é o fator de acoplamento eletromecânico da matriz piezoelétrica. Observe de (6.23) que, quando $V_1 = 0$, corresponde a um sólido homogêneo, então os lados direitos das expressões são iguais a 1 como esperado.

7 Resultados Numéricos

Nesta seção mostram-se resultados numéricos para as propriedades eletromecânicas efetivas do meio piezoelétrico homogeneizado contendo furos cilíndricos em termos da fração de área V_1 dos furos e do fator de acoplamento eletromecânico β de fêmur bovino seco. Para obter β , a partir de (5.3), utilizam-se as expressões (27) em Berlincourt, Curran e Jaffe (1964) para relacionar as constantes materiais p , s , e t às constantes elásticas, piezoelétricas, e dielétricas apresentadas nas expressões (22), (13) e (1), respectivamente, de Gundjian e Chen (1974). Deste modo, têm-se que $p = 8,2 \text{ GPa}$, $s = p d_{14} = 2,214 * 10^{-3} \text{ N/(Vm)}$ e $t = \kappa_{11}^T - s^2/p = 6,065 * 10^{-11} \text{ N/V}^2$. Utilizando a expressão (5.3), obtém-se $\beta = 9,856 * 10^{-6}$, que, para estes valores, corresponde a uma contribuição piezoelétrica bem pequena.

As expressões analíticas obtidas para constantes efetivas de materiais piezoelétricos porosos, pelo MHA em (6.7) e (6.8) e pelo método de Mori-Tanaka em (6.23), foram implementadas em ambiente MATLAB®.

Na Fig. 9 mostram-se gráficos das constantes efetivas normalizadas versus a fração de área V_1 . As constantes foram calculadas a partir das expressões (6.7.a,b) e (6.8.b), obtidas via MHA, utilizando valores crescentes de N_0 em (5.31) e a partir das expressões (6.23), obtidas via método de Mori-Tanaka (MT). Na Fig. 9.a mostram-se as razões p_e/p e t_e/t versus V_1 , em que $p_e/p = t_e/t$ utilizando as expressões (6.7.a) e (6.8.b) obtidas via MHA, e $p_e/p \neq t_e/t$ utilizando as expressões (6.23.a,c) obtidas via método de Mori-Tanaka. Observe desta figura que as curvas obtidas via MHA para valores crescentes de N_0 tornam-se indistinguíveis entre si para $N_0 \geq 1$. Observe também que a curva para t_e/t utilizando o MHA e considerando $N_0 = 0$ é indistinguível da curva para t_e/t utilizando a teoria de Mori-Tanaka e que todas as curvas para p_e/p utilizando o MHA e considerando valores crescentes de N_0 estão abaixo da curva para p_e/p utilizando o método de Mori-Tanaka. Na Fig. 9.b mostra-

se a razão s_e/s versus V_1 utilizando a expressão (6.7.b) ou (6.8.a), obtidas via MHA e para valores crescentes de N_0 e utilizando a expressão (6.23.b), obtida via método de Mori-Tanaka. As curvas obtidas via MHA tornam-se indistinguíveis entre si para $N_0 \geq 1$ e estão abaixo da curva obtida para s_e/s via método de Mori-Tanaka a qual é representada por (*). Em todos os casos, as curvas têm o mesmo comportamento qualitativo.

