

Sabrina Mascarenhas Vargas

**Estimativa das propriedades elásticas do esmalte dentário humano via
Homogeneização computacional**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Orientadora: Prof^a. D.Sc. Flávia de Souza Bastos

Coorientadora: Prof^a. D.Sc. Michèle C. Resende Farage

Juiz de Fora

2016

Sabrina Mascarenhas Vargas,

Estimativa das propriedades elásticas do esmalte dentário humano via Homogeneização computacional/
Sabrina Mascarenhas Vargas. – Juiz de Fora: UFJF/MMC, 2016.

XVII, 117 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadora: Flávia de Souza Bastos

Coorientador: Michèle C. Resende Farage

Dissertação (mestrado) – UFJF/MMC/Programa de Modelagem Computacional, 2016.

Referências Bibliográficas: p. ?? – ??.

1. Esmalte Dentário. 2. Homogeneização por Expansão Assintótica. 3. Técnica Multiescala. 4. Propriedades Mecânicas. 5. Ortotropia. I. de Souza Bastos, Flávia *et al.*. II. Universidade Federal de Juiz de Fora, MMC, Programa de Modelagem Computacional.

Sabrina Mascarenhas Vargas

**Estimativa das propriedades elásticas do esmalte dentário humano via
Homogeneização computacional**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Aprovada em 4 de abril de 2016.

BANCA EXAMINADORA

Prof^ª. D.Sc. Flávia de Souza Bastos - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof^ª. D.Sc. Michèle C. Resende Farage - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof^ª. D.Sc. Priscila Vanessa Zabala Capriles Goliatt
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof^ª. D.Sc. Cláudia Machado de Almeida Mattos
Universidade Federal do Espírito Santo

Dedico este trabalho a todas as pessoas que direta e indiretamente fizeram parte da minha vida e me ajudaram para que eu terminasse com êxito. Em especial, à minha mãe pelo cuidado, dedicação e amor. Ao meu irmão por todo companherismo e amor e, por fim, ao meu querido pai.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço à Deus pela dádiva da vida e por, juntamente, com os espíritos amigos me ampararem em todos os momentos, me ajudando a me manter no equilíbrio e no caminho do bem.

Agradeço à minha família, em especial à minha mãe e ao meu irmão que sempre estiveram do meu lado, me apoiando e me dando todo o suporte necessário para que eu conseguisse alcançar todos os meus objetivos e sonhos sem medir esforços. Sem vocês eu não seria nada! Deixo aqui o meu eterno obrigada!

Aos meus anjos, que mesmo no plano espiritual, me amparam e me ajudam nessa caminhada terrena. Vocês, pai e vô Ci, são a minha motivação!

À minha querida orientadora, Flávia, por ter acreditado em mim e ter me dado a oportunidade de aprender coisas novas. Você sempre será lembrada pela sua sinceridade, pela sua capacidade de ser mestre, de orientar, de guiar, assim como uma mãe faz com os seus filhos. Obrigada!

À querida coorientadora, Michèle, que esteve sempre disposta a ajudar e depositou toda a confiança em mim! Obrigada!

Às minhas amigas e à família do Piauí, que me fazem ter a certeza de que a melhor coisa que podemos ter na vida são amizades sinceras e que nos trazem alegria. Vocês são demais! Obrigada pelas risadas e por cada momento de felicidade!

Às minhas amigas de Juiz de Fora, que sempre estão presentes, tanto nos momentos bons, quanto nos difíceis, me oferecendo ouvidos, paciência, conselhos, companheirismo e muito amor!

Ao meu amor, Luciano, por toda a dedicação, pela convivência que me deixa segura e calma para continuar até o fim! Obrigada por fazer parte da minha vida e por ser essa pessoa tão especial! "Do que vale o paraíso sem o amor?"

Aos amigos do "prédio azul" por toda a convivência, pela paciência, pelas ajudas e principalmente por toda a alegria que vocês me proporcionaram. Vou sentir falta dos cafezinhos, dos barzinhos e de cada abraço amigo!

Aos professores e técnicos do PGMC por tornarem possível este trabalho.

À UFJF agradeço pelos auxílios disponibilizados e à CAPES pela Bolsa de estudo, que foram fundamentais para meu desenvolvimento acadêmico e pessoal.

À CAPES pela bolsa que possibilitou o andamento deste projeto.

*"Ando devagar porque já tive
pressa e levo esse sorriso porque
já chorei demais. Hoje me
sinto mais forte, mais feliz, quem
sabe? Só levo a certeza de
que muito pouco eu sei. Nada
sei. Conhecer as manhas e as
manhãs, sabor das massas e das
maçãs. É preciso amor pra poder
pulsar, é preciso paz pra poder
sorrir, é preciso a chuva para
florir. Penso que cumprir a vida
seja simplesmente compreender a
marcha e ir tocando em frente."*

Renato Teixeira

RESUMO

Visto que o esmalte dentário é um tecido não inervado e avascular, que está constantemente sob a influência de carregamento cíclico (funcional ou parafuncional) e que o mesmo não tem capacidade de regeneração, torna-se importante o estudo sobre as propriedades mecânicas desse tecido. Possui uma microestrutura única, que o faz apresentar propriedades mecânicas excelentes, porém o mesmo se apresenta frágil, com pouca capacidade de suportar deformação plástica antes da sua fratura. Alguns testes experimentais de indentação tentam entender o comportamento mecânico desse composto, porém a complexidade desse comportamento e as diferenças de técnicas fazem com que os módulos de elasticidade para a hidroxiapatita, a matriz orgânica e o módulo efetivo do esmalte dentário tenham resultados muito variados na literatura. O mesmo se dá para as simulações multiescala de modelos para o esmalte dentário. Diante disso, esse estudo tem como o objetivo utilizar a modelagem multi-escala em 2D para a determinação dos tensores de propriedades mecânicas efetivas do esmalte dentário, através da técnica de homogeneização por expansão assintótica (HEA). Dentre as conclusões do trabalho têm-se que: 1- O esmalte dentário pode ser representado por um meio homogêneo equivalente, uma célula unitária representativa repetitiva; 2- Os modelos propostos nesse estudo têm comportamento ortotrópico; 3- Embora haja limitações relacionadas às simplificações mecânicas e geométricas adotadas, os resultados obtidos encorajam aplicações mais realistas e estudos mais aprofundados acerca da microestrutura do material em questão.

Palavras-chave: Esmalte Dentário. Homogeneização por Expansão Assintótica. Técnica Multiescala. Propriedades Mecânicas. Ortotropia.

ABSTRACT

Whereas tooth enamel is not an innervated neither vascular tissue which is constantly under the influence of cyclical loading (functional or parafunctional) and that its tissue has no capacity for regeneration, it becomes important to study the mechanical properties of the enamel. It has an unique microstructure, which makes it exhibit excellent mechanical properties, but it appears fragile, with little ability to withstand plastic deformation prior to fracture. Some experimental indentation tests attempt to understand the mechanical behavior of this composite, but the complexity of its behavior and the different techniques imply in the modulus of elasticity for the hydroxyapatite, the organic matrix and the effective modulus of dental enamel showing very different results in the literature. The same occurs for multiscale simulations of dental enamel models. Thus, this study aims 2D multi-scale modeling by Asymptotic Expansion Homogenization (AEH) technic to determine the mechanical properties effective tensor of dental enamel. The conclusions of this study shows: 1- The enamel can be represented by an equivalent homogeneous medium, a repetitive representative unit cell; 2- The models proposed in this study present orthotropic behavior; 3- Although there are some limitations due to the mechanical and geometric simplifications adopted, the results suggest more realistic applications and further studies on the microstructure of the material in question.

Keywords: Tooth Enamel. Asymptotic Expansion Homogenization. Multiscale technique. Mechanicals properties. Orthotropia.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Objetivos	21
1.1.1	<i>Objetivos específicos</i>	21
1.2	Escopo	21
2	ESMALTE DENTÁRIO	23
2.1	Microestrutura do esmalte dentário	23
2.2	Hidroxiapatita (HAp)	25
2.3	Matriz orgânica	26
3	MODELO MECÂNICO LINEAR PARA SÓLIDOS	29
3.1	Tensão σ	29
3.2	Deformação específica	31
3.3	Coefficiente de Poisson	33
3.4	Elasticidade linear ou lei de Hooke	34
3.5	Módulo de elasticidade (E)	35
3.6	Materiais compósitos e equações constitutivas	36
3.6.1	<i>Materiais compósitos</i>	36
3.6.2	<i>Material anisotrópico linear elástico</i>	37
3.6.3	<i>Material monoclinico linear elástico</i>	38
3.6.4	<i>Material ortotrópico linear elástico</i>	39
3.6.5	<i>Material transversalmente isotrópico linear elástico</i>	41
3.6.6	<i>Material isotrópico linear elástico</i>	42
4	TESTES EXPERIMENTAIS ATRAVÉS DE INDENTAÇÃO PARA O ESMALTE DENTÁRIO	44
5	MODELOS MULTIESCALA DO ESMALTE DENTÁRIO	52
6	ANÁLISE COMPUTACIONAL DA ESTRUTURA DO ESMALTE DENTÁRIO	65

6.1	Descrição Geral do método	65
6.2	Programa de elementos finitos Abaqus	67
6.2.1	<i>Célula unitária representativa dos modelos</i>	67
6.2.2	<i>Malha de elementos finitos</i>	68
6.3	Programa HEA2D	70
6.3.1	<i>Subrotina LESCREEVE</i>	73
6.4	Testes com HEA2D	74
6.5	Propriedades de materiais	80
7	Resultados e Discussão.....	81
7.1	Análise de convergência	81
7.2	Modelo 1	82
7.2.1	<i>Geometria</i>	82
7.2.2	<i>Análise de convergência das malhas do Modelo 1</i>	83
7.2.3	<i>Resultados</i>	84
7.3	Modelo 2	85
7.3.1	<i>Geometria</i>	85
7.3.2	<i>Análise de convergência das malhas do Modelo 2</i>	86
7.3.3	<i>Resultados</i>	87
7.4	Discussão dos Resultados	89
8	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS.....	94
	APÊNDICES	101
A.1	Código em Matlab	102
A.2	Matrizes com resultados	115
A.2.1	<i>Modelo 1, caso 2</i>	115
A.2.2	<i>Modelo 1, caso 3</i>	115
A.2.3	<i>Modelo 1, caso 4</i>	115
A.2.4	<i>Modelo 1, caso 5</i>	116
A.2.5	<i>Modelo 2, caso 2</i>	116
A.2.6	<i>Modelo 2, caso 3</i>	116
A.2.7	<i>Modelo 2, caso 4</i>	117
A.2.8	<i>Modelo 2, caso 5</i>	117

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

2.1	Desenho esquemático do corte transversal do órgão dentário, adaptado de Ghadimi <i>et al.</i> (2013).	24
2.2	Imagem por microscopia da microestrutura do esmalte dentário. O detalhe em vermelho mostra uma unidade prismática (R) e IR significa região interprismática. Modificado de He e Swain (2008).	25
2.3	Desenho esquemático da estrutura hierárquica do esmalte dentário retirado do artigo He e Swain (2008).	25
2.4	Imagens representativas dos prismas e os cristais HAp com morfologia hexagonal na sua seção transversal.Retirado de Lu <i>et al.</i> (2012)	27
2.5	Desenho esquemático extraído de Ghadimi <i>et al.</i> (2013) das várias escalas do esmalte dentário.	27
3.1	Imagem (a) representação de um corpo sujeito a carga externa $d\mathbf{F}$ na área infinitesimal dA . Imagem (b) representação da decomposição do vetor de tensão. Fonte: Próprio autor.	30
3.2	Desenho representativo das componentes do tensor de tensões em um cubo, que representa um ponto material no corpo. Fonte: Próprio autor.	31
3.3	Desenho representativo de rotação pura. Fonte: Próprio autor.	32
3.4	Desenho representativo de cisalhamento puro. Fonte: Próprio autor.	32
3.5	Desenho representativo de cisalhamento simples. Fonte: Próprio autor.	32
3.6	Representação esquemática da deformação lateral. Fonte: Próprio autor.	34
3.7	Representação do gráfico tensão x deformação.	35
3.8	Desenho esquemático da composição de um material compósito (formado por matriz e reforços). Fonte: próprio autor.	37
3.9	Representação esquemática do comportamento de um material monoclinico.	39
3.10	Representação esquemática do comportamento de um material ortotrópico. Fonte: próprio autor.	40
3.11	Representação esquemática do comportamento de um material transversalmente isotrópico. Fonte: próprio autor.	41

5.1	Modelo multiescala do esmalte dentário proposto por Spears (1997).	54
5.2	Desenho esquemático da deformação do esmalte dentário nas direções paralela e perpendicular em relação ao eixo dos cristais, adaptado de Spears (1997).	54
5.3	Representação do modelo microscópico por eles adotados para a análise numérica das propriedades dos componentes do esmalte. Retirado de He e Swain (2008).	55
5.4	Modelo mecânico representativo da microestrutura do esmalte dentário adotado por Xie <i>et al.</i> (2009).	56
5.5	Representação de várias escalas associadas ao sistema "dentário" com malhas de elementos finitos para esmalte dentário (microescala), dente (mesoescala), suporte no osso alveolar (macroescala). Extraído de Miura <i>et al.</i> (2009). . .	57
5.6	Representação em nanoescala dos volumes elementares representativos (VER) adotados por An <i>et al.</i> (2012).	58
5.7	Representação em microescala do VER adotado por An <i>et al.</i> (2012).	58
5.8	Descrição esquemática da microestrutura escalonada desenvolvida por Bar-On e Wagner (2012).	59
5.9	Modelo laminado 2D da estrutura do esmalte dentário, incluindo camadas de prisma e interprismas anisotrópicos (Bar-On e Wagner, 2012).	60
5.10	Desenho esquemático de um compósito de duas escala adaptado Bar-On e Wagner (2012b).	60
5.11	Representação esquemática dos modelos 2D e 3D da microestrutura do esmalte dentário adotado por (da Cunha <i>et al.</i> , 2012).	61
5.12	Esquema representativo da escala hierárquica do esmalte dentário, que requer dois níveis de homogeneização com modelos anisotrópicos separados (Lu <i>et al.</i> , 2012).	62
5.13	Desenho esquemático de modelo, no qual as fibras hexagonais cinza escuro representam a hidroxiapatita e a fina camada entre elas de cor cinza claro representa a matriz orgânica (Scheider <i>et al.</i> , 2015).	63
5.14	Célula unitária representativa da microestrutura fibrosa nos três níveis similares entre si. Cinza claro: matriz proteica e Cinza escuro: mineral (Scheider <i>et al.</i> , 2015).	63

6.1	Esquemática através de fluxograma da metodologia do estudo numérico realizado neste trabalho.	66
6.2	Representação esquemática do VER, menor volume representativo que se repete periodicamente na microescala do esmalte dentário, para o Modelo1. As formas de buraco de fechadura são as representações dos prismas de hidroxiapatita.	68
6.3	Célula unitária periodicamente repetitiva para modelo simplificado do esmalte dentário- Modelo2.	68
6.4	Imagem a- Modelo 1 2D 1x1 representativo da célula unitária repetitiva da microscopia do esmalte dentário. As partes coloridas são as inclusões de prisma de hidroxiapatita, e as partes cinzas são as finas camadas de matriz orgânica; imagem b- Modelo 2- modelo simplificado da microestrutura do esmalte dentário.	69
6.5	Imagem a- Malha de elementos finitos gerada no Modelo1 através Abaqus; imagem b-Malha gerada no Modelo 2 através do Abaqus.	69
6.6	Imagem do modelo adotado com as linhas traçadas dentro do modelo e divisões para auxiliar a geração de malhas. A região com cor vermelha indica a matriz orgânica e as partes em cinza as inclusões de prisma de hidroxiapatita.	70
6.7	Modelo esquemático da célula unitária representativa da microestrutura do esmalte dentário (esquerda) que se repete periodicamente (direita).	71
6.8	Representação esquemática do material heterogêneo x , quando $\epsilon \rightarrow 0$, e a célula unitária y representativa da microescala. Retirado de Pinho-da Cruz <i>et al.</i> (2009).	72
6.9	Representação da estratégia utilizada para imposição das condições de contorno periódicas.	73
6.10	Geometria (a) e malha de 224 elementos finitos (b) do modelo com inclusão circular central, para teste do programa HEA2D.	75
6.11	Geometria (a) e malha de 270 elementos finitos (b) do modelo com duas inclusões, sendo uma central e a outra particionada nos quatro cantos, para teste do programa HEA2D.	76
6.12	Geometria (a) e malha de 200 elementos finitos (b) do modelo com inclusão laminar central, para teste do programa HEA2D.	77

6.13	Geometria (a) e malha de 200 elementos finitos (b) do modelo com inclusão laminar lateral, para teste do programa HEA2D.	79
7.1	Resumo das características geométricas do Modelo 1 (a), com a sua célula representativa (b) e malha de elementos finitos (c).	82
7.2	Curva de convergência da relação entre a norma frobenius (N_d) e o número de graus de liberdade (NGL) obtida para o Modelo 1, caso 1.	83
7.3	Resumo das características geométricas do Modelo 2 (a), com a sua célula representativa (b) e malha de elementos finitos (c).	86
7.4	Curva de convergência da relação entre o número de graus de liberdade (NGL) e da norma frobenius (N_d) N_d obtida para o Modelo 2.	86

LISTA DE TABELAS

4.1	Módulo elástico do esmalte a partir de diferentes métodos de medidas	51
5.1	Módulo elástico do esmalte a partir de simulação multiescala	64
7.1	Propriedades mecânicas adotadas para os componentes do material e proporção volumétrica dos Modelos 1 e 2.	81
7.2	Síntese dos Resultados Modelo 1	89
7.3	Síntese dos Resultados Modelo 2	89

LISTA DE ABREVIACOES E SMBOLOS

LISTA DE ABREVIACOES

CCP	Condio de contorno peridica
GLs	Graus de liberdade
HAp	Hidroxiapatita
HEA	Homogeneizao por Expanso Assinttica
HEA2D	Programa Homogeneizao por Expanso Assinttica em 2D
JEC	Juno esmalte-cimento
JED	Juno esmalte-dentina
MEF	Mtodo dos Elementos Finitos
NGL	Nmero de Graus de Liberdade
VER	Volume elementar representativo
UFJF	Universidade Federal de Juiz de Fora

LISTAS DE SMBOLOS

E	Mdulo de Elasticidade ou de Young
$E_1; E_2; E_3$	Deformao linear x tenso normal
ϵ	Deformao
$G_13; G_12; G_23$	deformao angular x tenso tangencial
ν	Coefficiente de Poisson
$\rho_{2311}; \rho_{1322}; \rho_{1311}; \rho_{1211}; \rho_{2322}; \rho_{1322}; \rho_{1233}$	deformao angular x deformao linear
$\rho_{1123}; \rho_{2213}; \rho_{3312}; \rho_{2223}; \rho_{3323}$	deformao linear x deformao angular
$\rho_{1312}; \rho_{2312}; \rho_{2313}; \rho_{1323}; \rho_{1223}$	deformao angular x deformao angular
σ	Tenso

1 INTRODUÇÃO

Os dentes constituem verdadeiros órgãos, compostos por vários tecidos, sendo estes do mais externo para o mais interno: o esmalte, o cemento, a dentina e a polpa. Além disso, compõem o Sistema Estomatognático (conjunto de estruturas bucais que desenvolvem funções comuns, tendo como característica constante a participação da mandíbula) e estão localizados dentro da cavidade oral (boca). São classificados quanto à sua posição na cavidade oral; ou forma e função e com isso podem ser inferiores ou superiores; incisivos (central e lateral), caninos, pré-molares e molares. Humanos adultos possuem entre 28 a 32 dentes (incluindo os sisos - terceiros molares). Esses órgãos desempenham várias funções, sendo a mastigação a função mais comumente associada à dentição humana, mas os dentes são também essenciais para uma fonação adequada, deglutição e respiração (Douglas, 2002; Nanci, 2013; Okeson, 2013).

O órgão dentário (ou dental) é substituído apenas uma vez na vida no processo de troca de dentição e os dentes permanentes ficam submetidos a carregamentos cíclicos provenientes dos hábitos funcionais e parafuncionais durante toda a vida. Uma possível consequência desse fato é a deterioração que qualquer estrutura mecânica pode sofrer devido a esse carregamento repetitivo, tanto por sobrecarga de tensão e propagação de trincas, quanto por fadiga mecânica (da Cunha *et al.*, 2012; Nanci, 2013; Okeson, 2013). Essas forças agem nos dentes produzindo diferentes respostas que podem gerar deformações e comprometer sua integridade com o passar do tempo (Anusavice e Philips, 2005).

Devido à necessidade de se conservar as estruturas dentárias por mais tempo e na tentativa de se desenvolverem materiais odontológicos bioinspirados que mimetizem o esmalte dentário, tornaram-se essenciais os estudos sobre as propriedades físicas e mecânicas dos materiais envolvidos (Scheider *et al.*, 2015). Nesse contexto, é importante compreender bem as características mecânicas e físicas do esmalte dentário, tecido que está mais diretamente ligado ao processo de mastigação e com isso recebe mais influência

das cargas dessa atividade funcional.

O esmalte dentário pode ser considerado um compósito biológico, formado por basicamente dois materiais distintos com relação às propriedades físicas, químicas e mecânicas (Sajewicz, 2006; Xie *et al.*, 2009). Possui por volta de 96% de material inorgânico, sendo este formado por prismas de cristais de hidroxiapatita ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) e 4% de material orgânico, matriz extracelular (proteínas, sendo 90% de amelogeninas, lipídeos, glicose e água) (Anusavice e Philips, 2005; Katchburian e Arana, 2012; Bhaskar, 1989; Nanci, 2013; Gibson *et al.*, 2001).

Por possuir alto conteúdo mineral, o esmalte dentário tem uma microestrutura única e é o tecido mais duro do organismo, capaz de sustentar as forças mecânicas aplicadas durante a mastigação. Esse material tem atraído interesse considerável por parte dos cientistas de materiais e profissionais clínicos devido às suas excelentes propriedades mecânicas, com relação à sua capacidade de suportar carga excessiva (Habelitz *et al.*, 2001; O'Brien *et al.*, 2014; He e Swain, 2008; Xie *et al.*, 2009). Porém, o mesmo se apresenta frágil, com pouca capacidade de suportar deformação plástica¹ antes da sua fratura (Giannini *et al.*, 2004).

Para se caracterizarem, eficientemente, as propriedades mecânicas dos dentes tem se tornado cada vez mais comum a execução de testes de dureza instrumentada através de micro ou nanoindentação. Nesses testes os valores encontrados para o esmalte dentário apresentam uma alta discrepância, dependendo do uso de diferentes técnicas e tipos de amostras. Além disso, observam-se diferenças significativas entre esmalte e hidroxiapatita sinterizada² (HAp) (na sua forma pura) na relação tensão-deformação. Embora o principal componente do esmalte seja a hidroxiapatita, o módulo de elasticidade e dureza daquele são menores (da Cunha *et al.*, 2012; He e Swain, 2007a), certamente devido à existência de uma rica camada orgânica em meio aos cristais de hidroxiapatita (He e Swain, 2007b).

Paralelamente, vários estudos vêm desenvolvendo modelos mecânicos multiescala do esmalte dentário para simulação numérica e analítica, buscando diminuir essa divergência

¹Deformação plástica é quando o material submetido a uma determinada tensão se deforma permanentemente, mantendo a deformação mesmo quando o carregamento é retirado.

²A sinterização é o processo de compactação e formação de uma massa sólida de material através de calor e/ou pressão sem derretê-lo ao ponto de liquefação.

de valores encontrados para o módulo efetivo de propriedades mecânicas desse tecido, assim como compreender melhor o comportamento da microestrutura e a influência dos seus constituintes na macroescala (An *et al.*, 2012; Bar-On e Wagner, 2012,b; da Cunha *et al.*, 2012; Farage *et al.*, 2009; Ge *et al.*, 2005; Ghadimi *et al.*, 2013; He e Swain, 2008; Lu *et al.*, 2012; Scheider *et al.*, 2015; Xie *et al.*, 2009; Miura *et al.*, 2009). Um exemplo de técnica multiescala que vem sendo utilizada há décadas com sucesso para aplicação em materiais compósitos que apresentam estrutura periódica ou repetitiva é a Homogeneização por Expansão Assintótica (HEA)³ (Chung *et al.*, 2001; Sanchez-Palencia, 1986).

Na tentativa de se buscar entender melhor como se dá o comportamento mecânico do esmalte dentário no âmbito elástico linear e estimar as propriedades mecânicas elásticas desse tecido através da técnica multiescala HEA, a pesquisa foi baseada nas hipóteses de que o esmalte dentário, por apresentar microestrutura periódica, pode ser representado por um meio homogêneo equivalente com comportamento ortotrópico e que o módulo de elasticidade efetivo do esmalte dentário é menor do que o da Hidroxiapatita sinterizada.

O programa HEA2D desenvolvido no Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional da UFJF (Quintela, 2011), que emprega a técnica HEA via método dos elementos finitos (MEF), foi utilizado nesta pesquisa para as simulações a partir de modelos geométricos representativos da microestrutura do esmalte dentário gerados por meio do *software* Abaqus (programa comercial de elementos finitos) a fim de se estimar as propriedades elásticas do esmalte dentário, visto que na literatura os valores encontrados são muito divergentes.

³A Homogeneização por Expansão Assintótica (HEA) é uma técnica multiescala empregada ao cálculo de propriedades efetivas de meios contínuos com estrutura periódica. As principais vantagens desta técnica são a redução do tamanho do problema a resolver e a possibilidade de se empregar uma propriedade homogeneizada que guarda informações da microestrutura heterogênea. Quando associada ao Método dos Elementos Finitos (MEF), a HEA demanda o emprego de malhas que permitam a imposição de condições de contorno periódicas.

1.1 Objetivos

O presente trabalho teve como objetivo investigar o comportamento do esmalte dentário no âmbito da elasticidade linear consistentemente com os seus constituintes microestrutural.

1.1.1 *Objetivos específicos*

- 1- Construir um modelo bidimensional de elementos finitos em multiescala suficientemente aproximado à microestrutura do esmalte dentário;
- 2- Verificar se o tensor constitutivo efetivo calculado apresenta características de ortotropia e se o esmalte dentário é significativamente diferente da HAp;
- 3- Validar o uso da HEA como técnica para validar o estudo do biocompósito esmalte dentário.

1.2 Escopo

Além do presente capítulo, esta dissertação encontra-se organizada em outros oito capítulos. Primeiramente, no capítulo 2 faz-se uma breve introdução do que é o esmalte dentário. Logo após abordada-se sobre a microestrutura desse tecido, bem como suas características, componentes, morfologia e função. O capítulo 3 descreve o do modelo mecânico para sólidos, visto que o estudo simula numericamente as propriedades mecânicas do esmalte dentário admitindo comportamento elástico linear. Alguns conceitos básicos são apresentados, tais como: tensão; deformação; coeficiente de poisson; Lei de Hooke; módulo de elasticidade e propriedades de material. Ainda no âmbito da revisão bibliográfica, o capítulo 4, trata dos testes experimentais para obtenção das propriedades mecânicas efetivas do esmalte dentário, assim como, de alguns resultados encontrados. No capítulo seguinte, 5, explica-se o que é modelagem multiescala e são apresentados alguns modelos propostos pela literatura. A metodologia do estudo, assim como os modelos geométricos propostos e as ferramentas utilizadas para as simulações são apresentados

no capítulo 6. O capítulo 7 traz todos os resultados encontrados nas simulações que são discutidos, baseando-se no referencial bibliográfico. Por fim, o capítulo 8 traz as conclusões e as perspectivas futuras de trabalho.

