

Trabajo Fin de Máster Máster Universitario en Ingeniería Industrial

Caracterización mecánica y modelización hiperelástica de hidrogeles de colágeno en aplicaciones de mecanobiología celular

Autor: Alejandro Apolinar Fernández

Tutor: José Antonio Sanz Herrera

**Departamento de Mecánica de Medios Continuos y
Teoría de Estructuras
Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Universidad de Sevilla**

Sevilla, 2020



Trabajo Fin de Máster
Máster Universitario en Ingeniería Industrial

Caracterización mecánica y modelización hiperelástica de hidrogeles de colágeno en aplicaciones de mecanobiología celular

Autor:

Alejandro Apolinar Fernández

Tutor:

José Antonio Sanz Herrera

Profesor Titular

Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras
Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Universidad de Sevilla

Sevilla, 2020

*A mis padres, Gustavo y Verónica, por su
eterno apoyo, sin el cual este trabajo
no habría sido posible.*

Resumen

En la consecución de este trabajo se ha estudiado la viabilidad del empleo de tres modelos constitutivos hiperelásticos en la caracterización de hidrogeles de colágeno: modelo Neo-Hookeano, modelo de Holzapfel y modelo de Steinwachs. Estos geles son utilizados en mecanobiología para simular las características de la matriz extracelular, siendo de gran importancia en el marco de la Microscopía de Fuerza de Tracción (TFM, por sus siglas en inglés). En dicho estudio, se ha efectuado la implementación de los modelos en MATLAB, y sirviéndose de las herramientas que el programa ofrece, se han realizado ajustes por mínimos cuadrados de los parámetros gobernantes de dichos modelos a curvas experimentales enviadas por colaboradores de la Universidad KU Leuven. El modelo que mejor aproxima el comportamiento de los geles es el modelo de Steinwachs, seguido por el de Holzapfel, siendo el Neo-Hookeano el que peores resultados ofrece. Por último, se ha desarrollado una sub-rutina UMAT que implementa el modelo de Steinwachs en el entorno de Análisis por Elementos Finitos Simulia ABAQUS, con el objetivo de ser empleada en el futuro en la resolución de problemas de mayor relevancia en el contexto de TFM.

Palabras clave: *Mecanobiología, Microscopía de Fuerza de Tracción, Hiperelasticidad, Mecánica no-lineal, Método de Elementos Finitos, MATLAB, ABAQUS, Trabajo de Fin de Máster.*

Abstract

This master's thesis is devoted to the study of the viability of the application of three hyperelastic constitutive models for the characterization of collagen hydrogels. The considered models are: Neo-Hookean model, Holzapfel model and Steinwachs model. The gels to be characterized are used in mechanobiology to simulate the characteristics of the extracellular matrix, being of great importance in the framework of Traction Force Microscopy (TFM). In such a study, the implementation of the models has been carried out in MATLAB, and using the tools offered by the software, it has been performed a least squares fitting of the experimental curves, sent by collaborators from the KU Leuven University, to the mentioned models. The model that best approximates the behaviour of the gels is the Steinwachs model, followed by Holzapfel's, with the Neo-Hookean model offering the worst results. Finally, a UMAT subroutine aimed for the implementation of the Steinwachs model in the Finite Element Analysis environment Simulia ABAQUS, has been developed, which could be used in the future in relevant problems in the framework of TFM.

Keywords: *Mechanobiology, Traction Force Microscopy, Hiperelasticity, Non-linear mechanics, Finite Element Method, MATLAB, ABAQUS, Master's Thesis.*

Agradecimientos

Querría agradecer la supervisión de este trabajo al Profesor José Antonio Sanz Herrera, tutor del mismo, cuyos conocimientos y opiniones han resultado indispensables para guiar mi camino en el proceso. Asimismo, querría agradecer al equipo de investigación en Mecanobiología e Ingeniería de Tejidos dirigido por el Profesor Hans Van Oosterwyck en la Universidad KU Leuven los datos experimentales en torno a los cuales han girado la mayoría de actividades realizadas en este trabajo.

Índice general

Resumen	III
Agradecimientos	v
1. Introducción	1
1.1. Contexto	1
1.2. Microscopía de Fuerza de Tracción (TFM)	1
1.2.1. Método directo	3
1.2.2. Método inverso	3
1.3. Objetivo	4
2. Hiperelasticidad	5
2.1. Marco teórico	5
2.1.1. Breve introducción a las medidas de tensión-deformación en elasticidad no lineal	5
2.1.2. Hiperelasticidad	7
2.2. Leyes hiperelásticas estudiadas	8
2.2.1. Neo-Hookeana	8
2.2.2. Holzapfel	9
2.2.3. Steinwachs	10
3. Implementación de las leyes hiperelásticas en MATLAB	13
3.1. Descripción general de la implementación	13
3.2. Estudio de sensibilidad de los parámetros	13
3.2.1. Neo-Hookeana	14
3.2.2. Holzapfel	15
3.2.3. Steinwachs	16
3.3. Procedimiento de ajuste de los datos experimentales	18
3.3.1. Obtención de las curvas de contracción vertical	19
4. Ajuste experimental de los parámetros gobernantes de las leyes	23
4.1. Datos experimentales recibidos	23
4.1.1. Cizalla simple	23
4.1.2. Contracción vertical ante extensión horizontal	24
4.2. Resultados	25
4.2.1. Neo-Hookeana	25
4.2.2. Holzapfel	25
4.2.3. Steinwachs	28
4.2.4. Recapitulación	30
5. Implementación de la ley de Steinwachs en ABAQUS	33
5.1. Contexto	33
5.2. Tensor de tensiones de Cauchy	34
5.3. Tensor de elasticidad material	34

5.3.1. Procedimiento alternativo	35
5.4. Validación de la implementación	36
5.4.1. Verificación del algoritmo de integración de las tensiones	36
5.4.2. Verificación de la precisión del Jacobiano	37
6. Conclusión	39
6.1. Resumen de los resultados	39
6.2. Trabajos futuros	40
Bibliografía	41

Índice de figuras

1.1. Una célula de tumor de mama (azul) inmersa en una matriz de colágeno tipo I. . .	2
2.1. Tensión de Cauchy frente a deformación en extensión uniaxial.	11
3.1. Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de μ y κ (modelo Neo-Hookeano).	15
3.2. Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de μ (modelo Neo-Hookeano).	15
3.3. Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de k_1 (modelo de Holzapfel).	15
3.4. Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de k_1 (modelo de Holzapfel).	15
3.5. Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de k_2 (modelo de Holzapfel).	16
3.6. Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de k_2 (modelo de Holzapfel).	16
3.7. Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de κ_o (modelo de Steinwachs).	17
3.8. Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de κ_o (modelo de Steinwachs).	17
3.9. Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de d_s (modelo de Steinwachs).	17
3.10. Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de d_s (modelo de Steinwachs).	17
3.11. Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de λ_s (modelo de Steinwachs).	17
3.12. Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de λ_s (modelo de Steinwachs).	17
3.13. Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de d_o (modelo de Steinwachs).	18
3.14. Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de d_o (modelo de Steinwachs).	18
4.1. Curva experimental y correspondiente ajuste para el ensayo de cizalla simple (Steinwachs).	24
4.2. Curva experimental y correspondiente ajuste para el ensayo de contracción vertical ante extensión horizontal (Steinwachs).	24
4.3. Curvas experimentales provenientes del ensayo de cizalla simple (KU Leuven). . . .	24
4.4. Curva experimental proveniente del experimento de contracción vertical ante extensión horizontal (KU Leuven).	24
4.5. Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml - $\mu = 20.1884$ Pa.	26
4.6. Ajuste para contracción vertical, 0.6 mg/ml - $\mu = 20.1884$ Pa, $\kappa = 1150$ Pa.	26
4.7. Ajuste para cizalla simple, 1.2 mg/ml - $\mu = 26.7160$ Pa.	26
4.8. Ajuste para contracción vertical, 1.2 mg/ml - $\mu = 26.7160$ Pa, $\kappa = 1930$ Pa.	26

4.9. Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $k_1 = 16.5425$ Pa, $k_2 = 4.1789$. . .	27
4.10. Ajuste para contracción vertical, 0.6 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $\kappa = 970$ Pa, $k_1 = 16.5425$ Pa, $k_2 = 4.1789$	27
4.11. Ajuste para cizalla simple, 1.2 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $k_1 = 24.3827$ Pa, $k_2 = 3.5363$. . .	27
4.12. Ajuste para contracción vertical, 1.2 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $\kappa = 970$ Pa, $k_1 = 24.3827$ Pa, $k_2 = 3.5363$	27
4.13. Contracción vertical frente a extensión horizontal para diversos valores de k_2 , considerando únicamente el término relativo a las fibras en el modelo de Holzapfel. .	28
4.14. Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml - $\kappa_o = 118.4608$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0$, $d_s = 0.0861$	29
4.15. Ajuste para contracción vertical, 0.6 mg/ml - $\kappa_o = 118.4608$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0$, $d_s = 0.0861$	29
4.16. Ajuste para cizalla simple, 1.2 mg/ml - $\kappa_o = 276.9333$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.0455$, $d_s = 0.0951$	29
4.17. Ajuste para contracción vertical, 1.2 mg/ml - $\kappa_o = 276.9333$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.0455$, $d_s = 0.0951$	29
4.18. Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml, $\gamma \in [0, 0.4]$ - $\kappa_o = 127.1748$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.024$, $d_s = 0.0705$	30
4.19. Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de cizalla simple - 0.6 mg/ml.	31
4.20. Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de contracción vertical - 0.6 mg/ml.	31
4.21. Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de cizalla simple - 1.2 mg/ml.	31
4.22. Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de contracción vertical - 1.2 mg/ml.	31
5.1. σ_{11} en extensión uniaxial.	37
5.2. σ_{13} en extensión uniaxial en dirección oblicua.	37
5.3. Desplazamiento en la dirección \mathbf{Y} en un estado de tracción-compresión.	38

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto

La *mecanobiología* es la ciencia que estudia la influencia que ejercen las cargas mecánicas en el desarrollo de procesos asociados a células y tejidos, así como de sus características y propiedades. A diferencia de la medicina, la cual, típicamente, busca el origen genético o bioquímico de las enfermedades, la mecanobiología sugiere que los cambios en el comportamiento mecánico de células, la estructura de las matrices extracelulares y mecanismos como la mecanotransducción podrían contribuir al desarrollo de numerosas enfermedades: aterosclerosis, fibrosis, asma, osteoporosis, fallo cardíaco y cáncer, entre otras [1, 2]. El reconocimiento a lo largo de las últimas dos décadas de la relevancia que poseen las sollicitaciones mecánicas en la respuesta celular ha conducido a la concepción de este campo emergente, lugar de confluencia de las disciplinas de biología, ingeniería y física. Evaluar el impacto de las fuerzas en los procesos celulares requerirá la medición y cuantificación de las variables mecánicas involucradas con gran resolución espacio-temporal, siendo el enfoque más utilizado la medición de las tracciones en la interfaz célula-matriz. En general, las fuerzas no constituyen una magnitud directamente accesible en un experimento, y éstas han de ser inferidas de algún tipo de movimiento, esto es, del campo de deformaciones fruto de la interacción entre la célula y la matriz extracelular. Esta aproximación mecánica al problema biológico ha visto un rápido desarrollo en los últimos años, siendo conocida como Microscopía de Tracción Celular (TFM, por sus siglas en inglés), la cual constituye el contexto en el que se enmarca el presente trabajo y será descrita en mayor profundidad a lo largo de la siguiente sección.

1.2. Microscopía de Fuerza de Tracción (TFM)

La Microscopía de Fuerza de Tracción es la técnica que permite conocer las fuerzas ejercidas por una célula sobre el sustrato en el que se encuentra embebida, creado para imitar las características mecánicas del entorno que habita la célula, esto es, la matriz extracelular. Estas fuerzas se obtendrán a través del campo de desplazamientos medido, resultante de la deformación del sustrato como consecuencia de la actividad de la célula, asumiéndose el conocimiento de las características mecánicas del mismo. Típicamente, el estado de deformaciones del sustrato se determina a través de los desplazamientos que experimenta un conjunto de marcadores de posición, comúnmente referidos como *beads*, desde una situación deformada (en tensión) a una situación indeformada (relajada). Pese a la gran variedad de posibilidades existente actualmente en la aplicación de la técnica [3], la forma más común en la que se realiza es a través de microscopía en sustratos elásticos blandos, el cual es el marco bajo el que se desarrolla este proyecto. La reconstrucción de las fuerzas en las tres direcciones espaciales requiere el registro tridimensional del

movimiento de los *beads* inmersos en el sustrato en lo que se conoce como 3D TFM, y constituye un procedimiento relativamente reciente [4], habiéndose practicado con menor frecuencia que la modalidad bidimensional. Esto se debe, no exclusivamente al hecho de que el problema implicado se manifieste de mayor complejidad que en 2D TFM, sino además a que esta última tiene fundamento en la observación de que a menudo las células se vuelven “planas” en adhesiones maduras dentro de sustratos elásticos. No obstante, muchos tipos celulares requieren la reconstrucción de las complejas características biofísicas y bioquímicas de una matriz extracelular tridimensional para poder mostrar un comportamiento fisiológicamente realista en el interior de ambientes *in vitro* [5]. Asimismo, cabe discernir entre procedimientos que contemplan no-linealidades de origen geométrico (deformaciones finitas, $\varepsilon \sim O(1)$) y aquellos que no (deformaciones infinitesimales, $\varepsilon \ll 1$). Dentro del régimen lineal, la aproximación de deformaciones infinitesimales brinda la posibilidad de usar funciones de Green en la resolución del problema mecánico, dando lugar a rápidos y eficientes algoritmos para la reconstrucción de las tracciones. Sin embargo, avances recientes en TFM muestran la capacidad de las células de ejercer deformaciones con una magnitud de hasta el 40%, requiriéndose un enfoque basado en la teoría de grandes deformaciones que contemple tales niveles de deformación [6]. A este respecto, la resolución del problema mecánico habrá de enmarcarse en el contexto de una discretización por elementos finitos, no pudiéndose utilizar las funciones de Green para ello. Ambos procedimientos se hallan inscritos en el marco del método inverso de recuperación de tracciones. Esencialmente, este método se basa en la obtención de las tracciones a través de la resolución de un problema de minimización que implique el equilibrio de fuerzas internas y de volumen ($\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = 0$), así como determinadas restricciones, empleando como dato el campo de desplazamientos medido experimentalmente. De esta forma, el campo de tracciones resultante no se corresponderá directamente con el campo de desplazamientos medido. Existe, no obstante, una alternativa a la resolución del problema inverso: el método directo; el cual se basa en la obtención del tensor de deformaciones correspondiente al campo de desplazamientos medido (derivándolo) para, mediante la ley constitutiva del material, obtener el tensor de tensiones asociado. Ambos métodos se describen con más detenimiento en las secciones 1.2.1 y 1.2.2.