Na Fig. 10 mostram-se curvas para a razão entre o fator de acoplamento efetivo, definido por $\beta_e \triangleq s_e^2/(p_e t_e)$, e o fator de acoplamento da matriz, dado por σ em (5.3), versus a fração de área V_1 . As constantes efetivas p_e , s_e e t_e são dadas pelas expressões (6.7.a,b) e (6.8.b), respectivamente, as quais foram obtidas via MHA, para valores crescentes de N_0 em (5.31) e pelas expressões (6.23), as quais foram obtidas via método de Mori-Tanaka (MT). Observe desta figura que as curvas obtidas via MHA são indistinguíveis entre si para $N_0 \geq 1$ e todas estas curvas estão abaixo da curva obtida via método de Mori-Tanaka, a qual é representada por (*). Aqui também, as curvas obtidas via MHA têm o mesmo comportamento qualitativo das curvas obtidas via método de Mori-tanaka. A boa concordância entre todas as curvas obtidas via MHA sugere que a expressão correspondente para $N_0 = 0$ fornece uma fórmula muito simples para calcular o fator de acoplamento efetivo do compósito. Nas Figuras 11 e 12 mostram-se gráficos das constantes efetivas normalizadas, obtidas via MHA, versus o fator de acoplamento piezoelétrico β para as frações de área $V_1 = 0.2$ e $V_1 = 0.785$, respectivamente, e para valores crescentes de N_0 . Estes valores representam, respectivamente, a área de um canal Haversiano na secção transversal de um sistema de Haversian e um valor próximo ao limite de sobreposição dos furos. O gráfico à esquerda é para $p_e/p = t_e/t$, calculado por (6.7.a), ou, (6.8.b), e o gráfico à direita é para s_e/s , calculado por (6.7.b), ou, (6.8.a). Observe dos gráficos na Fig. 11 que as curvas são indistinguíveis entre si para $N_0 \geq 1$, sendo válida esta observação para todos os valores de V_1 no intervalo $(0, 0.2)$. Este intervalo é usado por Parnell e Grimal (2009) na investigação da influência da porosidade na anisotropia de osso cortical por meio da homogeneização assintótica. Estes resultados indicam que as expressões correspondentes a $N_0 = 0$ fornecem fórmulas muito simples para calcular as constantes materiais efetivas de compósitos porosos neste intervalo. Na Fig. 12 mostra-se o comportamento das constantes efetivas normalizadas próximo ao limite de percolação, o qual é definido pelo maior valor que o raio r pode assumir sem que

Figura 9: Constantes efetivas do compósito piezoelétrico versus a fração de área V_1 . a) Constantes elásticas e permissividade dielétrica normalizadas; b) Constantes piezoelétricas normalizadas.

ocorra sobreposição da fração de área dos poros. Aqui, este limite de percolação é $\pi/4$. Observe desta figura que o MHA fornece uma sequência convergente de constantes efetivas aproximadas para valores crescentes de N_0 . Este resultados indicam que uma alta ordem de aproximação das constantes efetivas normalizadas deve ser usada para grandes valores da fração de área dos furos. Em particular, $N_0 > 0$ deve ser usado próximo ao limite de percolação.

As figuras mostram que os resultados obtido pelo MHA são bons quando comparados com os resultados obtidos pelo método de MT. As curvas comparativas distanciam-se próximo ao limite de percolação, o que pode ser explicado devido às dificuldades de convergência do Método de Mori-Tanaka. Diferentemente do MHA

Figura 10: Razão entre o fator de acoplamento efetivo β_e e o fator de acoplamento da matriz β versus fração de área V_1 .

que preserva condições de simetria e de positividade do tensor de elasticidade no tensor de elasticidade efetivo correspondente (ver Prado et al. (2010), Camacho (2010)), no método de MT, em geral, a simetria do tensor de elasticidade não é preservada (ver Ferrari (1991), Benveniste, Dvorak e Chen (1991)).

A validação de modelos teóricos, comparando os resultados previstos por eles com dados experimentais, é extremamente difícil devido à ausência de padronização, ou, unificação de métodos experimentais. Os dados sobre as propriedades mecânicas do tecido ósseo estão dispersos na literatura e, além disto, na maior parte dos trabalhos as propriedades piezoelétricas e elásticas foram calculadas separadamente via modelos desacoplados.

Figura 11: Constantes efetivas do compósito piezoelétrico versus fator de acoplamento piezoelétrico β para $V_1 = 0.2$: a) Constante elástica e de permissividade dielétrica normalizadas; b) Constante piezoelétrica normalizada.

Figura 12: Constantes efetivas do compósito piezoelétrico versus fator de acoplamento piezoelétrico β para $V_1 = 0.785$: a) Constante elástica e de permissividade dielétrica normalizada; b) Constantes piezoelétricas normalizadas.