2 ESMALTE DENTÁRIO

O esmalte dentário é um tecido orgânico, sendo a camada mais externa da coroa do órgão dentário, a que usualmente é vista e faz limite com a dentina, na sua superfície interna e com o cimento, no colo do dente. Juntamente com a dentina, a polpa dentária e o cimento forma o dente. Sua cor pode variar de amarelo claro ao branco acinzentado. É um tecido translúcido e sua espessura varia ao longo da superfície, sendo mais espessa (≈ 2.5 mm) nas cúspides (cada uma das pontas formadas na extremidade de atrito, contato, dos dentes) e mais fina (≈ 1.0 mm) na junção amelo-cementário ou esmalte-cimento (JEC) (Katchburian e Arana, 2012; Lu *et al.*, 2012; Nanci, 2013). A figura representativa do órgão dentário, juntamente com os tecidos que o constituem, pode ser observada na figura 2.1.

Os ameloblastos são as células responsáveis pela formação do esmalte e desaparecem ao passo que o dente erupciona na cavidade oral. Em função disso, o esmalte dentário é um tecido não vital e sem sensibilidade, não podendo ser regenerado em caso de perda de estrutura. Em contrapartida, tal estrutura possui alto grau de complexidade de organização da sua microestrutura, assim como alto grau de mineralização (Nanci, 2013). As principais funções do esmalte dentário são: suportar os esforços mastigatórios, proteger a dentina (tecido subjacente ao esmalte) e trocar constantemente íons com a saliva, interagindo com o meio bucal (Nanci, 2013).

2.1 Microestrutura do esmalte dentário

O esmalte dentário é constituído na sua microestrutura por prismas de hidroxiapatita (HAp) unidos por uma substância cimentante, chamada matriz orgânica e a mineralização do esmalte começa imediatamente após o início de secreção da matriz orgânica (Junqueira e Carneiro, 2008).

O prisma de HAp, que compõe a parte mineral do esmalte dentário, é a sua unidade

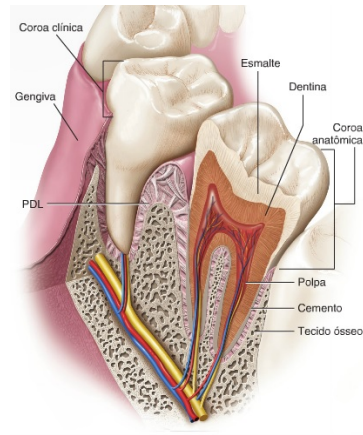


Figura 2.1: Desenho esquemático do corte transversal do órgão dentário, adaptado de Ghadimi *et al.* (2013).

primária estrutural. Os prismas de esmalte se originam, aproximadamente, em ângulo reto com a superfície da dentina. Nas áreas cervicais têm curso aproximadamente horizontal, próximos a bordas incisais ou pontas de cúspides mudam sua direção gradualmente, tornando-se oblíquos até quase verticais. A espessura de matriz orgânica que intercala os prismas é de, aproximadamente, 2nm (Bhaskar, 1989; Douglas, 2002; Nanci, 2013).

Imagens obtidas por microscopia de varredura ou de força atômica mostram o aspecto morfológico dos prismas de esmalte semelhantes a buracos de fechadura, com cabeça circular larga e cauda fina, diâmetros de aproximadamente $7\mu\text{m}$, unidos entre si por uma fina camada de matriz orgânica e que se repetem periodicamente no plano transversal (Habelitz *et al.*, 2001; He e Swain, 2008; O'Brien *et al.*, 2014; Xie *et al.*, 2009; Ge *et al.*, 2005).

A figura 2.2 mostra imagem de microscopia eletrônica do esmalte dentário e é possível observar as regiões de prismas (R) e interprismas (IR). Assim como a figura 2.3, na qual pode ser vista a forma dos prismas de esmalte descrita acima, onde a imagem (B) mostra os prismas (R), formados por cristais de HAp, no corte transversal e a imagem (C) mostra os prismas (R) com as regiões interprismáticas (IR), formadas por matriz e cristais, vista pelo corte longitudinal.

O esmalte dentário é considerado um material fibra-reforçado altamente complexo e hierárquico e sua microestrutura vem sendo investigada experimentalmente, mas ainda não está totalmente compreendida. Além disso, não é de interesse apenas para biólogos,

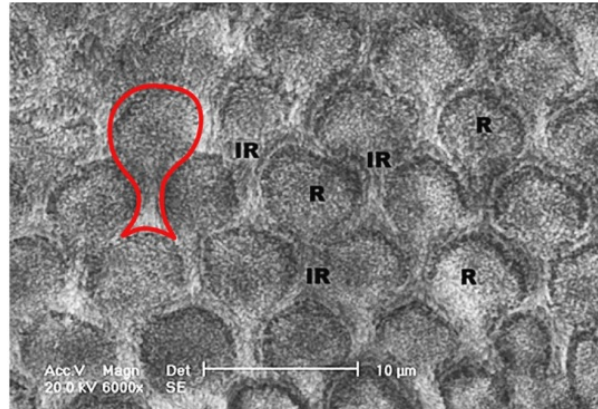


Figura 2.2: Imagem por microscopia da microestrutura do esmalte dentário. O detalhe em vermelho mostra uma unidade prismática (R) e IR significa região interprismática. Modificado de He e Swain (2008).

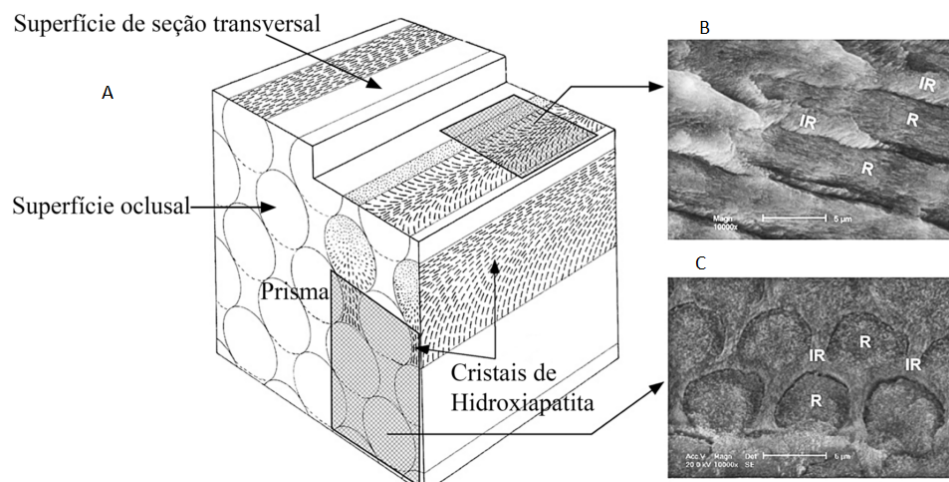


Figura 2.3: Desenho esquemático da estrutura hierárquica do esmalte dentário retirado do artigo He e Swain (2008).

veterinários e dentistas, mas também para engenheiros, visto que tal tecido possui uma alta resistência à fratura devido à sua microestrutura e isso pode permitir o desenvolvimento de aprimorados materiais bioinspirados (Scheider *et al.*, 2015).

2.2 Hidroxiapatita (HAp)

A composição inorgânica ou mineral do esmalte dentário é formada por cristais de hidroxiapatita ou carbonatoapatita do tipo fitas longas (medindo de 20nm a 70nm de largura e 25nm a 30nm de espessura), possuem forma hexagonal no eixo transversal, se rearranjam de forma diferenciada para formarem os prismas de esmalte e estão, na

maioria, paralelos ao eixo longitudinal quando dentro dos prismas (Lu *et al.*, 2012; Nanci, 2013).

Em volta dos prismas existe uma região chamada interprismática, na qual os cristais minerais se dispõem não mais paralelamente ao eixo longitudinal prismático. Nessa região também se encontra a matriz orgânica (Nanci, 2013).

A figura 2.4 apresenta imagens obtidas por microscopia eletrônica de varredura dos prismas do esmalte após condicionamento ácido, onde a imagem (a) apresenta a forma da seção transversal dos prismas com morfologia semelhante a buraco de fechadura e a imagem (b) seção transversal das fibras de HAp, compostas por cristais HAp, dentro dos prismas de esmalte.

A figura 2.5 representa o desenho esquemático das várias escalas dos componentes do esmalte dentário. No âmbito micrométrico, a fase inorgânica do esmalte consiste de estruturas em forma de buraco de fechadura, são os prismas (imagem c) alinhados paralelamente, que se repetem periodicamente e estão envoltos por uma camada de matriz orgânica (imagem b). Os prismas são divididos em 2 grupos: prisma propriamente dito e interprismas. A diferença entre essas duas regiões são as orientações dos cristais de HAp. Prismas e interprismas consistem por várias fibras de cristais embaladas (imagem d) e cada fibra é formada por fibrilas de cristalitos bem empacotados. Cada fibrila é uma agregação de nanofibrilas compostas por cristais de hidroxiapatita (imagem e). A figura 2.5 (imagem a) mostra o aspecto macroscópico do esmalte dentário.

2.3 Matriz orgânica

A matriz orgânica é composta por carboidratos, proteínas não colágenas, lipídeos e água. Compõe aproximadamente 4% do esmalte dentário e se encontra nas uniões dos cristais de hidroxiapatita e na região interprismática. Classicamente são conhecidos dois grupos de proteínas na matriz orgânica: as amelogeninas e as não amelogeninas (Junqueira e Carneiro, 2008).

A principal proteína de matriz extracelular que compõe essa fase é a amelogenina,

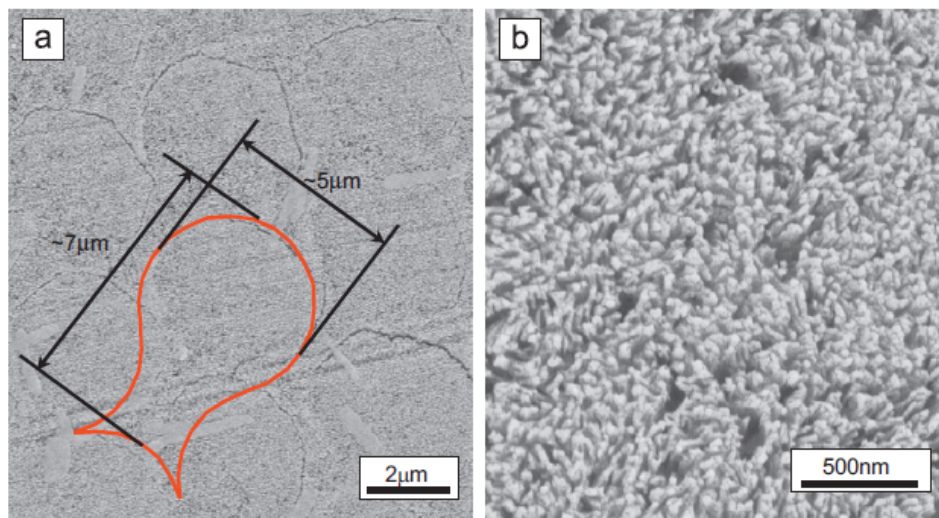


Figura 2.4: Imagens representativas dos prismas e os cristais HAp com morfologia hexagonal na sua seção transversal. Retirado de Lu *et al.* (2012)

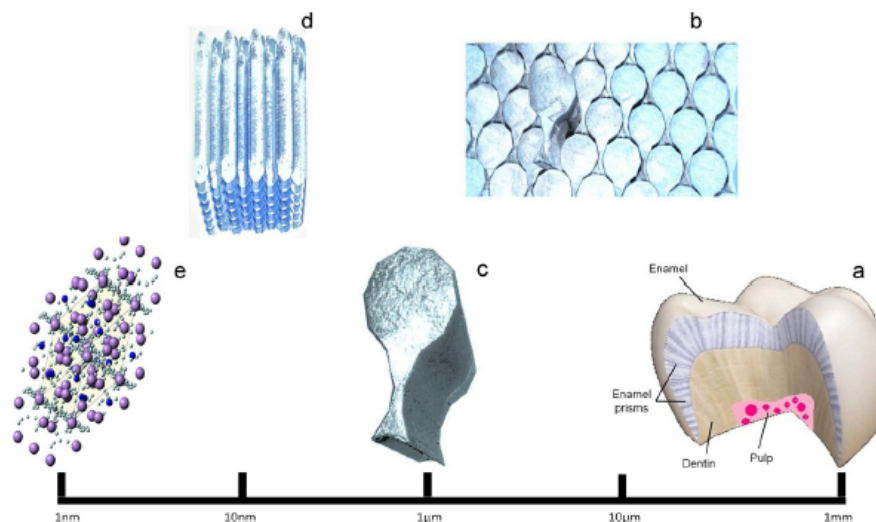


Figura 2.5: Desenho esquemático extraído de Ghadimi *et al.* (2013) das várias escalas do esmalte dentário.

hidrofóbica e rica em prolinas¹, está inteiramente ligada ao processo de mineralização do esmalte dentário; é secretada mais abundantemente pelos ameloblastos; constitui 90% da matriz do esmalte e é digerida e removida para que os cristais cresçam na organização prismática (Junqueira e Carneiro, 2008).

No grupo das não amelogeninas encontram-se as outras proteínas que ajudam no

¹É um dos aminoácidos codificados pelo código genético, sendo portanto um dos componentes das proteínas dos seres vivos. Diferencia-se dos demais aminoácidos devido ao facto de possuir uma estrutura quimicamente coesa e rígida, sendo o aminoácido mais rígido dos vinte que são codificados geneticamente

processo de organização dos cristais e mineralização: ameloblastinas (glicoproteínas sulfatadas gene-específicas encontradas no esmalte dentário); enamelinas (maiores proteínas do esmalte que integram aproximadamente 5% do total de matriz proteica do esmalte) e tuftelinas (fosfoproteínas glicosiladas acídicas encontradas no esmalte dentário de humanos, muito parecidas com a queratina) (Kierszenbaum, 2012).

3 MODELO MECÂNICO LINEAR PARA SÓLIDOS

Neste estudo foram simuladas numericamente as propriedades mecânicas do esmalte dentário admitindo comportamento elástico linear. Torna-se, portanto, necessário descrever o modelo linear mecânico de sólidos e, conseqüentemente, compreender alguns conceitos básicos, tais como: tensão; deformação; coeficiente de poisson; Lei de Hooke; módulo de elasticidade e propriedades de material, para assim demonstrar suas correlações. Para um estudo aprofundado dos conceitos descritos neste capítulo são indicadas as referências: (Barbero, 2014; Callister Jr., 2008; Fish e Belytschko, 2007; Hibbeler, 2004; Lai *et al.*, 2009; Lemaitre e Chaboche, 1994; Mase *et al.*, 2009).

3.1 Tensão σ

Em um corpo sujeito a cargas externas, ocorre distribuição interna de forças, assegurando o equilíbrio de cada segmento do corpo. Para um material contínuo e coeso, a tensão é o valor limite da força por unidade de área quando a área tende a zero, como dada pela equação (3.1):

$$\vec{\sigma} = \lim_{A \rightarrow 0} \frac{\vec{F}}{A}, \quad (3.1)$$

o vetor de tensão $\vec{\sigma}$ na área da seção transversal (A) de um elemento quando a seção está submetida à resultante de força (\vec{F}). A figura 3.1(b) mostra a tensão $\vec{\sigma}$ decomposta nas direções normal n e tangencial s à faceta dA, obtendo-se a tensão normal σ e a tensão tangencial ou de corte τ .

Baseado no princípio da conservação do momento linear, se o corpo contínuo está em equilíbrio estático, as componentes do tensor de tensões em todo ponto material do corpo satisfazem às equações de equilíbrio. Da mesma forma, de acordo com o princípio da

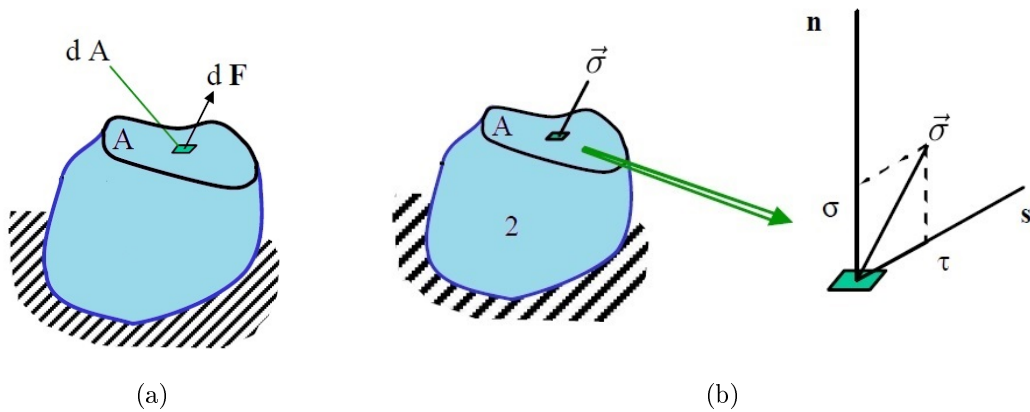


Figura 3.1: Imagem (a) representação de um corpo sujeito a carga externa $d\mathbf{F}$ na área infinitesimal dA . Imagem (b) representação da decomposição do vetor de tensão. Fonte: Próprio autor.

conservação do momento angular, para haver o equilíbrio é necessário que a soma dos momentos em relação a um ponto arbitrário seja nula, concluindo que o tensor de tensões é simétrico, havendo assim somente seis componentes independentes de tensão.

Ao relacionar o vetor de tensão com o vetor que representa a normal (\vec{n}) à superfície, obtém-se as componentes do tensor de tensões, dadas pelas equações (3.2), (3.3) e (3.4):

$$\sigma_x = \sigma_{xx}n_x + \sigma_{xy}n_y + \sigma_{xz}n_z \quad (3.2)$$

$$\sigma_y = \sigma_{yx}n_x + \sigma_{yy}n_y + \sigma_{yz}n_z \quad (3.3)$$

$$\sigma_z = \sigma_{zx}n_x + \sigma_{zy}n_y + \sigma_{zz}n_z. \quad (3.4)$$

onde x , y e z representam 3 direções ortogonais de referência.

As 6 (seis) componentes independentes do tensor de tensões em cada ponto do corpo, são representadas pelo tensor σ , mostrado na equação (3.5):

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

onde σ é o tensor de tensões; $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ são as componentes normais do tensor de tensões e $\tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}$ são as componentes de cisalhamento do tensor de tensões. As

suas intensidades dependem do tipo de carga que atua sobre o corpo e da orientação do elemento no ponto. Isso pode ser visto na figura 3.2.

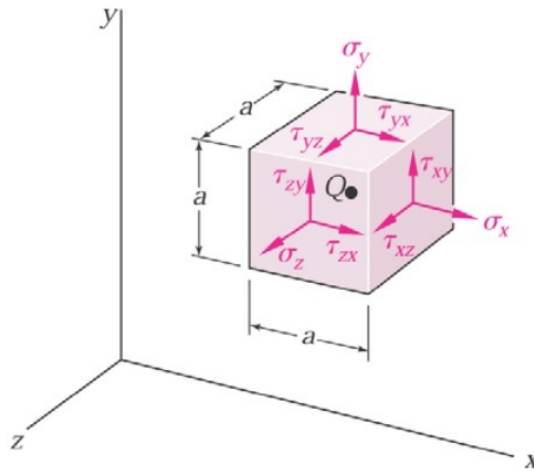


Figura 3.2: Desenho representativo das componentes do tensor de tensões em um cubo, que representa um ponto material no corpo. Fonte: Próprio autor.

3.2 Deformação específica

As cargas provocam deformação no material de todos os corpos, causando deslocamentos ou mudança de posição (alteração de forma ou tamanho), podendo ser perceptíveis a olho nu ou não e, além disso, a deformação do corpo não é, necessariamente, uniforme em todo seu volume. É medida por meio de técnicas experimentais, sendo uma grandeza geométrica e adimensional.

A deformação normal média é a medida do alongamento ou da contração de um segmento de reta do corpo. Ao tomarmos um segmento de reta \overline{AB} com comprimento S , a mudança do comprimento será S' , então a deformação (ϵ) é dada pela equação (3.6):

$$\epsilon = \frac{S - S'}{S}. \quad (3.6)$$

Além da deformação normal, consideram-se ainda:

1. **ROTAÇÃO PURA:** Originalmente um corpo na posição inicial, como mostrado na figura (3.3), sofre rotação pura (A) e sua deformação pode ser vista em (B).

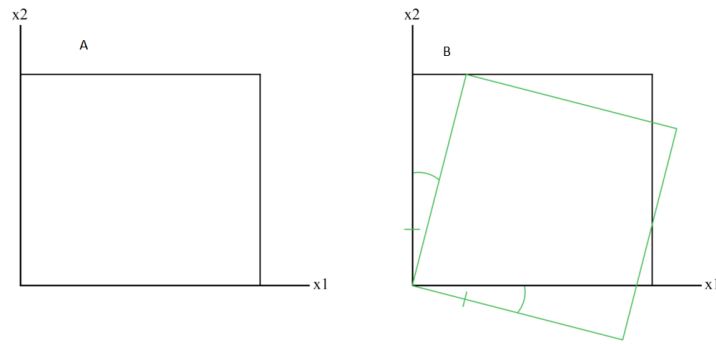


Figura 3.3: Desenho representativo de rotação pura. Fonte: Próprio autor.

2. CISALHAMENTO PURO: Originalmente um corpo na posição inicial, como mostrado na figura 3.4, sofre cisalhamento (A) puro e sua deformação pode ser vista em (B).

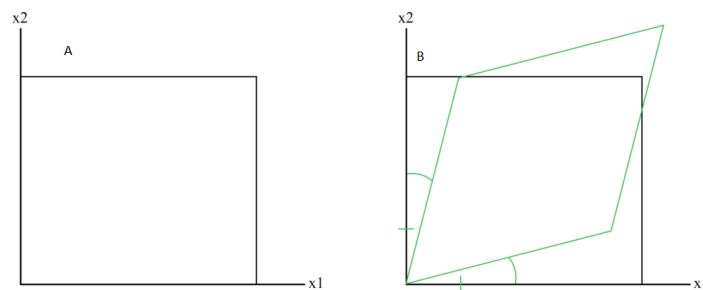


Figura 3.4: Desenho representativo de cisalhamento puro. Fonte: Próprio autor.

3. CISALHAMENTO SIMPLES: Originalmente um corpo na posição inicial, como mostrado na figura 3.5, sofre cisalhamento simples (A) e sua deformação pode ser vista em (B).

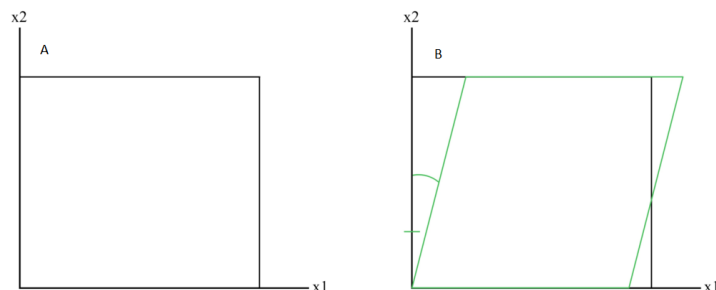


Figura 3.5: Desenho representativo de cisalhamento simples. Fonte: Próprio autor.

Deformações normais provocam mudança de volume, já as deformações por cisalhamento provocam mudanças no seu formato.

Da mesma forma que para a tensão, o estado de deformação também possui 6 (seis) componentes: três deformações normais ϵ_x , ϵ_y , ϵ_z e três por cisalhamento γ_{xy} , γ_{xz} , γ_{yz} . Tais componentes dependem da orientação dos segmentos de reta e de sua localização, sendo descrito pela equação (3.7):

$$\gamma = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \tau_{xy} & \gamma_{yy} & \gamma_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \gamma_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

onde x, y e z representam 3 direções ortogonais de referência.

A deformação elástica acontece no nível atômico do sólido e os movimentos de deslocamento são reversíveis no campo macroscópico. Na deformação puramente elástica, a configuração inicial dos átomos é restaurada assim que é removida a força aplicada.

Já a deformação plástica representa o resultado de uma alteração permanente, tanto de forma, quanto de volume do material, após a remoção da carga.

3.3 Coeficiente de Poisson

O coeficiente de Poisson mede a deformação lateral de um material homogêneo e isotrópico em relação à sua deformação longitudinal. Tomando uma barra com seção transversal circular de raio r e comprimento L e aplicando uma carga longitudinal P , muda-se o comprimento da barra na quantidade δ e seu raio na quantidade δ' , por conseguinte as deformações longitudinal e lateral são, respectivamente, descritas pelas equações (3.8) e (3.9):

$$\epsilon_{(long)} = \frac{\delta}{L} \quad (3.8)$$

$$\epsilon_{(lat)} = \frac{\delta'}{r}. \quad (3.9)$$

Na faixa da elasticidade a razão entre essas deformações é uma constante, denominada

coeficiente de Poisson, dada pela equação (3.10):

$$\nu = \frac{-\epsilon_{(lat)}}{\epsilon_{(long)}}. \quad (3.10)$$

Tal constante é adimensional e para a maioria dos sólidos se encontra na faixa de valor entre $\frac{1}{4}$ e $\frac{1}{3}$.

A figura 3.6 mostra a relação entre δ e δ' . Nota-se no esquema que o corpo submetido a compressão uniaxial na direção longitudinal sofre um alargamento na direção transversal.

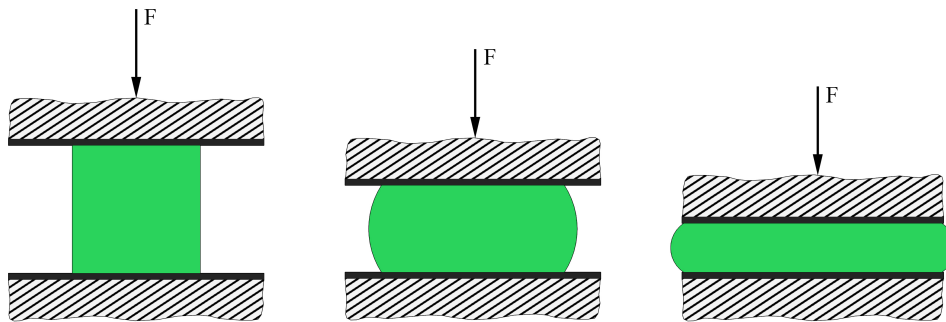


Figura 3.6: Representação esquemática da deformação lateral. Fonte: Próprio autor.

3.4 Elasticidade linear ou lei de Hooke

A resistência de um material depende de sua capacidade de suportar carga sem deformação excessiva ou ruptura, sendo esta propriedade determinada por meio de testes em laboratório. Com os dados experimentais dos testes de tração ou compressão é possível construir um gráfico (figura 3.7) e a curva resultante é o diagrama tensão-deformação. Tal diagrama tem várias fases que caracterizam as propriedades do material, onde $\sigma = \frac{F}{A}$ é a tensão aplicada; $\epsilon = \frac{(L-L_0)}{L_0}$ é a deformação e P é o ponto de transição de deformação elástica para plástica, porém este estudo se limitará a fase elástica.

Na região de elasticidade, ocorre uma relação linear entre tensão e deformação, ou seja, um aumento na tensão provoca um aumento proporcional na deformação. Tal fenômeno,

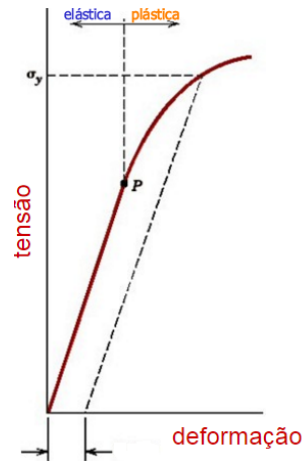


Figura 3.7: Representação do gráfico tensão x deformação.

descrito pela *Lei de Hooke*, é expresso na equação (3.11):

$$\sigma = E\epsilon, \quad (3.11)$$

onde σ é a tensão, E representa a constante de proporcionalidade ou módulo de elasticidade ou módulo de Young e ϵ é a deformação.