La figura 1.1 ilustra una configuración típica en 3D TFM. La superficie azul corresponde a una célula de tumor de mama inmersa en una matriz de colágeno de tipo I, y las barras coloreadas representan los desplazamientos correspondientes a los *beads* causados por la relajación de la tracción celular [7].

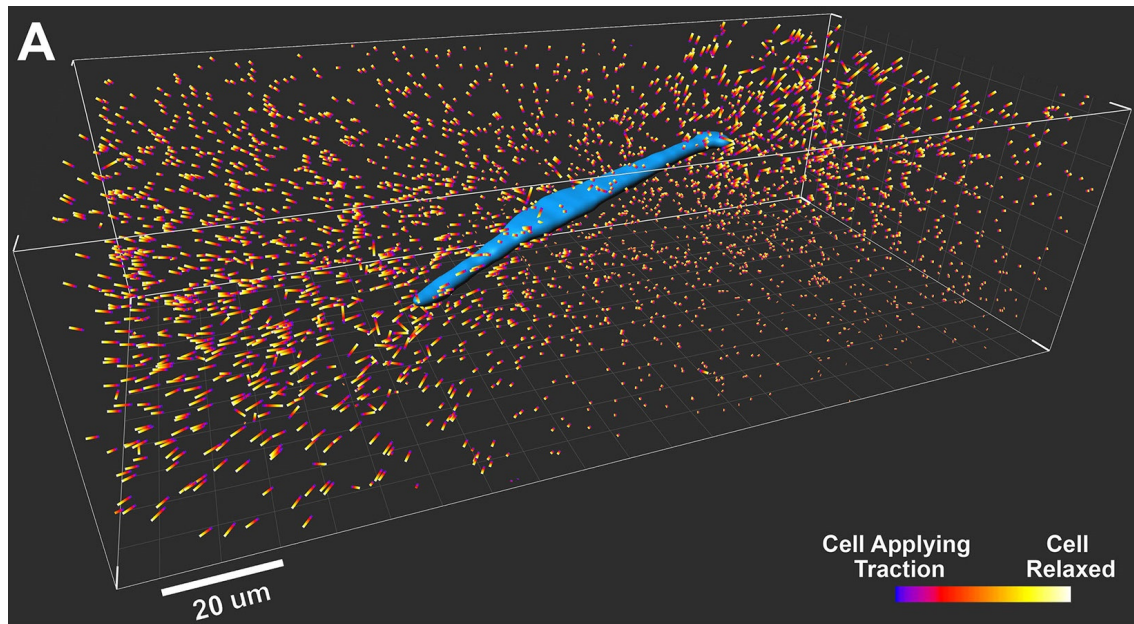


Figura 1.1: Una célula de tumor de mama (azul) inmersa en una matriz de colágeno tipo I.

1.2.1. Método directo

El método directo consiste fundamentalmente en la reconstrucción directa de las tracciones celulares a partir del campo de desplazamientos medido en laboratorio. La diferenciación de este último permite obtener el tensor gradiente de deformación correspondiente, que es entonces aplicado a la ley constitutiva del material para obtener el tensor de tensiones de Cauchy. Las tracciones buscadas se relacionan con dicho tensor a través del vector normal exterior genérico de la superficie envolvente de la célula. Un flujo de trabajo típico para este método podría ser:

1. Obtención del campo de desplazamientos discreto, esto es, los desplazamientos de cada *bead*.
2. Interpolación mediante funciones de forma del campo de desplazamientos en el dominio considerado. Esto requerirá la discretización del mismo en elementos finitos, pero aliviará bastante la generación de ruido a la hora de practicar las derivadas sobre el campo de desplazamientos, la cual puede devenir enorme en la aproximación numérica de derivadas.
3. Diferenciación del campo de desplazamientos y obtención del tensor gradiente de deformación compatible a través de la expresión $\mathbf{F} = \mathbf{1} + [\nabla \otimes \mathbf{u}]^T$.
4. Obtención del tensor de tensiones de Cauchy, $\boldsymbol{\sigma}$, a través de la relación constitutiva del substrato, que ha de depender en última instancia de \mathbf{F} .
5. Recuperación de las tracciones en la interfaz célula-substrato, la cual se relaciona con el tensor de tensiones de Cauchy a través del vector normal a la superficie de la célula, $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$.

Debido al carácter “ruidoso” de los desplazamientos medidos, el método directo presenta potenciales inestabilidades en su aplicación, esto es, gran sensibilidad de las fuerzas reconstruidas ante pequeños cambios en los desplazamientos medidos. Por tanto, el procedimiento requiere de la disposición de técnicas sofisticadas de procesamiento de imágenes, así como de la captura de imágenes 3D de gran resolución.

1.2.2. Método inverso

Este enfoque busca una solución *regularizada* matemáticamente consistente del campo de tracciones, que en última instancia implique a las relaciones constitutivas y cinemáticas (de compatibilidad) entre desplazamientos y deformaciones en una región grande alrededor de la célula. El objetivo del procedimiento es pues el de obtener una solución al campo de tracciones a través de un problema de minimización con restricciones que contemple como parte de la función objetivo la ecuación de equilibrio que relaciona las tracciones con el campo de desplazamientos medido. En el caso de deformaciones infinitesimales, dicha relación se expresa a través de la integral de convolución de la función de Green correspondiente con las tracciones buscadas, que en la práctica es discretizada y por tanto pasa a ser una operación matricial,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \int \mathbf{G}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \mathbf{t}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad \longrightarrow \quad \mathbf{u} = \mathbf{G}^* \mathbf{t} \quad (1.1)$$

donde \mathbf{u} es el campo de desplazamientos medido, $\mathbf{G}^* \mathbf{t}$ es el campo de desplazamientos predicho por el campo de tracciones estimado (\mathbf{G} la función de Green, \mathbf{t} el campo de tracciones buscado), es decir, la integral de convolución discretizada; y \mathbf{x} y \mathbf{X} las coordenadas de cualquier punto del substrato en configuración deformada e indeformada, respectivamente. Debido a la naturaleza tensorial de la teoría de la elasticidad, la función de Green \mathbf{G} constituye una matriz 3×3 la cual contempla desplazamientos del substrato en tres dimensiones. De este modo, la solución de (1.1) se obtiene de resolver un problema de minimización por mínimos cuadrados con regularización de la función objetivo $(\mathbf{u} - \mathbf{G}\mathbf{t})$. La regularización constituye un enfoque heurístico que tiene por objetivo limitar la magnitud de las tracciones resultantes de resolver dicho problema, que puede alcanzar valores muy grandes debido al ruido presente en las mediciones del campo de desplazamientos. Atendiendo a tal restricción, se plantea el problema de minimización con regularización de *Tikhonov* de orden cero como [3],

$$\mathbf{t} = \arg \min_{\mathbf{t}} \left[\|\mathbf{G}\mathbf{t} - \mathbf{u}\|^2 + \lambda^2 \mathbf{t}^2 \right] \quad (1.2)$$

en donde la elección del parámetro de regularización λ puede basarse en la teoría *Bayesiana* [8] o realizarse empíricamente [9]. Por tanto, la diferencia fundamental del método inverso con respecto al directo es que el campo de tracciones resultante no guarda relación directa con el campo de desplazamientos medido.

En caso de que las deformaciones sean grandes, el problema de optimización descrito deberá plantearse en el contexto de una discretización por elementos finitos u otros métodos afines. En todo caso, el método inverso representa pues un problema de gran complejidad computacional en relación al método directo, pero proporciona resultados significativamente más fidedignos que este último. Por ello, para conjuntos de datos de calidad estándar, resulta más conveniente aplicar el método inverso.

1.3. Objetivo

El objetivo del presente trabajo consiste en verificar la viabilidad de los modelos hiperelásticos Neo-Hookeano, de Holzapfel y de Steinwachs en la caracterización de las propiedades mecánicas de unos hidrogeles de colágeno tipo I. Para ello, se pretende implementar dichas leyes constitutivas en MATLAB y hacer uso de las herramientas de optimización que ofrece tal programa a la hora de ajustar los modelos a datos experimentales del comportamiento de los geles enviados por colaboradores en la Universidad KU Leuven. Por último, se quiere desarrollar una sub-rutina de usuario que permita implementar el modelo material de Steinwachs en el programa de análisis por elementos finitos Simulia ABAQUS.

Capítulo 2

Hiperelasticidad

En este capítulo se desarrolla el núcleo teórico del trabajo. Se comienza realizando una breve descripción del contexto teórico en el que se enmarcan las subsiguientes secciones, esto es, el compuesto por la formulación de las magnitudes esenciales de tensión y deformación en la elasticidad no lineal, y la teoría de leyes constitutivas hiperelásticas. A continuación, se describen de forma detallada las características de las tres leyes hiperelásticas consideradas en este trabajo.

2.1. Marco teórico

Aunque el análisis lineal de problemas de elasticidad sea, en general, de gran utilidad -además de relativamente simple-, su alcance es limitado. Las condiciones requeridas para que su aplicación sea viable no son satisfechas en muchas de las circunstancias dadas en la práctica, como aquellas propias de la mecanobiología. En efecto, cualquier situación que involucre la respuesta en deformación de una matriz extracelular ante un determinado estado de cargas -como, por ejemplo, un gel de colágeno- no podrá ser tratada desde un enfoque lineal. Esto es cierto para virtualmente todo tejido corporal o elemento mecánico biológico. Existen, pues, dos clases esenciales de no-linealidades: las no-linealidades **de origen material**, y aquellas **de origen geométrico**. La primera se debe a que la propia ley constitutiva del material no se comporta de forma lineal, es decir, la relación tensión-deformación no es una línea recta, al contrario que aquella de un material elástico lineal ($\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$). La segunda, en cambio, se origina cuando los desplazamientos producidos en el proceso de deformación son lo suficientemente grandes como para que las configuraciones deformada e indeformada del cuerpo en cuestión no puedan ser consideradas indistintas.

Todas las definiciones y formulaciones que se hallan en la presente sección han sido extraídas fundamentalmente de los libros de *Holzapfel* [10] y *Bonet y Wood* [11].

2.1.1. Breve introducción a las medidas de tensión-deformación en elasticidad no lineal

Contrariamente a como se hace en la teoría de deformaciones infinitesimales, en la teoría de grandes deformaciones (elasticidad geoméricamente no lineal) se considera la distinción entre las configuraciones deformada e indeformada del cuerpo en deformación, debido a que los desplazamientos que las relacionan son, como mínimo, del orden de magnitud de las dimensiones originales del problema (configuración indeformada). De este modo, la posición instantánea de un punto cualquiera del medio puede expresarse a partir de las coordenadas iniciales como,

$$\boldsymbol{x}(\boldsymbol{X}, t) = \boldsymbol{X} + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) \rightarrow \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) = O(\boldsymbol{X}) \quad (2.1)$$

donde \mathbf{u} es el vector de desplazamientos. Esta diferenciación entre \mathbf{x} y \mathbf{X} da lugar a dos tipos de formulaciones distintas de las magnitudes y ecuaciones de la mecánica no lineal: la formulación **material o Lagrangiana**, en la cual se realiza el seguimiento de la evolución de las propiedades de una partícula que en el instante inicial se hallaba en un punto determinado de la configuración indeformada; y la formulación **espacial o Euleriana**, en la que la atención se centra más bien en la evolución de las magnitudes en cualquier punto del dominio definido, siendo estos puntos ocupados por diferentes partículas en diferentes instantes. Así pues, la primera se enfoca en la partícula, mientras que la segunda lo hace en el dominio en el que esa partícula se halla. Siendo θ una magnitud cualquiera, ambas configuraciones se “encuentran” a través de la siguiente relación:

$$\theta(\mathbf{X}, t) = \theta(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t), t) \quad (2.2)$$

Se define el **tensor gradiente de deformación \mathbf{F}** como la magnitud que permite expresar la posición relativa **espacial** entre dos partículas vecinas después de la deformación en términos de su posición relativa **material** previa a la deformación,

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} \quad F_{iJ} = \frac{\partial x_i}{X_J} \quad \forall i, J = 1, 2, 3 \quad (2.3)$$

En este sentido, \mathbf{F} permite transformar vectores expresados en la configuración material, o de referencia, en vectores expresados en la configuración espacial, o actual; y por ello es conocido como un **tensor bi-punto**. Esto quiere decir que no se halla expresado en ninguna de las dos configuraciones, sino “en medio” de ambas. De ahí la diferenciación entre subíndices en minúsculas (espacial) y mayúsculas (material). Del mismo modo pueden definirse otras magnitudes de deformación que operen exclusivamente sobre elementos materiales o espaciales:

Materiales

- *Tensor de Cauchy por la derecha, $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$*
- *Tensor de deformaciones de Green, $\mathbf{E} = [\mathbf{C} - \mathbf{1}]/2$*

Espaciales

- *Tensor de Cauchy por la izquierda, $\mathbf{b} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T$*
- *Tensor de deformaciones de Almansi, $\mathbf{e} = [\mathbf{1} - \mathbf{b}^{-1}]/2$*