8 Conclusão

Modela-se uma estrutura óssea como um compósito bifásico composto de uma distribuição periódica de furos cilíndricos circulares unidirecionais, distribuídos em uma matriz piezoelétrica de classe de simetria cristalina 622. Deste modo, investiga-se o comportamento de sólidos piezoelétricos porosos compostos de uma matriz homogênea contendo furos periódicos unidirecionais, sob um estado acoplado de cisalhamento antiplano e campo elétrico plano. Empregando-se o MHA obtêm-se fórmulas analíticas para as propriedades efetivas elástica, piezoelétrica e dielétrica, as quais dependem da fração de volume dos furos e de um fator de acoplamento eletromecânico da matriz. As constantes efetivas normalizadas obtidas via MHA estão de acordo com as constantes efetivas normalizadas obtidas por meio da abordagem de Mori-Tanaka para um pequeno fator de acoplamento. As fórmulas são fáceis de implementar numericamente e poderiam ser utilizadas para avaliar dados experimentais e no exame de estruturas ósseas. Esta tese representa um primeiro passo para o entendimento do comportamento piezoelétrico efetivo de ossos secos. Deseja-se utilizar não somente materiais com simetria cristalina mais próxima do encontrado na literatura, mas também considerar distribuições de inclusões e furos mais próximos da realidade.

8.1 Trabalhos futuros e em progresso

- I Modelar o comportamento de sólidos piezoelétricos porosos, constituídos de uma matriz piezoelétrica que ocupa uma região $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^3$ e de uma distribuição periódica de furos cilíndricos paralelos nas direções x_1 e x_2 , idênticos e de comprimento infinito na direção x_3 , em que cada furo da distribuição periódica está centrado em um cilindro cuja secção transversal pode ser mapeada na célula

hexagonal. Admitir que a matriz pertença à classe de simetria cristalina 6 e está sob um estado acoplado de cisalhamento antiplano e campo elétrico plano. Empregar o MHA e obter fórmulas analíticas para as propriedades efetivas elástica, piezoelétrica e dielétrica.

- II Modelar o comportamento de sólidos piezoelétricos não homogêneos contendo uma rede de inomogeneidades aleatórias. Considerar sólidos que pertencem à classe de simetria cristalina 622 e, eventualmente 6, e obter fórmulas analíticas para as propriedades efetivas elástica, piezoelétrica e dielétrica via tensores de Green. Neste caso, derivam-se expressões explícitas para as componentes da função do tensor de Green para um material piezoelétrico com simetria hexagonal 622. Ao melhor de nosso conhecimento, a função de Green piezoelétrica na forma explícita foi obtida apenas para simetria hexagonal 6mm.

¹Referências

AGUIAR, A. R.; BRAVO-CASTILLERO, J.; RODRÍGUEZ-RAMOS, R.; SILVA, U. P. Effective electromechanical properties of 622 piezoelectric medium with unidirectional cylindrical holes. **Journal of Applied Mechanics**, v. 80, n. 5, p. 050905–050905, 2013.

AGUIAR, A. R.; PÉREZ-FERNANDEZ, L. D.; PRADO, E. B. T. Investigation of bifurcation solutions of plane problems for a class of hyperelastic laminates. In: **Proceedings of the Thirteenth Pan-American Congress of Applied Mechanics (PACAM XIII - Houston, Texas, USA)**. [S.l.: s.n.], 2013.

AHN, A. C.; GRODZINSKY, A. J. Relevance of collagen piezoelectricity to “wolff’s law”: A critical review. **Med. Eng. Phys.**, v. 31, p. 733–741, 2009.

AOUBIZA, B.; CROLET, J.; MEUNIER, A. On the mechanical characterization of compact bone structure using the homogenization theory. **Journal of Biomechanics**, v. 29, n. 12, p. 1539 – 1547, 1996. ISSN 0021-9290. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929096800054>>.