3.5 Módulo de elasticidade (E)

O comportamento elástico linear pode ser caracterizado por duas condições: 1- quando a tensão em um material (corpo ou sólido) é proporcional à deformação; e 2- quando esse mesmo material tem a capacidade de voltar à sua forma original assim que removidas todas as forças aplicadas. O módulo de elasticidade representa a inclinação da reta na faixa de elasticidade do diagrama tensão-deformação, obtido através de ensaio uniaxial de tração e é uma propriedade mecânica que indica a rigidez de um material. Materiais muito rígidos apresentam altos valores de E .

Na forma matricial, a relação (3.11) para problemas em 3D pode ser dada pela equação

constitutiva (3.12):

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} E_x & \frac{E_y}{\nu_{yx}} & \frac{E_z}{\nu_{zx}} & \frac{G_{yz}}{\rho_{yzxx}} & \frac{G_{xz}}{\rho_{xzzx}} & \frac{G_{xy}}{\rho_{xyxx}} \\ \frac{E_x}{\nu_{xy}} & E_y & \frac{E_z}{\nu_{zy}} & \frac{G_{yz}}{\rho_{yzyy}} & \frac{G_{xz}}{\rho_{xzyy}} & \frac{G_{xy}}{\rho_{xyyy}} \\ \frac{E_x}{\nu_{xz}} & \frac{E_y}{\nu_{yz}} & E_z & \frac{G_{yz}}{\rho_{yzzz}} & \frac{G_{xz}}{\rho_{xzzz}} & \frac{G_{xy}}{\rho_{xyzz}} \\ \frac{E_x}{\rho_{xxyz}} & \frac{E_y}{\rho_{yyyz}} & \frac{E_z}{\rho_{zzyz}} & G_{yz} & \frac{G_{xz}}{\rho_{xzyz}} & \frac{G_{xy}}{\rho_{xyzz}} \\ \frac{E_x}{\rho_{xxxz}} & \frac{E_y}{\rho_{yyxz}} & \frac{E_z}{\rho_{zzxz}} & \frac{G_{yz}}{\rho_{yzxz}} & G_{xz} & \frac{G_{xy}}{\rho_{xyxz}} \\ \frac{E_x}{\rho_{xxxxy}} & \frac{E_y}{\rho_{yyxy}} & \frac{E_z}{\rho_{zzxy}} & \frac{G_{yz}}{\rho_{yzxy}} & \frac{G_{xz}}{\rho_{xzxy}} & G_{xy} \end{pmatrix}}^C \times \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

onde a primeira matriz, do lado direito da equação, mostra os coeficientes elásticos de rigidez para material.

3.6 Materiais compósitos e equações constitutivas

Baseado nesses conceitos prévios cabe dizer que existem vários tipos de materiais, que ao serem submetidos a testes de carga, se comportam cada um de uma forma. Um corpo elástico retorna à sua forma original quando se retiram as causas que o deformam. É dito linearmente elástico quando um aumento ou diminuição das cargas provoca, respectivamente, um aumento ou diminuição linear das deformações. Ao se relacionar cada componente de tensão com cada componente de deformação identificam-se as propriedades de material.

Seguem as definições de material compósito e propriedades de materiais anisotrópico, monoclinico, ortotrópico, transversalmente isotrópico e isotrópico e suas equações constitutivas.

3.6.1 Materiais compósitos

Por definição, materiais compósitos consistem em uma combinação em âmbito macroscópico e não solúvel de dois ou mais materiais dos tipos: poliméricos, cerâmicos, metálicos, carbono ou biomateriais. De maneira esquemática, um dos constituintes garante a ligação (matriz) e o outro a resistência (reforço ou inclusão), como pode ser

visto na figura 3.8. Este último se apresenta, em geral, na forma de partículas, fibras curtas ou fibras longas.

Essa combinação é projetada para se obter melhores propriedades que as dos constituintes individualizados, tais como: 1 - resistência à fadiga, capacidade de suportar carregamentos cíclicos de tensão ou deformação sem apresentar ruptura progressiva; 2 - resistência à corrosão, que é o processo de destruição parcial ou total, superficial ou estrutural do material causado pela ação do meio; 3 - estabilidade térmica, capacidade de resistir a mudanças de temperatura, sem alterar sua constituição inicial; 4 - baixa condutibilidade térmica e/ou elétrica, dentre outras.

A distribuição dos reforços ou inclusões em um material compósito influencia no seu comportamento. Os cálculos, tanto experimentais quanto numéricos, de suas propriedades podem ser simplificados, se as partículas possuírem esfericidade ou cilindridade, se houver paralelismo e uniformidade das fibras e regularização da distribuição. Outra característica importante é que a interface é responsável pela transferência de cargas entre a matriz e os reforços.

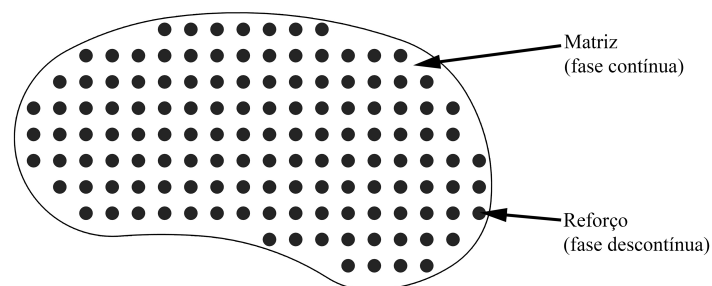


Figura 3.8: Desenho esquemático da composição de um material compósito (formado por matriz e reforços). Fonte: próprio autor.

3.6.2 Material anisotrópico linear elástico

São materiais que não possuem nenhum plano de simetria material, sendo assim, qualquer carregamento provoca todas as deformações possíveis. A maioria dos materiais anisotrópicos necessita de 21 constantes elásticas para sua descrição. A lei constitutiva

inversa de um material anisotrópico em função das propriedades elásticas pode ser descrita pela relação (3.13):

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{E_x} & \frac{\nu_{yx}}{E_y} & \frac{\nu_{zx}}{E_z} & \frac{\rho_{yzxx}}{G_{yz}} & \frac{\rho_{xzzx}}{G_{xz}} & \frac{\rho_{xyxx}}{G_{xy}} \\ \frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & \frac{\nu_{zy}}{E_z} & \frac{\rho_{yzyy}}{G_{yz}} & \frac{\rho_{xzyy}}{G_{xz}} & \frac{\rho_{xyyy}}{G_{xy}} \\ \frac{\nu_{xz}}{E_x} & \frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & \frac{\rho_{yzzz}}{G_{yz}} & \frac{\rho_{xzzz}}{G_{xz}} & \frac{\rho_{xyzz}}{G_{xy}} \\ \frac{\rho_{xxyz}}{E_x} & \frac{\rho_{yxyz}}{E_y} & \frac{\rho_{zzyz}}{E_z} & \frac{1}{G_{yz}} & \frac{\rho_{xzyz}}{G_{xz}} & \frac{\rho_{xyzz}}{G_{xy}} \\ \frac{\rho_{xxxz}}{E_x} & \frac{\rho_{yyxz}}{E_y} & \frac{\rho_{zzxz}}{E_z} & \frac{yzxz}{G_{yz}} & \frac{1}{G_{xz}} & \frac{\rho_{xyxz}}{G_{xy}} \\ \frac{\rho_{xxxy}}{E_x} & \frac{\rho_{yyxy}}{E_y} & \frac{\rho_{zzxy}}{E_z} & \frac{\rho_{yzxy}}{G_{yz}} & \frac{\rho_{xzxy}}{G_{xz}} & \frac{1}{G_{xy}} \end{pmatrix}}^S \times \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

A matriz S (correlação entre deformação e tensão) é conhecida como matriz de conformidade. É simétrica e positiva definida; todos os elementos da diagonal são positivos; o determinante é positivo; e sua inversa $[S] = [C]^{-1}$ é também positiva definida e conhecida como matriz de rigidez.

3.6.3 Material monoclinico linear elástico

Se um sólido linearmente elástico possui um plano de simetria¹, é chamado de material monoclinico e possui 13 coeficientes elásticos independentes. A matriz S mostrada na equação (3.14), refere-se a material monoclinico no plano X_1X_2 . Ilustra-se esta situação para uma tensão normal σ_{11} (simétrica relativamente ao plano) na figura 3.9. Ao aplicar uma tensão σ_{11} simétrica aos planos X_1X_2 (imagem 1) tem-se a deformação simétrica relativamente ao plano X_1X_2 (imagem 2). Na imagem 3 observa-se a deformação nos planos X_2X_3 em resposta a essa mesma tensão. Para esse tipo de material há uma deformação angular na direção do eixo de simetria (imagem 4).

¹considera-se que existe um plano de simetria material, quando um carregamento simétrico relativamente a esse plano só provocar deformações simétricas a esse plano.

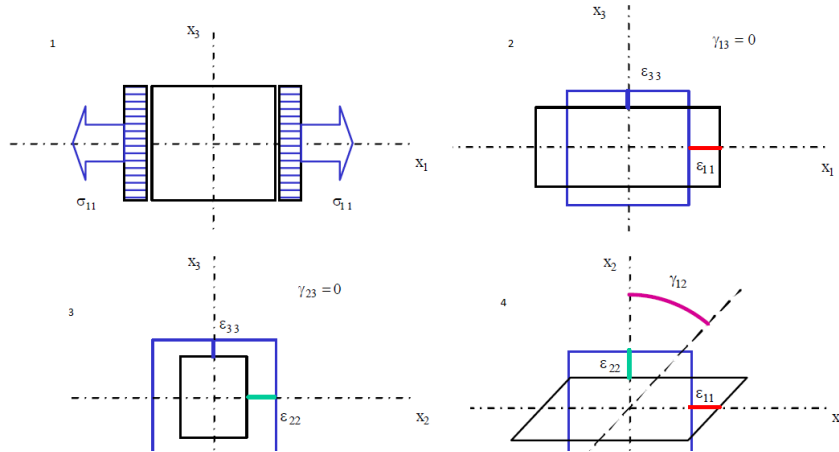


Figura 3.9: Representação esquemática do comportamento de um material monoclinico.

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{E_x} & \frac{\nu_{yx}}{E_y} & \frac{\nu_{zx}}{E_z} & 0 & 0 & \frac{\rho_{xyxx}}{G_{xy}} \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & 0 & 0 & \frac{\rho_{xyyy}}{G_{xy}} \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & \frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & \frac{\rho_{xyzz}}{G_{xy}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{yz}} & \frac{\rho_{xzyz}}{G_{xz}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\rho_{yzxz}}{G_{yz}} & \frac{1}{G_{xz}} & 0 \\ \frac{\rho_{xxxy}}{E_x} & \frac{\rho_{yyxy}}{E_y} & \frac{\rho_{zzxy}}{E_z} & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xy}} \end{pmatrix}}^S \times \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Os coeficientes da matriz de rigidez satisfazem a condição de que todos os elementos da diagonal são positivos; que o determinante é positivo e que sua matriz identidade é positiva definida.

3.6.4 Material ortotrópico linear elástico

O material ortotrópico possui 3 planos ortogonais de simetria material. A situação onde, os planos X_1X_2 , X_1X_3 , X_2X_3 são planos de simetria material, nos quais qualquer tensão simétrica relativamente a esses planos só pode provocar deformações simétricas, está ilustrada na figura 3.10 para uma tensão normal σ_{11} , simétrica relativamente a todos os planos. De forma idêntica qualquer tensão anti-simétrica relativamente a esses planos só pode provocar deformações anti-simétricas. Ao aplicar uma tensão σ_{11} simétrica relativamente a todos os planos (imagem 1) tem-se a deformação simétrica relativamente a todos os planos (imagem 2- deformação nos planos X_1X_3). Na imagem 3 observa-se a

deformação nos planos X_2X_3 em resposta a essa mesma tensão. Na imagem 4 observa-se a deformação nos planos X_1X_2 em resposta a essa mesma tensão e não ocorre deformação angular.

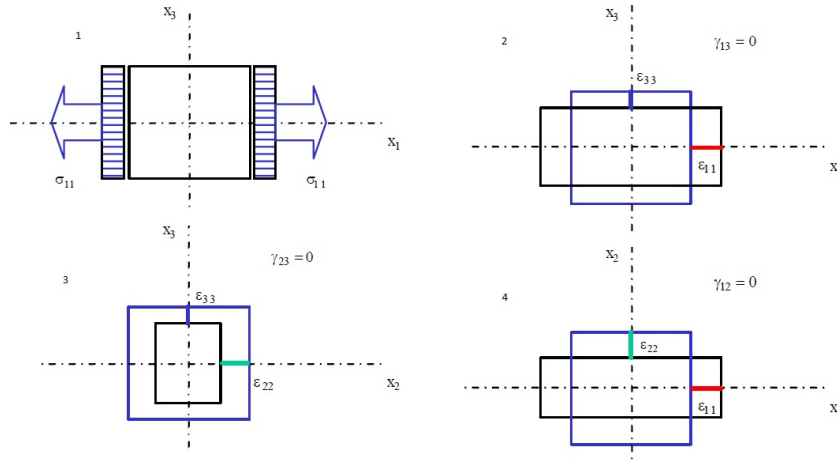


Figura 3.10: Representação esquemática do comportamento de um material ortotrópico. Fonte: próprio autor.

A relação constitutiva ortotrópica é apresentada na equação (3.15):

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_x} & \frac{\nu_{yx}}{E_y} & \frac{\nu_{zx}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & \frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{yz}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xz}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xy}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

As componentes do tensor de coeficientes elásticos de rigidez, para esse tipo de material, podem ser obtidas invertendo-se a matriz acima, onde há 9 termos independentes. Para sólidos bidimensionais a relação constitutiva do material ortotrópico

é dada pela equação (3.16):

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yx} \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} \frac{E_x}{1-\nu_{xy}\nu_{yx}} & \frac{\nu_{xy}E_y}{1-\nu_{xy}\nu_{yx}} & 0 \\ \frac{\nu_{xy}E_y}{1-\nu_{xy}\nu_{yx}} & \frac{E_y}{1-\nu_{xy}\nu_{yx}} & 0 \\ 0 & 0 & G_{xy} \end{pmatrix}}^C \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yx} \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

3.6.5 Material transversalmente isotrópico linear elástico

Um material transversalmente isotrópico constitui-se de um material ortotrópico que apresenta isotropia em um dos planos de simetria, ou seja, apresenta as mesmas propriedades em todas as direções neste plano. A figura 3.11 ilustra esta situação para uma tensão normal σ_{11} simétrica relativamente a todos os planos. Ao aplicar uma tensão σ_{11} simétrica relativamente a todos os planos (imagem 1) tem-se a deformação simétrica relativamente a todos os planos (imagem 2- deformação nos planos X_1X_3). Na imagem 3 observa-se a deformação nos planos X_2X_3 em resposta a essa mesma tensão, a deformação tem que ser simétrica relativamente a todos os planos e como as propriedades são iguais no plano X_2X_3 as deformações ϵ_{22} e ϵ_{33} devem ser iguais. Na imagem 4 observa-se a deformação nos planos X_1X_2 em resposta a essa mesma tensão.

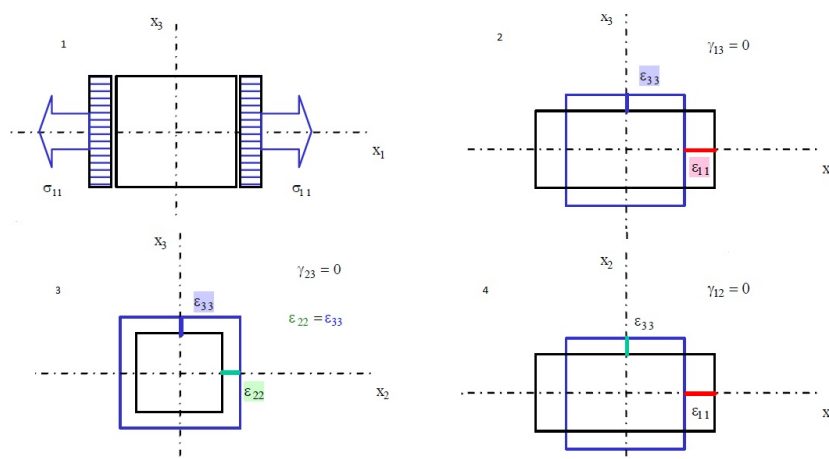


Figura 3.11: Representação esquemática do comportamento de um material transversalmente isotrópico. Fonte: próprio autor.

Para o plano de simetria sendo X_2X_3 , pode-se escrever a relação constitutiva dada em

(3.17):

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_x} & \frac{\nu_{yx}}{E_y} & \frac{\nu_{zx}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & \frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{yz}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xz}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xy}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Em virtude da isotropia no plano X_2X_3 , o módulo de elasticidade transversal G_{yz} neste plano não é independente do módulo de elasticidade longitudinal E_y e do coeficiente de poisson ν_{yz} , como pode ser visto na equação (3.18). Para esse tipo de material, o número de coeficientes elásticos independentes reduz-se a 5.

$$\frac{1}{G_{23}} = \frac{2(1 + \nu_{23})}{E_2}. \quad (3.18)$$

3.6.6 Material isotrópico linear elástico

Para um material isotrópico os componentes do tensor de elasticidade devem permanecer os mesmos, independentemente da direção considerada. Um tensor que tenha os mesmos componentes no que diz respeito a todas as bases ortonormais é conhecido como um tensor isotrópico. Com isso, tem-se as igualdades dadas pelas equações (3.19), (3.20) e (3.21):

$$C_{22} = C_{33} = C_{11}; \quad (3.19)$$

$$C_{12} = C_{13}; \quad (3.20)$$

$$C_{44} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (3.21)$$

e então, tem-se dois coeficientes independentes, ou seja, nos materiais isotrópicos são necessárias duas propriedades elásticas para definir completamente o seu comportamento

elástico, segundo as equações (3.22), (3.23), (3.24):

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}; \quad (3.22)$$

$$\nu = \frac{E}{2G}; \quad (3.23)$$

$$E = 2(1 + \nu)G. \quad (3.24)$$

E a equação (3.25) mostra a lei constitutiva do material isotrópico:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{yx}}{E_y} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & -\frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{yz}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xz}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xy}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

4 TESTES EXPERIMENTAIS

ATRAVÉS DE INDENTAÇÃO PARA

O ESMALTE DENTÁRIO

O conhecimento das propriedades físicas e mecânicas do tecido dentário e dos materiais restauradores é de grande importância. No ambiente bucal, dentes e materiais são constantemente submetidos a esforços mecânicos através das forças mastigatórias e, algumas vezes, das forças parafuncionais. Estas forças agem nos dentes e nos materiais produzindo diferentes reações que podem gerar deformações e comprometer sua integridade com o passar do tempo (Anusavice e Philips, 2005; Nanci, 2013; Okeson, 2013).

Para se caracterizarem as propriedades mecânicas dos dentes, tem-se tornado cada vez mais comum a execução testes de dureza instrumentada via micro ou nanoindentação, com o objetivo de quantificar a resistência à penetração do material, ou seja, conhecer melhor o comportamento mecânico do material em estudo. Porém nesses testes os valores encontrados para o esmalte dentário apresentam divergências (da Cunha *et al.*, 2012; He e Swain, 2007a,b,c, 2008).

O teste se dá pela penetração, via compressão lenta e gradual do indentador (um material duro), sobre a superfície em estudo, aquela que se almeja obter o valor de dureza. Esse valor será o quociente da força aplicada em relação à área de contato entre as superfícies (Callister e Rethwisch, 2007).

Para Ge *et al.* (2005) a nanodureza e o módulo de elasticidade são duas propriedades mecânicas muito importantes que se referem à resistência do material na deformação plástica e elástica, respectivamente. As diferenças entre as propriedades mecânicas das duas fases isoladas que compõem o esmalte (matriz e prismas) podem ser importantes para entender o mecanismo e estratégias terapêuticas do esmalte, assim como também

colaborar no desenvolvimento de materiais biomiméticos.

Weig *et al.* (2011) relataram que tentar prever o módulo de elasticidade é importante, pois mostra quanto o tecido se deforma com a aplicação de uma tensão.

Craig *et al.* (1961) avaliaram as propriedades compressivas do esmalte, resistência à compressão e o módulo de elasticidade do esmalte humano. Para o teste foram selecionados alguns primeiros molares, seccionados até a dentina, e colocados dentro de moldes cilíndricos e todas as amostras fixadas de forma que a direção dos transversal dos prismas ficasse paralela ao longo eixo dos cilindros e isso foi garantido por visualização microscópica. Como resultados obtiveram os valores para módulo de elasticidade do esmalte oclusal ou de cúspide $E_{para} = 84,1 \pm 6,2$ GPa (paralelo ao longo eixo dos prismas) e $E_{perp} = 77,9 \pm 4,8$ GPa (perpendicular ao longo eixo dos prismas)

Staines *et al.* (1981) por meio de técnica de indentação esférica (bola de tungstênio de 6,35mm) em espécimes de 8 dentes incluídos em resina, posteriormente polidos e mantidos dentro de água, tentaram estimar o módulo de Young do esmalte dentário. Para o teste a carga aplicada do indentador foi de 5 kN e a velocidade de de indentações variaram entre: 1 a 100 μmmin^{-1} . Como resultado foi observado que o comportamento mecânico do esmalte é viscoelástico; encontrou-se o valor médio de $E = 83 \pm 3$ GPa para o módulo de Young do esmalte dentário e desvio padrão de 8 GPa e um aumento de 15% para testes em esmaltes desidratados, o que implica em dizer um aumento de rigidez desse tecido devido à desidratação da camada de proteínas. Além disso, foram medidos os módulos de elasticidade do esmalte variando a indentação com relação à direção dos cristais de HPA. Para indentações paralelas ao eixo dos cristais, os valores foram de 108 GPa a 112 GPa e para as indentações perpendiculares ao eixo dos cristais, o valor obtido foi 136 GPa. Isso significa dizer que o módulo de elasticidade varia de acordo com a profundidade e direção da indentação.

Habelitz *et al.* (2001) tentaram estimar as propriedades mecânicas elásticas do esmalte dentário via nanoindentação combinada com microscopia de força atômica. Portanto, selecionaram 5 terceiros molares (4 erupcionados e 1 impactado), que foram cortados longitudinalmente em relação ao longo eixo do dente, em seguida polidos com papéis

abrasivos, depois enxaguados copiosamente em água. Após isso, foram analisados via microscopia, porém não foi possível identificar as microestruturas do esmalte e então, as amostras foram submetidas a decapagem com ácidos hidrocloreídrico e cítrico. Posteriormente, foram testados via nanoindentação por meio de uma ponta cúbica diamantada com raio de aproximadamente 20nm, as medições foram realizadas paralela e perpendicularmente ao eixo dos prismas de HAp, tanto na região oclusal, quanto na região longitudinal ao eixo do dente. A carga de indentação foi de $1500\mu\text{N}$, profundidade de 300nm e velocidade de carga aplicada de $500\mu\text{N/s}$. A partir disso, observaram que as amostras de dente que não sofreram decapagem química apresentavam módulo de elasticidade maior (80 GPa), enquanto que as que sofreram decapagem apresentaram módulo elástico mais baixo (55 GPa), sendo assim, a decapagem química das amostras de dente influencia consideravelmente na diminuição do módulo de elasticidade do esmalte dentário. Além disso, encontraram alguns módulos de elasticidade para o esmalte dentário dependendo da região da indentação. $E_{para} = 87,5 \pm 2,2$ GPa para indentação paralela ao longo eixo dos prismas; $E_{perp} = 72,7 \pm 4,5$ GPa para indentação perpendicular ao longo eixo dos prismas; $E_{head} = 88 \pm 8,6$ GPa para região de cabeça de prismas; $E_{tail} = 80,3 \pm 7,2$ para região de cauda de prismas e por fim para a região interprismática $E_{inter} = 86,4 \pm 11,7$ GPa.

Ge *et al.* (2005) tentaram definir as propriedades nanomecânicas, como o módulo de elasticidade dos prismas de HAp e da matriz orgânica do esmalte dentário por meio de nanoindentação combinada com microscopia de força atômica. Para isso, selecionaram 5 terceiros molares que foram cortados, embebidos em resina acrílica, polidos, limpos e não foram submetidos a tratamento químico com ácido. Um coeficiente de Poisson de 0,07 e $E = 1140$ GPa foram os valores atribuídos para a ponta diamantada do nanoindentador. Para os testes foram atribuídos os seguintes valores: força aplicada de $300\mu\text{N}$; velocidade da carga aplicada entre 200 e $60\frac{\mu\text{N}}{\text{s}}$ e foram realizadas 30 indentações em cada dente. Encontraram o valor médio de $E_r = 83,4 \pm 7,1$ GPa para os prismas e a média do módulo de elasticidade da matriz orgânica $E_m = 39,5 \pm 4,1$ GPa. Apontaram a dificuldade que existe nesses testes em indentar o mesmo tipo de material com relação à profundidade

mesmo utilizando um microscópio como auxílio. Isso faz com que, na tentativa de testar apenas a matriz orgânica, por exemplo, possa ser indentado partes de prisma no teste.

Braly (2007) por meio de técnica de nanoindentação combinada com microscopia de força atômica tentaram prever o valor do módulo de Young efetivo para esmalte dentário. Sendo assim, selecionaram alguns terceiros molares impactados, que foram inseridos em blocos de resina epoxy e cortados transversalmente, polidos e mantidos secos em temperatura ambiente. Para a indentação foi utilizado ponta piramidal diamantada, com penetração máxima de 200nm de profundidade. Para o cálculo do módulo de elasticidade do esmalte, foi considerado que o coeficiente de Poisson para esmalte é de $\nu = 0,25$; coeficiente de Poisson do indentador de 0,07 e o módulo de elasticidade do indentador $E = 1141$ GPa. E com isso, encontraram os valores de módulo de elasticidade para o esmalte: $E = 130$ a 120 GPa na região de cúspide do dente e $E = 47$ GPa na região de junção do esmalte com a dentina.

He e Swain (2007b) desenvolveram um modelo simples com base na microestrutura hierárquica de esmalte para ilustrar mecanismos de deformação de contato relacionados ao esmalte humano e testaram através de microindentação o esmalte dentário. Primeiramente, utilizaram uma ponta piramidal, com força mínima aplicada de 5 mN e força máxima de 250 mN por 900 s cada indentação, depois utilizaram uma ponta esférica de indentador com a mesma faixa de força aplicada e tempo. Com isso, observaram que, tratando-se da área de contato pelo indentador, as camadas de proteínas finas entre os cristais de HAp conseguem suportar mais deformação na forma de deformação de cisalhamento, que é 16 vezes maior do que o contato por deformação. Esse estudo pode mostrar que a camada orgânica é responsável pelo comportamento inelástico do esmalte dentário.

He e Swain (2007c) compararam a resposta mecânica do esmalte dentário com alguns metais usados na restauração dentária e com a HAp pura por meio de nanoindentação. Todas as amostras foram envolvidas por resina epoxy, cortadas, polidas, limpas e armazenadas em água destilada. Foram utilizados dois indentadores: um piramidal e um esférico, a força aplicada no teste variou entre 10 e 300 mN e foram assumidos os valores

1050 GPa e 0,07 para o módulo de elasticidade e coeficiente de Poisson do indentador, respectivamente. Afirmaram que mesmo sendo a hidroxiapatita o principal componente do esmalte, a resposta mecânica do esmalte é totalmente diferente da HAp pura, ou seja, o módulo de elasticidade e dureza daquele são menores. O valor do módulo de elasticidade dos cristais de hidroxiapatita sinterizada encontrado foi de $E_{(HAp)} = 130 \pm 4,7$ GPa e o valor de módulo elástico efetivo para esmalte de $E = 94,1 \pm 5,4$ GPa.