En cuanto a las magnitudes de tensión, aunque éstas se describen con mayor profundidad junto con la introducción de la noción de *función de densidad de energía de deformación* en la siguiente sección, puede anticiparse cuáles son de naturaleza material, bi-punto y espacial:

- **Material.** *Segundo tensor de Piola-Kirchhoff (\mathbf{S}).*
- **Bi-punto.** *Primer tensor de Piola-Kirchhoff (\mathbf{P}).*
- **Espacial.** *Tensor de Cauchy ($\boldsymbol{\sigma}$) y Tensor de Kirchhoff ($\boldsymbol{\tau}$).*

Resulta conveniente definir un operador a través del cual puedan expresarse las relaciones entre las distintas medidas de tensión descritas por los tensores presentados previamente. Se define pues el operador de *empuje* o *push-forward* como aquel que permite transformar magnitudes materiales en espaciales, $\phi_*[\cdot]$; y el de *tirón* o *pull-back* como aquel que permite transformar magnitudes espaciales en materiales, $\phi^*[\cdot]$. Ambos son mutuamente inversos, y la operación implicada por ellos dependerá de la magnitud sobre la cual se practique. De este modo, las relaciones entre las distintas medidas de tensión a través del operador de *empuje* son las siguientes:

$$\boldsymbol{\tau} = J \boldsymbol{\sigma} = \phi_*[\mathbf{P}] = \mathbf{P} \mathbf{F}^T \quad (2.4)$$

$$\boldsymbol{\tau} = J \boldsymbol{\sigma} = \phi_*[\mathbf{S}] = \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T \quad (2.5)$$

2.1.2. Hiperelasticidad

Se define la *elasticidad* como la cualidad de aquel material cuya relación constitutiva es únicamente dependiente del estado actual de deformación. En tal sentido, la *hiperelasticidad* es definida como la cualidad propia de aquellos materiales elásticos cuya relación constitutiva deriva directamente de una función escalar que relaciona la energía de deformación con el tensor gradiente de deformación, denominada *función densidad de energía de deformación* o *potencial elástico*. Esto es posible debido a que el trabajo realizado por las tensiones en el proceso de deformación depende exclusivamente de los instantes inicial y final, no por tanto del camino intermedio. Esta función se define como,

$$\Psi(\mathbf{F}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) = \int_{t_0}^t \mathbf{P}(\mathbf{F}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) : \dot{\mathbf{F}} dt \longrightarrow \dot{\Psi} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} \quad (2.6)$$

donde la notación $\dot{\quad}$ indica derivada con respecto al tiempo.

Toda función densidad de energía debe ser objetiva, esto es, debe permanecer invariante ante movimientos de sólido rígido. Teniendo en cuenta que el tensor gradiente de deformación puede ser descompuesto en la combinación de una rotación y un estiramiento (descomposición polar), $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$, el potencial elástico ha de depender únicamente de la componente de estiramiento \mathbf{U} . Por una cuestión de conveniencia, el potencial se suele expresar en función de $\mathbf{U}^2 = \mathbf{C}$, permitiendo así la reinterpretación de la expresión dada en (2.6) como,

$$\Psi(\mathbf{C}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) = \int_{t_0}^t \mathbf{S}(\mathbf{C}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) : \dot{\mathbf{E}} dt \longrightarrow \dot{\Psi} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} \quad (2.7)$$

Los pares \mathbf{P} y $\dot{\mathbf{F}}$ y \mathbf{S} y $\dot{\mathbf{E}}$ son *conjugados energéticos*, y permiten definir la relación constitutiva en las configuraciones mixta y material, respectivamente, de la siguiente forma,

$$\mathbf{P}(\mathbf{F}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) = \frac{\partial \Psi(\mathbf{F}(\mathbf{X}), \mathbf{X})}{\partial \mathbf{F}} \quad P_{iJ} = \frac{\partial \Psi}{\partial F_{iJ}} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{C}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) = \frac{\partial \Psi(\mathbf{C}(\mathbf{X}), \mathbf{X})}{\partial \mathbf{E}} \quad S_{IJ} = \frac{\partial \Psi}{\partial E_{IJ}} \quad (2.9)$$

Asimismo, en el marco de un material isótropo, el potencial elástico debe ser independiente de cualquier dirección en la configuración material, *i. e.*, ha de depender únicamente de los tres primeros invariantes del tensor \mathbf{C} ,

$$\Psi(\mathbf{C}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) = \Psi(I_1, I_2, I_3, \mathbf{X}) \quad (2.10)$$

en donde los invariantes de \mathbf{C} son definidos como,

$$I_1 = \text{tr}[\mathbf{C}] = \mathbf{C} : \mathbf{1} \quad (2.11)$$

$$I_2 = \text{tr}[\mathbf{C}^2] = \mathbf{C} : \mathbf{C} \quad (2.12)$$

$$I_3 = \det[\mathbf{C}] = \det[\mathbf{F}]^2 = J^2 \quad (2.13)$$

Las relaciones dadas en (2.8) y (2.9) serán, en general, no lineales. En el contexto de un esquema numérico iterativo -por ejemplo, un esquema de *Newton-Raphson*- aparecerán linealizadas con respecto a un incremento \mathbf{u} en la configuración correspondiente, presentándose así dichas relaciones en la siguiente forma,

$$D\mathbf{P}[\mathbf{u}] = \mathbf{A} : D\mathbf{F}[\mathbf{u}] \quad D\mathbf{S}[\mathbf{u}] = \mathbf{C} : D\mathbf{E}[\mathbf{u}] \quad (2.14)$$

en donde $D\mathbf{f}[\mathbf{u}]$ denota derivada direccional de \mathbf{f} en la dirección de \mathbf{u} . \mathcal{A} y \mathcal{C} son tensores de cuarto orden que reciben el nombre de *Primer* y *Segundo Tensor de Elasticidad*, respectivamente, y vienen descritos por,

$$\mathcal{A} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{F}} \quad \mathcal{A}_{iJkL} = \frac{\partial P_{iJ}}{\partial F_{kL}} \quad (2.15)$$

$$\mathcal{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} \quad \mathcal{C}_{IJKL} = \frac{\partial S_{IJ}}{\partial E_{KL}} \quad (2.16)$$

Ambos tensores, debido a que son consecuencia de derivar dos veces una función (potencial elástico) con respecto a la misma cantidad (tensor de deformación), poseen *simetría mayor*,

$$\mathcal{A}_{iJkL} = \mathcal{A}_{kLiJ} \quad \mathcal{C}_{IJKL} = \mathcal{C}_{KLIJ} \quad (2.17)$$

antes bien, sólo el segundo tensor de elasticidad presenta *simetrías menores*, ya que es consecuencia de derivar una cantidad simétrica (segundo tensor de Piola-Kirchoff) con respecto a otra magnitud simétrica (tensor de deformación de Green-Lagrange),

$$\mathcal{C}_{IJKL} = \mathcal{C}_{JIKL} \quad \mathcal{C}_{IJKL} = \mathcal{C}_{IJLK} \quad (2.18)$$

2.2. Leyes hiperelásticas estudiadas

A continuación se describen en detalle las tres leyes hiperelásticas consideradas en este trabajo: la ley Neo-Hookeana, la ley de Holzapfel y la ley de Steinwachs.

2.2.1. Neo-Hookeana

El modelo *Neo-Hookeano* constituye una extensión del comportamiento descrito por la *ley de Hooke* para el caso de grandes deformaciones [12]. A diferencia con el sólido *Hookeano*, cuya ley de comportamiento es enteramente lineal, la relación tensión-deformación del sólido Neo-Hookeano es virtualmente lineal antes de cruzar el umbral de pequeñas deformaciones, más allá del cual el comportamiento deviene no lineal. La tensión alcanza eventualmente un *plateau* debido a la liberación de energía de deformación en forma de calor, para luego volver a rigidizarse. Fue concebido en origen para describir el comportamiento de materiales plásticos y similares a la goma, de carácter incompresible, es decir, cuyo volumen permanece invariable durante el proceso de deformación ($J = 1$), y por tanto su función densidad de energía de deformación no depende del tercer invariante. No obstante, en ocasiones conviene llevar a cabo la concepción de modelos compresibles, ya sea porque la implementación numérica de tal modelo presente dificultades [13], o porque el propio material de estudio sea de naturaleza compresible, como es el caso del considerado en este trabajo, un hidrogel de colágeno de tipo I cuasi-incompresible [14, 15]. A este respecto, la función potencial elástico del material ahora habrá de depender del tercer invariante, o lo que es igual, del determinante de \mathbf{F} (J). Existen diversas formulaciones alternativas del potencial elástico para materiales Neo-Hookeanos compresibles, habiéndose elegido para este trabajo la siguiente [13],

$$\Psi(I_1, J) = \frac{\mu}{2}[I_1 - \mathbf{1} : \mathbf{1} - 2 \log J] + \frac{\kappa}{2}[J - 1]^2 \quad (2.19)$$

siendo μ y κ los parámetros de *Lamé*, con unidades de tensión. Se verifica que cuando no existe deformación, $\mathbf{F} = \mathbf{1}$, el potencial elástico adquiere valor cero.

La ley constitutiva en configuración mixta viene descrita por,

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \Psi(I_1, J)}{\partial \mathbf{F}} = \frac{\partial \Psi}{\partial I_1} \frac{\partial I_1}{\partial \mathbf{F}} + \frac{\partial \Psi}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{F}} \quad (2.20)$$

siendo,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial I_1} = \frac{\mu}{2} \quad \frac{\partial I_1}{\partial \mathbf{F}} = 2\mathbf{F} \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial J} = -\mu \frac{1}{J} + \kappa[J - 1] \quad \frac{\partial J}{\partial \mathbf{F}} = J \cdot [\mathbf{F}^{-1}]^T = \text{cof}[\mathbf{F}] \quad (2.22)$$

denotando $\text{cof}[\mathbf{F}]$ la matriz de cofactores de \mathbf{F} .

2.2.2. Holzapfel

En 1998, *Holzapfel* y *Weizsäcker* [16] propusieron un modelo *desacoplado* del potencial elástico para arterias de tipo *elástico* y *muscular*,

$$\Psi = \Psi_{\text{iso}} + \Psi_{\text{aniso}} \quad (2.23)$$

El término Ψ_{iso} representa la contribución isótropa de la sustancia base no colágena, probablemente por la acción de la *elastina* en la pared vascular, y que puede corresponder a una función densidad de energía de deformación isótropa cualquiera. En este sentido, Ψ_{iso} será una función de los tres primeros invariantes, y en el contexto de este trabajo se ha elegido como la descrita en la sección 2.2.1. Por otro lado, Ψ_{aniso} representa la contribución anisótropa de la familia de fibras colágenas presentes en la pared vascular en una dirección determinada. Ψ_{aniso} será pues una función del invariante cuarto, el cual se define como,

$$I_4 = \mathbf{M}^T \mathbf{C} \mathbf{M} \quad (2.24)$$

en donde \mathbf{M} corresponde al vector unitario que apunta en la dirección paralela a las fibras. La manera en la que Ψ_{aniso} depende de I_4 es a través de una función exponencial propuesta originalmente por *Fung et al.* [17],

$$\Psi_{\text{aniso}}(I_4) = \frac{k_1}{k_2} \left[\exp \left[k_2 [I_4 - 1]^2 \right] - 1 \right] \quad (2.25)$$

y que contempla la fuerte rigidización del tejido a cargas más elevadas debida casi enteramente a la acción de las fibras colágenas. k_1 es un parámetro material con unidades de tensión y k_2 es un parámetro adimensional. Si se consideran más de una familia de fibras, la contribución total se obtendrá como el promedio de las contribuciones de toda ellas, pasando entonces (2.25) a escribirse como,

$$\Psi_{\text{aniso}}(I_4) = \frac{k_1}{k_2} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[\exp \left[k_2 [I_{4i} - 1]^2 \right] - 1 \right] \quad (2.26)$$

siendo n el número total de familias de fibras (o direcciones) existentes. Se verifica que para $\mathbf{F} = \mathbf{1}$, esto es, en ausencia de deformaciones, $I_4 = 1$, y Ψ_{aniso} deviene nulo.