AOUBIZA, B.; CROLET, J. M. Osteon simulation of mechanical behavior of multiscale composite. In: LADEVEZE, P. Edited by; ZIENKIEWCZ (Ed.). **In Proc. European Conf on New Advances in Computational Structural Mechanics**. [S.l.: s.n.], 1991.

ARMITAGE J., V.; EBERLEIN W., F. **Elliptic Functions**. [S.l.]: Cambridge University Press, Cambridge, England, 2006.

AUGAT, P.; SCHORLEMMER, S. The role of cortical bone and its microstructure in bone strength. **Age And Ageing**, OXFORD UNIV PRESS, GREAT CLARENDON ST, OXFORD OX2 6DP, ENGLAND, v. 35, n. 2, p. 27–31, SEP 2006. ISSN 0002-0729. International Symposium on Preventing Falls and Fractures in Older People, Yokohama, JAPAN, JUN, 2004.

BAKHVALOV, N.; PANASENKO, G. **Homogenization: Averaging Processes in Periodic Media**. [S.l.]: K.A. Publishers, Netherlands., 1989.

BASSET, C. Current concepts of bone formation. **J. Bone Joint Surg.**, v. 44, p. 1217–1244, 1962.

BEHARI, J. **Front Matter in Biophysical Bone Behavior: Principles and Applications**. Chichester, UK.: John Wiley & Sons, Ltd., 2009.

BENSOUSAN, A.; LION, J.; PAPANICOLAOU, G. **Asymptotic Analysis for Periodic Structures**. [S.l.]: North Holland, Amsterdam., 1978.

BENVENISTE, Y. A new approach to the application of mori-tanaka's theory in composite materials. **Mech. Mater.**, v. 6, p. 147–157, 1987.

BENVENISTE, Y.; DVORAK, G.; CHEN, T. On diagonal and elastic symmetry of the approximate effective stiffness tensor of heterogeneous media. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 39, n. 7, p. 927 – 946, 1991. ISSN 0022-5096. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002250969190012D>>.

BERGER, H.; GABBERT, U.; KOPPE, H.; RODRIGUEZ-RAMOS, R.; BRAVO-CASTILLERO, J.; GUINOVART-DIAZ, R.; OTERO, J. A.; MAUGIN, G. A. Finite element and asymptotic homogenization methods applied to smart composite materials. **Computational Mechanics**, v. 33, p. 61–67, 2003.

BERLINCOURT, D. A.; CURRAN, D. R.; JAFFE, H. **Piezoelectric and Piezomagnetic Materials and Their Function in Transducers**. [S.l.]: New York: Academic Press, 1964.

BIKLE, D. D.; SAKATA, T.; HALLORAN, B. P. The impact os skeletal unloading on bone formation. **Gravitational and Space Biology Bulletin**, v. 16, n. 2, p. 45–54, 2003.

BRAVO-CASTILLERO, J.; GUINOVART-DIAZ, R.; SABINA, F. J.; RODRIGUEZ-RAMOS, R. Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents - ii. piezoelectric and square symmetry. **Mechanics of Materials**, v. 33, n. 4, p. 237–248, 2001.

BRAVO-CASTILLERO, J.; RODRIGUEZ-RAMOS, R.; GUINOVART-DIAZ, R.; SABINA, F. J.; AGUIAR, A. R.; SILVA, U. P.; GOMEZ-MUNOZ, J. L. Analytical formulae for electromechanical effective properties of 3-1 longitudinally porous piezoelectric materials. **Acta Materialia**, v. 57, n. 3, p. 795–803, 2009.

BUDIANSKY, B. On the elastic moduli of some heterogeneous materials. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 13, n. 4, p. 223 – 227, 1965. ISSN 0022-5096. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509665900116>>.

CAMACHO, L. M. S. **Homogeneización de compuestos termo-magneto-electro-elásticos con estructura periódica**. Dissertação (Mestrado) — Facultad de Matemática y Computación - Universidad de La Habana, 2010.