He e Swain (2008) na sua pesquisa compararam o esmalte dentário com a hidroxiapatita sinterizada (maior componente do esmalte) através de diferentes tipos de sistemas de nanoindentação. Afirmaram que a variedade de valores encontrados na literatura para módulo de Young do esmalte depende da técnica usada na experimentação e da direção da amostra medida. Observaram que o esmalte é mais deformável que a HAp na sua forma pura; que o esmalte possui uma área proeminente de resposta elástica (quando observado o gráfico tensão deformação gerado pelos resultados da nanoindentação) e que a resposta tensão deformação do esmalte é muito mais complexa, devido à sua microestrutura. Com isso, o esmalte que compõe a superfície oclusal tem valores maiores de módulo de elasticidade do que a superfície transversal, o que implica dizer que testes macroescalas tem valores menores do que testes micro e nanoescalas.

Miura *et al.* (2009) tentaram entender a distribuição de tensão no dente por meio de aplicação de força externa via microindentação em esmalte dentário. Utilizaram 5 dentes incisivos superiores guardados em solução salina por 2 semanas. Para a microindentação mantiveram uma força de 490 mN que foi mantida por 5 s. Encontraram os resultados do módulo de elasticidade do esmalte paralelo ao eixo dos prismas $E = 73,72$ GPa; do módulo de elasticidade perpendicular ao eixo dos prismas $E = 63,27$ GPa e o coeficiente de Poisson $\nu = 0,23$.

Xie *et al.* (2009) compraram o comportamento mecânico do esmalte dentário sem alteração com esmalte hipomineralizado por meio de teste de nanoindentação. Utilizaram amostras dentárias que foram colocadas em resina epoxy, cortadas transversalmente, polidas e limpas. Os testes foram realizados com a indentação paralela ao longo eixo dos prismas. Encontraram os valores de módulo de elasticidade de esmalte entre $E = 55$

a 75 GPa e para esmalte hipomineralizado $E_{hipo} = 10 \pm 1$ GPa. A partir disso, concluíram que o valor de módulo de elasticidade do esmalte hipomineralizado é menor devido à maior concentração de matriz orgânica nesse tipo de tecido.

Chan *et al.* (2011) através da nanoindentação estudaram o comportamento mecânico do esmalte dentário na região de junção com a dentina. Utilizaram 4 pré-molares que foram seccionados, polidos, limpos e mantidos em solução balanceada salina de Hank (rica em íons bicarbonato). Para a indentação foi utilizado o indentador piramidal e os dentes foram mantidos hidratados. O resultado obtido para o módulo elástico do esmalte foi de $E = 95 \pm 1,5$ GPa e concluíram que a resistência à flexão do esmalte na região de junção com a dentina é menor (flexão é um esforço físico onde ocorre perpendicularmente ao eixo do corpo, paralelamente à força atuante).

Weig *et al.* (2011) estudaram as propriedades mecânicas do esmalte dentário através da microdureza instrumentada. Os testes foram realizados em terceiros molares incluídos em resina acrílica e polidos, posteriormente. Foram realizadas 5 indentações em cada ponto selecionado no esmalte, sendo 3 pontos de escolha. Os parâmetros utilizados foram: força de contato 10 mN; velocidade de aproximação $8000 \frac{nm}{min}$; carga máxima 500 mN; taxa de carregamento $1000 \frac{nm}{min}$ e tempo de penetração do indentador de 35 segundos. A partir disso encontraram os seguintes valores de módulo de elasticidade para o esmalte: $E = 87,66 \pm 1,2$ GPa para esmalte; $E = 78,04 \pm 6,7$ para esmalte central e $E = 55,6 \pm 6,3$ para esmalte na região de junção amelo-dentinária.

O'Brien *et al.* (2014) por meio de nanoindentação avaliaram o comportamento mecânico do esmalte. Selecionaram 9 amostras dentárias, que foram polidas e mantidas em solução balanceada salina de Hank. A ponta utilizada foi do tipo piramidal para as nanoindentações e a força máxima foi de 400mN, a taxa foi de 2,5mN/s. Observaram que quanto maior a indentação, menor o módulo de Young do esmalte. Assim, é necessário medi-lo como uma função da profundidade de indentação e aplicar isto nas simulações. Com essa aproximação, eles determinaram o módulo de esmalte de acordo com a espessura a partir da superfície oclusal até JED (junção esmalte-dentina). Para cada indentação testada, o módulo de elasticidade diminui com o aumento da distância a partir da

superfície oclusal, confirmando que o esmalte é na verdade um material com gradação funcional.

Baseando-se nessa revisão de literatura acerca do testes experimentais para estimativas do módulo de elasticidade do esmalte dentário é possível observar que os valores encontrados para a matriz orgânica, para a hidroxiapatita e para o esmalte dentário variam e isso é devido à falta de padrão nos preparos das amostras e técnica de indentação ente as pesquisas.

Os resultados do módulo de elasticidade do esmalte observados pelos autores apresentados acima foram resumidos e podem ser visualizados na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Módulo elástico do esmalte a partir de diferentes métodos de medidas

Autor	Tipo de teste	Módulo de elasticidade (GPa)	superfície, posição (esmalte dentário)	tipo
Craig <i>et al.</i> (1961)	compressão	84, 1 ± 6, 2 77, 9 ± 4, 8	paralelo à direção do prisma perpendicular à direção do prisma	prisma
Staines <i>et al.</i> (1981)	identação esférica	83	esmalte	esmalte
Habelitz <i>et al.</i> (2001)	nanoindentação	87, 2 ± 2, 2 72, 7 ± 4, 5 88 ± 8, 6	paralelo à direção prisma perpendicular ao prisma região de cabeça de prisma	prisma
Cuy <i>et al.</i> (2002)	nanoindentação	80, 3 ± 7, 2 120 – 47	região de cauda de prisma cúspide até Junção amelo- dentinária	prisma
He <i>et al.</i> (2006)	nanoindentação	92 ± 5 GPa	esmalte	esmalte
Braly (2007)	nanoindentação	120 – 130 47	cúspide	esmalte
He e Swain (2007a)	nanoindentação	105 ± 2	esmalte	esmalte
He e Swain (2007c)	micro e nanoindentação	94, 1 ± 5, 4	esmalte	esmalte
Miura <i>et al.</i> (2009)	microindentação	73, 72 63, 77 55 – 75	longitudinal aos prismas transversal aos prismas	prisma
Xie <i>et al.</i> (2009)	nanoindentação	10 – 1 95 ± 1, 5	esmalte normal	esmalte
Chan <i>et al.</i> (2011)	nanoindentação	87, 66 ± 1, 2 78, 04 ± 6, 7	esmalte hipomineralizado	esmalte
Weig <i>et al.</i> (2011)	microindentação	55, 6 ± 6, 3	esmalte central esmalte junção amelo- dentinária	esmalte

5 MODELOS MULTIESCALA DO ESMALTE DENTÁRIO

Técnica multiescala é resumidamente levar em conta as características da microescala na modelagem de sistemas heterogêneos (materiais compósitos) para que se obtenha uma simulação ajustada de seus efeitos na macroescala. Ou seja, significa transferir informações obtidas a partir da escala "pequena" para uma escala "grande". Essa transferência, também denominada de *upscaling*, permite o emprego da simulação numérica em macroescala com malhas mais grosseiras, porém com informações refinadas sobre a descrição do problema (Chung *et al.*, 2001; Pinho-da Cruz *et al.*, 2009; Oliveira *et al.*, 2009).

Pode-se considerar o esmalte dentário como um material compósito formado pela fase contínua da matriz (parte orgânica) e pela fase descontínua de reforço (hidroxiapatita). De acordo com Ge *et al.* (2005), o esmalte dentário está adaptado para absorver tensões devido à sua rigidez e essa propriedade está relacionada à sua microestrutura.

Spears (1997) simulou analiticamente o modelo prismático do esmalte dentário com valores de módulo de elasticidade dos cristais de hidroxiapatita $E_{cry} = 114GPa$, módulo de elasticidade da matriz proteica $E_{org} = 4,3GPa$ e coeficiente de poisson para ambas as fases $\nu = 0,3$. O modelo multiescala foi desenvolvido pelo programa *ANSYS* é apresentado na figura TAL e se baseia numa malha quadrada com 256 nós espaçados igualmente. A malha é repetida 8 vezes, produzindo um cubo e os elementos representam a natureza anisotrópica do esmalte. O modelo de baseia na junção de 3 prismas e cada prisma possui, para a cabeça, as dimensões $4\mu m$ de espessura, $4\mu m$ de altura e $16\mu m$ de comprimento e $4 \times 4 \times 8$ elementos, respectivamente, para a cauda, as dimensões $2\mu m$ de espessura, $4\mu m$ de altura e $16\mu m$ de comprimento, com $2 \times 4 \times 8$ elementos. A partir disso, baseado em um sistema de coordenadas de elemento para cada elemento as direções de alta (E_{para}) e baixa (E_{perp}) dureza puderam ser rotacionadas para se aproximarem da orientação dos

cristais. Foi gerado um deslocamento constante em cada nós dos elementos e a partir desse deslocamento foram calculados a dureza e o módulo de elasticidade. Encontraram os seguintes valores para módulo de elasticidade efetivo do esmalte dentário: para fração volumétrica de 0,81 de prisma de hidroxiapatita, módulo de elasticidade ao longo eixo dos prismas $E_z = 60$ GPa, módulo de elasticidade verticalmente através da orientação dos prismas $E_y = 30$ GPa e módulo de elasticidade horizontalmente através da orientação dos prismas $E_x = 20$ GPa. Para a fração volumétrica de 0,81 de cristais de HAp o valor do módulo de Young paralelo à orientação dos cristais $E_{para} = 93$ GPa e o valor do módulo de Young perpendicular à orientação dos cristais $E_{perp} = 19$ GPa. Para fração volumétrica de 0,99 de prismas o módulo de elasticidade ao longo eixo dos prismas $E_z = 110$ GPa, o módulo de elasticidade verticalmente através da orientação dos prismas $E_y = 95$ GPa e o módulo de elasticidade horizontalmente através da orientação dos prismas $E_x = 90$ GPa. Para a fração volumétrica de 0,99 de cristais de HAp o valor do módulo de Young paralelo à orientação dos cristais $E_{para} = 113$ GPa e o valor do módulo de Young perpendicular à orientação dos cristais $E_{perp} = 91$ GPa. Com isso, percebeu que o valor de módulo de elasticidade para o esmalte dentário é menor do que o atribuído para os cristais de hidroxiapatita, porém muito maiores do que o atribuído para a matriz orgânica. Além disso, observou que a dureza do compósito ao longo dos prismas, ou seja na direção paralela, é maior e conseqüentemente a deformação é menor. Já na direção perpendicular, a dureza é menor e a deformação é maior (figura 5.2).

He e Swain (2008) apresentaram evidências experimentais e numéricas sobre propriedades mecânicas e nanomecânicas do esmalte, incluindo sua estrutura hierárquica. Desenvolveram um modelo mecânico simplificado no âmbito dos cristais de HAp na tentativa de explicar o comportamento elástico do esmalte encontrado nos resultados experimentais. Baseando-se nisso, o cálculo analítico para a estimativa do módulo de elasticidade do esmalte dentário foi feito de acordo com as equações propostas por Zhou e Hsiung (2007) (apud He e Swain, 2008) que podem ser vista nas equações (5.1) para deformação uniforme e (5.2) para tensão uniforme, onde V é a fração volumétrica e E é o módulo de elasticidade. Para os autores, a microestrutura do esmalte dentário consiste

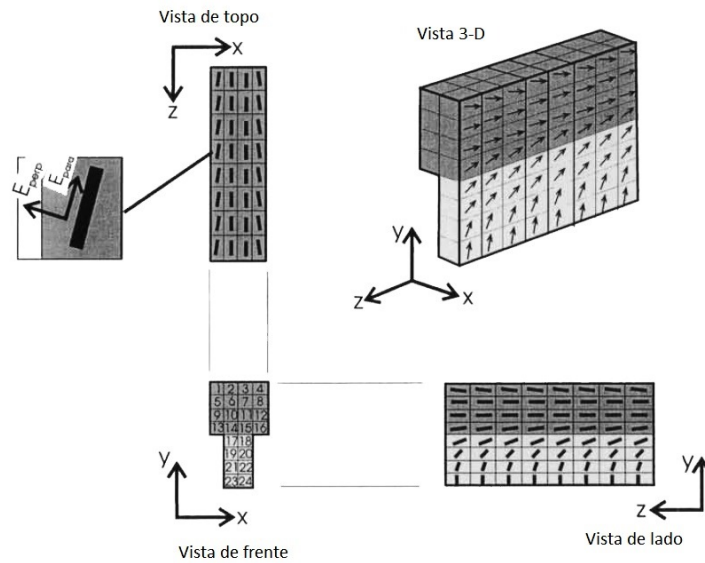


Figura 5.1: Modelo multiescala do esmalte dentário proposto por Spears (1997).

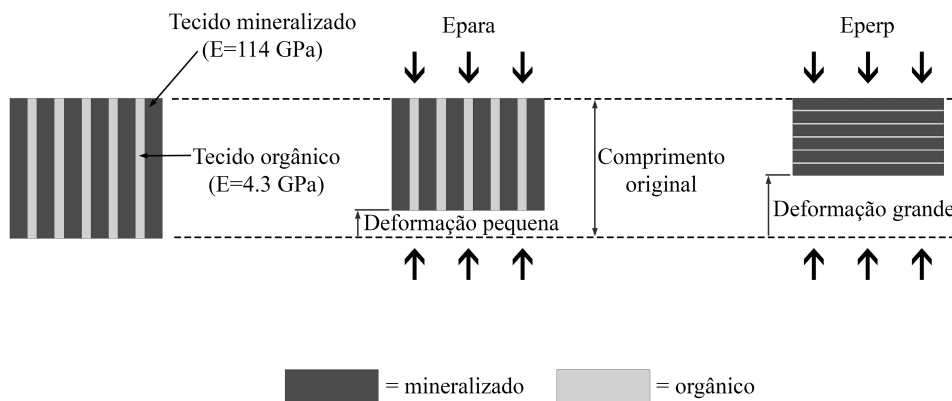


Figura 5.2: Desenho esquemático da deformação do esmalte dentário nas direções paralela e perpendicular em relação ao eixo dos cristais, adaptado de Spears (1997).

de cristais muito finos de HAp alinhados em diferentes níveis hierárquicos, representado na figura 5.3. O modelo numérico analítico por eles estudado explica, por exemplo, que devido à suavidade e viscosidade das proteínas, qualquer carga de contato pequena produzirá deformação de cisalhamento nas finas camadas de proteínas. Esta é a razão que explica porque não se pode encontrar qualquer resposta puramente elástica em medições de tensão-deformação do esmalte por meio de indentação. E concluíram que as estruturas

hierárquicas apresentam propriedades anisotrópicas e as proteínas macromoleculares um comportamento nanomecânico peculiar.

$$E_{enamel} = V_{HAP}E_{HAP} + V_{matriz}E_{matriz} \quad (5.1)$$

$$\frac{1}{E_{enamel}} = \frac{V_{HAP}}{E_{HAP}} + \frac{V_{matriz}}{E_{matriz}} \quad (5.2)$$

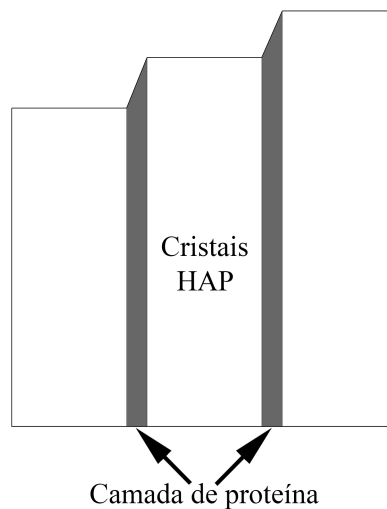


Figura 5.3: Representação do modelo microscópico por eles adotados para a análise numérica das propriedades dos componentes do esmalte. Retirado de He e Swain (2008).

Xie *et al.* (2009) utilizaram modelos analíticos dos tipos teoria laminada e estrutura compósita escalonada para explorar as relações do módulo elástico do compósito proteína-mineral (esmalte), com a espessura da camada de proteína e com a direção da carga aplicada. Os autores perceberam que na microestrutura ocorre uma mudança gradual na orientação dos cristais na área entre a cabeça e a cauda dos prismas. O modelo por eles adotado, figura 5.4, representa as camadas de proteínas que envolvem os cristais de hidroxiapatita, que ocupam 96% do volume, sendo que a carga mecânica aplicada foi direcionada em vários ângulos diferentes (de 0° a 50°) com relação ao eixo transversal dos prismas. Usaram como dados iniciais os valores de módulo de elasticidade da parte mineral

$E_m = 114$ GPa e módulo de elasticidade da proteína $E_p = 0,1$ GPa. Concluíram que para o esmalte, a fina camada de proteínas entre os cristais de apatita altamente não circulares, por causa da elevada concentração de sais minerais, resulta em uma maior rigidez. O módulo de elasticidade da estrutura esmalte mineral-proteína diminui rapidamente com o aumento do ângulo de carga fora do eixo da orientação dos cristais.

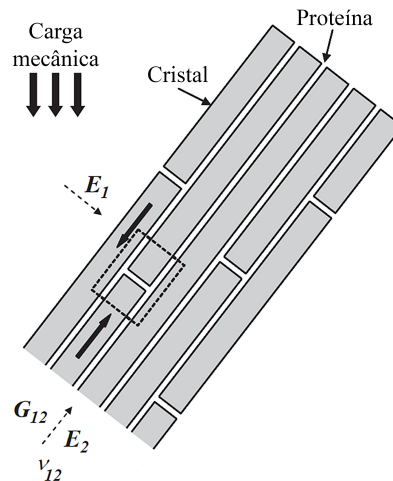


Figura 5.4: Modelo mecânico representativo da microestrutura do esmalte dentário adotado por Xie *et al.* (2009).

Miura *et al.* (2009) utilizaram simulação multiescala numérica associada ao método de elementos finitos para esmalte dentário e osso alveolar, a partir do modelo microescala por eles adotados, passando pela mesoescala até a macroescala. A figura 5.5 exemplifica as várias escalas, sendo a microescala semelhante à imagem de microscopia do esmalte dentário, no qual os prismas de HAp apresentam forma de buraco de fechadura; a mesoescala equivale ao dente e a macroescala introduz o osso alveolar, aquele que suporta o órgão dentário.

An *et al.* (2012) exploraram as vantagens da distribuição não uniforme dos cristais de hidroxiapatita e também identificaram como se dá o comportamento mecânico do esmalte dentário. Para isso utilizaram simulações numéricas multiescala. Desenvolveram volumes elementares representativos (VER) tanto na nanoescala, quanto na microescala. A nanoescala (figura 5.6) representa a composição nanométrica do esmalte dentário, que é composta por cristais hexagonais de HAp, que estão empacotados e possuem várias orientações angulares diferentes a partir da cabeça do prisma HAp até a cauda. Nesta

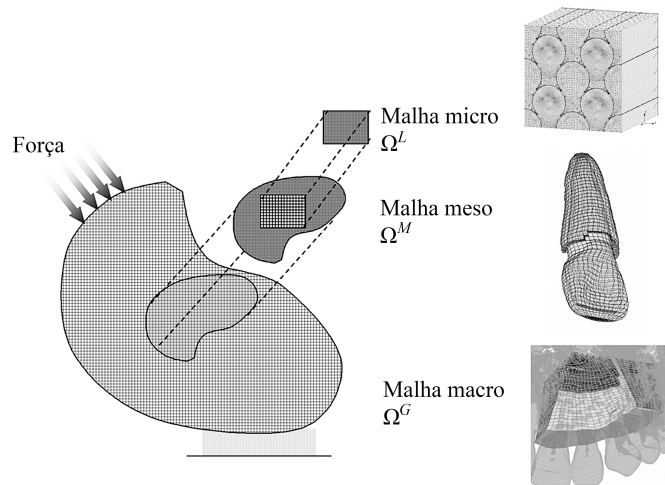


Figura 5.5: Representação de várias escalas associadas ao sistema "dentário" com malhas de elementos finitos para esmalte dentário (microescala), dente (mesoescala), suporte no osso alveolar (macroescala). Extraído de Miura *et al.* (2009).

escala, os autores desenvolveram três tipos diferentes de VER (Figura 5.6), sendo o VER(A) a representação de uma matriz proteica descontínua e de disposição irregular dos cristais minerais; o VER(B) reproduziu, de forma diferente do anterior, a disposição regular dos cristais, sem considerar a imperfeição da matriz e por último o VER(C) possui as mesmas características do anterior, porém a espessura da camada de cristais é $10\eta m$ maior. A microescala (figura 5.7) é composta por prismas de esmalte e matriz orgânica e o comportamento mecânico dessa escala foi determinado de acordo com os resultados encontrados na nanoescala. A seção transversal dos prismas é dividida em 7 regiões, no qual em cada uma delas a orientação dos cristais muda. Os modelos da nano escala foram simulados por meio de análise numérica pelo método de elementos finitos e os resultados foram incorporados na simulação do modelo microescala.

Bar-On e Wagner (2012) estudaram o esmalte dentário e a dentina sob a perspectiva de compósitos multiescala formados por uma microestrutura escalonada feita de plaquetas duras embebidas em uma matriz mais complacente e, posteriormente, a agregaram em uma estrutura do tipo compósito macroscópico. Utilizaram a modelagem de aproximação ascendente (de baixo para cima), ou seja, a partir da menor escala (microestrutura escalonada) para a maior escala (macroestrutura do tipo compósito) e o módulo efetivo das estruturas foi calculado analiticamente pelos modelos BW (Bar-On e Wagner, 2012

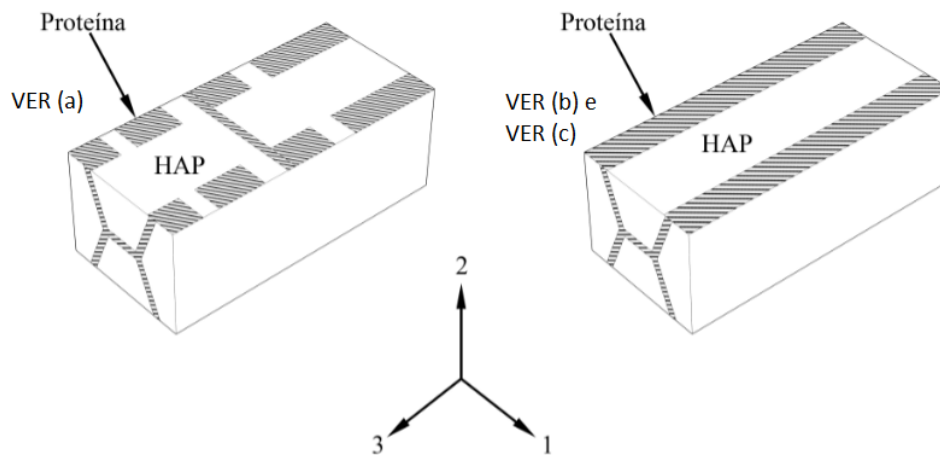


Figura 5.6: Representação em nanoescala dos volumes elementares representativos (VER) adotados por An *et al.* (2012).

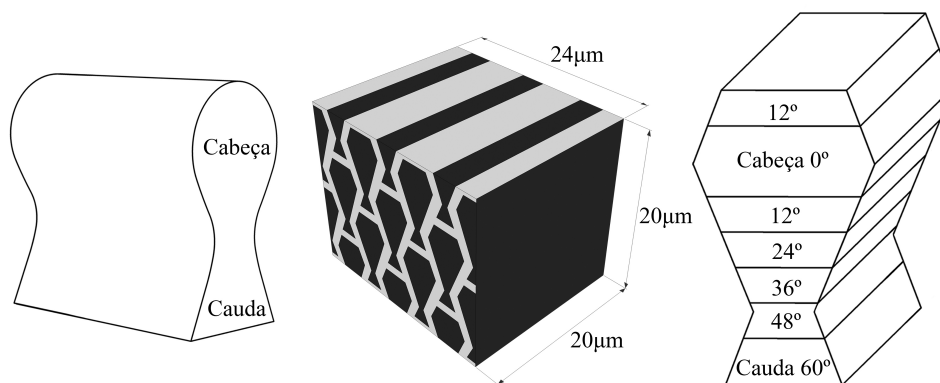


Figura 5.7: Representação em microescala do VER adotado por An *et al.* (2012).

apud Bar-On e Wagner (2012b)) e Halpin-Tsai (Bar-On e Wagner, 2012 apud Affdl e Kardos (1976)). A microestrutura é definida pelos autores como um arranjo de plaquetas rígidas (correspondentes aos cristais de hidroxiapatita) com comprimento L_p e altura h_p , inseridas de forma escalonada dentro de uma matriz mole (correspondente à matriz proteica). Cada unidade periódica, demonstrada na figura 5.8, apresenta comprimento L , altura h e é formada por duas plaquetas. A largura t varia de acordo com a estrutura a ser representada. Para a microestrutura do esmalte dentário, com plaquetas do tipo prisma, $t = h \ll L$; já para a microestrutura da dentina, com plaquetas do tipo chapa, $h \ll t = L$. Na macroescala o esmalte inclui um conjunto de prismas unidirecionados

dentro de um material de incorporação. Tal tecido é hipermineralizado composto por prismas ($\approx 5\mu\text{m}$ de diâmetro), que estão unidos por uma fina camada ($\approx 0.5\mu\text{m}$) de material interprismático. Como visto na figura 5.9, o modelo 2D da macroescala consiste basicamente de camadas alternadas de prisma e material interprismático. Sendo que ambas as camadas possuem a mesma microescala, porém as plaquetas na camada interprismas são orientadas a $\pm 60^\circ$ com relação à orientação dos prismas. Para a simulação foram atribuídos os valores de módulo de elasticidade para a hidroxiapatita $E = 114$ GPa e para a fase inorgânica de $E = 0,5$ GPa. Encontraram o valor de $E = 89 - 117,7$ GPa para o módulo de elasticidade dos prismas de HAp. A partir desse resultado conseguiram estimar os valores do módulo de elasticidade do esmalte dentário, sendo $E_{\text{perp}} = 80 \pm 4$ GPa o módulo elástico efetivo do esmalte na direção perpendicular ao eixo dos prismas e $E_{\text{para}} = 84,1$ GPa o módulo elástico efetivo do esmalte na direção paralela ao eixo dos prismas. Concluíram que as estruturas mecânica dos cristais de HAp e proteínas da matriz são semelhantes às de compósitos reforçados por fibras longas.

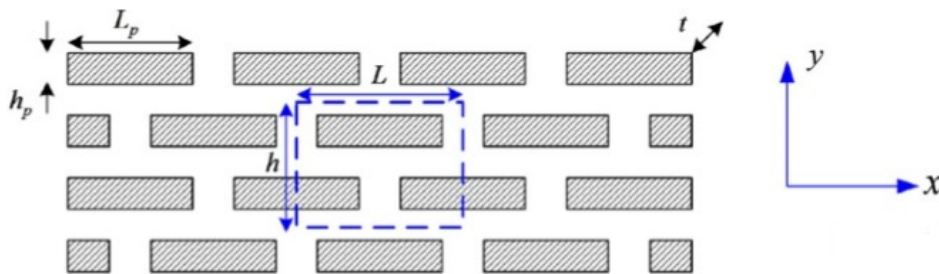


Figura 5.8: Descrição esquemática da microestrutura escalonada desenvolvida por Bar-On e Wagner (2012).