No obstante, el gel de colágeno considerado en este trabajo se comporta de forma isótropa. Esto implica que las fibras embebidas en el mismo han de estar homogéneamente distribuidas en todas direcciones, esto es, isótropamente distribuidas. Debido a esto, para obtener la ley constitutiva correspondiente, el término Ψ_{aniso} debe constituir el promedio de la contribución de todas las fibras existentes en todas direcciones. Así pues, la ley constitutiva en configuración mixta queda expresada de la siguiente forma,

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \left\langle \frac{\partial \Psi(I_1, J, I_4)}{\partial \mathbf{F}} \right\rangle_{\Omega} = \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}(I_1, J)}{\partial \mathbf{F}} + \left\langle \frac{\partial \Psi_{\text{aniso}}(I_4)}{\partial \mathbf{F}} \right\rangle_{\Omega} = \\ &= \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}}{\partial I_1} \frac{\partial I_1}{\partial \mathbf{F}} + \frac{\partial \Psi_{\text{iso}}}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{F}} + \left\langle \frac{\partial \Psi_{\text{aniso}}}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{F}} \right\rangle_{\Omega} \end{aligned} \quad (2.27)$$

donde los términos correspondientes a la parte isótropa se obtienen de forma idéntica a lo indicado en (2.21) y (2.22), mientras que aquellos correspondientes a la parte anisótropa se obtienen como,

$$\frac{\partial \Psi_{\text{aniso}}}{\partial I_4} = 2k_1[I_4 - 1] \exp[k_2[I_4 - 1]^2] \quad \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{F}} = 2[\mathbf{F}\mathbf{M}] \otimes \mathbf{M} \quad (2.28)$$

denotando $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$ el producto de *Kronecker* entre ambos vectores. La notación $\langle \cdot \rangle_{\Omega}$ indica el promedio de la magnitud entre paréntesis angulares considerándose toda dirección contenida en el ángulo sólido $\Omega = [\theta, \phi]$, donde θ y ϕ son las variables independientes angulares en coordenadas esféricas; y \mathbf{M} un vector unitario cualquiera definido como $\mathbf{M} = [\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta]^T$. Se ha elegido realizar el promedio integrando la magnitud en cuestión alrededor de la esfera unitaria, para ello empleando la cuadratura de *Gauss-Legendre* [18],

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \Psi_{\text{aniso}}}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{F}} \right\rangle_{\Omega} &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{\partial \Psi_{\text{aniso}}}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{F}}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi \approx \\ &\approx \frac{1}{4\pi} \frac{\pi}{m} \sum_{j=1}^{2m} \sum_{i=1}^m w_i \left[\frac{\partial \Psi_{\text{aniso}}}{\partial I_4} \frac{\partial I_4}{\partial \mathbf{F}} \right](\theta_i, \phi_j) \end{aligned} \quad (2.29)$$

siendo m el orden de integración. El conjunto $\{\theta_i\}$ es escogido de modo que $\{\cos(\theta_i)\}$ y $\{w_i\}$ sean, respectivamente, los nodos y pesos de Gauss-Legendre en el intervalo $[-1, 1]$. Los puntos ϕ_j se distribuyen uniformemente en el intervalo $[0, 2\pi]$ a través de la siguiente expresión,

$$\phi_j = \left[j - \frac{1}{2} \right] \frac{\pi}{m} \quad (2.30)$$

2.2.3. Steinwachs

Steinwachs et al. [19] proponen un modelo para redes de biopolímeros -como el colágeno-, basado en la combinación de una descripción micromecánica, es decir, centrada en el comportamiento individual de una fibra en particular; y de una descripción de medio continuo. Teniendo en cuenta una escala espacial suficientemente pequeña correspondiente a un segmento de fibra, la deformación local de dicho segmento es considerada *no-afín*, esto es, independiente de la deformación del resto del volumen. Sin embargo, para escalas mayores a la distancia de interconexión típica entre fibras, la deformación de la fibra se aproxima a la deformación macroscópica λ , dependiendo de la orientación de la fibra y la deformación practicada. De este modo, se considera que las deformaciones pasan a ser *afines* para un volumen de material suficientemente grande. Análogamente a lo descrito en la sección 2.2.2, la relación constitutiva macroscópica para este modelo se obtiene promediando en todas direcciones aquella propia de una fibra.

Se considera que una fibra puede encontrarse en tres estados distintos de deformación: compresión, ante la cual la fibra se vuelve inestable (pandea) y presenta entonces una rigidez que decae exponencialmente hasta cero; enderezamiento, proceso intermedio en el que la fibra recupera su longitud natural después de haber pandeado y ante el cual presenta una rigidez constante; y estiramiento, proceso en el que la fibra se deforma axialmente más allá de su longitud natural y experimenta una rigidización exponencial. El potencial elástico se define a través de la rigidez, es decir, de su segunda derivada con respecto a la deformación macroscópica λ ,

$$\Psi''(\lambda) = \kappa_o \begin{cases} \exp[\lambda/d_o] & \forall \lambda < 0 \\ 1 & \forall 0 \leq \lambda < \lambda_s \\ \exp[(\lambda - \lambda_s)/d_s] & \forall \lambda \geq \lambda_s \end{cases} \quad \lambda = \|\mathbf{F}\mathbf{e}_{\Omega}\| - 1 \quad (2.31)$$

en donde κ_o es un parámetro material con dimensiones de tensión, d_o es el parámetro adimensional de pandeo, d_s es el parámetro adimensional de estiramiento y λ_s es el parámetro adimensional que controla la extensión del intervalo de comportamiento lineal, *i. e.*, de rigidez constante. La deformación λ de una fibra se define como la variación de longitud de la misma con respecto a su

longitud natural, y \mathbf{e}_Ω es el vector unitario que describe la orientación de la fibra. Se comprueba que el potencial elástico presenta un valor nulo cuando $\mathbf{F} = \mathbf{1}$, puesto que en ese caso $\lambda = 0$ (no existe deformación alguna). La tensión mecánica de la fibra es definida por la siguiente expresión,

$$\Psi'(\lambda) = \int_0^\lambda \Psi''(\lambda) d\lambda = \kappa_o \begin{cases} d_o \cdot [\exp[\lambda/d_o] - 1] & \forall \lambda < 0 \\ \lambda & \forall 0 \leq \lambda < \lambda_s \\ \lambda_s + d_s \cdot [\exp[(\lambda - \lambda_s)/d_s] - 1] & \forall \lambda \geq \lambda_s \end{cases} \quad (2.32)$$

indicando la integración desde cero que el material no se encuentra pretensado. La ecuación constitutiva en configuración mixta se escribe,

$$\mathbf{P} = \left\langle \frac{\partial \Psi(\lambda(\mathbf{F}))}{\partial \mathbf{F}} \right\rangle_\Omega = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{F}} \right\rangle_\Omega = \left\langle \Psi'(\lambda) \frac{[\mathbf{F} \mathbf{e}_\Omega] \otimes \mathbf{e}_\Omega}{\|\mathbf{F} \mathbf{e}_\Omega\|} \right\rangle_\Omega \quad (2.33)$$

La Figura 2.1 muestra de forma ilustrativa el comportamiento de los tres modelos en el caso de una extensión uniaxial (movimiento impedido en las direcciones y y z), caracterizada por el siguiente gradiente de deformación,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

Los parámetros de los modelos se han elegido para que las curvas resultantes sean similares entre sí. Para la curva Neo-Hookeana, el conjunto de valores es: $(\mu, \kappa) = (1.5, 20)$ [Pa]; para la curva de Holzapfel, el conjunto de valores es: $(\mu, \kappa, k_1, k_2) = (1.5 \text{ Pa}, 20 \text{ Pa}, 0.85 \text{ Pa}, 0.06)$; y para la curva de Steinwachs el conjunto de valores es: $(\kappa_o, d_s, \lambda_s, d_o) = (200 \text{ Pa}, 0.5, 0.5, 0.005)$. Cabe destacar que, de las tres curvas, aquella producida por el modelo de Steinwachs es la única que presenta rigidez nula en la región de compresión. Esto es, naturalmente, debido a la propia definición del potencial elástico del modelo, la cual establece que las fibras pandean rápidamente después de ser sometidas a compresión. El modelo de Holzapfel mostraría un comportamiento similar en caso de no contemplar la aportación de la matriz, esto es, la contribución isótropa del potencial Neo-Hookeano. Este fenómeno, tal y como se verá en secciones posteriores, es susceptible de entrañar numerosos problemas de carácter numérico.

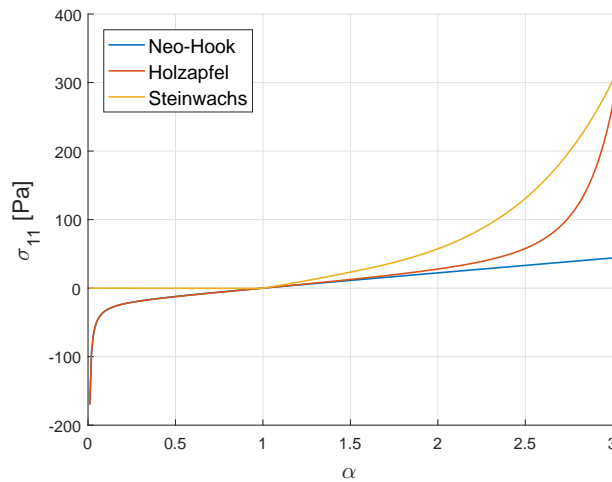


Figura 2.1: Tensión de Cauchy frente a deformación en extensión uniaxial.

Capítulo 3

Implementación de las leyes hiperelásticas en MATLAB

Este capítulo se estructura en tres secciones. En la primera se da una breve descripción de los algoritmos de implementación de las leyes hiperelásticas descritas en la sección 2.2, mediante los cuales se han obtenido todas las figuras (excepto aquellas presentadas en el capítulo 5) expuestas en este trabajo. En la segunda se detalla un estudio de la sensibilidad de las curvas tensión-deformación producidas por los tres modelos a los parámetros que los gobiernan, con el fin de ilustrar las mecánicas de los mismos. Por último, en la tercera sección se describe el procedimiento seguido a la hora de ajustar los parámetros de los modelos a datos experimentales utilizando las herramientas de ajuste de datos que ofrece MATLAB, y cuyos resultados se presentan en la sección 4.2.

3.1. Descripción general de la implementación

Se han desarrollado esencialmente tres algoritmos con el objetivo de implementar sendas leyes hiperelásticas siguiendo las convenciones del lenguaje de programación de MATLAB. En líneas generales, los algoritmos consisten fundamentalmente en un bucle principal que recorre un vector con diferentes valores de deformación y produce un valor de tensión para cada valor de deformación, resultando en una curva tensión-deformación al terminar. En el caso del modelo Neo-Hookeano, la implementación es directa. Antes bien, para los modelos de Holzapfel y de Steinwachs, debido a la presencia de la integración en la esfera unidad explicada en la sección 2.2.2, han de anidarse otros dos bucles en el interior del principal. Los nodos y pesos de Gauss-Legendre se han obtenido para cualquier orden de integración mediante el empleo de la función `lgwt` creada por *Greg von Winkel* [24]. En todo caso, las rutinas resultantes aceptan como parámetros de entrada el vector de deformaciones, los parámetros materiales, y el orden de integración en los casos de Holzapfel y Steinwachs.

3.2. Estudio de sensibilidad de los parámetros

En esta sección se presentan una serie de figuras que ilustran la influencia de los parámetros propios de las leyes contempladas en la generación de sendas curvas tensión-deformación. Se ha considerado un estado de extensión uniaxial caracterizado por el tensor gradiente de deformación dado en (2.34), así como un estado de cizalla simple caracterizado por el tensor gradiente de deformación,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & \gamma & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

donde el parámetro γ corresponde a la deformación de cizalla. Entonces, partiendo de un conjunto base de valores de los parámetros, se han variado los mismos de forma independiente.

3.2.1. Neo-Hookeana

El conjunto base de valores es: $(\mu, \kappa) = (1.5, 20)[\text{Pa}]$. Teniendo en cuenta que el modelo Neo-Hookeano contemplado en este trabajo sólo tiene validez en caso de que se cumpla la condición de cuasi-incompresibilidad, el coeficiente de *Poisson* implicado por el par de valores μ y κ (parámetros de Lamé) tiene que encontrarse suficientemente cercano a 0.5 (incompresibilidad). En tal sentido, la independencia con la que pueden variar los valores de los parámetros se encuentra restringida por dicha imposición, teniéndose pues que considerar variaciones simultáneas de ambos parámetros. La expresión que relaciona el coeficiente de Poisson con μ y κ es la siguiente,

$$\nu = \frac{\kappa}{2[\kappa + \mu]} \quad (3.2)$$

requiriéndose que $\nu \in [0.45, 0.5)$.

La figura 3.1 muestra los diferentes perfiles obtenidos variando los parámetros μ y κ . Se observa, principalmente, que un aumento en μ resulta también en un aumento en κ —de modo que se cumpla con la condición de cuasi-incompresibilidad—, y como consecuencia, el perfil se rectifica llegando a convertirse prácticamente en una línea recta con pendiente igual a κ . En efecto, la expresión de la primera componente del tensor de tensiones de Cauchy en este caso se escribe,

$$\sigma_{11} = \mu \left[\alpha - \frac{1}{\alpha} \right] + \kappa [\alpha - 1] \quad (3.3)$$

de la cual se extrae naturalmente que para valores de μ lo suficientemente pequeños, el término dominante será aquel de κ , que escala linealmente con α . Además, el término $1/\alpha$ se desvanece con rapidez y a partir de cierto valor de α el término correspondiente a μ se comportará también de forma lineal. En cualquier caso, todos los perfiles presentan una asíntota en $\alpha = 0$. La expresión (3.3) se obtiene de retener la primera componente del tensor de tensiones de Cauchy,

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mu \mathbf{F} \mathbf{F}^T + \frac{1}{J} \left[-\mu \frac{1}{J} + \kappa [J - 1] \right] \cdot \text{cof}[\mathbf{F}] \mathbf{F}^T \quad (3.4)$$

siendo,

$$J = \alpha, \quad \text{cof}[\mathbf{F}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Debido a que en un estado de cizalla simple se mantiene constante el volumen en todo momento, esto es, $J = 1$, el parámetro κ no participa en la obtención de las curvas de tensión de cizalla, y éstas evolucionan linealmente con la deformación de cizalla. Efectivamente, teniéndose en cuenta que,

$$J = 1, \quad \text{cof}[\mathbf{F}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\gamma & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

de (3.4) se tiene que,

$$\sigma_{12} = \mu \gamma \quad (3.7)$$

Este comportamiento se encuentra ilustrado en la figura 3.2, en la cual se verifica que las curvas de tensión de cizalla son rectas con pendiente igual a μ .

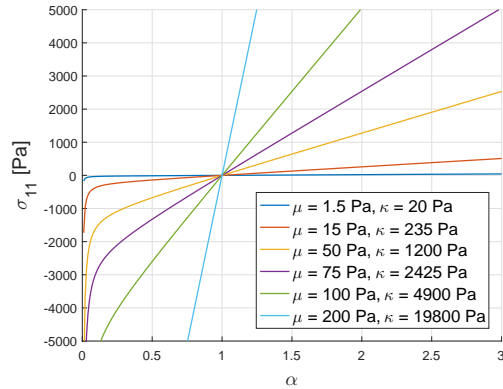


Figura 3.1: Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de μ y κ (modelo Neo-Hookeano).