CROLET, J. M.; AOUBIZA, B.; MEUNIER, A. Compact bone: numerical simulation of mechanical characteristics. **J. Biomechanics**, v. 26, p. 677–687, 1993.

DUARTE, L. The stimulation of bone growth by ultrasound. **Achieves of Orthopedics and Traumatic Surge**, v. 101, p. 153–159, 1983.

- DUNN, M. L.; TAYA, M. Electromechanical properties of porous piezoelectric ceramics. **J Am Ceram Soc**, v. 76, p. 1697–1706., 1993.
- DUNN, M. L.; TAYA, M. Micromechanics predictions of the effective electroelastic moduli of piezoelectric composites. **Int. J. Solids Structures**, v. 30, p. 161–175, 1993.
- ESHELBY, J. D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. **Proc. R. Soc. Lon.**, A 241, p. 376–396, 1957.
- FERRARI, M. Asymmetry and the high concentration limit of the mori-tanaka effective medium theory. **Mechanics of Materials**, v. 11, p. 251–256, 1991.
- FRIEDENBERG, Z. B.; TBRIGHTON, C. Bioelectric potentials in bone. **The Journal of Bone & Joint Surgery**, v. 48, n. 5, p. 915–923, 1966. Disponível em: <+ <http://dx.doi.org/>>.
- FUKADA, E.; YASUDA, I. On the piezoelectric effect of bone. **Journal of The Physical Society of Japan**, v. 12, p. 1158–1162., 1957.
- FUKADA, E.; YASUDA, I. On piezoelectric effect of collagen. **Journal of The Physical Society of Japan**, v. 3, n. 2, p. 117–121, 1964.
- FYHRIE, D. P.; JEPSEN, K.; HOLLISTER, S. J.; GOLDSTEIN, S. A. Predicting trabecular bone strength and micro-strain using homogenization theory. **Journal of Biomechanics**, v. 22, p. 1014, 1989.
- GRIGOLYUK, E.; FIL'SHTINSKII, L. **Perforated Plates and Shells**. [S.l.]: Nauka, Moscow (in Russian)., 1970.
- GUNDJIAN, A. A.; CHEN, H. L. Standardization and interpretation of the electromechanical properties of bone. **IEEE TRANSACTIONS ON BIOMEDICAL ENGINEERING**, BME-21, n. 3, p. 177–182, 1974.
- GURTIN, E. M. **An Introduction to Continuum Mechanics**. New York, USA: Academic Press, 1981. (Mathematics in Science and EGINEERING, v. 158).
- GUZELSU, N.; DEMIRAY, H. Recent advances: Electromechanical properties and related models of bone tissue. a review. **Int. J. Eng.**, v. 17, p. 813–851, 1979.
- HAHN, T.; KLAPPER, H. **International Tables for Crystallography**. First online edition. [S.l.: s.n.], 2006. 763–795 p.
- HAVERTY, D.; TOFAIL, S. A. M.; STANTON, K. T.; MCMONAGLE, J. B. Structure and stability of hydroxyapatite: Density functional calculation and rietveld analysis. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 71, p. 094103, Mar 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.094103>>.
- HILL, R. A self-consistent mechanics of composite materials. **Mech. Phys. Solids**, Vol. 13, p. 213 – 222, 1965.

HOLLISTER, S. J.; FYHRIE, D. P.; JEPSEN, K. J.; GOLDSTEIN, S. A. Application of homogenization theory to the study of trabecular bone mechanics. **J. Biomechanics**, v. 24, p. 825–839, 1991.

IKEDA, T. **Fundamentals of Piezoelectricity**. [S.l.]: Oxford University Press, Oxford, 1990.

IRE. Ire standards on piezoelectric crystals: Determination of the elastic, piezoelectric, and dielectric constants – the electromechanical coupling factor. **Proceedings of the IRE**, v. 46, p. n. 4, p., 1958.

JUNQUEIRA, L. C. U.; CARNEIRO, J. **Histologia Básica**. 10ed.. ed. [S.l.]: Guanabara Koogan S.A, Rio de Janeiro, RJ., 2004.