Bar-On e Wagner (2012b) propuseram um modelo compósito multiescala baseado em duas escalas. Segundo os autores, um compósito multiescala foi definido como uma estrutura em que cada escala é um material compósito, que contém uma matriz e um reforço. Dessa forma, o compósito na pequena escala inclui uma matriz reforçada por plaquetas (ou prismas) e na escala maior contém fibras incorporadas nessa mesma matriz, que é apresentada na figura 5.10. Os módulos efetivos de propriedade mecânica das duas escalas foram calculados por meio de modelagem de aproximação ascendente (de baixo para cima) analiticamente.

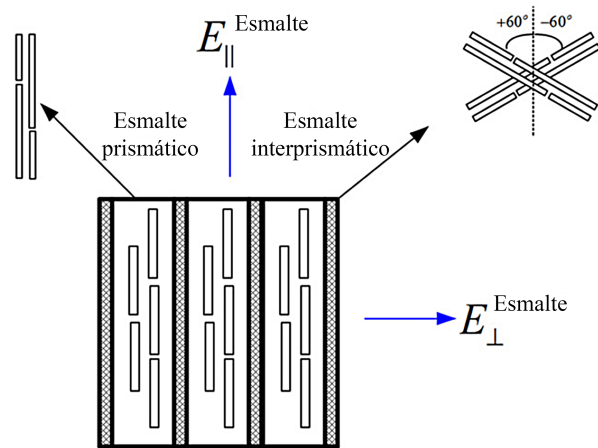


Figura 5.9: Modelo laminado 2D da estrutura do esmalte dentário, incluindo camadas de prisma e interprismas anisotrópicos (Bar-On e Wagner, 2012).

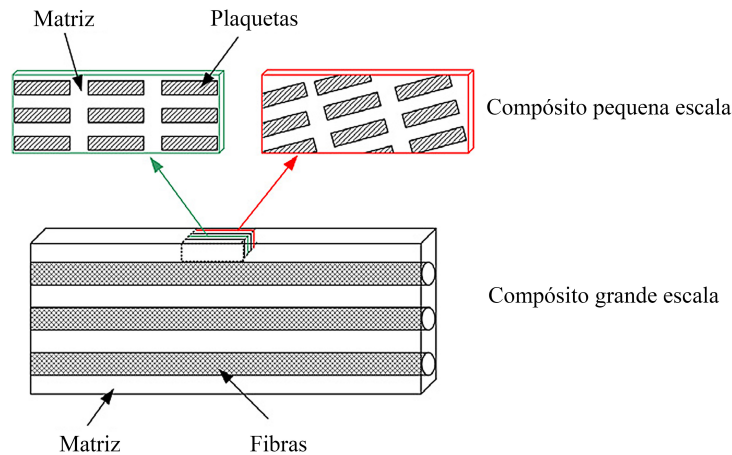


Figura 5.10: Desenho esquemático de um compósito de duas escala adaptado Bar-On e Wagner (2012b).

Os autores da Cunha *et al.* (2012) utilizaram a modelagem multiescala por meio da técnica de Homogeneização por Expansão Assintótica (HEA) para determinar o módulo de elasticidade do esmalte dentário, considerando que o mesmo se comporta como um material compósito ortotrópico. Para o estudo, os autores desenvolveram um modelo geométrico cúbico de arestas unitárias com inclusões cilíndricas, representando os prismas, que ocupam por volta de 80% do volume total (figura 5.11). Para isso o módulo de elasticidade da hidroxiapatita atribuído para representar as inclusões de tecido inorgânico foi de $E=114$ GPa e o módulo de elasticidade da matriz orgânica foi o mesmo da queratina $E= 4,3$ GPa. Consideraram ambos os materiais como isotrópicos, com coeficiente de

Poisson de $\nu = 0,33$. Para a aplicação da técnica foi empregada malha de elementos finitos (12.290 elementos) na geometria adotada com comportamento transversalmente isotrópico. E os valores efetivos para módulo de elasticidade do esmalte foram de: $E_1 = E_2 = 40,9$ GPa e $E_3 = 86,5$ GPa.

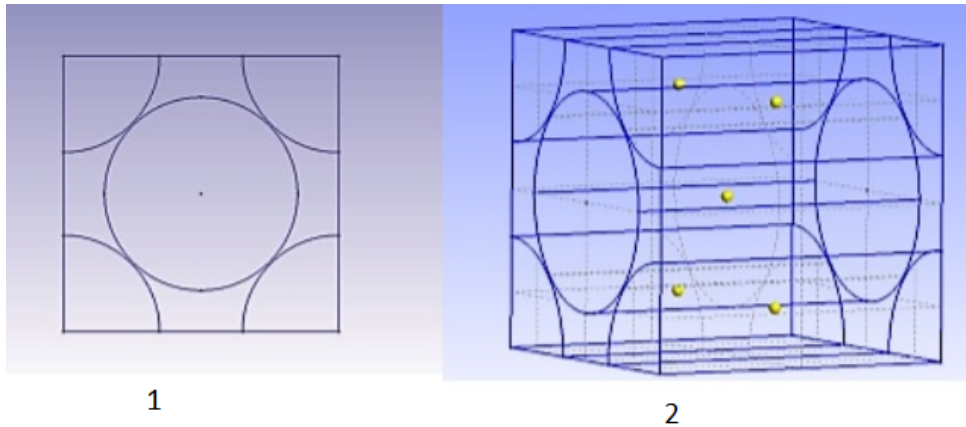


Figura 5.11: Representação esquemática dos modelos 2D e 3D da microestrutura do esmalte dentário adotado por (da Cunha *et al.*, 2012).

A figura 5.12 ilustra o desenho esquemático das várias escalas do esmalte dentário adotado por Lu *et al.* (2012). A imagem 1 representa o modelo transversalmente isotrópico das fibras de HAp dentro dos prismas, a imagem 2 é o modelo monoclinico com arranjos periódicos de prismas de esmalte que compõem o esmalte, e a imagem 3 mostra um dente com o esmalte dentário na visão macroscópica. Consoante os autores, na escala submicro as fibras de HAp (30 – 70nm de largura e $100\mu m$ de comprimento) estão ligadas por uma matriz orgânica e são compostas por cristais de fosfato de cálcio com forma hexagonal. Nessa escala, o comportamento efetivo de tensão-deformação pode ser modelado como transversalmente isotrópico. Consensualmente, as estruturas mecânicas de matriz proteica com fibras de HAp são semelhantes aos compósitos reforçados por fibras longas. Entretanto, ao contrário dos compósitos, as fibras de HAp não são unidirecionais e suas orientações variam dentro dos prismas. Na escala seguinte, a micrométrica, pode-se ver o arranjo das células periódicas repetitivas em forma de buraco de fechadura, que são os prismas de esmalte dentário. Localmente, as microestruturas possuem apenas um plano de simetria e, por isso, são classificadas como material do tipo monoclinico. Um modelo em macroescala descrito pela relação tensão-deformação monoclinica pode ser

utilizado para estudar as respostas mecânicas do dente como um todo, sem a necessidade de se incluir os prismas discretos. A fim de determinarem as 13 componentes do material monoclinico, os autores utilizaram o método de decomposição do valor singular (*SVD*), que se baseia no método dos mínimos quadrados de múltiplas variáveis, ajustando de forma a gerar as melhores estimativas conhecidas ou disponíveis.

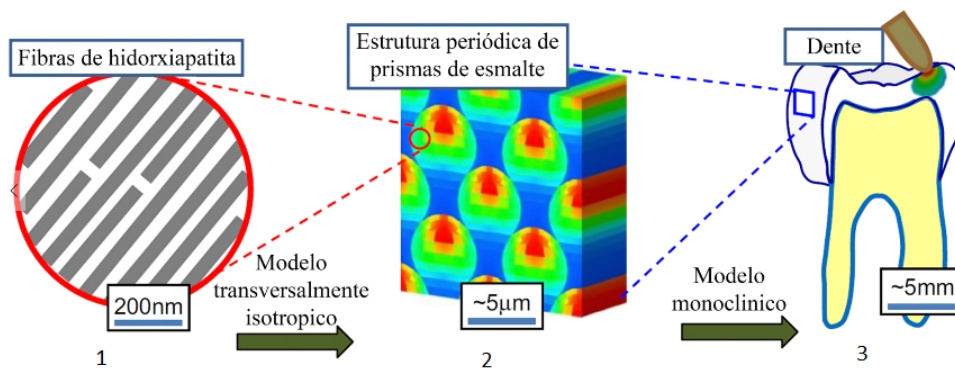


Figura 5.12: Esquema representativo da escala hierárquica do esmalte dentário, que requer dois níveis de homogeneização com modelos anisotrópicos separados (Lu *et al.*, 2012).

Scheider *et al.* (2015) utilizaram modelagem multiescala afim de obter a dureza do esmalte dentário. O modelo microestrutural proposto é, na sua escala menor, um compósito com fibras de HAp hexagonais alinhadas unidirecionalmente, cercado por uma pequena matriz intercamadas. A fração volumétrica mineral é de 90%. Os autores assumem que a hidroxiapatita é um material forte, porém frágil, enquanto que a proteína é mais ou menos 100 vezes mais macia. As deformações foram obtidas numericamente por elementos finitos e o comportamento do material na próxima escala maior foi recuperado através de homogeneização. Para essa homogeneização, os autores assumem que, pelo menos nas duas escalas (figura 5.13), a agregação hierárquica (composta por fibras e matriz) tem a mesma estrutura, uma vez que as hastes têm a mesma estrutura que as próprias fibras minerais. No primeiro nível hierárquico a microestrutura é modelada explicitamente como composição heterogênea dos seus constituintes originais (HAp e proteína) e em cada nível mais elevado, o modelo vai consistir de compósito homogeneizado do nível anterior, ou seja, já na próxima escala as fibras consistem de microestrutura fibrosa homogeneizada de natureza hiperelástica anisotrópica, apresentada na figura 5.14.

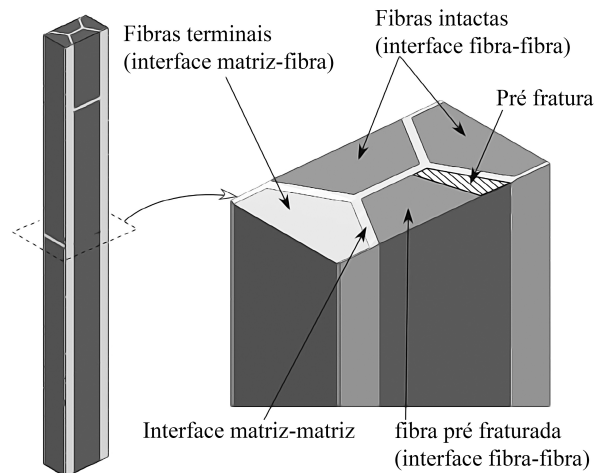


Figura 5.13: Desenho esquemático de modelo, no qual as fibras hexagonais cinza escuro representam a hidroxiapatita e a fina camada entre elas de cor cinza claro representa a matriz orgânica (Scheider *et al.*, 2015).

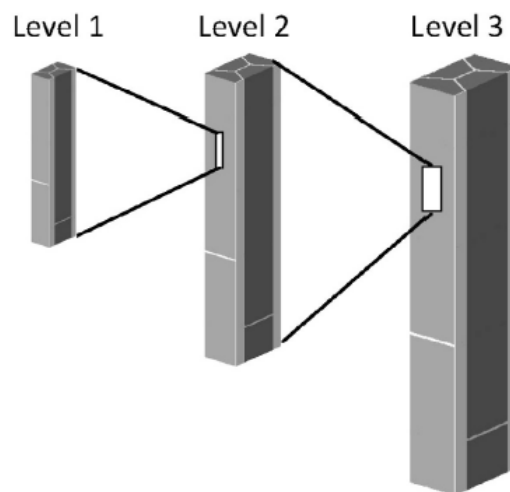


Figura 5.14: Célula unitária representativa da microestrutura fibrosa nos três níveis similares entre si. Cinza claro: matriz proteica e Cinza escuro: mineral (Scheider *et al.*, 2015).

A tabela 5.1 mostra de forma resumida os valores encontrados para o esmalte dentário através de simulação multiescala.

Tabela 5.1: Módulo elástico do esmalte a partir de simulação multiescala

Autor	proporção do volume de inclusão obtido ou característica do modelo	Módulo de elasticidade (GPa)	(paralelo ao longo dos eixos dos prismas/perpendicular/transversalmente)
Spears (1997)	81% - hipomineralizado	30/ 20/ 60	
	99%	99/ 95/ 110	
Xie <i>et al.</i> (2009)	80% - hipomineralizado	40 / 2,3/ -	
	96%	90/ 10, 9/ -	
Miura <i>et al.</i> (2009)	-	73, 72/ 63, 27/ -	
An <i>et al.</i> (2012)	matriz proteica descontínua e cristais irregulares	41/ 41/ 51, 6	
	cristais regulares e matriz perfeita	41, 41/ 45, 45/ 73	
	mesma da anterior com camada de matriz mais espessa	38, 7/ 42, 8/ 72, 11	
Bar-On e Wagner (2012)	95%	84, 1/ 80 ± 4/ -	
da Cunha <i>et al.</i> (2012)	80%	86, 5/ 40, 9/ -	
Lu <i>et al.</i> (2012)	95%	78 ± 5/ 32 ± 4/ -	

6 ANÁLISE COMPUTACIONAL DA ESTRUTURA DO ESMALTE DENTÁRIO

6.1 Descrição Geral do método

Os testes experimentais de indentação para o esmalte dentário revelam dados de propriedades de materiais de estruturas compósitas, entretanto, tais testes dificilmente oferecem dados sobre propriedades de materiais da fibra mineral ou da proteína isoladamente. As propriedades do esmalte dentário dependem da sua posição no dente e da geometria da amostra, de tal modo que existe uma variação muito ampla com respeito às propriedades mecânicas reportadas na literatura (Chan *et al.*, 2011; Cuy *et al.*, 2002; Craig *et al.*, 1961; Habelitz *et al.*, 2001; He *et al.*, 2006; He e Swain, 2007a,c; Miura *et al.*, 2009; Scheider *et al.*, 2015; Xie *et al.*, 2009; Weig *et al.*, 2011).

Quando o esmalte é submetido a diferentes tratamentos térmicos ou químicos (etapa de processo em testes experimentais) pode haver mudança nas propriedades das proteínas de forma significativa, diretamente ligada ao fato de que essas proteínas regulam as propriedades mecânicas do esmalte (He e Swain, 2008; Habelitz *et al.*, 2001; Staines *et al.*, 1981; Weig *et al.*, 2011).

O módulo efetivo de elasticidade do esmalte depende da profundidade da indentação e da área de contato gerada entre a ponta do indentador e o material. Os valores pequenos para módulos elásticos de esmalte podem ser explicados devido à profundidade de contato ou área do indentador, já que mais tecido orgânico é incorporado na região de indentação (He *et al.*, 2006).

Baseado nessas informações justifica-se a escolha da simulação numérica no presente estudo. Para obter as propriedades mecânicas homogeneizadas do esmalte dentário, foram

desenvolvidas análises computacionais empregando o programa comercial de elementos finitos Abaqus e o programa HEA2D desenvolvido no Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional da UFJF (Quintela, 2011) que emprega a técnica de homogeneização por expansão assintótica (HEA) via MEF. As descrições gerais do Abaqus e do HEA2D serão mostradas adiante.

Foram gerados dois modelos geométricos. O Modelo 1, enquanto que o Modelo 2 é o que mais se assemelha à morfologia microscópica dos prismas de HAp e da matriz orgânica, visto que esta é uma substância cimentante.

A figura 6.1 mostra, por meio de um fluxograma, as etapas do processo da metodologia simplificada. Primeira etapa: desenvolver o modelo geométrico que represente a célula unitária microscópica do esmalte dentário e gerar malha de elementos finitos a partir desse modelo, ambos realizados através do *software* Abaqus. Segunda etapa: ler e armazenar, através de uma subrotina que foi desenvolvida neste estudo feita em Matlab, denominada LESCREVE, as informações da malha de elementos finitos que foi gerada através do Abaqus, tais como: número de nós e suas coordenadas, número de elementos e suas conectividades, as propriedades de cada fase e elementos que compõem cada fase; e por último utilizar essas informações como dados de entrada para o programa principal HEA2D (Quintela, 2011) a fim de se obter o tensor homogeneizado de propriedades efetivas mecânicas do esmalte dentário.



Figura 6.1: Esquematização através de fluxograma da metodologia do estudo numérico realizado neste trabalho.

6.2 Programa de elementos finitos Abaqus

Abaqus é um pacote de *software* comercial para análise por elementos finitos desenvolvido pela HKS Inc de Rhode Island, E.U.A. e comercializado sob a SIMULIA, marca da Dassault Systemes S.A. O conjunto de produtos Abaqus consiste em três produtos principais: Abaqus / Standard, Abaqus / Explicit e Abaqus / CAE (3ds.com, 2015).

O ABAQUS/CAE é um pré e pós-processador. Como pré-processador, gera o arquivo de entrada de dados que contém a geometria, propriedades do material, condições de contorno, carregamento aplicado e a malha de elementos finitos definidos pelo usuário. O programa ainda permite que o arquivo de entrada de dados seja alterado manualmente pelo usuário. Como pós-processador, o ABAQUS/CAE possibilita a visualização gráfica dos resultados. O ABAQUS/Viewer funciona exclusivamente como pós-processador. O ABAQUS/Standard e o ABAQUS/Explicit simulam computacionalmente carregamentos estáticos e dinâmicos, respectivamente (3ds.com, 2015).

Neste trabalho, o Abaqus foi empregado na confecção do modelo geométrico e na geração das malhas de elementos finitos empregadas posteriormente nas análises.

6.2.1 Célula unitária representativa dos modelos

A figura 6.2 representa a célula unitária repetitiva, ou o menor volume elementar representativo (VER), do Modelo 1 e a figura 6.3 a do Modelo 2. Ambos foram gerados com o auxílio do programa Abaqus CAE- pré processador.

Para os modelos adotou-se a geometria quadrada (2D) formada por inclusão de dois prismas em cada composição do esmalte e a relação entre o volume das inclusões e o volume total da célula é de aproximadamente 95% para o Modelo 1 e de 96% para o Modelo 2.

A figura 6.4(a) representa o primeiro modelo, no qual a geometria do prisma se assemelha à sua característica de buraco de fechadura. Essa figura ressalta as porções de prisma que são idênticas dentro da célula unitária, ou seja, as cores coincidentes são partes iguais. Teve-se o cuidado de inserir a mesma malha de elementos finitos nas porções idênticas. A figura 6.4(b) representa a forma simplificada do modelo anterior. A parte em

cor vermelha representa a matriz orgânica e as partes em cinza representam os prismas.

No Modelo 1 há uma fina camada de matriz orgânica entre a cauda dos prismas e a cabeça dos mesmos, diferentemente do Modelo 2, que apresenta as caudas dos prismas engastadas às cabeças dos próximos prismas, o que representa o efeito da zona de transição.

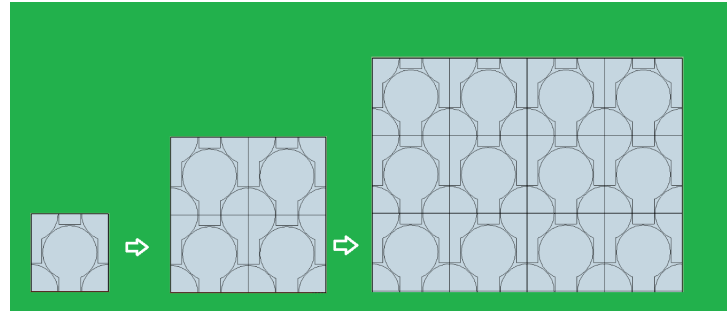


Figura 6.2: Representação esquemática do VER, menor volume representativo que se repete periodicamente na microescala do esmalte dentário, para o Modelo1. As formas de buraco de fechadura são as representações dos prismas de hidroxiapatita.

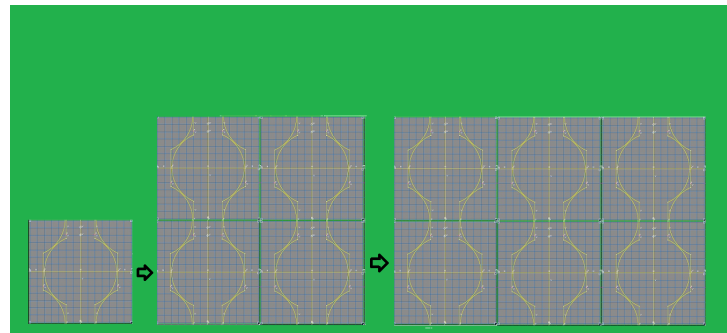


Figura 6.3: Célula unitária periodicamente repetitiva para modelo simplificado do esmalte dentário- Modelo2.

6.2.2 Malha de elementos finitos

O aspecto da malha de elementos finitos empregada no presente estudo é apresentado na figura 6.5(a) para o Modelo 1 e na figura 6.5(b), para o Modelo 2. As malhas são formadas por elementos triangulares quadráticos (6 nós), que no Abaqus são do tipo=CPS6M. Uma característica importante é que as malhas de elementos finitos, geradas no *software* Abaqus, devem ser capazes de aceitar imposição de condições de contorno periódicas (CCP) nos nós localizados nas arestas.

Outras considerações importantes são: 1- na região de interface, ou seja, na transição

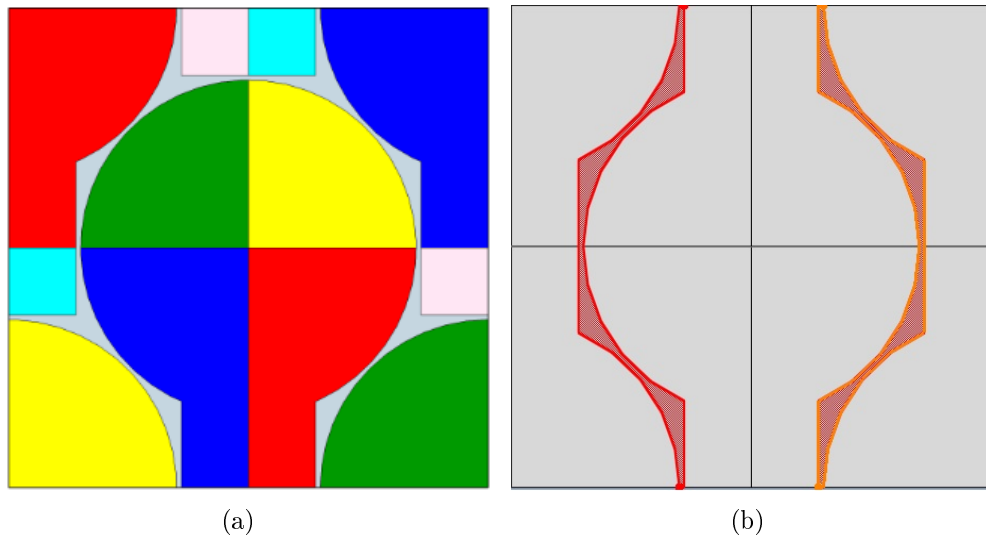


Figura 6.4: Imagem a- Modelo 1 2D 1x1 representativo da célula unitária repetitiva da microscopia do esmalte dentário. As partes coloridas são as inclusões de prisma de hidroxiapatita, e as partes cinzas são as finas camadas de matriz orgânica; imagem b- Modelo 2- modelo simplificado da microestrutura do esmalte dentário.

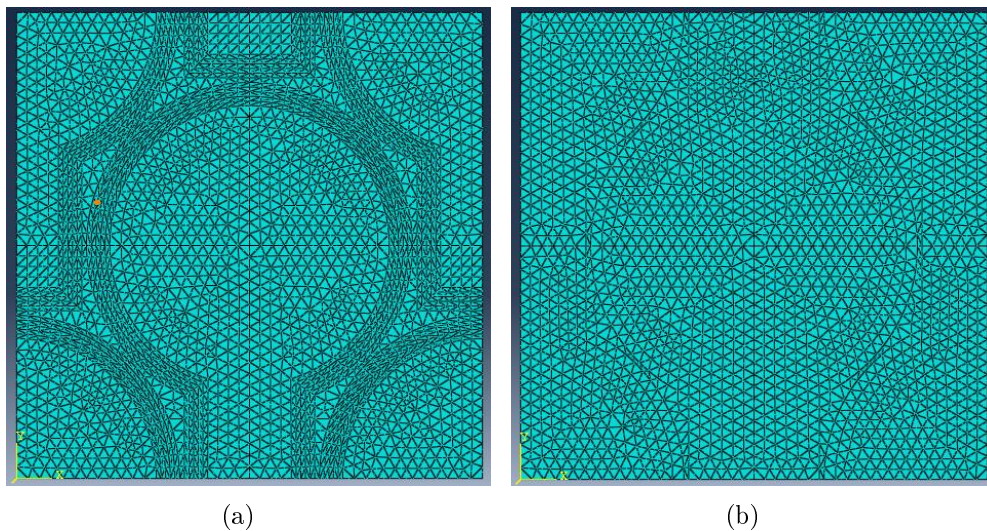


Figura 6.5: Imagem a- Malha de elementos finitos gerada no Modelo1 através Abaqus; imagem b- Malha gerada no Modelo 2 através do Abaqus.

de uma fase para a outra (de prisma para matriz), é necessário que os elementos sejam refinados de forma gradual para que não haja uma grande distorção dos mesmos, visto que as propriedades mecânicas das fases são muito diferentes; 2- as formas das malhas geradas dentro das porções idênticas de prismas que compõem o modelo da figura 6.4(a) devem ser as mesmas na tentativa de reduzir os erros numéricos. Portanto, foi necessário traçar linhas dentro do modelo geométrico para auxiliar na distribuição dos nós dos elementos.

Tais características estão representadas na figura 6.6.

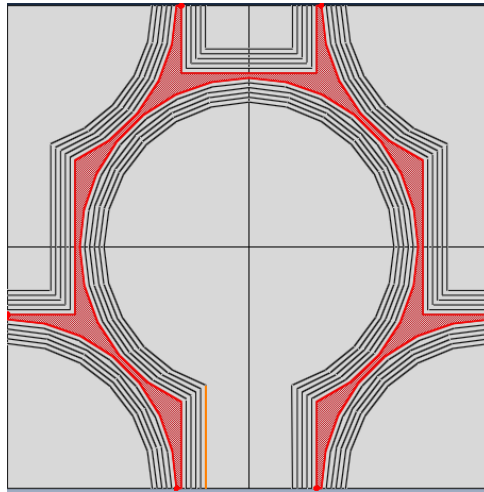


Figura 6.6: Imagem do modelo adotado com as linhas traçadas dentro do modelo e divisões para auxiliar a geração de malhas. A região com cor vermelha indica a matriz orgânica e as partes em cinza as inclusões de prisma de hidroxiapatita.

6.3 Programa HEA2D

Neste estudo foi utilizado o programa HEA2D, que se baseia na técnica de homogeneização por expansão assintótica via MEF, para o cálculo do tensor de propriedades elásticas efetivas do esmalte dentário através de um modelo plano da sua estrutura periódica. Para isso, deve-se fornecer como entrada de dados: as características geométricas e mecânicas da célula periódica, cujo domínio é quadrado; as características das malhas de elementos finitos geradas sobre o modelo (número de nós, matriz de coordenadas dos nós, número de elementos, matriz de conectividade dos elementos, matriz dos elementos com a propriedade mecânica de cada fase que eles compõe) com condições de contorno periódicas. E como resposta tem-se o tensor de propriedades efetivas do material.

A Homogeneização por Expansão Assintótica (HEA) é uma técnica numérica multiescala aplicável a meios que apresentam microestrutura heterogênea periódica (Sanchez-Palencia, 1986). Baseia-se no desacoplamento de diferentes escalas de um material, extrapolando os resultados de escalas inferiores ou heterogêneas para escalas macroscópicas de modo a obter propriedades homogeneizadas ou efetivas.