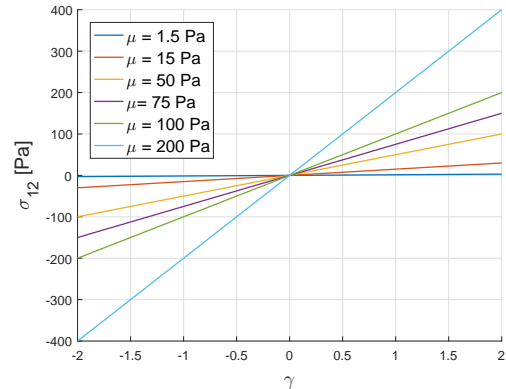


Figura 3.2: Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de μ (modelo Neo-Hookeano).

3.2.2. Holzapfel

El conjunto base de valores es: $(\mu, \kappa, k_1, k_2) = (1.5 \text{ Pa}, 20 \text{ Pa}, 0.85 \text{ Pa}, 0.06)$. Debido a que el término correspondiente a la contribución de la matriz en el modelo de Holzapfel se ha elegido como el potencial elástico del modelo Neo-Hookeano, la dinámica de los perfiles generados con respecto a los parámetros μ y κ es muy similar a la descrita en la sección 3.2.1, con la diferencia de que los anteriores presentan un crecimiento exponencial a partir de cierto valor de α , correspondiente a la contribución de las fibras. Así pues, sólo se presentan los efectos que produce la variación de los parámetros característicos del término de Holzapfel. La influencia de los parámetros k_1 y k_2 se ilustra en las figuras 3.3 y 3.5, respectivamente, para el caso de la extensión uniaxial; y en las figuras 3.4 y 3.6, respectivamente, para el caso de la cizalla simple. Ambos parámetros afectan de forma similar a la forma del perfil resultante, aumentando el crecimiento exponencial a medida que estos aumentan. Sin embargo, k_1 influencia la solución de forma proporcional, mientras que k_2 lo hace de forma exponencial, siendo pues el perfil significativamente más sensible a cambios en este último.

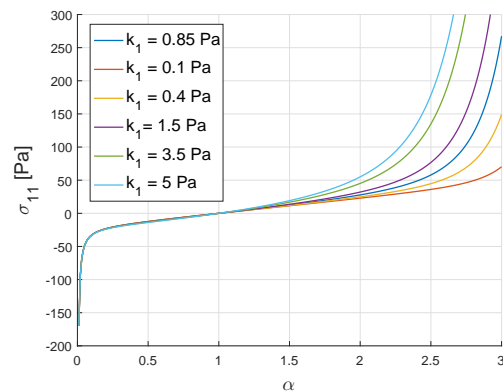


Figura 3.3: Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de k_1 (modelo de Holzapfel).

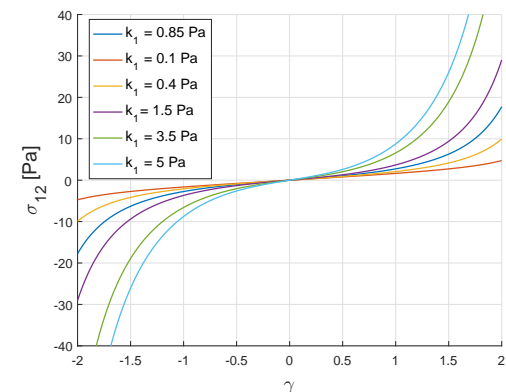


Figura 3.4: Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de k_1 (modelo de Holzapfel).

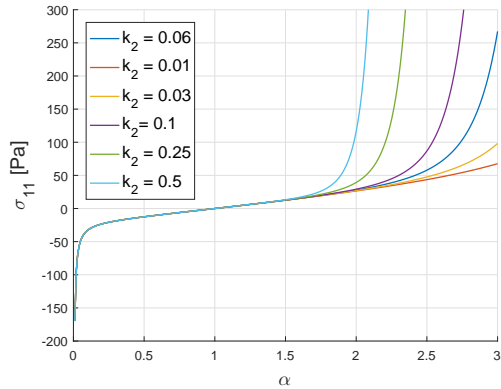


Figura 3.5: Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de k_2 (modelo de Holzapfel).

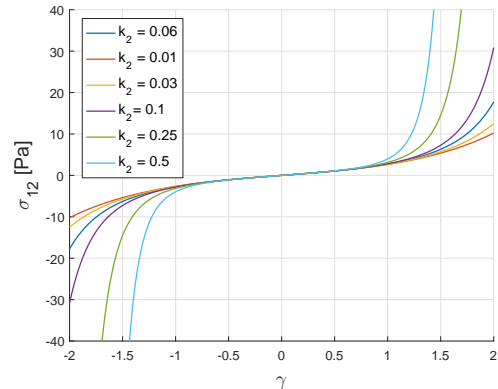


Figura 3.6: Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de k_2 (modelo de Holzapfel).

3.2.3. Steinwachs

El conjunto base de valores es: $(\kappa_o, d_s, \lambda_s, d_o) = (200 \text{ Pa}, 1, 0.01, 0.005)$. Las figuras 3.7 y 3.9 ilustran la influencia en la generación de las curvas de los parámetros κ_o y d_s , respectivamente, para el caso de extensión uniaxial. Ambos influyen en el crecimiento exponencial, aunque de forma contraria, potenciándose este crecimiento conforme κ_o aumenta y d_s disminuye. Debido a que la influencia de d_s es exponencial, el perfil resultante es significativamente más sensible a cambios en este último que en κ_o , cuya influencia es proporcional. No obstante, a diferencia de d_s , κ_o afecta a todas las regiones de la curva, y es por eso que también el intervalo correspondiente a la región lineal se ve afectado por dicho parámetro (figura 3.7). En efecto, en la figura 3.9 se verifica que todos los perfiles exhiben el mismo comportamiento en la región lineal (hasta $\lambda_s = 0.01$). Las figuras 3.8 y 3.10 exponen los efectos de estos parámetros en la generación de las curvas de cizalla simple, observándose comportamientos análogos a los descritos en el caso de la extensión uniaxial. Por otro lado, la sensibilidad de los perfiles ante cambios en el parámetro λ_s en los casos de extensión uniaxial y cizalla simple se encuentra ilustrada en las figuras 3.11 y 3.12, respectivamente. Se extrae que un aumento en λ_s resulta en una extensión de la región lineal, retrasándose así la aparición del crecimiento exponencial, aunque este efecto es menos notable en el caso de la cizalla simple. De hecho, se comprueba en la figura 3.12 que los perfiles para $\lambda_s = 1$ y $\lambda_s = 3$ son cuasi idénticos. Por último, las figuras 3.13 y 3.14 muestran, respectivamente, la influencia del parámetro d_o en las curvas de extensión uniaxial y de cizalla simple. Se concluye en el caso de la extensión uniaxial que d_o sólo afecta a la región de compresión, relajando el decrecimiento de la rigidez y evitando, para valores lo suficientemente grandes del parámetro, el *plateau* característico que presenta el modelo en esta región. No obstante, se encuentra que la curva de cizalla simple apenas varía con cambios significativos en el parámetro.

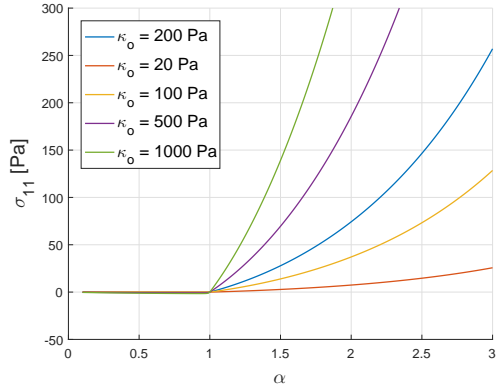


Figura 3.7: Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de κ_o (modelo de Steinwachs).

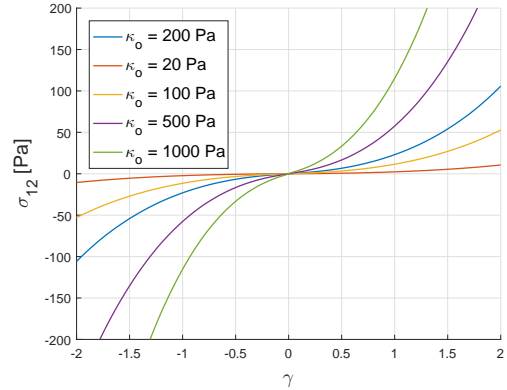


Figura 3.8: Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de κ_o (modelo de Steinwachs).

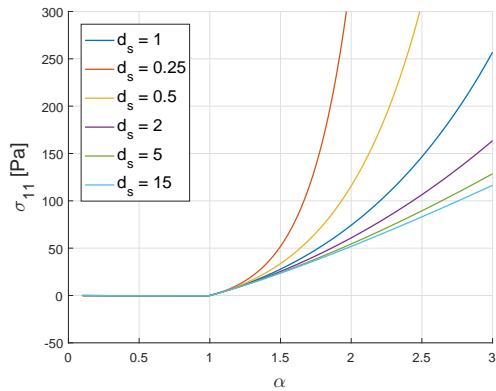


Figura 3.9: Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de d_s (modelo de Steinwachs).

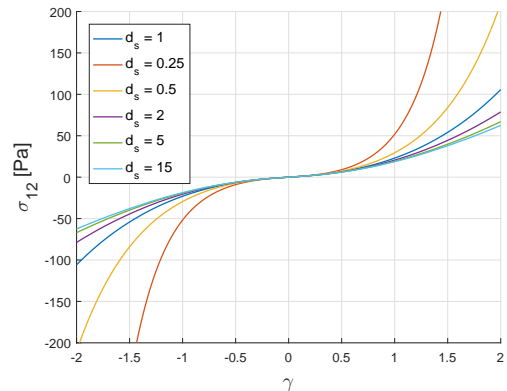


Figura 3.10: Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de d_s (modelo de Steinwachs).

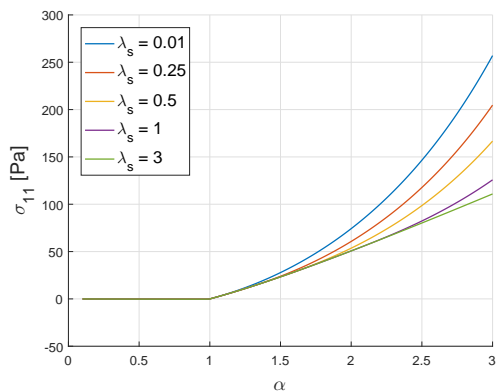


Figura 3.11: Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de λ_s (modelo de Steinwachs).

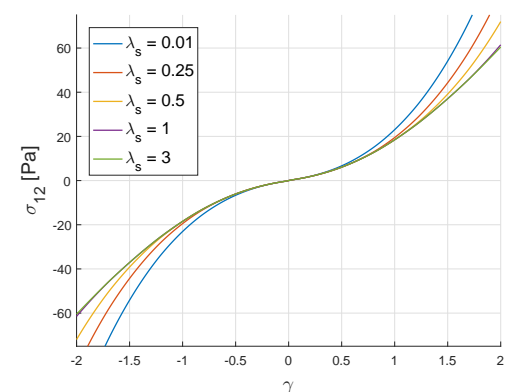


Figura 3.12: Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de λ_s (modelo de Steinwachs).

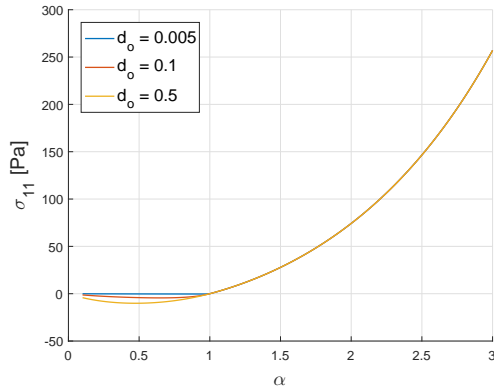


Figura 3.13: Tensión de Cauchy en extensión uniaxial para diferentes valores de d_o (modelo de Steinwachs).

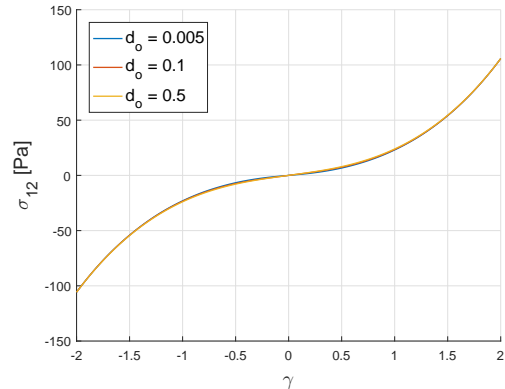


Figura 3.14: Tensión de Cauchy en cizalla simple para diferentes valores de d_o (modelo de Steinwachs).

3.3. Procedimiento de ajuste de los datos experimentales

El ajuste de los parámetros de los modelos a datos experimentales se ha llevado a cabo a través del empleo de la función de MATLAB `lsqnonlin` [25], la cual resuelve problemas no-lineales de ajuste de curvas por mínimos cuadrados de la forma,

$$\min_x \|f(x)\|_2^2 = \min_x (f_1(x)^2 + f_2(x)^2 + \dots + f_n(x)^2) \quad (3.8)$$

El procedimiento seguido se resume en los siguientes pasos:

1. Se ajustan heurísticamente los parámetros para obtener una curva relativamente similar a la experimental. Los valores encontrados se almacenan en un vector `param0`. Estos valores de partida favorecerán la convergencia del algoritmo, evitando en la medida de lo posible la aparición de mínimos locales.
2. Se selecciona el rango de abscisas en el que se quiere ajustar. Entonces se almacenan las abscisas y ordenadas experimentales en dos vectores `xdata` y `ydata`, respectivamente. Las abscisas corresponden a los valores de deformación del experimento, así como las ordenadas a los valores de tensión correspondientes.
3. Se define la función correspondiente al modelo hiperelástico `modelo(param,xdata)`, de modo que acepte como variables de entrada el vector de parámetros `param` y el vector de las abscisas experimentales `xdata`, devolviendo las ordenadas predichas por la ley constitutiva en cuestión.
4. Se define una función *anónima* que compute la diferencia entre las ordenadas predichas por el modelo y las experimentales: `fun = @(param)modelo(param,xdata) - ydata`.
5. Opcionalmente se definen dos vectores `lb` y `ub` que contienen, respectivamente, cotas inferiores y superiores de los valores que pueden alcanzar los parámetros.
6. Se arranca el cálculo: `param = lsqnonlin(fun,param0,lb,ub,options)`. La variable de entrada `options` es opcional, y permite la especificación de algoritmos de resolución no estándar, así como de otras opciones. En este trabajo se ha omitido, utilizándose por tanto el conjunto de opciones definidas por defecto.