KALAMKAROV, A.; ANDRIANOV, I.; DANISHEVS'KYY, V. Asymptotic homogenization of composite materials and structures. **Applied Mechanics Reviews**, v. 62, 2009.

KANTAROVICH, L.; KRILOV, V. **Approximated methods of higher analysis**. 4. ed. [S.l.]: Interscience Publishers, inc, 1964.

KAR-GUPTA, R.; VENKATESH, T. A. Electromechanical response of porous piezoelectric materials. **Acta Materialia**, v. 54, p. 4063–4078., 2006.

KATZ, J.; UKRAINCIIK, K. On the anisotropic elastic properties of hydroxyapatite. **Journal of Biomechanics**, v. 4, n. 3, p. 221 – 227, 1971. ISSN 0021-9290. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021929071900078>>.

LANG, S. B.; TOFAIL, S. A. M.; GANDHI, A. A.; GREGOR, M.; WOLF-BRANDSTETTER, C.; KOST, J.; BAUER, S.; KRAUSE, M. Pyroelectric, piezoelectric, and photoeffects in hydroxyapatite thin films on silicon. **Applied Physics Letters**, v. 98, n. 12, 2011.

LOPEZ-LOPEZ, E.; SABINA, F. J.; BRAVO-CASTILLERO, J.; GUINOVART-DIAZ, R.; RODRIGUEZ-RAMOS, R. Overall electromechanical properties of a binary composite with 622 symmetry constituents. antiplane shear piezoelectric state. **International Journal of Solids and Structures**, v. 42, n. 21-22, p. 5765–5777, 2005.

MARINO, A. A.; BECKER, R. Origin of the piezoelectric effect in bone. **Calif. Tiss. Int.**, v. 8, p. 177–180, 1971.

MARKUSHEVICH, A. **Teoría de las Funciones Analíticas (Tomo I & II)**. [S.l.]: Editorial Mir, Moscow., 1970.

MIARA, B.; ROHAN, E.; ZIDI, M.; LABAT, B. Piezomaterials for bone regeneration design—homogenization approach. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 53, n. 11, p. 2529 – 2556, 2005. ISSN 0022-5096. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022509605000967>>.

MIKATA, Y. Determination of piezoelectric eshelby tensor in transversely isotropic piezoelectric solids. **International Journal of Engineering Science**, v. 38, p. 605–641., 2000.

MILGROM, M.; SHTRIKMAN, S. Linear response of two-phase composites with cross-moduli: Exact universal relations. **Phys. Rev. A**, v. 40, p. 1568–1575., 1989.

MORAES, M. C. C. S. B. **Microestrutura E Propriedades Mecânicas De Compósitos Alumina-Zircônia Para Próteses Dentárias**. Tese (Doutorado) — INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA, 2004.

MORI, T.; TANAKA, K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. **Acta Metall.**, v. 21, p. 571–574., 1973.

NYE, J. F. **Physical Properties of Crystals: Their Representations by Tensors and Matrices**. [S.l.]: University Press, Oxford., 1985.

ONUBR. Plano de ação internacional sobre o envelhecimento (parágrafo 19), madrid. **ONUBR - A Organização das Nações Unidas no Brasil**, 2002.

PARNELL, W. J.; GRIMAL, Q. The influence of mesoscale porosity on cortical bone anisotropy. investigations via asymptotic homogenization. **J. R. Soc. Interface**, v. 6, p. 97–109., 2009.

PARTON, V.; KUDRYAVTSEV, B. **Engineering Mechanics of Composite Structures**. [S.l.]: CRC Press, Boca Raton, 1993.

PIMENTA, M. P. **Fundamentos da Mecânica dos Sólidos e das Estruturas**. [S.l.: s.n.], 2006.

POBEDRYA, B. E. **Mechanics of Composite Materials**. [S.l.]: Izd-vo MGU, 1984.