Segundo os autores Chung *et al.* (2001); Sanchez-Palencia (1986), fundamenta-se em

representar um corpo global, que apresente estrutura periódica em sua composição, por um corpo local, denominado célula periódica, objetivando determinar as propriedades homogeneizadas adequadas para o corpo multifásico, a partir das propriedades mecânicas de cada fase.

Como pode ser visto na figura 6.7, para a estrutura do esmalte dentário, admite-se a existência de pelo menos duas escalas distintas associadas a fenômenos microscópicos e macroscópicos, que podem ser desacopladas. Frequentemente, a notação x é o referencial para a macroescala, que caracteriza o sistema global, e y como o referencial da microescala associada à heterogeneidade da microestrutura estudada (Sanchez-Palencia, 1986).

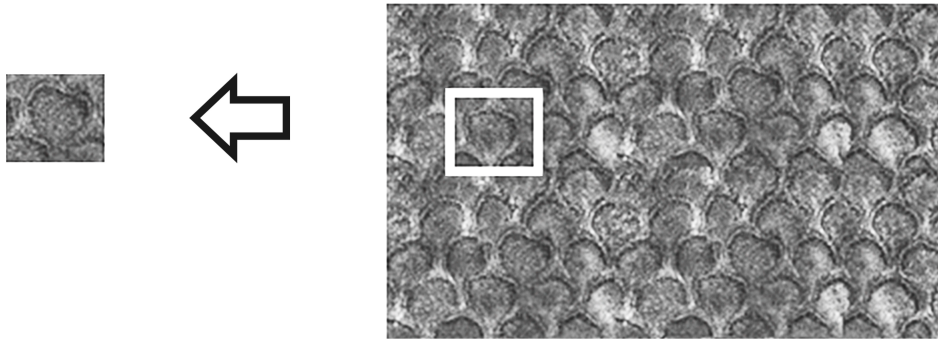


Figura 6.7: Modelo esquemático da célula unitária representativa da microestrutura do esmalte dentário (esquerda) que se repete periodicamente (direita).

Para se correlacionar as escalas, admite-se um parâmetro de escala ϵ , que é uma razão entre a micro e a macroescala, segundo a equação (6.1):

$$y_i = \frac{x_i}{\epsilon}, \quad (6.1)$$

onde y_i é o referencial da microescala; x_i é o referencial para a macroescala e ϵ é o parâmetro de escala.

Para se definir as propriedades mecânicas por meio do tensor homogeneizado é necessário aplicar essa técnica ao problema clássico de mecânica linear (Sanchez-Palencia, 1986) e a partir daí são obtidas as equações diferenciais que descrevem o problema e

que podem ser resolvidas pelo MEF (Oliveira *et al.*, 2007). A HEA é uma técnica de perturbação baseada na série de expansão assintótica em torno do parâmetro ϵ da variável primária, que para o problema mecânico é o deslocamento.

O alicerce da aproximação é a premissa de que o parâmetro de escala tende a zero ($\epsilon \rightarrow 0$), o que implica em dizer que o número de células periódicas tende a infinito e a estrutura não homogênea é aproximada por uma homogênea (Chung *et al.*, 2001; Oliveira *et al.*, 2007; Sanchez-Palencia, 1986), como mostrado na figura 6.8.

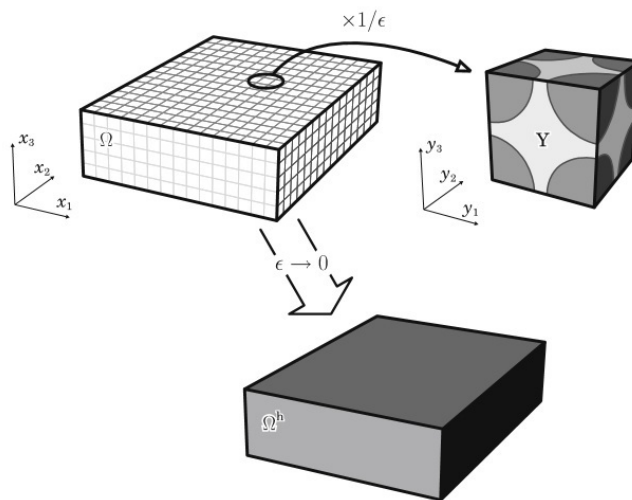


Figura 6.8: Representação esquemática do material heterogêneo x , quando $\epsilon \rightarrow 0$, e a célula unitária y representativa da microescala. Retirado de Pinho-da Cruz *et al.* (2009).

A segunda premissa da HEA é a expansão assintótica da variável central do problema em torno de ϵ . No caso desse estudo, em que se tem pequenas deformações no regime linear elástico, a variável de campo é o deslocamento. Podendo ser expressa como:

$$u_i^\epsilon(x^\epsilon) = u_i^{(0)}(x, y) + \epsilon u_i^{(1)}(x, y) + \epsilon^2 u_i^{(2)}(x, y) + \epsilon^3 u_i^{(3)}(x, y) + \dots \quad (6.2)$$

onde ϵ é o parâmetro de escala, u é o deslocamento, $(.)^{(0)}$ é a escala macroscópica e $(.)^{(1)}$, $(.)^{(2)}$, $(.)^{(3)}$,... são as escalas microscópicas.

O que se espera, dessa forma, é adotar propriedades macroscópicas que considerem a influência das propriedades mecânicas da microestrutura, através de procedimentos semelhantes à determinação de médias (Quintela, 2011). Isso causa diminuição substancial do tamanho do problema e do custo computacional, uma vez que, ao invés de analisar

toda a hierarquia do material de uma vez só, a análise é feita nas partes representativas da estrutura completa (Quintela, 2011).

Para a resolução dessas equações é necessário supor que a variável de campo, ou seja, o deslocamento seja periódico ao longo das fronteiras do VER. Para isso aplica-se CCP, utilizando uma estratégia que induz a redução da ordem do sistema de equações a ser resolvido. Inicialmente, os nós do contorno são associados através da numeração das equações globais: os graus de liberdade (GLs) dos nós correspondentes em arestas opostas recebem a mesma numeração. Uma representação esquemática dos nós do contorno pode ser vista na figura 6.9. Para exemplificar, admite-se que cada nó tenha um grau de liberdade e números iguais indicam a periodicidade entre os nós situados em arestas opostas.

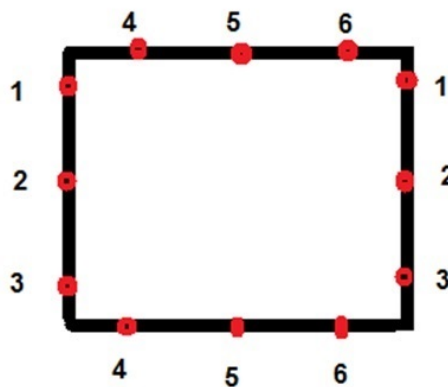


Figura 6.9: Representação da estratégia utilizada para imposição das condições de contorno periódicas.

Para um estudo mais detalhado da técnica HEA indicam-se as referências: Chung *et al.* (2001); Oliveira *et al.* (2007); Sanchez-Palencia (1986).

6.3.1 Subrotina *LESCREVE*

Foi desenvolvida uma sub-rotina na linguagem Matlab (plataforma para processamento algébrico) para transcrever esses os dados de entrada obtidos pelo programa Abaqus para um arquivo compatível com o programa HEA2D. No algoritmo 1 está apresentada a sub-rotina *LESCREVE*. O preenchimento das variáveis da saída são obtidos após leitura do

arquivo (.inp) proveniente do Abaqus. O código da sub-rotina se encontra no apêndice.

Algoritmo 1: Subrotina Lescreve

Entrada: Arquivo de saída do Abaqus (.inp)

Saída: nnodes = número de nós

coordg = matriz de coordenadas dos nós

nelm = número de elementos

nos = matriz de conectividade dos elementos

nome1 = nome da fase 1

elementos1 = elementos da fase 1

props1 = propriedade de material da fase 1

nome2 = nome da fase 2

elementos2 = elementos da fase 2

props2 = propriedade de material da fase 2

matrizelementos = matriz de elementos e suas propriedades de material de cada fase.

6.4 Testes com HEA2D

Para conhecer o funcionamento do programa HEA2D, foram feitos alguns testes com diferentes tipos de modelo geométrico em 2D antes de testar os modelos representativos para esmalte dentário.

No primeiro momento testou-se uma geometria com inclusão circular central, caracterizando um material do tipo isotrópico. Posteriormente, testou-se uma variação do modelo anterior, sendo um modelo com uma inclusão central circular e $\frac{1}{4}$ de círculo nos encontros das arestas retangulares do modelo, totalizando 2 inclusões, ou seja um aumento da proporção volumétrica das mesmas. Sequencialmente, foram realizadas simulações em um modelo com inclusão laminar central, caracterizando um material do tipo ortotrópico. E por último, foi testado um modelo com inclusão laminar lateral, caracterizando também um material ortotrópico.

1- Teste de geometria com inclusão circular central:

A figura 6.10(a) mostra o modelo geométrico com inclusão central e proporção de 20% em relação ao modelo. A malha de elementos finitos, com 224 elementos, gerada nesse modelo pode ser vista na figura 6.10(b).

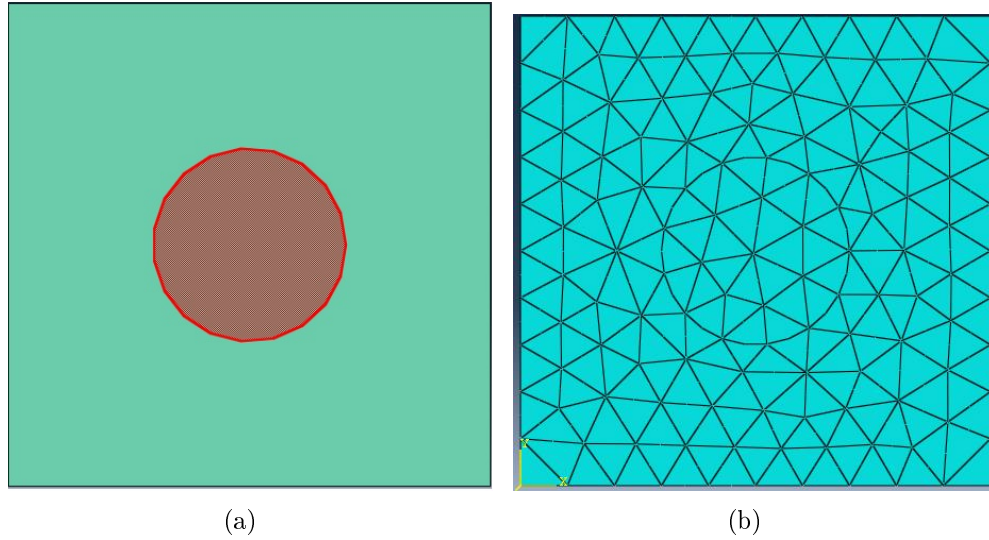


Figura 6.10: Geometria (a) e malha de 224 elementos finitos (b) do modelo com inclusão circular central, para teste do programa HEA2D.

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: módulo de elasticidade dos prismas $E_{prisma} = 10,0$ GPa; módulo de elasticidade da matriz $E_{matriz} = 10,0$ GPa e coeficiente de poisson $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 10,9890109890098 & 3,2967032967029 & 0,0000000000000 \\ 3,2967032967029 & 10,9890109890098 & -0,0000000000000 \\ 0,0000000000000 & 0,0000000000000 & 3,8461538461534 \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

Observa-se que a matriz de tensores efetivos para essa geometria é característica de material isotrópico. $C_{11} = C_{22} = 10,9890109890098$ GPa; $C_{12} = C_{21} = 3,2967032967029$ GPa; $C_{13} = C_{23} = C_{31} = C_{32} = 0,000000$.

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: $E_{prisma} = 10,0$ GPa; $E_{matriz} = 1,0$ GPa e $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 1,297613992882746 & 0,384568746167452 & 0,000921332881025 \\ 0,384563802241605 & 1,297700452158068 & -0,000629953444191 \\ -0,000000000816407 & -0,001097395141539 & 0,446334306444792 \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

A matriz de tensores efetivos para essa geometria é característica de material isotrópico. $C_{11} \cong C_{22} \cong 1,2977$ GPa; $C_{12} \cong C_{21} \cong 0,38456$ GPa; os valores $C_{13} = C_{23} = C_{31} =$

$C_{32} = 0,000$ aproximam de zero com pequenos erros numéricos.

- 2- Teste de geometria com inclusão circular central e $\frac{1}{4}$ de círculo nos encontros das arestas retangulares do modelo:

A figura 6.11(a) mostra o modelo geométrico com circular central e $\frac{1}{4}$ de círculo nos encontros das arestas retangulares do modelo, totalizando 80% de inclusão com relação ao modelo. A malha de elementos finitos, com 270 elementos, gerada nesse modelo pode ser vista na figura 6.11(b).

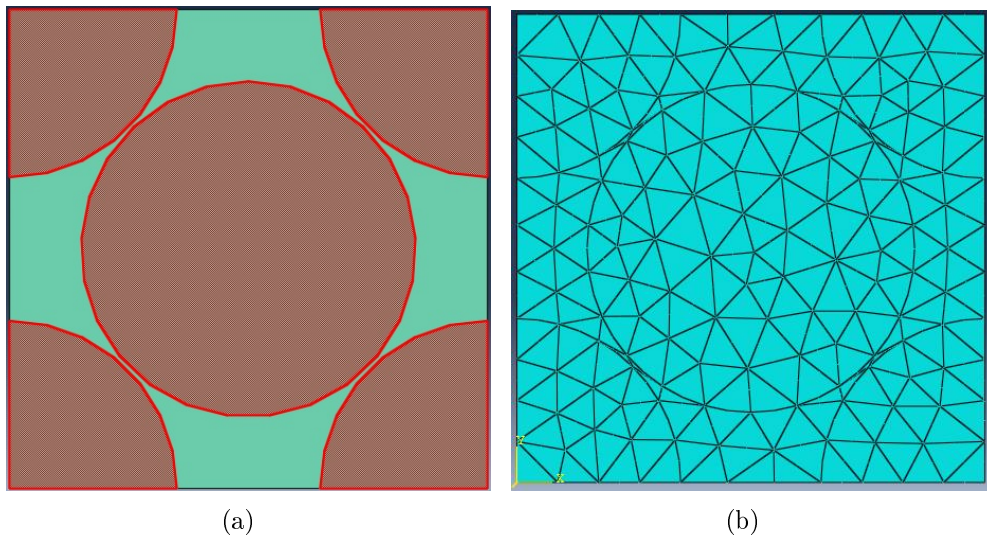


Figura 6.11: Geometria (a) e malha de 270 elementos finitos (b) do modelo com duas inclusões, sendo uma central e a outra particionada nos quatro cantos, para teste do programa HEA2D.

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: $E_{prisma} = 10,0$ GPa; $E_{matriz} = 10,0$ GPa e $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 10,9890109890098 & 3,2967032967029 & 0,0000000000000 \\ 3,2967032967029 & 10,9890109890098 & -0,0000000000000 \\ 0,0000000000000 & -0,0000000000000 & 3,8461538461534 \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

A matriz de tensores efetivos para essa geometria é característica de material isotrópico.

$C_{11} = C_{22} = 10,9890109890098$ GPa; $C_{12} = C_{21} = 3,2967032967029$; $C_{13} = C_{23} = C_{31} = C_{32} = 0,000000$.

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: $E_{prisma} = 10,0$ GPa; $E_{matriz} = 1,0$ GPa e $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 4,870545367325495 & 1,700928829833406 & 0,311557528726729 \\ 1,680896387765928 & 4,951216478774338 & -0,037703403789471 \\ -0,000064952732345 & 0,234694426442726 & 2,026238622247367 \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

Observa-se que nessa simulação para esse tipo de modelo o erro já é significativo para os elementos C_{13} , C_{23} , C_{31} e C_{32} . Além disso, mesmo que pequenas, existem diferenças entre C_{11} e C_{22} e entre os elementos C_{21} e C_{12} .

3- Teste de geometria com inclusão laminar central:

A figura 6.12(a) mostra o modelo geométrico com inserção laminar central de 20% em relação ao volume. A malha de elementos finitos, com 200 elementos, gerada nesse modelo pode ser vista na figura 6.12(b).

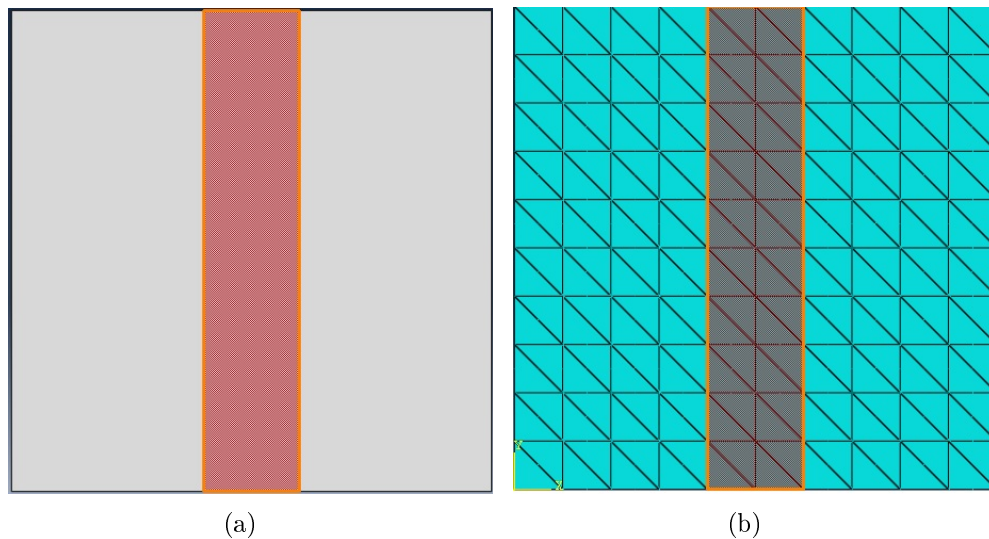


Figura 6.12: Geometria (a) e malha de 200 elementos finitos (b) do modelo com inclusão laminar central, para teste do programa HEA2D.

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: $E_{prisma} = 10,0$ GPa; $E_{matriz} =$

10,0 GPa e $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 10,989010989009900 & 3,296703296702959 & -0,000000000000000 \\ 3,296703296702959 & 10,989010989009900 & -0,000000000000000 \\ 0,000000000000000 & 0,000000000000000 & 3,846153846153461 \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

De acordo com a matriz de tensores efetivos: $C_{11} = C_{22} = 10,989010989009900$ GPa; $C_{12} = C_{21} = 3,296703296702959$ GPa; $C_{13} = C_{23} = C_{31} = C_{32} = 0,000000$.

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: $E_{prisma} = 10,0$ GPa; $E_{matriz} = 1,0$ GPa e $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 1,340123317818271 & 0,410720997115274 & -0,005628516499569 \\ 0,402036995345482 & 2,923216461134298 & -0,001688554949871 \\ 0,000000000000000 & -0,016081475713047 & 0,479174496634487 \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

Para essas simulação ocorrem erros numéricos em C_{13} , C_{23} , C_{32} , além de diferenças entre os elementos C_{11} e C_{22} e entre os elementos C_{21} e C_{12} . Essas diferenças, mesmo que pequenas, se dão pela característica do tipo ortotópica que assume o modelo.

4- Teste de geometria com inclusão laminar lateral:

A figura 6.13(a) mostra o modelo geométrico com inserção laminar central de 20% do volume. A malha de elementos finitos, com 200 elementos, gerada nesse modelo pode ser vista na figura 6.13(b).

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: $E_{prisma} = 10,0$ GPa; $E_{matriz} = 10,0$ GPa e $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 10,989010989009891 & 3,296703296702963 & 0,000000000000000 \\ 3,296703296702960 & 10,989010989009858 & 0,000000000000000 \\ -0,000000000000000 & 0,000000000000001 & 3,846153846153453 \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

A matriz de tensores efetivos para essa geometria se comporta como um modelo ortotrópico. Há uma pequena diferença entre os resultados de $C_{11} =$

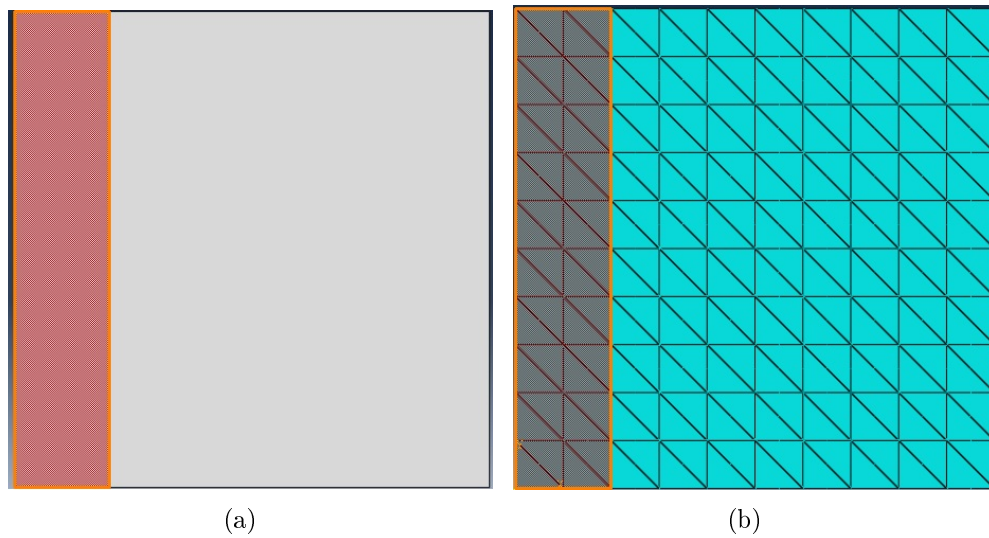


Figura 6.13: Geometria (a) e malha de 200 elementos finitos (b) do modelo com inclusão laminar lateral, para teste do programa HEA2D.

10,989010989009891 e $C_{22} = 10,989010989009858$ GPa, diferentemente da simulação anterior. $C_{13} = C_{23} = C_{31} = C_{32} = 0,000000$.

Para a simulação com os seguintes dados de entrada: $E_{prisma} = 10,0$ GPa; $E_{matriz} = 1,0$ GPa e $\nu = 0,3$ para ambas fases, tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{pmatrix} 1,340123295755272 & 0,410720989864928 & 0,036022515416918 \\ 0,402036988726582 & 2,923216323959196 & 0,010806754625076 \\ 0,000000000000000 & 0,102921472619768 & 0,479174488175750 \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

A mesma observação com relação ao aparecimento de erro numérico, como vista no modelo anterior, se faz aqui também.

Quintela (2011) afirmou que a técnica de Homogeneização por expansão assintótica tem uma limitação relacionada à geometria da célula unitária e da malha gerada, podendo haver erros numéricos significativos.

Para esses testes pode-se observar que a geometria do modelo adotada influencia diretamente nos resultados obtidos, assim como nos erros numéricos, como por exemplo, nas simulações para os modelos com inclusão laminar central e com inclusão laminar lateral com as mesmas propriedades de material para ambas as fase. A possível explicação para a pequena diferença entre os elementos C_{11} e C_{22} no modelo laminar lateral é a

diferença entre as propriedades mecânicas na região de contorno do modelo laminar lateral, quando $x = 1$ e quando $x = 0$.

Sendo assim, modelos 2D com características de material isotrópico e com dois planos de simetria geram malhas mais simétricas e com isso apresentam melhores resultados quando empregada a HEA. Outra observação importante é que, quando a diferença de propriedade de material entre as fases do compósito aumenta, há uma maior chance de se obterem erros numéricos.

6.5 Propriedades de materiais

Os valores de módulo de elasticidade para a HAp sinterizada e para a matriz orgânica encontrados na literatura são muito divergentes. De acordo com Bar-On e Wagner (2012) os dados de entrada para simulações multiescala devem ser: proporção volumétrica de 95% para as inclusões em relação ao modelo, $E_{prisma} = 114$ GPa (módulo de elasticidade dos prismas) e $E_{matriz} = 0,5$ GPa (módulo de elasticidade da matriz orgânica) a fim se obterem boas estimativas para o módulo efetivo do esmalte dentário. Baseando-se nessas informações foram adotados esses valores como dados de entrada para o caso 1 de simulação dos dois modelos propostos.

De acordo com Lu *et al.* (2012) os valores de entrada para a matriz orgânica variam entre $E_{matriz} = 0,1 - 4,3$ GPa e para a hidroxiapatita sinterizada variam entre $E_{HAp} = 110 - 135$ GPa. Baseando-se nessas informações foram feitas as 4 seguintes simulações (caso 2, caso 3, caso 4, caso 5) para cada modelo proposto, com a combinação dos valores dos limites, tanto inferior, quanto superior e combinados inversamente.

Totalizando, dessa forma, 5 casos para cada modelo. Em todos os casos de simulações foi adotado o valor de $\nu = 0.3$ para ambas as fases e cada fase foi considerada um material isotrópico e homogêneo.

7 Resultados e Discussão

São apresentados aqui os resultados numéricos obtidos das propriedades elásticas do esmalte dentário através da técnica da HEA para os dois modelos empregados, Modelo 1 e Modelo 2, nos 5 casos de acordo com as propriedades mecânicas adotadas para os componentes do material, assim como a proporção volumétrica de cada fase. As características de cada simulação estão resumidas na tabela 7.1. O valor do coeficiente de Poisson, tanto para a hidroxiapatita, quanto para a matriz orgânica foi adotado como $\nu = 0.3$ em todos os casos para ambos os modelos.

Tabela 7.1: Propriedades mecânicas adotadas para os componentes do material e proporção volumétrica dos Modelos 1 e 2.

Modelo	Caso	E_{HAp} (GPa)	E_{matriz} (GPa)
Modelo 1 (95%HAp, 5% matriz)	1 ¹	114	0.5
Modelo 1 (95%HAp, 5% matriz)	2 ²	135	4.3
Modelo 1 (95%HAp, 5% matriz)	3	110	0.1
Modelo 1 (95%HAp, 5% matriz)	4	135	0.1
Modelo 1 (95%HAp, 5% matriz)	5	110	4.3
Modelo 2 (96%HAp, 4% matriz)	1 ³	114	0.5
Modelo 2 (96%HAp, 4% matriz)	2 ⁴	135	4.3
Modelo 2 (96%HAp, 4% matriz)	3	110	0.1
Modelo 2 (96%HAp, 4% matriz)	4	135	0.1
Modelo 2 (96%HAp, 4% matriz)	5	110	4.3

7.1 Análise de convergência

Sabe-se que os resultados de aproximação via MEF dependem fortemente do grau de refinamento e qualidade das malhas empregadas na análise.

Para verificar a convergência dos resultados, fez-se aqui uma avaliação baseada na norma Frobenius do tensor homogeneizado Dh , dada pela equação 7.1 (Campos-Filho, 2001), para avaliar a convergência do resultado em função do número de graus de liberdade

das malhas.

$$\| Dh \|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (d_{ij}^h)^2}, \quad (7.1)$$

onde Dh é o tensor homogeneizado, n é a ordem da matriz e $(d_{ij}^h)^2$ é o termo ij do tensor Dh .

Como critério de convergência foi considerado adequado o resultado para a variação da norma Frobenius $N_d \leq 0,005\%$, de acordo com a equação 7.2:

$$N_d = \frac{N_{atual} - N_{anterior}}{N_{anterior}} \quad (7.2)$$

onde $N_{anterior}$ é a norma Frobenius da matriz de tensores imediatamente anterior e N_{atual} é a norma Frobenius da matriz avaliada.