3.3.1. Obtención de las curvas de contracción vertical

El ajuste de curvas de contracción vertical entraña el problema de que el conjunto de ordenadas se corresponde con una componente del tensor gradiente de deformación, siendo entonces este último desconocido y no pudiendo por tanto ser utilizado como variable de entrada directa en la ley constitutiva. En efecto, el tensor gradiente de deformación que caracteriza un estado de contracción vertical ante extensión horizontal se escribe como,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda_h & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_v \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

donde λ_h es la extensión horizontal aplicada (abscisas) y λ_v es la contracción vertical resultante de aplicar dicha extensión (ordenadas). En este sentido, λ_v se obtiene de aplicar la condición de libre movimiento en la dirección vertical, esto es, $\sigma_{33} = 0$. A continuación se procede a explicar la obtención de la contracción vertical λ_v para cada modelo. Para aproximar las integrales de superficie se ha utilizado el método de cuadratura de Gauss-Legendre descrito en la sección 2.2.2.

Neo-Hookeano

El tensor de tensiones de Cauchy para el modelo Neo-Hookeano recibe la siguiente expresión,

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \mu \mathbf{F} \mathbf{F}^T + \frac{1}{J} \left[-\mu \frac{1}{J} + \kappa [J - 1] \right] \cdot \text{cof}[\mathbf{F}] \mathbf{F}^T \quad (3.10)$$

siendo,

$$J = \lambda_h \lambda_v, \quad \text{cof}[\mathbf{F}] = \begin{bmatrix} \lambda_v & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_h \lambda_v & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_h \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

A través de la aplicación de la condición $\sigma_{33} = 0$ se tiene,

$$[\mu + \kappa \lambda_h^2] \lambda_v^2 - \kappa \lambda_h \lambda_v - \mu = 0 \quad (3.12)$$

Reteniendo la única solución compatible (positiva), se obtiene la siguiente expresión explícita para λ_v ,

$$\lambda_v = \frac{\kappa \lambda_h + \sqrt{\kappa^2 \lambda_h^2 + 4\mu [\mu + \kappa \lambda_h^2]}}{2 [\mu + \kappa \lambda_h^2]} \quad (3.13)$$

Holzapfel

Debido al carácter fuertemente no-lineal del modelo de Holzapfel -y de Steinwachs-, no es posible obtener una expresión explícita para la contracción vertical. Por tanto, resulta necesario el planteamiento de un esquema iterativo para aproximar la solución, habiéndose elegido en este caso el método de Newton-Raphson-Kantorovich. Este último se enuncia de la siguiente manera,

$$f(x) = 0 \quad \longrightarrow \quad x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)} \quad (3.14)$$

particularizándose en este caso como,

$$\sigma_{33}(\lambda_v) = 0 \quad \longrightarrow \quad \lambda_v^{k+1} = \lambda_v^k - \frac{\sigma_{33}(\lambda_v^k)}{\sigma'_{33}(\lambda_v^k)} \quad (3.15)$$

donde el índice k denota la iteración actual. Es preciso pues, para cada $k + 1$, partir de un valor inicial (semilla) en k que arranque el proceso iterativo. En este caso, para incrementos

suficientemente pequeños en λ_h ($|\lambda_h^{n+1} - \lambda_h^n| \ll 1$), se asume que $\lambda_v^k|_{\lambda_h^{n+1}} \approx \lambda_v|_{\lambda_h^n}$ al principio de la iteración, teniéndose en cuenta que para $\lambda_h = 1$, $\lambda_v = 1$. Nótese que el índice n indica la estación actual, esto es, la posición actual en la variable independiente λ_h , y por tanto es distinto de k . En este sentido, una estación n contiene múltiples iteraciones k .

El tensor de tensiones de Cauchy se obtiene mediante la siguiente expresión,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} = & \frac{1}{J} \mu \mathbf{F} \mathbf{F}^T + \frac{1}{J} \left[-\mu \frac{1}{J} + \kappa [J - 1] \right] \cdot \text{cof}[\mathbf{F}] \mathbf{F}^T + \\ & + \frac{1}{J} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi 2k_1 [I_4 - 1] \exp [k_2 [I_4 - 1]^2] \cdot 2[\mathbf{F} \mathbf{M}] \otimes \mathbf{M} \cdot \sin \theta d\theta d\phi \right] \cdot \mathbf{F}^T \end{aligned} \quad (3.16)$$

Imponiendo $\sigma_{33} = 0$,

$$\begin{aligned} \sigma_{33}(\lambda_v) = & \frac{1}{\lambda_h} \mu \lambda_v - \mu \frac{1}{J} + \kappa [J - 1] + \\ & + \frac{1}{\lambda_h} \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi 2k_1 [I_4 - 1] \exp [k_2 [I_4 - 1]^2] \cdot 2\lambda_v M_3^2 \cdot \sin \theta d\theta d\phi = \\ & = \frac{1}{\lambda_h} \left[f_1 + f_2 + \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi 2f_3 M_3^2 \cdot \sin \theta d\theta d\phi \right] \approx \\ & \approx \frac{1}{\lambda_h} \left[f_1 + f_2 + \frac{1}{4\pi} \frac{\pi}{m} \sum_{j=1}^{2m} \sum_{i=1}^m w_i 2 [f_3 M_3^2] (\theta_i, \phi_j) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

donde,

$$f_1 = \mu \lambda_v, \quad f_2 = \left[-\mu \frac{1}{J} + \kappa [J - 1] \right] \lambda_h, \quad f_3 = 2k_1 [I_4 - 1] \exp [k_2 [I_4 - 1]^2] \lambda_v \quad (3.18)$$

La derivada de σ_{33} con respecto a λ_v ,

$$\begin{aligned} \sigma'_{33}(\lambda_v) = & \frac{1}{\lambda_h} \left[f'_1 + f'_2 + \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi 2f'_3 M_3^2 \cdot \sin \theta d\theta d\phi \right] \approx \\ & \approx \frac{1}{\lambda_h} \left[f'_1 + f'_2 + \frac{1}{4\pi} \frac{\pi}{m} \sum_{j=1}^{2m} \sum_{i=1}^m w_i 2 [f'_3 M_3^2] (\theta_i, \phi_j) \right] \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde,

$$\begin{aligned} f'_1 = \mu, \quad f'_2 = & \mu \frac{1}{\lambda_h^2} + \kappa \lambda_h^2, \\ f'_3 = & [2 [2k_1 + 4k_1 k_2 [I_4 - 1]^2] M_3^2 \lambda_v^2 + 2k_1 [I_4 - 1]] \cdot \exp [k_2 [I_4 - 1]^2] \end{aligned} \quad (3.20)$$

Steinwachs

Análogamente al caso del modelo de Holzapfel, la obtención de la contracción vertical para el modelo de Steinwachs se realiza mediante el planteamiento de un esquema iterativo basado en el método de Newton-Raphson-Kantorovich, descrito por (3.15).

El tensor de tensiones de Cauchy se obtiene como,

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi'(\lambda) \frac{[\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega] \otimes \mathbf{e}_\Omega}{\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|} \sin \theta d\theta d\phi \right] \cdot \mathbf{F}^T \quad (3.21)$$

Imponiendo $\sigma_{33} = 0$,

$$\begin{aligned} \sigma_{33}(\lambda_v) &= \frac{1}{\lambda_h} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi'(\lambda) \frac{1}{\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|} \lambda_v \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi \right] = \\ &= \frac{1}{\lambda_h} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f \cdot \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi \right] \approx \\ &\approx \frac{1}{\lambda_h} \left[\frac{1}{4\pi} \frac{\pi}{m} \sum_{j=1}^{2m} \sum_{i=1}^m w_i f(\theta_i, \phi_j) \cdot \cos^2 \theta_i \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

donde,

$$f = \Psi'(\lambda) \frac{1}{\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|} \lambda_v \quad (3.23)$$

La derivada de σ_{33} con respecto a λ_v ,

$$\begin{aligned} \sigma'_{33}(\lambda_v) &= \frac{1}{\lambda_h} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f' \cdot \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi \right] \approx \\ &\approx \frac{1}{\lambda_h} \left[\frac{1}{4\pi} \frac{\pi}{m} \sum_{j=1}^{2m} \sum_{i=1}^m w_i f'(\theta_i, \phi_j) \cdot \cos^2 \theta_i \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde,

$$f' = \Psi''(\lambda) \frac{d\lambda}{d\lambda_v} \frac{1}{\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|} \lambda_v + \Psi'(\lambda) \left[\frac{\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\| - \frac{d\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|}{d\lambda_v} \lambda_v}{\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|^2} \right] \quad (3.25)$$

$$\frac{d\lambda}{d\lambda_v} = \frac{d\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|}{d\lambda_v} = \frac{\lambda_v \cos^2 \theta}{\|\mathbf{F}\mathbf{e}_\Omega\|} \quad (3.26)$$

Capítulo 4

Ajuste experimental de los parámetros gobernantes de las leyes

En este capítulo se presentan los principales resultados obtenidos de ajustar los parámetros gobernantes de las leyes constitutivas descritas en la sección 2.2 a las curvas experimentales recibidas mediante el procedimiento descrito en la sección 3.3. Estas curvas corresponden a dos experimentos en concreto: cizalla simple y contracción vertical ante extensión horizontal (efecto Poisson); practicados ambos sobre dos hidrogeles de colágeno con sendas concentraciones de fibras: 0.6 y 1.2 mg/ml. La caracterización reológica de los hidrogeles (cizalla simple) ha sido llevada a cabo por Mar Cándor Salgado, integrante del equipo de investigación en Mecanobiología e Ingeniería de Tejidos dirigido por el Profesor Hans Van Oosterwyck en la Universidad KU Leuven, siguiendo las pruebas de *Steinwachs et al.* [19]. Los resultados correspondientes a la contracción vertical han sido extrapolados de los datos obtenidos por Ben Fabry, coautor del artículo citado en líneas anteriores.

4.1. Datos experimentales recibidos

4.1.1. Cizalla simple

El gel se somete a la acción de un reómetro rotacional de cono y plato con el fin de medir la relación tensión-deformación en un estado de deformación de cizalla simple. Para ello, el gel se deposita en un plato horizontal y a su vez se sitúa un cono poco profundo encima del mismo. La polimerización del gel se efectúa en el interior de la configuración. Entonces, el reómetro aplica un estado de deformación de modo que el potencial elástico del gel sólo depende de la deformación de cizalla. Básicamente, el plato es rotado y el torque transmitido al cono es medido, a partir del cual puede obtenerse la tensión de cizalla σ_{12} . El tensor gradiente de deformación que caracteriza el experimento recibe la expresión,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & \gamma & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

donde γ representa la deformación de cizalla. La figura 4.1 muestra la curva experimental y el correspondiente ajuste obtenidos por *Steinwachs et al.* [19] en este experimento, así como un pequeño diagrama que ilustra la configuración del reómetro utilizado. Asimismo, la figura 4.3 muestra las curvas resultantes del experimento para ambas concentraciones de fibras, recibidas de la Universidad KU Leuven.

4.1.2. Contracción vertical ante extensión horizontal

El gel es depositado sobre la superficie activada con sulfo-SANPAH de un plato flexible de polidimetilsiloxano. Tras la polimerización, el gel se estira uniaxialmente en la dirección horizontal X a ritmo del 6% por hora utilizando un motor paso a paso, y al mismo tiempo se mide con un microscopio la altura del gel (dirección Z), la cual es función del estiramiento aplicado. Durante todo el proceso se impide el movimiento en la dirección transversal Y. La expresión del tensor gradiente de deformación que caracteriza este experimento viene dada por,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda_h & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_v \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

donde λ_h y λ_v representan la extensión horizontal y la contracción vertical, respectivamente. La figura 4.2 muestra la curva experimental y el correspondiente ajuste obtenidos por *Steinwachs et al.* [19] en este experimento, así como un pequeño diagrama que ilustra la configuración utilizada. La figura 4.4 muestra la curva promedio de las resultantes para cada concentración de fibras (recibidas de la Universidad KU Leuven), puesto que éstas no presentan diferencias significativas entre sí.

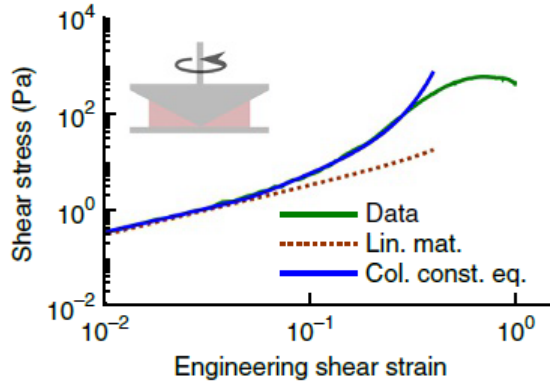


Figura 4.1: Curva experimental y correspondiente ajuste para el ensayo de cizalla simple (Steinwachs).