PRADO, E. B. T.; ROCHA, F. C.; ROCHA, G. L.; MATOS, L.; SAMPAIO, M. S. M.; SILVA, U. P. O método de homogeneização assintótica aplicado na obtenção dos coeficientes efetivos de um compósito elástico linear. **Cadernos de Engenharia de Estruturas**, v. 12, p. p. 67 – 86, 2010.

QUEIROZ, W. F. **Desenvolvimento de Métodos Construtivos e de Novos Materiais Empregados na Confecção de Cartuchos de Próteses de Membros Inferiores**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2008.

RHO, J.-Y.; KUHN-SPEARING, L.; ZIOUPOS, P. Mechanical properties and the hierarchical structure of bone. **Medical Engineering & Physics**, v. 20, n. 2, p. 92 – 102, 1998. ISSN 1350-4533. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1350453398000071>>.

SANCHEZ-PALENCIA, E. **Non-Homogeneous Media and Vibration Theory. In: Lecture Notes in Physics, 127**. [S.l.]: Springer-Verlag. New York, 1980.

SEVOSTIANOV, I.; KACHANOV, M. On the relationship between microstructure of the cortical bone and its overall elastic properties. **International Journal of Fracture**, v. 92, p. L3–L8, 1998.

SEVOSTIANOV, I.; KACHANOV, M. Impact of the porous microstructure on the overall elastic properties of the osteonal cortical bone. **Journal of Biomechanics**, v. 33, p. 881–888., 2000.

SILVA, C.; THOMAZINI, D.; PINHEIRO, A.; ARANHA, N.; FIGUEIRO, S.; GOES, J.; SOMBRA, A. S. B. Collagen-hydroxyapatite films: piezoelectric properties. **Mater. Sci. Eng.**, B86, p. 201–218, 2001.

SILVA, O. L. **Estudo do mecanismo de ação do ultra-som na estimulação do crescimento ósseo**. Dissertação (Mestrado) — EESC, Programa de Pós-Graduação Interunidades Bioengenharia, 1987.

SILVA, U. P. **Um estudo do Método de Homogeneização Assimptótica visando aplicações em estruturas ósseas**. Dissertação (Mestrado) — Bioengenharia, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

STROM, O.; BORGSTRÖM, F.; KANIS, J. A.; COMPSTON, J.; COOPER, C.; MCCLOSKEY, E. U.; JÖNSSON, B. Osteoporosis: burden, health care provision and opportunities in the eu. **Archives of Osteoporosis**, v. 6 (1-2), p. 59–155, 2011.

SWAN, C.; LAKES, R.; BRAND, R.; STEWART, K. Micromechanically based poroelastic modeling of fluid flow in haversian bone. **Journal of Biomechanical Engineering**, v. 125, p. Swan CC, Lakes RS, Brand RA, Stewart KJ. J Biomech Eng 2003;125:25–37., 2003.

TEBALDI, A.; JUNIOR, V. L.; COELHO, L. S. Detecção de falhas em estruturas inteligentes usando otimização por nuvem de partículas: Fundamentos e estudo de casos. **Revista Controle & Automação**, v. 17, n. 3, 2006.

TOFAIL, S. A. M.; HAVERTY, D.; STANTON, K. T.; MCMONAGLE, J. B. Structural order and dielectric behaviour of hydroxyapatite. **Ferroelectrics**, v. 319, n. 1, p. 117–123, 2005. Disponível em: <<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00150190590965523>>.

YINGZHEN, L.; MINGGEN, C.; YI, Z. Representation of the exact solution for infinite system of linear equations. **Applied Mathematics and Computation**, v. 168(1), p. 636–650, 2005.

ZHANG, Y.; GANDHI, A. A.; ZEGLINSKI, J.; GREGOR, M.; TOFAIL, S. A. M. A complementary contribution to piezoelectricity from bone constituents. **Dielectrics and Electrical Insulation, IEEE Transactions on**, v. 19, n. 4, p. 1151–1157, 2012. ISSN 1070-9878.

ZOHDI, T. I.; WRIGGERS, P. **An introduction to computational micromechanics. In Lectures Notes in Applied and Computational Mechanics.** 2. ed. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2008.