7.2 Modelo 1

7.2.1 Geometria

O Modelo 1 representa o material como ilustrado na figura 6.4(a) através da célula periódica mostrada na figura 6.2. A figura 7.1 resume as características geométricas deste modelo.

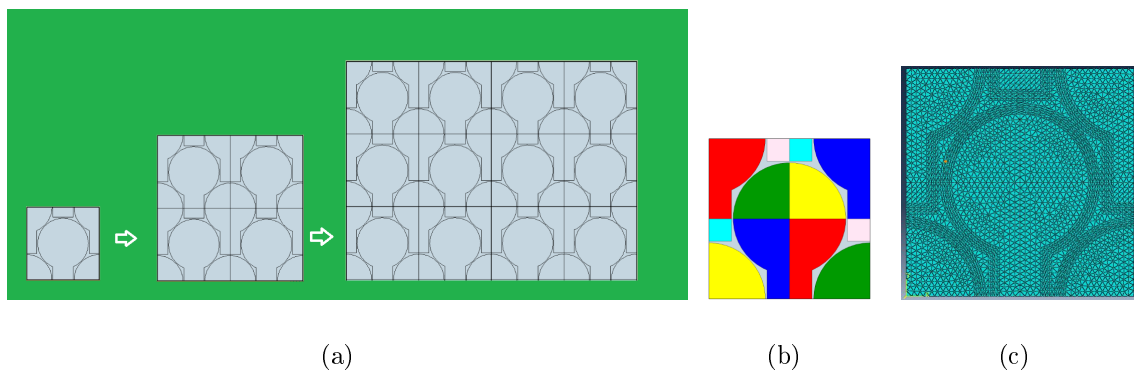


Figura 7.1: Resumo das características geométricas do Modelo 1 (a), com a sua célula representativa (b) e malha de elementos finitos (c).

7.2.2 Análise de convergência das malhas do Modelo 1

A figura 7.2 mostra a curva da norma Frobenius (N_d) em função do número de graus de liberdade, obtida para 16 malhas com graus de refinamento variados baseado nos valores do Modelo 1, caso 1.

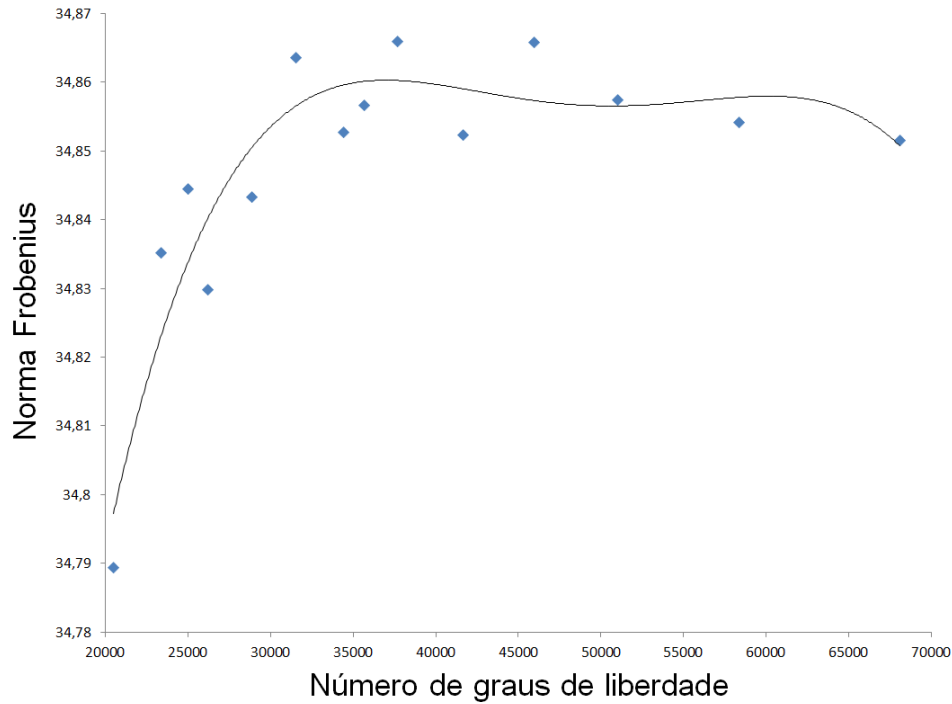


Figura 7.2: Curva de convergência da relação entre a norma frobenius (N_d) e o número de graus de liberdade (NGL) obtida para o Modelo 1, caso 1.

Com base nesta análise, adotou-se para o Modelo 1 em todos os demais casos, os resultados gerados com a malha de elementos finitos de 14.428 elementos e 58.358 GLs. A equação (7.3) apresenta o resultado do tensor homogeneizado para o modelo 1, caso 1.

$$Dh = \begin{pmatrix} 13,984438736911875 & 3,532079867501716 & 0,080638583624114 \\ 3,231266660810464 & 30,448738041476332 & 4,214573132552421 \\ 0,000794794984559 & 0,784101489012350 & 7,129219725517639 \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

Esse por sua vez, foi aproximado pelo tensor mostrado na equação (7.4), onde os termos Dh_{A31} ; Dh_{A32} ; Dh_{A13} ; Dh_{A23} foram considerados nulos. Tal consideração se baseia nas hipóteses de que a ocorrência de valores não-nulos naquelas posições do tensor deve-se a

questões numéricas. A norma Frobenius para o tensor Dh_A adotada é $= 34,58948715$. Comparando-a com o valor relativo ao tensor original, tem-se, pela equação (7.2), $N_d = 7,6 \times 10^{-3}$ indicando, portanto, que a aproximação é válida.

$$Dh_A = \begin{pmatrix} 13,984438736911875 & 3,3817 & 0,0 \\ 3,3817 & 30,448738041476332 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 7,129219725517639 \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

7.2.3 Resultados

Para encontrar os valores aproximados para os módulos de elasticidade, coeficiente de Poisson e o módulo de cisalhamento do esmalte dentário é necessário correlacionar a matriz de tensores efetivos (Dh) com a matriz constitutiva de material ortotrópico. Assim, todas as matrizes com resultados de tensores efetivos obtidas nas análises de todos os casos para o Modelo 1 foram aproximadas pelas suas respectivas matrizes constitutivas de material ortotrópico 2D, onde os termos Dh_{A31} ; Dh_{A32} ; Dh_{A13} ; Dh_{A23} foram considerados nulos e os termos Dh_{A12} e Dh_{A21} foram considerados como o resultado da média entre os valores obtidos na matriz resultado.

Modelo 1, caso 1

A matriz de tensores efetivos para o Modelo 1, caso 1, através da malha com 14.428 elementos, é dada pela equação (7.3) e foi aproximada pela matriz de materiais ortotrópicos 2D dada pela equação 3.16.

Assim, foram encontrados os valores $E_x = 13,79$ GPa; $E_y = 30,04$ GPa; $\nu_{12} = \nu_{21} = 0,012$ e $G = 7,13$ GPa para o esmalte dentário.

Para todos os outros casos seguintes de simulação para o Modelo 1, as matrizes resultados encontram-se em apêndice na seção A.2.

Modelo 1, caso 2

Para o Modelo 1, caso 2, para o qual foram testados os valores de propriedades mecânicas das fases como sendo os limites superiores encontrados na literatura, obteve-se o tensor homogeneizado dado pela equação (A.1) e a sua aproximação é dada por

(A.2). Assim, foram encontrados os valores efetivos $E_x = 65,31$ GPa; $E_y = 84,35$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,22$ e $G \cong 26,72$ GPa para o esmalte dentário.

Modelo 1, caso 3

Para o Modelo 1, caso 3, para o qual os valores de propriedades mecânicas para as fases são os limites inferiores encontrados na literatura, tem-se a matriz homogeneizada dada pela equação (A.3) e a aproximação pela equação (A.4). Baseado na relação constitutiva de material ortotrópico, tem-se os valores $E_x = 3,1$ GPa; $E_y = 14,77$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,053$ e $G \cong 2,38$ GPa para o esmalte dentário.

Modelo 1, caso 4

Para o Modelo 1, caso 4 foi simulado o valor de propriedades mecânicas para a hidroxiapatita como sendo o limite superior e para a matriz orgânica o limite inferior e teve como resultado a matriz de tensores homogeneizados a equação (A.5) e aproximada pela equação A.6. Os valores efetivos para o esmalte dentário são: $E_x = 3,11$ GPa; $E_y = 17,09$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,04$ e $G \cong 2,61$ GPa.

Modelo 1, caso 5

No Modelo 1, caso 5 foram testados o limite inferior para o valor de propriedades mecânicas da HAp e o limite superior para a matriz orgânica. Os tensores homogeneizados são dados pela equação (A.7) e a matriz aproximada é (A.8). Foram encontrados os seguintes valores efetivos para as propriedades mecânicas do esmalte dentário: $E_x = 18,14$ GPa; $E_y = 77,16$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,003$ e $G \cong 23,62$ GPa.

7.3 Modelo 2

7.3.1 Geometria

Este modelo consiste em uma geometria mais aproximada da microestrutura do esmalte dentário do que a empregada no Modelo 1. Trata-se da célula mostrada na figura 6.4(b), extraída da representação periódica mostrada na figura 6.3. O resumo das características geométricas adotadas para o Modelo 2 é dado na figura 7.3.

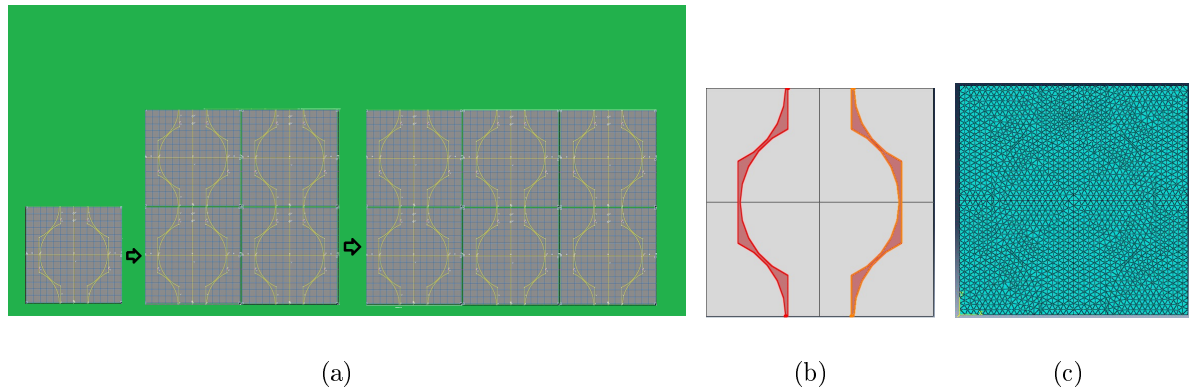


Figura 7.3: esumo das características geométricas do Modelo 2 (a), com a sua célula representativa (b) e malha de elementos finitos (c).

7.3.2 Análise de convergência das malhas do Modelo 2

A figura 7.4 mostra a curva número da norma Frobenius (N_d) x de graus de liberdade (NGL) obtida para 8 malhas com graus de refinamento variados baseado nos valores do caso 1.

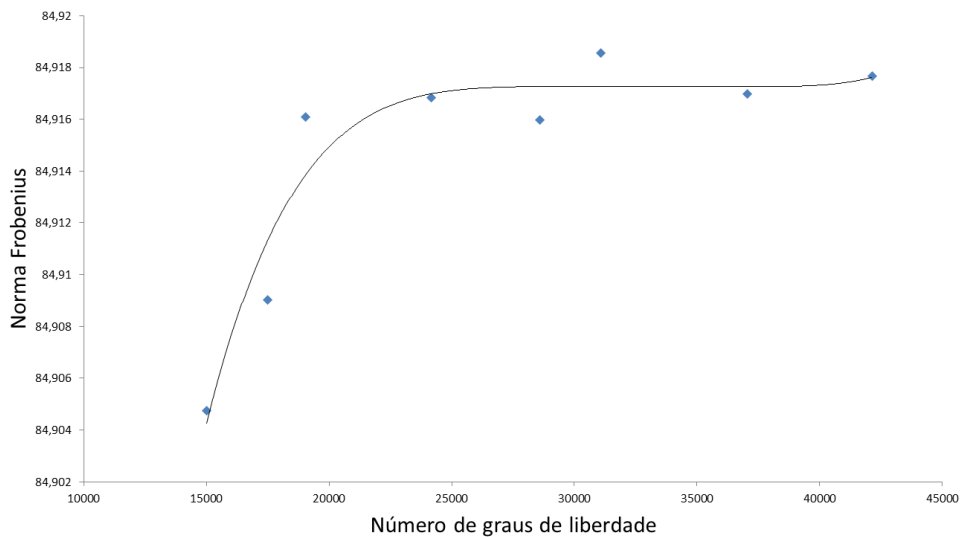


Figura 7.4: Curva de convergência da relação ente o número de graus de liberdade (NGL) e da norma frobenius (N_d) N_d obtida para o Modelo 2.

Foi adotado para a análise de todos os casos do Modelo 2 a malha de elementos finitos de 9.134 elementos e 37.042 GLs e o seu resultado para a análise do caso 1 é dado na

equação (7.5).

$$Dh = \begin{pmatrix} 14,097227362670697 & 5,044106762970642 & 0,069019852182894 \\ 4,958947735624986 & 83,084697826292938 & 0,018019051843753 \\ 0,000005006015490 & 0,176573204081964 & 7,682635102991315 \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

A matriz Dh foi aproximada pelo tensor mostrado na equação (7.6), onde os termos $Dh_A(31)$; $Dh_A(32)$; $Dh_A(13)$; $Dh_A(23)$ foram considerados nulos. Tal consideração se baseia nas hipóteses de que a ocorrência de valores não-nulos naquelas posições do tensor deve-se a questões numéricas. A norma Frobenius para o tensor Dh_A adotada é = 84,9170. Ao compará-la com o valor relativo ao tensor original, tem-se, pela equação (7.2), $N_d = 3,28147x10^{-7}$ indicando, portanto, que a aproximação é válida e melhor do que para o Modelo 1.

$$Dh_A = \begin{pmatrix} 14,097227362670697 & 5,0015 & 0,0 \\ 5,0015 & 83,084697826292938 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 7,682635102991315 \end{pmatrix} \quad (7.6)$$

7.3.3 Resultados

Da mesma forma como foi feita para a análise dos resultados das simulações de todos os casos para o Modelo 1, no Modelo 2 foram aproximadas as matrizes com resultados de tensores efetivos homogeneizados pela matriz constitutiva de material ortotrópico 2D, a fim de se encontrarem os valores aproximados para os módulos de elasticidade, coeficiente de Poisson e o módulo de cisalhamento do esmalte dentário. Os termos Dh_{A31} ; Dh_{A32} ; Dh_{A13} ; Dh_{A23} foram considerados nulos e os termos Dh_{A12} e Dh_{A21} foram considerados como o resultado da média entre os valores obtidos na matriz resultado.

Modelo 2, caso 1

A equação 7.5 traz a matriz de tensores efetivos para o Modelo 2, caso 1, através da malha com 9.134 elementos e a aproximação foi dada pela equação 3.16.

A partir disso, foram encontrados os valores $E_x = 14,05$ GPa; $E_y = 82,8$ GPa; $\nu_{12} = \nu_{21} = 0,06$ e $G = 7,68$ GPa para o esmalte dentário.

Para todos os outros casos seguintes de simulação para o Modelo 2, as matrizes resultados encontram-se em apêndice na seção A.2.

Modelo 2, caso 2

No Modelo 2, caso 2 foram testados os valores de propriedades mecânicas das fases como sendo os limites superiores encontrados na literatura, obteve-se o tensor homogeneizado dado pela equação (A.9) e sua aproximação pela equação (A.10). Assim, foram encontrados os valores efetivos $E_x = 66,85$ GPa; $E_y = 110,66$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,20$ e $G \cong 29,5$ GPa para o esmalte dentário.

Modelo 2, caso 3

Nesse caso foram testados os valores de propriedades mecânicas para as fases os limites inferiores encontrados na literatura e tem-se a matriz homogeneizada dada pela equação (A.11), que foi aproximada pela equação (A.12). Baseado na relação constitutiva de material ortotrópico, tem-se os valores $E_x = 3,11$ GPa; $E_y = 76,88$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,01$ e $G \cong 1,92$ GPa para o esmalte dentário.

Modelo 2, caso 4

Foi simulado no Modelo 2, caso 4 o valor de propriedades mecânicas para a hidroxiapatita como sendo o limite superior e para a matriz orgânica o limite inferior e teve como resultado a matriz de tensores homogeneizados a equação (A.13) e sua aproximação pela equação (A.14). Os valores efetivos para o esmalte dentário são: $E_x = 3,13$ GPa; $E_y = 94,15$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,013$ e $G \cong 1,97$ GPa.

Modelo 2, caso 5

No Modelo 2, caso 5 foram testados o limite inferior para o valor de propriedades mecânicas da HAp e o limite superior para a matriz orgânica. Os tensores homogeneizados são dados pela equação (A.15). Foram encontrados os seguintes valores efetivos para as propriedades mecânicas do esmalte dentário: $E_x = 59,86$ GPa; $E_y = 91,5$ GPa; $\nu_{12} \cong \nu_{21} \cong 0,21$ e $G \cong 25,86$ GPa.

A tabela 7.2 traz a síntese dos resultados dos 5 casos para as simulações com o Modelo

1 e a tabela 7.3 para o Modelo 2, onde ν é o coeficiente de Poisson das fases; E_{HAp} é o módulo de elasticidade dos prismas de HA; E_{matriz} é o módulo de elasticidade da matriz orgânica; % é a proporção volumétrica da inclusão; E_x é o módulo de elasticidade efetivo para o esmalte dentário na direção x; E_y é o módulo de elasticidade efetivo para o esmalte dentário na direção y; G é o módulo de cisalhamento efetivo para o esmalte e ν_{ef} é o coeficiente de Poisson efetivo para o esmalte dentário.

Tabela 7.2: Síntese dos Resultados Modelo 1

Caso	ν	$E_{HAp}(GPa)$	E_{matriz} (GPa)	%	E_x	E_y	G	ν_{ef}
Caso 1	0,3	114	0,5	95	13,79	30,04	7,13	0,012
Caso 2	0,3	135	4,3	95	65,31	84,35	26,72	0,22
Caso 3	0,3	110	0,1	95	3,1	14,77	2,38	0,53
Caso 4	0,3	135	0,1	95	3,11	17,09	2,61	0,04
Caso 5	0,3	110	4,3	95	18,14	77,16	23,62	0,003

Tabela 7.3: Síntese dos Resultados Modelo 2

Caso	ν	$E_{HAp}(GPa)$	E_{matriz} (GPa)	%	E_x	E_y	G	ν_{ef}
Caso 1	0,3	114	0,5	96	14,05	82,8	7,68	0,06
Caso 2	0,3	135	4,3	96	66,85	110,66	29,5	0,2
Caso 3	0,3	110	0,1	96	3,11	76,88	1,92	0,01
Caso 4	0,3	135	0,1	96	3,13	94,15	1,97	0,013
Caso 5	0,3	110	4,3	96	59,86	91,5	25,86	0,21

7.4 Discussão dos Resultados

Para o caso 1 no Modelo 1, os valores obtidos se assemelham a valores de módulo de elasticidade encontrados em análise multiescala da literatura para esmalte hipomineralizado, corroborando com os de Xie *et al.* (2009), que encontraram os valores $E_x = 2,3$ GPa; $E_y = 40$ GPa e também vai ao encontro dos resultados obtidos por Spears (1997), para simulações de modelo com 81% de inclusão, remetendo-se a esmalte hipomineralizado. Mas, por outro lado, se assemelha aos resultados encontrados por An *et al.* (2012) para simulação multiescala de esmalte sem defeito, $E_x = 41$ GPa; $E_y = 45$ GPa. O módulo elástico perpendicular ao eixo dos prismas (E_x) encontrado nesse estudo está próximo do encontrado por Xie *et al.* (2009), ($E_x = 10,9$ GPa), para proporção volumétrica de inclusão de 90%. O valor do módulo elástico paralelo ao eixo dos prismas

(E_y) encontrado para simulação desse caso está próximo dos obtidos por Braly (2007) ($E_y = 47$ GPa) e Weig *et al.* (2011) ($E_y = 55,6 \pm 6,3$ GPa), ambos via teste experimental e para esmalte de região de junção amelo-dentinária.

Os resultados obtidos no caso 2, Modelo 1 estão próximos dos encontrados em testes multiescala, como por exemplo, Miura *et al.* (2009) que obtiveram os valores $E_y = 73,72$ GPa e $E_x = 63,27$ GPa; com os de da Cunha *et al.* (2012) ($E_y = 86,5$ GPa e $E_x = 40,9$ GPa) e este último utilizou o mesmo valor de módulo de elasticidade para a matriz orgânica, $E_m = 4,3$ GPa na simulação. Os valores obtidos nesse caso 2 também se aproximam de alguns resultados obtidos por testes experimentais, como os de Craig *et al.* (1961); Staines *et al.* (1981); Habelitz *et al.* (2001); Miura *et al.* (2009); Xie *et al.* (2009).

A simulação dos casos 3 e 4 resultaram em valores de E_y próximos do obtido por Xie *et al.* (2009), $E_y = 10,9$ GPa, através de simulação multiescala. Para o caso 5, o valor para E_y se aproxima do resultado de Lu *et al.* (2012), $E_y = 78 \pm 5$ GPa, através de simulação multiescala e corrobora com os resultados obtidos através de teste experimental de Miura *et al.* (2009); Xie *et al.* (2009); Weig *et al.* (2011).

Os valores mais baixos encontrados para o Modelo 1 podem ser explicados devido à maior proporção de matriz orgânica, quando comparado com o Modelo 2, assim como foi observado por Xie *et al.* (2009). Além disso, a falta de um plano de simetria no modelo 1 e os valores muito discrepantes entre as fases do modelo podem ter comprometido os resultados, o que aponta uma limitação da técnica HEA, assim como observado por Quintela (2011).

Lu *et al.* (2012) relataram o cuidado que tomaram para gerar a malha de elementos finitos, além de uma certa dificuldade para impor a condição de contorno periódica no modelo geométrico por eles adotado. Este estudo, também se deparou com essa mesma dificuldade e se teve o mesmo cuidado. Dessa maneira, uma das maiores dificuldades dessa pesquisa foi conseguir gerar uma malha com poucos elementos, diminuindo assim o custo computacional, que obedecesse a imposição de CCP no modelo geométrico adotado, além de tentar reduzir os erros numéricos para as considerações a seguir.

Ao analisar o caso 1, Modelo 2, o valor encontrado para E_y está de acordo com os

encontrados via simulação multiescala, Bar-On e Wagner (2012), que utilizaram o mesmo dado de entrada, $E_y = 84,1$ GPa. Assim como os de Lu *et al.* (2012) ($E_y = 78 \pm 5$ GPa) e da Cunha *et al.* (2012) que tiveram como resultado o valor de $E_y = 86,5$ GPa. Além disso, corrobora com os resultados obtidos nos testes experimentais de Craig *et al.* (1961) ($E_y = 84,1 \pm 6,2$ GPa), de Staines *et al.* (1981) ($E_y = 83$ GPa), de Habelitz *et al.* (2001) ($E_y = 87,2 \pm 2,2$ GPa) e de Weig *et al.* (2011) ($E_y = 87,66 \pm 1,2$ GPa).

Para a simulação do caso 2, Modelo 2, o valor obtido para E_x está de acordo com o valor encontrado por Miura *et al.* (2009) ($E_x = 63,27$ GPa) em análise multiescala e com os valores obtidos por meio de teste experimental, como, por exemplo, Craig *et al.* (1961) ($E_x = 77,9 \pm 4,8$ GPa), Miura *et al.* (2009) ($E_x = 63,77$ GPa) Weig *et al.* (2011) ($E_x = 55,6 \pm 6,3$ GPa) para esmalte de região de JED. O resultado de E_y está próximo do obtido por Spears (1997) ($E_y = 99$ GPa), através de análise multiescala, e corrobora também com alguns valores encontrados na literatura por meio de teste experimental, Cuy *et al.* (2002) ($E_y = 120$ GPa), Braly (2007) ($E_y = 120 - 130$ GPa), He e Swain (2007a) ($E_y = 105 \pm 2$ GPa) e com He e Swain (2007c) ($E_y = 94,1 \pm 5,4$ GPa).

O resultado obtido no caso 3, Modelo 2, para E_y está de acordo com os encontrados através de teste de indentação, Miura *et al.* (2009) ($E_y = 73,72$ GPa), Xie *et al.* (2009) ($E_y = 75$ GPa) e Weig *et al.* (2011) ($E_y = 78,04 \pm 6,7$ GPa), sendo este último para esmalte central. E corrobora com os resultados de Miura *et al.* (2009) e Lu *et al.* (2012) ($E_y = 78 \pm 5$ GPa) através de simulação multiescala.

No caso 4, Modelo 2 o valor obtido para E_y se aproxima dos encontrados por Xie *et al.* (2009) ($E_y = 90$ GPa) e Spears (1997) ($E_y = 99$ GPa) via análise multiescala e com os autores He *et al.* (2006) ($E_y = 92 \pm 5$ GPa), He e Swain (2007c) ($E_y = 94,1 \pm 5,4$ GPa) e Chan *et al.* (2011) ($E_y = 95 \pm 1,5$ GPa), todos através de teste experimental.

A simulação do caso 5, Modelo 2 apresentou valor de E_y próximos aos de Spears (1997) e Xie *et al.* (2009), para simulação multiescala e parecido com os valores obtidos por meio de teste de indentação, Craig *et al.* (1961) ($E_y = 84,1 \pm 6,2$ GPa), Habelitz *et al.* (2001) ($E_y = 87,2 \pm 7,2$ GPa), He *et al.* (2006) ($E_y = 92 \pm 5$ GPa), He e Swain (2007c) ($E_y = 94,1 \pm 5,4$ GPa) e Chan *et al.* (2011) ($E_y = 95 \pm 1,5$ GPa). O resultado para o

E_x se assemelha aos resultados de Miura *et al.* (2009), An *et al.* (2012), da Cunha *et al.* (2012) em análises multiescala e ao mesmo tempo está próximo dos resultados encontrados por teste experimental, Craig *et al.* (1961) ($E_x = 77,9 \pm 4,8$ GPa), Habelitz *et al.* (2001) ($E_x = 72,7 \pm 54,5$ GPa), Miura *et al.* (2009) ($E_x = 63,77$ GPa), Xie *et al.* (2009) ($E_x = 55$ GPa) e Weig *et al.* (2011) ($E_y = 55,6 \pm 6,3$ GPa).

Para o Modelo 1 os melhores resultados efetivos para as propriedades mecânicas do esmalte dentário são os casos 2 e 5. Já para o Modelo 2 os melhores resultados efetivos foram obtidos nos casos 1, 2 e 5. Baseando-se nas hipóteses do estudo, o esmalte dentário pode ser representado por um meio homogêneo equivalente. Mesmo que tenha sido encontrado uma variedade ampla de valores para o módulo de elasticidade de esmalte dentário, os resultados foram comparados com resultados encontrados na literatura e com isso pode-se validar a técnica.

Outra hipótese é de que a microestrutura do esmalte dentário representada pelos Modelos 1 e 2 apresenta comportamento ortotrópico e desta forma apresentam módulo de elasticidade efetivo maior na direção paralela ao eixo dos prismas do que na direção perpendicular corroborando com a literatura (He *et al.*, 2006; Habelitz *et al.*, 2001; He e Swain, 2007a; Spears, 1997).

De acordo com Habelitz *et al.* (2001) alguns desafios ainda existem com relação a testes e interpretação das propriedades mecânicas desse material (esmalte dentário). A dependência das propriedades mecânicas em relação à orientação do dente tem origem na textura das fibras que compõem os cristais de apatita nos prismas. Com isso, o esmalte pode ser também considerado com característica anisotrópica. Os valores encontrados têm uma diferença pequena quando comparados com outros resultados da literatura e são devidos à biovariedade do esmalte humano e às diferenças de técnica nas pesquisas.