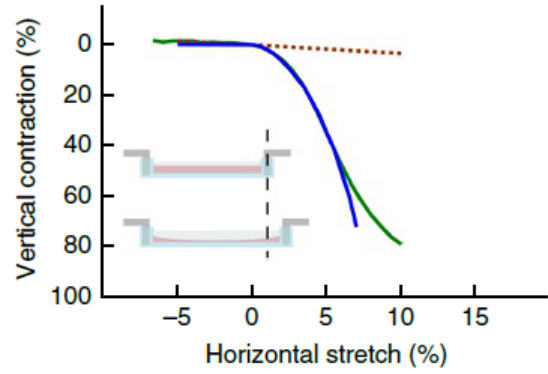


Figura 4.2: Curva experimental y correspondiente ajuste para el ensayo de contracción vertical ante extensión horizontal (Steinwachs).

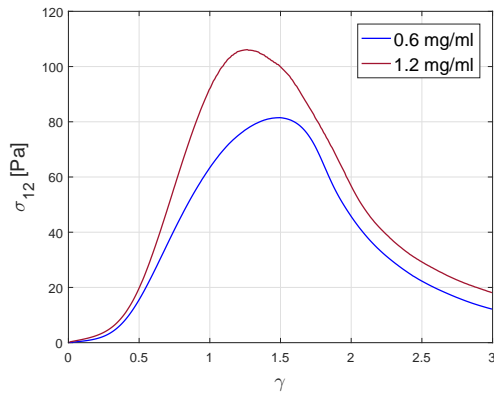


Figura 4.3: Curvas experimentales provenientes del ensayo de cizalla simple (KU Leuven).

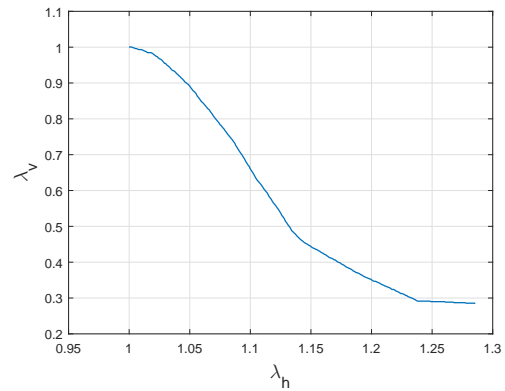


Figura 4.4: Curva experimental proveniente del experimento de contracción vertical ante extensión horizontal (KU Leuven).

4.2. Resultados

En el caso del ensayo de cizalla simple, los ajustes se han llevado a cabo para el rango de deformaciones definido por $\gamma \in [0, 0.5]$ debido a que, al no presentar los modelos considerados puntos de inflexión en el rango de deformaciones del experimento, estos no son capaces de aproximar el comportamiento del gel más allá del punto en el que las curvas empíricas manifiestan un cambio de curvatura, alrededor de $\gamma = 0.5$. A partir de este punto, el comportamiento del gel entra en régimen plástico, manifestando una física diferente no contemplada por los modelos. Asimismo, rangos de deformación tan grandes no resultan de gran interés porque no son de aplicación en este problema. En el caso del ensayo de contracción vertical, el rango considerado es $\lambda_h \in [1, 1.05]$ debido a que es donde se obtienen mejores ajustes.

4.2.1. Neo-Hookeana

Las figuras 4.5 y 4.7 muestran los mejores ajustes obtenidos en el caso del ensayo de cizalla simple para los geles de 0.6 y 1.2 mg/ml, respectivamente. Puede apreciarse claramente que el modelo no captura adecuadamente el comportamiento no lineal del gel. Esto se debe principalmente al carácter isocórico del gradiente de deformación en cizalla simple ($J = 1$), que oblitera toda contribución de κ en el tensor de tensiones. De este modo, la tensión de cizalla adquiere la forma $\sigma_{12} = \mu\gamma$, comportándose entonces de forma lineal con respecto a la deformación de cizalla. El único parámetro ajustable a través de este ensayo es μ , que representa la pendiente de la recta resultante, y que adquiere sendos valores 20.1884 y 26.7160 Pa.

En las figuras 4.6 y 4.8 se representan los mejores ajustes para ambos geles en el caso del experimento de contracción vertical. Manteniendo los valores de μ hallados a través del otro experimento se obtienen los valores de κ : 1150 y 1930 Pa, respectivamente. Se observa que el modelo sólo representa fielmente la porción de curva comprendida en el rango $\gamma \in [1, 1.025]$ aproximadamente. La curva teórica entonces se separa y, mientras que la curva experimental es cóncava en el rango aproximado $\gamma \in [1, 1.09]$, la anterior se presenta convexa desde el principio. En efecto, para valores de κ mucho mayores que μ , la expresión (3.13) verifica que,

$$\text{si } \kappa \gg \mu \longrightarrow \lambda_v \approx \frac{1}{\lambda_h}, \quad (4.3)$$

siendo la curva teórica virtualmente independiente de los parámetros materiales y de curvatura estrictamente convexa. Es evidente que la curva proporcionada en este caso por el modelo Neo-Hookeano nunca podrá aproximar el comportamiento de la curva experimental más allá del punto de separación.

4.2.2. Holzapfel

Las figuras 4.9 y 4.11 ilustran los ajustes obtenidos del ensayo de cizalla simple para ambos geles. Se aprecia un considerable aumento de precisión en la captura del comportamiento del gel con respecto al modelo Neo-Hookeano -incluso más notable en el de mayor concentración de fibras-, causado por la presencia de la función de tipo Fung (exponencial) en la definición del potencial elástico. Los valores obtenidos para las constantes características del modelo de Holzapfel son, respectivamente, $k_1 = 16.5425$ Pa y $k_2 = 4.1789$; y $k_1 = 24.3827$ Pa y $k_2 = 3.5363$. En cambio, ambos ajustes revelan un valor de μ nulo, lo cual implica, teniendo en cuenta que κ no tiene influencia en el comportamiento del gel ante cizalla simple, que sólo el conjunto de las fibras, y no la matriz, contribuye en la obtención de las tensiones. Esta observación puede tener fundamento en la hipótesis de deformación afín entre la red de fibras y la matriz planteada por *Steinwachs et al.* en la confección de su modelo [19], la cual es tanto más cierta cuanto mayor es la concentración de fibras del gel en cuestión.

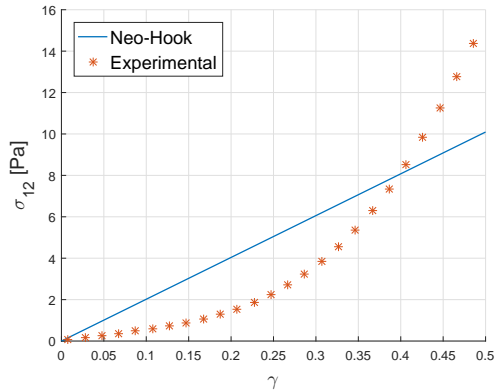


Figura 4.5: Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml - $\mu = 20.1884$ Pa.

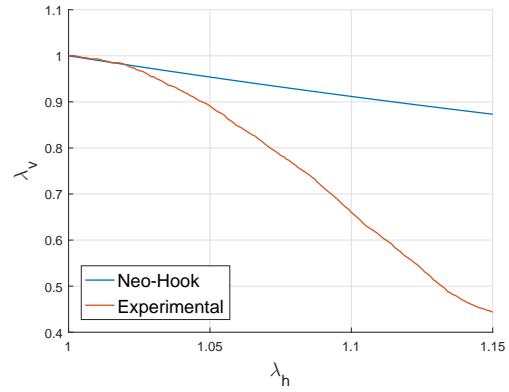


Figura 4.6: Ajuste para contracción vertical, 0.6 mg/ml - $\mu = 20.1884$ Pa, $\kappa = 1150$ Pa.

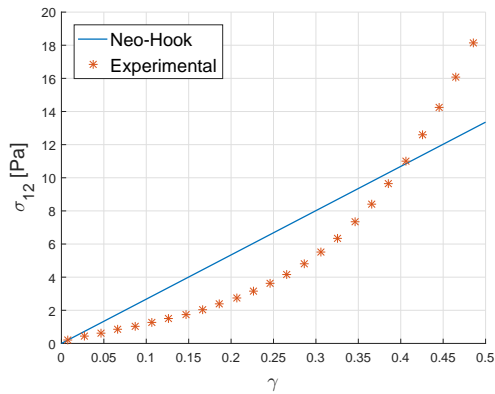


Figura 4.7: Ajuste para cizalla simple, 1.2 mg/ml - $\mu = 26.7160$ Pa.

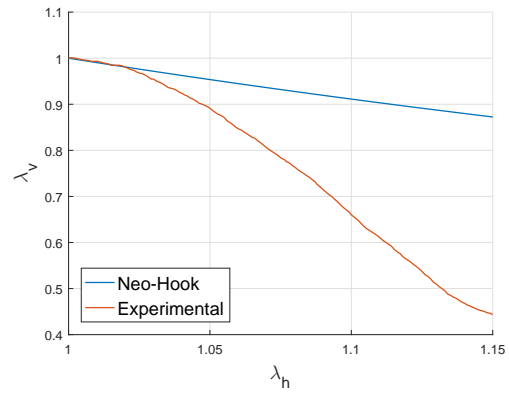


Figura 4.8: Ajuste para contracción vertical, 1.2 mg/ml - $\mu = 26.7160$ Pa, $\kappa = 1930$ Pa.

Si bien el modelo de Holzapfel se ajusta relativamente bien a las curvas del ensayo de cizalla simple, no ocurre lo mismo con el ensayo de contracción vertical, tal y como se desprende de las figuras 4.10 y 4.12. En concreto, manteniendo los valores de μ , k_1 y k_2 obtenidos previamente, y para $\kappa = 970$ Pa, el modelo produce curvas casi idénticas a las obtenidas con el modelo Neo-Hookeano. Esto sugiere que la contribución del término relativo a las fibras en la obtención de la contracción vertical es insignificante en comparación con aquella del relativo al parámetro κ . A este respecto, para valores de κ suficientemente grandes, la curva de contracción vertical es independiente de los parámetros materiales y opuesta en curvatura a la obtenida experimentalmente, de forma análoga a cómo ocurre en el caso del modelo Neo-Hookeano. Es por este motivo que las curvas son tan similares, y que el valor de κ es el mismo para ambas concentraciones. En efecto, eliminando el término relativo a la matriz del potencial elástico y estudiando la curva de contracción vertical que produciría el mantener el término relativo a las fibras, se verifica la necesidad de conferir a k_2 valores extremadamente grandes a fin de producir una curvatura cóncava significativa en la gráfica, resultando k_1 irrelevante en la obtención de la misma (figura 4.13). El orden de magnitud de estos valores carece de sentido, pues trastocarían completamente los ajustes realizados para el ensayo de cizalla simple.

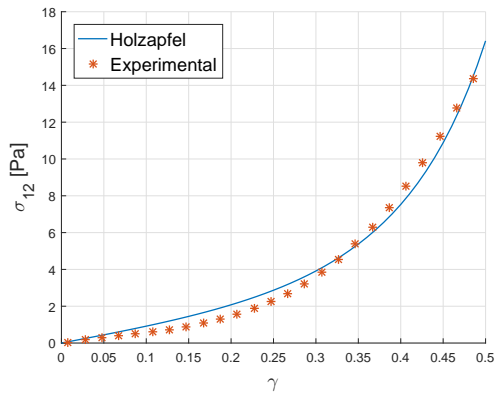


Figura 4.9: Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $k_1 = 16.5425$ Pa, $k_2 = 4.1789$.

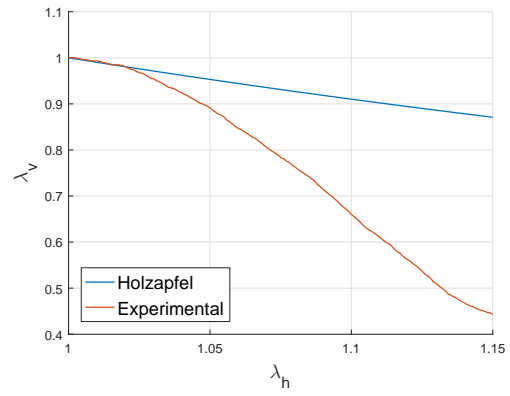


Figura 4.10: Ajuste para contracción vertical, 0.6 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $\kappa = 970$ Pa, $k_1 = 16.5425$ Pa, $k_2 = 4.1789$.

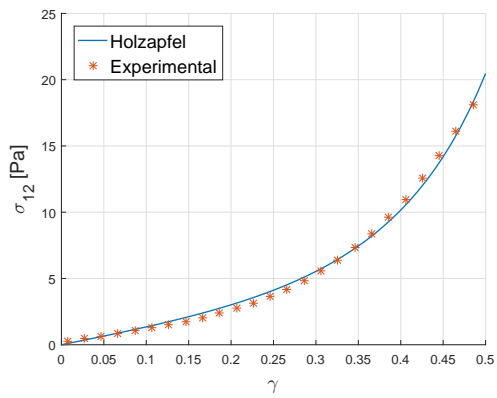


Figura 4.11: Ajuste para cizalla simple, 1.2 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $k_1 = 24.3827$ Pa, $k_2 = 3.5363$.

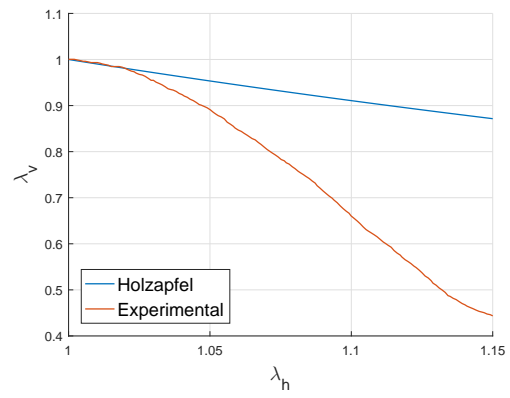


Figura 4.12: Ajuste para contracción vertical, 1.2 mg/ml - $\mu = 0$ Pa, $\kappa = 970$ Pa, $k_1 = 24.3827$ Pa, $k_2 = 3.5363$.