He e Swain (2008) perceberam que o esmalte dentário é mais deformável do que a HAp e não encontraram uma resposta puramente elástica para o comportamento desse tecido. A curva de tensão-deformação desse tecido mostra uma resposta não linear suave sem um ponto de transição bem definido. O que implica dizer que a resposta tensão-deformação do esmalte dentário é muito mais complexa do que a HAp devido à sua estrutura e

características de composição. O comportamento mecânico do esmalte dentário não se encontra apenas em resposta puramente elástica, tal como apontado por He e Swain (2007a,b,c, 2008); Staines *et al.* (1981).

8 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

A partir das simulações numéricas por meio da técnica HEA para os dois Modelos (1 e 2) propostos para a microestrutura do esmalte dentário pode-se chegar às seguintes conclusões:

- 1- O esmalte dentário pode ser representado por um meio homogêneo equivalente, visto que sua microestrutura é um compósito biológico que pode ser representado por uma célula unitária representativa repetitiva;
- 2- Os modelos propostos nesse estudo têm comportamento ortotrópico, com módulo de elasticidade menor no eixo perpendicular e maior no eixo paralelo ao dos prismas de esmalte. O modelo 2 que representa o engaste das caudas dos prismas com as cabeças dos mesmos, sendo mais fiel à microestrutura do esmalte dentário é o que mais consegue se equivaler às propriedades efetivas do esmalte.
- 3- O módulo de Young efetivo do esmalte dentário é menor do que o da Hidroxiapatita sinterizada;
- 4- O comportamento do esmalte dentário não está apenas no campo da elasticidade e esse tipo de análise é muito mais complexa;
- 5- A técnica empregada no estudo apresenta limitações dependendo do modelo geométrico e das diferenças de propriedades mecânicas de cada fase, implicando em erros numéricos.

A partir disso, tem-se como perspectivas futuras do estudo:

- 1- Desenvolver a versão tridimensional para os modelos propostos;

- 2- Gerar malha de elementos finitos no modelo 3D que consiga reduzir ou evitar erro numérico na matriz final de tensores;
- 3- Testar outras técnicas multiescala para comparação com a HEA;
- 4- Efetuar análises paramétricas mais abrangentes empregando valores entre os limites superiores e inferiores;
- 5- Aplicar os resultados encontrados à análise macroscópica que avaliam o comportamento biomecânico dos dentes sujeitos às diversas condições tribológicas no ambiente oral.

Referências Bibliográficas

- 3ds.com, 2015. Abaqus. Accessed: 10-08-2015. Disponível em: <http://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus>
- Affdl, J. C., Kardos, J. L., 1976. The Halpin-Tsai equations: a review. *Polymer Engineering Science*.
- An, B., Wang, R., Zhang, D., 2012. Role of crystal arrangement on the mechanical performance of enamel. *Acta biomaterialia*. 8 (10), 3784–3793.
- Anusavice, k., Philips, 2005. *Materiais Dentários.*, 11th Edição. Elsevier.
- Bar-On, B., Wagner, H., 2012b. Effective moduli of multi-scale composites. *Compos. Sci. Technol.* 72, 566–573.
- Bar-On, B., Wagner, H. D., 2012. Enamel and dentin as multi-scale bio-composites. *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials*. 12, 174–183.
- Barbero, E. J., 2014. *Finite Element Analysis of Composite Materials*, segunda Edição. CRC Press.
- Bhaskar, S., 1989. *Histologia e Embriologia Oral de Orban*.
- Braly, A. e. a., 2007. The effect of prism orientation on the indentation testing of human molar enamel. *archives of oral biology* 52, 856–860.
- Callister, W. D., Rethwisch, D. G., 2007. *Materials science and engineering: an introduction*. Vol. 7.

- Callister Jr., W., month 2008. *Ciência e Engenharia dos Materiais, uma Introdução*, 7th Edição.
- Campos-Filho, F. F., 2001. *Algoritmos Numéricos*.
- Chan, Y., Ngan, A., King, N., 2011. Nano-scale structure and mechanical properties of the human dentine–enamel junction. *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials* 4 (5), 785–795.
- Chung, P. W., Tamma, K. K., Namburu, R. R., 2001. Asymptotic expansion homogenization for heterogeneous media: computational issues and applications. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 32 (9), 1291–1301.
- Craig, R., Peyton, F., Johnson, D., 1961. Compressive properties of enamel, dental cements, and gold. *J Dent Res* 40 (5), 936–945.
- Cuy, J. L., Mann, A. B., Livi, K. J., Teaford, M. F., Weihs, T. P., 2002. Nanoindentation mapping of the mechanical properties of human molar tooth enamel. *Archives of Oral Biology* 47 (4), 281–291.
- da Cunha, F. M., Mazzucchelli, P., Rabelo, J. M. G., Farage, M. C., Bastos, F. S., 2012. Análise multiescala da estrutura do esmalte dentário. *Anais do X simpósio de mecânica computacional*.
- Douglas, C. R., 2002. *Tratado De Fisiologia Aplicada As Ciencias Da Saude*, quinta Edição.
- Farage, M. C. R., Beaucour, A.-L., Barra, L. P. d. S., Ke, Y., Sanábio, D. F. d. S., Ferreira, A. P. G., 2009. Multiscale modeling of the elastic moduli of lightweight aggregate concretes: numerical estimation and experimental validation. *Rem: Revista Escola de Minas* 62 (4), 455–462.
- Fish, J., Belytschko, T., 2007. *A first course in finite elements*. Vol. 517. Wiley New York.
- Ge, J., Cui, F., Wang, X., Feng, H., 2005. Property variations in the prism and the organic sheath within enamel by nanoindentation. *Biomaterials* 26 (16), 3333–3339.

- Ghadimi, E., Eimar, H., Marelli, B., Nazhat, S. N., Asgharian, M., Vali, H., Tamimi, F., 2013. Trace elements can influence the physical properties of tooth enamel. *SpringerPlus* 2 (1), 499.
- Giannini, M., Soares, C. J., de Carvalho, R. M., 2004. Ultimate tensile strength of tooth structures. *Dental Materials* 20 (4), 322–329.
- Gibson, C. W., Yuan, Z.-A., Hall, B., Longenecker, G., Chen, E., Thyagarajan, T., Sreenath, T., Wright, J. T., Decker, S., Piddington, R., *et al.*, 2001. Molecular Basis Of Cell and Developmental Biology-Amelogenin-deficient Mice Display an Amelogenesis Imperfecta Phenotype. *Journal of Biological Chemistry*. 276 (34), 31871–31875.
- Habelitz, S., Marshall, S., Marshall, G., Balooch, M., 2001. Mechanical properties of human dental enamel on the nanometre scale. *Archives of Oral Biology* 46 (2), 173–183.
- He, L. H., Fujisawa, N., Swain, M. V., 2006. Elastic modulus and stress–strain response of human enamel by nano-indentation. *Biomaterials* 27 (24), 4388–4398.
- He, L. H., Swain, M. V., 2007a. Nanoindentation derived stress–strain properties of dental materials. *Dental materials*. 23 (7), 814–821.
- He, L. H., Swain, M. V., 2007b. Contact induced deformation of enamel. *Applied Physics Letters* 90 (17), 171916.
- He, L. H., Swain, M. V., 2007c. Enamel- A "metallic-like"deformable biocomposite. *Journal of dentistry* 35 (5), 431–437.
- He, L. H., Swain, M. V., 2008. Understanding the mechanical behaviour of human enamel from its structural and compositional characteristics. *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials* 1 (1), 18–29.
- Hibbeler, R. C., 2004. *Resistência Dos Materiais*, quinta Edição.
- Junqueira, L., Carneiro, J., 2008. *Histologia Básica*, 11th Edição.

- Katchburian, E., Arana, V., 2012. *Histologia e Embriologia Oral*, terceira Edição. Guarnabara Koogan.
- Kierszenbaum, B. L., 2012. *Histologia e biologia celular: uma introdução à patologia*, terceira Edição. Elsevier.
- Lai, W. M., Rubin, D. H., Rubin, D., Krempl, E., 2009. *Introduction to continuum mechanics*, quarta Edição. Butterworth-Heinemann.
- Lemaitre, J., Chaboche, J.-L., 1994. *Mechanics of solid materials*. Cambridge university press.
- Lu, C., Nakamura, T., Korach, C. S., 2012. Effective property of tooth enamel: Monoclinic behavior. *Journal of biomechanics* 45 (8), 1437–1443.
- Mase, G. T., Smelser, R. E., Mase, G. E., 2009. *Continuum Mechanics for Engineers*, terceira Edição. CRC Press.
- Miura, J., Maeda, Y., Nakai, H., Zako, M., 2009. Multiscale analysis of stress distribution in teeth under applied forces. *dental materials* 25 (1), 67–73.
- Nanci, A., 2013. *Ten Cate histologia oral: desenvolvimento, estrutura e função*, 8th Edição. Elsevier.
- O'Brien, S., Shaw, J., Zhao, X., Abbott, P. V., Munroe, P., Xu, J., Habibi, D., Xie, Z., *et al.*, 2014. Size dependent elastic modulus and mechanical resilience of dental enamel. *Journal of biomechanics* 47 (5), 1060–1066.
- Okeson, J., 2013. *Tratamento das Desordens Temporomandibulares e Oclusão*, 7th Edição. Elsevier.
- Oliveira, J., Pinho-da Cruz, J., Teixeira-Dias, F., 2007. On the prediction of the mechanical properties of composite materials using asymptotic expansion homogenization. *ECCOMAS Thematic Conference on Mechanical Response of Composites*.

- Oliveira, J., Pinho-da Cruz, J., Teixeira-Dias, F., 2009. Asymptotic homogenisation in linear elasticity. Part II: Finite element procedures and multiscale applications. *Computational Materials Science* 45 (4), 1081–1096.
- Pinho-da Cruz, J., Oliveira, J., Teixeira-Dias, F., 2009. Asymptotic homogenisation in linear elasticity. Part I: Mathematical formulation and finite element modelling. *Computational Materials Science* 45 (4), 1073–1080.
- Quintela, B., 2011. Implementação Computacional Paralela da Homogeneização por Expansão Assintótica para Análise de Problemas Mecânicos em 3D.
- Sajewicz, E., 2006. On evaluation of wear resistance of tooth enamel and dental materials. *Wear* 260 (11), 1256–1261.
- Sanchez-Palencia, E., 1986. Homogenization in mechanics. A survey of solved and open problems. *Rend. Sem. Mat. Univ. Politec. Torino* 44 (1), 1–45.
- Scheider, I., Xiao, T., Yilmaz, E., Schneider, G., Huber, N., Bargmann, S., 2015. Damage modeling of small-scale experiments on dental enamel with hierarchical microstructure. *Acta biomaterialia* 15, 244–253.
- Spears, I., 1997. A three-dimensional finite element model of prismatic enamel: a reappraisal of the data on the Young's modulus of enamel. *Journal of Dental Research* 76 (10), 1690–1697.
- Staines, M., Robinson, W., Hood, J., 1981. Spherical indentation of tooth enamel. *Journal of materials science* 16 (9), 2551–2556.
- Weig, K. d. M., F., C. M., Netor, C. A. d. C., 2011. Avaliação das propriedades mecânicas do dente através da microdureza instrumentada.
- Xie, Z.-H., Swain, M., Swadener, G., Munroe, P., Hoffman, M., 2009. Effect of microstructure upon elastic behaviour of human tooth enamel. *Journal of biomechanics* 42 (8), 1075–1080.

Zhou, J., Hsiung, L. L., 2007. Depth-dependent mechanical properties of enamel by nanoindentation. *Journal of Biomedical Materials Research Part A*.

APÊNDICE A - APÊNDICE

A.1 Código em Matlab

```

1  clc ;
2  t0=clock ;
3  %prop_prisma = input('nome que identifica a propriedade do
   prisma no Abaqus: ')
4
5  clear aux yp1 yp0 x0p x1p aux0 aux1 icp id x0 x1 y0 y1 countnos
   coord countelm nosel nomel nome2 nomematerial1 nomematerial2
   matriz elementos1 elementos2 matrizElementos prosp1 prosp2
6  fid=fopen('fecha_bi_02.m'); %abre o arquivo do abaqus
7
8  maiorx = 1.;
9  maiory = 1.;
10
11 while ~feof(fid)
12     countnelmm=fgetl(fid);
13     a=strfind(countnelmm, '*Node');
14     if a>0
15         break
16     end;
17 end
18
19 pos=ftell(fid);% indica a posição que o código está lendo o
   arquivo.
20

```

```

21 nnodes=0;
22 while 1
23     countnoss=fgetl(fid);
24     a=strfind(countnoss, '*');
25     if a>0
26         break
27     end;
28     nnodes=nnodes+1; %soma a quantidade de nos(total de nos).
29 end;
30
31 STATUS=fseek(fid, pos, 'bof');%reposiciona o codigo para comecar
    a leitura no ponto (pos).
32
33 coord(nnodes,3)=double(0.);
34 format long
35 for i=1:nnodes
36     a= fgetl(fid);
37     coord(i,:)= str2double(strsplit(a, ','));
38
39 end;
40
41 %criar matriz so com a posicao x e y de cada no.
42
43 coordg(nnodes,2)=double(0.);
44 format long
45 for i=1:nnodes
46     %a= fgetl(fid);
47     %coord(i,:)= str2double(strsplit(a, ','));
48     coordg(i,:)=coord(i,2:3);

```

```
49
50 end;
51
52 %vai para a leitura dos elementos
53 for i=1:1;
54     countnelmm=fgetl(fid);
55 end;
56
57 pos1=ftell(fid);% indica a posição que o código esta lendo o
    arquivo.
58
59 %contagem dos elementos
60 nelm=0;
61 while 1
62     countnelmm=fgetl(fid);
63     a=strfind(countnelmm, '*');
64     if a>0
65         break
66     end;
67     nelm=nelm+1;%soma a quantidade de elementos(total de
    elementos).
68 end;
69 disp('nnelm: ')
70 disp(nelm);
71
72 status1=fseek(fid, pos1, 'bof');%reposiciona o código para
    começar a leitura no ponto (pos1).
73
74 %matriz com elementos e suas conectividades
```



```

75 nosel(nelm,7)=double(0.);
76 for i=1:nelm
77     a= fgetl(fid);
78     nosel(i,:)= str2double(strsplit(a,','));
79 end;
80 %disp(nosel);
81
82 %criar matriz para ter os nos com seus elementos
83
84 nos(nelm,6)=double(0.);
85 for i=1:nelm
86     %a= fgetl(fid);
87     %nosel(i,:)= str2double(strsplit(a,','));
88     nos(i,:)=nosel(i,2:7);
89 end;
90 %disp(nos);
91
92 %Pega o nome do grupo de elementos afins
93 Nset=fgetl(fid);
94 p1 = strfind(Nset, '=');
95 %p2 = strfind(Nset, ',');
96 %nome1=Nset(p1+1:p2(end)-1);
97 nome1=Nset(p1+1:(end));
98 split=strsplit(nome1,',' );
99 if length(split)>1
100     nome1=split{1};
101 end;
102 %disp(nome1);
103

```

```

104 %Pega os elementos do primeiro grupo
105 while ~feof(fid)
106     countnelmm=fgetl(fid);
107     a=strfind(countnelmm, '*Elset ');
108     b=strfind(countnelmm, nome1);
109     if a>0 & b>0
110         break
111     end;
112 end;
113
114 countnelmm=fgetl(fid);
115 elementos1= str2num(countnelmm);
116 while ~feof(fid)
117     countnelmm=fgetl(fid);
118     a=strfind(countnelmm, '* ');
119     if a>0
120         break
121     end;
122     elementosADD= str2num(countnelmm);
123     elementos1 = cat(2, elementos1, elementosADD);
124     %disp(elementos1);
125 end;
126
127
128 if length(elementos1) > 3
129     elementostot1=elementos1;
130
131 else
132     %quantos elementos tem no grupo 1:

```

```

133     quantelementosgrupo1= elementos1(2)-elementos1(1);
134
135     elementostot1=zeros(1,1);
136     for i= elementos1(1):elementos1(2) %quantelementosgrupo1
137         b=nosel;
138         elementostot1(1,i)=b(i,1);
139     end;
140 end;
141 %quando o elset no inp so tem 3 elementos , deve descomentar o
142     comenatrio abaixo:
143 %elementostot1= elementostot1(1,elementos1(1):elementos1(2));
144 %elementostot1= elementostot1(1,2);
145
146 %Pega o nome do elementos afins
147 Nset=countnelmm;%fgetl(fid);
148 p1 = strfind(Nset, '=');
149 %p2 = strfind(Nset, ',');
150 nome2=Nset(p1+1:p2(end)-1);
151 nome2=Nset(p1+1:(end));
152 split=strsplit(nome2, ',');
153 if length(split)>1
154     nome2=split{1};
155 end;
156 disp(nome2);
157
158 %Pega os elementos
159 while ~feof(fid)
160     countnelmm=fgetl(fid);
161     a=strfind(countnelmm, 'Elset');

```

```

161     b=strfind(countnelmm , nome2);
162     if a>0 & b>0
163         break
164     end;
165 end;
166
167 countnelmm=fgetl(fid);
168 elementos2= str2num(countnelmm);
169 %disp(elementos2);
170 while ~feof(fid)
171     countnelmm=fgetl(fid);
172     a=strfind(countnelmm , '*' );
173     if a>0
174         break
175     end;
176     elementosADD= str2num(countnelmm);
177     elementos2 = cat(2, elementos2 , elementosADD);
178     %disp(elementos2);
179 end;
180
181 %total de elementos do grupo 2
182 if length(elementos2) > 3
183     elementostot2=elementos2;
184 else
185     %quantos elementos tem no grupo 1
186     quantelementosgrupo2= elementos2(2)-elementos2(1);
187
188     elementostot2=zeros(1,1)
189     for i= elementos2(1):elementos2(2)%quantelementosgrupo2

```

```

190         b=nosel;
191         elementostot2(1,i)=b(i,1);
192     end;
193 end
194 %quando o elset no inp so tem 3 elementos, deve descomentar o
        comenatrio abaixo
195 %elementostot2= elementostot2(1,elementos2(1):elementos2(2));
196
197 %Pega o nome do material do nome1
198 while ~feof(fid)
199     countnelmm=fgetl(fid);
200     a=strfind(countnelmm, '*Solid Section ');
201     b=strfind(countnelmm, nome1);
202     if a>0 & b>0
203         break
204     end;
205 end;
206 p1 = strfind(countnelmm, 'material=');
207 nomeMaterial1=countnelmm(p1+9:end);
208 disp(nomeMaterial1);
209
210 status1=fseek(fid, pos1, 'bof');%reposiciona o codigo para
        comecar a leitura no ponto (pos).
211
212 %Pega o material do nome2
213 while ~feof(fid)
214     countnelmm=fgetl(fid);
215     a=strfind(countnelmm, '*Solid Section ');
216     b=strfind(countnelmm, nome2);

```

```

217     if a>0 & b>0
218         break
219     end;
220 end;
221 p1 = strfind(countnelmm, 'material=');
222 nomeMaterial2=countnelmm(p1+9:end);
223
224 %Pega elementos com suas respectivas propriedade do material1
225 while 1
226     countnelmm=fgetl(fid);
227     a=strfind(countnelmm, '*Material');
228     b=strfind(countnelmm, nomeMaterial1);
229     if a>0 & b>0
230         break
231     end;
232 end;
233 countnelmm=fgetl(fid);%pula linha
234 countnelmm=fgetl(fid);
235 propss1= str2double(strsplit(countnelmm, ','));
236 disp(propss1);
237
238 status1=fseek(fid, pos1, 'bof');%reposiciona o codigo para
      comecar a leitura no ponto (pos).
239
240 %Pega elementos com suas respectivas propriedade do material2
241 while 1
242     countnelmm=fgetl(fid);
243     a=strfind(countnelmm, '*Material');
244     b=strfind(countnelmm, nomeMaterial2);

```

```
245     if a>0 & b>0
246         break
247     end;
248 end;
249 countnelmm=fgetl(fid);%pula linha
250 countnelmm=fgetl(fid);
251 props2= str2double(strsplit(countnelmm,','));
252 disp(props2);
253
254 qtdElementos1=length(elementostot1);
255 qtdElementos2=length(elementostot2);
256 qtdTotalEl=qtdElementos1+qtdElementos2;
257 matrizElementos(qtdTotalEl, 3) = double(0.);
258 for i=1:qtdElementos1
259     matrizElementos(i,1)=elementostot1(i);
260     matrizElementos(i,2)=propss1(1);
261     matrizElementos(i,3)=propss1(2);
262 end;
263 for j=1:qtdElementos2
264     matrizElementos(i+j,1)=elementostot2(j);
265     matrizElementos(i+j,2)=props2(1);
266     matrizElementos(i+j,3)=props2(2);
267 end;
268
269 matrizElementos=sortrows(matrizElementos);
270 matrizElementos
271
272 %monta matriz so com as propriedades
273
```

```

274 mat(qtdTotalEl,2)=double(0.);
275 format long
276 for i=1:qtdTotalE
277     mat(i,:)=matrizElementos(i,2:3);
278 end;
279 disp(mat);
280
281 %condicoes de contorno (restricoes e de periodicidade)
282
283 id(nnodes,2)=double(0.);
284
285 x0=find(coordg(:,1)==0.);
286 x1=find(coordg(:,1)==maiorx);
287
288 y0=find(coordg(:,2)==0.);
289 y1=find(coordg(:,2)==maiory);
290
291 if length(x0)~=length(x1)
292     disp('Erro na malha. Checar a periodicidade ao longo de Y')
293 end;
294 if length(y0)~=length(y1)
295     disp('Erro na malha. Checar a periodicidade ao longo de X')
296 end;
297
298 %condicoes de contorno periodicas dos nos ao longo de Y
299
300 y00 = find(coordg(x0,2)==0.); %vertice (0,0) find acha o
    indice
301 y01 = find(coordg(x0,2)==maiory); %vertice (0,1)

```



```

302
303 y10=find (coordg(x1,2)==0.); %vertice (1,0)
304 y11=find (coordg(x1,2)==maior); %vertice (1,1)
305
306 icp=[x0(y00)
307      x0(y01)
308      x1(y10)
309      x1(y11)];
310
311 for i=1:4
312     id(icp(i,:),:)= [1 1]; % os gls dos vertices estao
313                        restringidos
314
315 %comparando os nos da aresta x0 com os da aresta x1
316 aux0=find (coordg(x0,2)~=0.& coordg(x0,2)~=maior);
317 aux1=find (coordg(x1,2)~=0.& coordg(x1,2)~=maior);
318 x0p=x0(aux0);
319 x1p=x1(aux1);
320 disp(x0p);
321
322 glp=2;
323 for i=1:length(x0p);
324     yp0 = coordg(x0p(i),2);
325     for j=1:length(x1p);
326         yp1 = coordg(x1p(j),2);
327         aux=abs((yp0-yp1)/yp0);
328         if aux<10e-8
329             id(x0p(i),1)=glp;

```

```

330         id(x0p(i),2)=glp+1;
331         id(x1p(j),1)=glp;
332         id(x1p(j),2)=glp+1;
333         glp=glp+2;
334     end;
335 end;
336 end;
337
338 %comparando os nos da aresta y0 com os da aresta y1
339 auy0=find(coordg(y0,1)~=0.& coordg(y0,1)~=maiorx);
340 auy1=find(coordg(y1,1)~=0.& coordg(y1,1)~=maiorx);
341 y0p=y0(auy0);
342 y1p=y1(auy1);
343
344 for i=1:length(y0p)
345     xp0 = coordg(y0p(i),1);
346     for j=1:length(y1p)
347         xp1 = coordg(y1p(j),1);
348         aux=abs((xp0-xp1)/xp0);
349         if aux<10e-8
350             id(y0p(i),:)= [glp glp+1];
351             id(y1p(j),:)= [glp glp+1];
352             glp=glp+2;
353         end;
354     end;
355 end;
356
357 tempo=etime(clock,t0)

```

A.2 Matrizes com resultados

A.2.1 Modelo 1, caso 2

$$Dh = \begin{pmatrix} 68,780202604202060 & 19,947322046005514 & 0,167564320935774 \\ 19,443627372909635 & 88,832939859398294 & 2,090391701475644 \\ 0,002030279029542 & 0,228693135073409 & 26,725640029790533 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 68,780202604202060 & 19,6955 & 0,0 \\ 19,6955 & 88,832939859398294 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 26,725640029790533 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

A.2.2 Modelo 1, caso 3

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,104764561300357 & 0,784059576729517 & 0,001225999277567 \\ 0,645139064997295 & 14,819610146918757 & 4,990600464216105 \\ 0,000200445464517 & 0,990324138431267 & 2,387712847200398 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,104764561300357 & 0,7146 & 0,0 \\ 0,7146 & 14,819610146918757 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 2,387712847200398 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

A.2.3 Modelo 1, caso 4

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,121583115037504 & 0,801999602439986 & -0,004936065175657 \\ 0,644124004013298 & 17,131446795876041 & 6,193760796437106 \\ 0,000202874154628 & 1,232901914478664 & 2,613801086007763 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,121583115037504 & 0,7231 & 0,0 \\ 0,7231 & 17,131446795876041 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 2,613801086007763 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

A.2.4 Modelo 1, caso 5

$$Dh = \begin{pmatrix} 61,977822327002357 & 18,142201605015067 & 0,125418916579004 \\ 17,755414692595195 & 77,161229554836282 & 1,481416792109298 \\ 0,001622346597753 & 0,140536219545452 & 23,620675003797970 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 61,977822327002357 & 17,8482 & 0,0 \\ 17,8482 & 77,161229554836282 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 23,620675003797970 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

A.2.5 Modelo 2, caso 2

$$Dh = \begin{pmatrix} 69,6494371501310 & 23,0859178031422 & 0,0440048876351 \\ 23,0365167451287 & 115,2904282234314 & 0,0110137409520 \\ 0,0000083790124 & 0,0944724626386 & 29,4668644377251 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 69,6494371501310 & 23,0612 & 0,0440048876351 \\ 23,0612 & 115,2904282234314 & 0,0110137409520 \\ 0,0000083790124 & 0,0944724626386 & 29,4668644377251 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

A.2.6 Modelo 2, caso 3

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,120196212554820 & 1,205737962465266 & 0,074348311108754 \\ 1,112774828630311 & 76,907248779685517 & 0,019520937510247 \\ 0,000001347620666 & 0,206349294824616 & 1,926645072575899 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,120196212554820 & 1,1593 & 0,0 \\ 1,1593 & 76,907248779685517 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 1,926645072575899 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

A.2.7 Modelo 2, caso 4

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,136471430382854 & 1,234201295675156 & 0,091759723335422 \\ 1,119392303679886 & 94,171082828443673 & 0,024099501197212 \\ 0,000001368636345 & 0,255966816799826 & 1,970141770326570 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 3,136471430382854 & 1,1768 & 0,091759723335422 \\ 1,1768 & 94,171082828443673 & 0,024099501197212 \\ 0,000001368636345 & 0,255966816799826 & 1,970141770326570 \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

A.2.8 Modelo 2, caso 5

$$Dh = \begin{pmatrix} 62,759808299812079 & 20,603254041344268 & 0,031840935894964 \\ 20,568301225336686 & 95,936815620461715 & 0,007871513735642 \\ 0,000006046323645 & 0,067522990892394 & 25,867547172162570 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

$$Dh = \begin{pmatrix} 62,759808299812079 & 20,585777633340477 & 0,0 \\ 20,585777633340477 & 95,936815620461715 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 & 25,867547172162570 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.16})$$