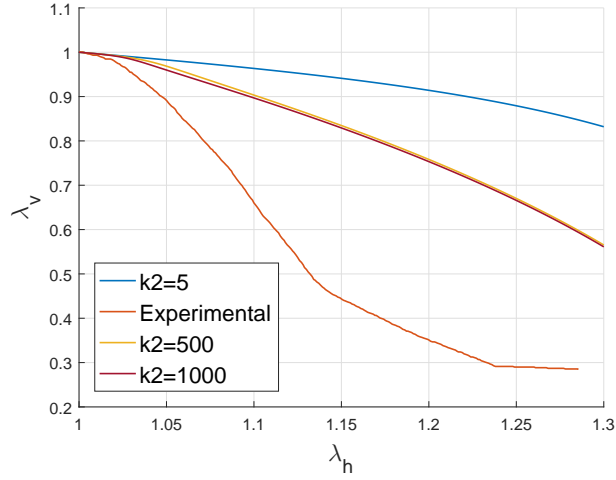


Figura 4.13: Contracción vertical frente a extensión horizontal para diversos valores de k_2 , considerándose únicamente el término relativo a las fibras en el modelo de Holzapfel.

4.2.3. Steinwachs

En el caso del modelo de Steinwachs, primero se extrae el valor del parámetro de pandeo d_o que mejor ajusta la curva de contracción vertical, puesto que en dicho caso este parámetro domina sobre los otros (κ_o no influye en la curva obtenida). Se obtiene pues $d_o = 0.0014$ para ambas concentraciones. Teniendo en cuenta que d_o tiene poca influencia en la curva de cizalla simple, se congela su valor y se realiza el ajuste para los otros tres parámetros, resultando los valores $\kappa_o = 118.4608$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0$ y $d_s = 0.0861$; y $\kappa_o = 276.9333$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.0455$ y $d_s = 0.0951$, respectivamente.

Las figuras 4.14 y 4.16 muestran los ajustes obtenidos en el caso de la cizalla simple, y las figuras 4.15 y 4.17 aquellos para el caso de la contracción vertical. Para la cizalla simple, el modelo aproxima con gran precisión el comportamiento de ambos geles. Es de notar que el parámetro que controla la región de rigidez constante del hidrogel (λ_s) recibe un valor nulo para el de menor concentración, obteniéndose un ajuste algo peor que para el de mayor concentración. En realidad, si bien la curva experimental del gel de 1.2 mg/ml presenta un punto de inflexión alrededor de $\gamma = 0.5$, la curva del gel de 0.6 mg/ml lo hace alrededor de $\gamma = 0.4$, estando pues este último ajuste fuera del rango dentro del cual el modelo puede aproximar el comportamiento con curvatura únicamente convexa. Restringiendo el rango de deformaciones a $\gamma \in [0, 0.4]$ se obtiene un mejor ajuste con el conjunto de valores $\kappa_o = 127.1748$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.024$ y $d_s = 0.0705$, tal y como ilustra la figura 4.18. Para la contracción vertical, el modelo rinde resultados mucho mejores que los obtenidos en las secciones anteriores. En efecto, el modelo aproxima la curva experimental razonablemente bien para los rangos $\gamma \in [1, 1.05]$ y $\gamma \in [1, 1.06]$, respectivamente. Más allá, la curva experimental pasa a ser convexa, haciendo imposible que la curva teórica pueda adaptarse debido a la naturaleza intrínsecamente cóncava de la misma. No obstante, el rango de deformaciones para el que el ajuste deja de ser bueno no resulta de gran interés en experimentos futuros.

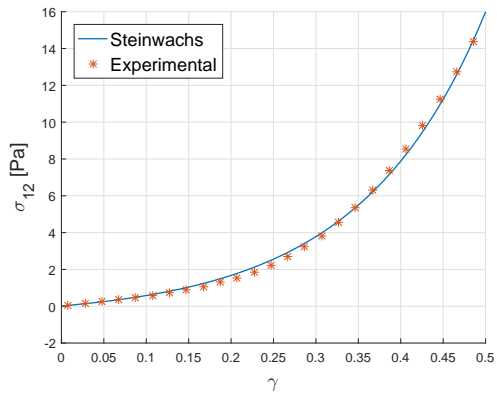


Figura 4.14: Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml - $\kappa_o = 118.4608$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0$, $d_s = 0.0861$.

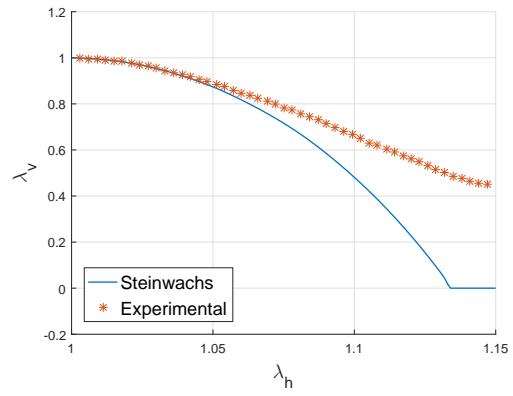


Figura 4.15: Ajuste para contracción vertical, 0.6 mg/ml - $\kappa_o = 118.4608$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0$, $d_s = 0.0861$.

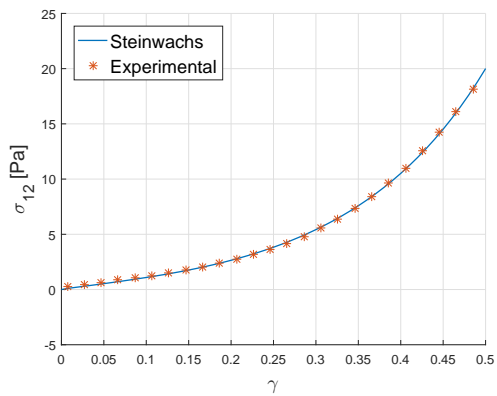


Figura 4.16: Ajuste para cizalla simple, 1.2 mg/ml - $\kappa_o = 276.9333$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.0455$, $d_s = 0.0951$.

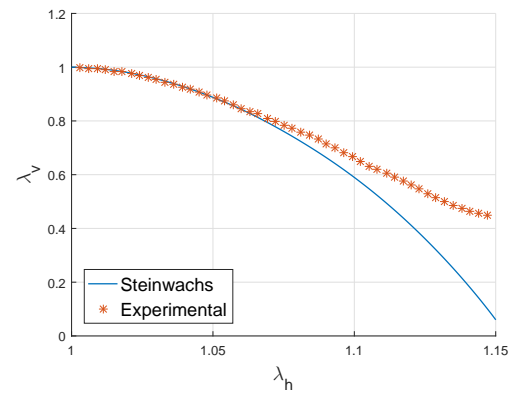


Figura 4.17: Ajuste para contracción vertical, 1.2 mg/ml - $\kappa_o = 276.9333$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.0455$, $d_s = 0.0951$.

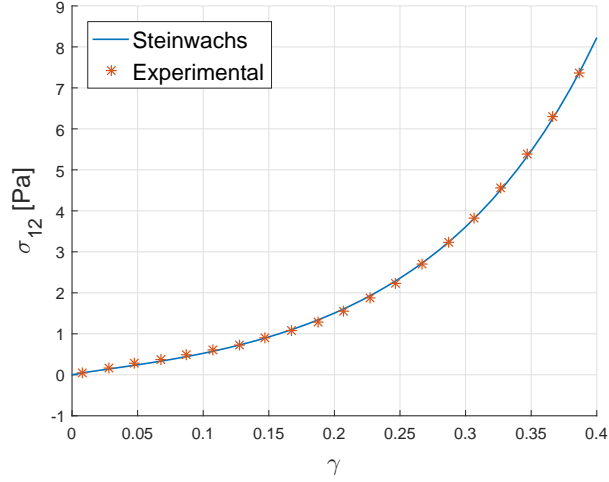


Figura 4.18: Ajuste para cizalla simple, 0.6 mg/ml, $\gamma \in [0, 0.4]$ - $\kappa_o = 127.1748$ Pa, $d_o = 0.0014$, $\lambda_s = 0.024$, $d_s = 0.0705$.

4.2.4. Recapitulación

En esta sección, con el fin de ilustrar las diferencias entre los ajustes proporcionados por los tres modelos, estos se representan de manera simultánea para los casos de cizalla simple, figuras 4.19 y 4.21; y de contracción vertical, figuras 4.20 y 4.22. Como se extrae de ellas, el modelo de Steinwachs es el que mejor estima el comportamiento de los hidrogeles —dentro de los rangos de deformación considerados—, no sólo en el conjunto de los dos ensayos, sino también para cada uno individualmente. El modelo Neo-Hookeano no es adecuado, teniendo en cuenta que presenta un comportamiento estrictamente lineal bajo cizalla simple, y falla al producir la curva de contracción vertical por motivos previamente descritos. El modelo de Holzapfel muestra mejores resultados en el caso de cizalla simple, aunque peores que aquellos del modelo de Steinwachs, y al igual que el Neo-Hookeano falla al producir la curva de contracción vertical. No obstante, el modelo de Steinwachs presenta algunos fallos de carácter teórico, experimental y numérico:

- La formulación del potencial elástico se hace en principio para una sola fibra, la cual presenta rigidez nula ante compresión (pandeo). Como consecuencia de promediar el comportamiento de esa fibra en la esfera unitaria para obtener el comportamiento macroscópico del hidrogel, el modelo muestra un *plateau* —rigidez nula— en la región de compresión, tal y como ilustra la figura 2.1. La rigidez nula a compresión es fuente de infinitos problemas de carácter numérico: convergencia, distorsión de malla, pérdida de convexidad, etcétera.
- Físicamente, el hidrogel es un material bi-fásico, compuesto por gel y fibras. El modelo de Steinwachs meramente considera la contribución de las fibras, comportamiento que atribuyen a la deformación *no-afín* entre ambas partes. Esta hipótesis es tanto más cierta cuanto mayor es la concentración de fibras. Antes bien, para hidrogeles con baja concentración de fibras, la rigidez del material es comparable a la rigidez de la matriz acuosa. Por tanto, puede que sea necesario incluir la contribución de la matriz en el potencial elástico, tal y como hace el modelo de Holzapfel. Además, en TFM, los *beads* no se sitúan exclusivamente a lo largo de las fibras, de modo que el movimiento registrado corresponde al compuesto por el gel y fibras simultáneamente.

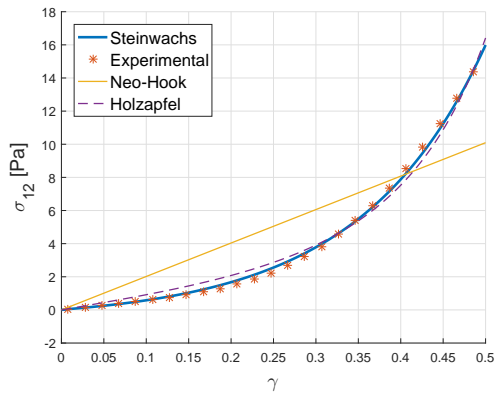


Figura 4.19: Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de cizalla simple - 0.6 mg/ml.

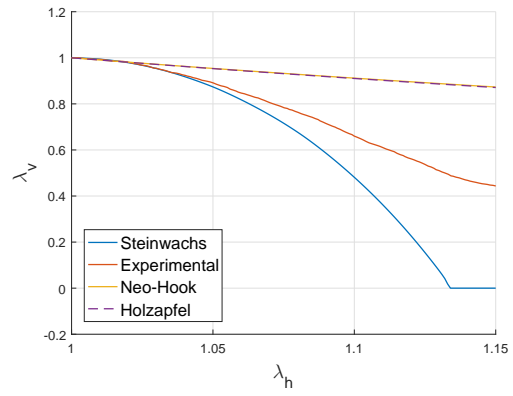


Figura 4.20: Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de contracción vertical - 0.6 mg/ml.

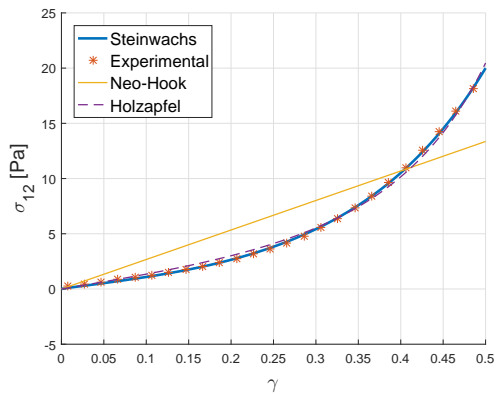


Figura 4.21: Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de cizalla simple - 1.2 mg/ml.

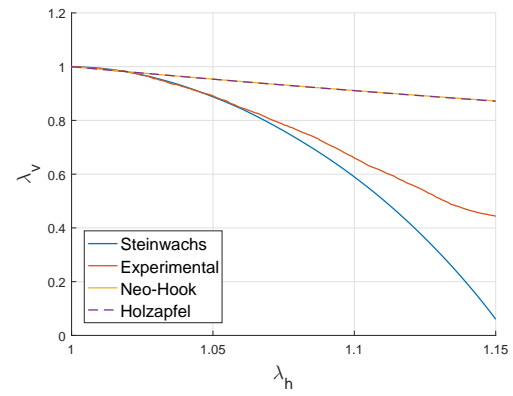


Figura 4.22: Comparación entre los ajustes de los diferentes modelos para el ensayo de contracción vertical - 1.2 mg/ml.

Capítulo 5

Implementación de la ley de Steinwachs en ABAQUS

El *software* de análisis por elementos finitos ABAQUS cuenta por defecto con diversas relaciones constitutivas no-lineales, entre las que se encuentran la Neo-Hookeana y la de Holzapfel. Por el contrario, leyes constitutivas de investigación recientes como la de Steinwachs no se encuentran implementadas. No obstante, ABAQUS permite la definición de cualquier modelo constitutivo de complejidad arbitraria a través de la programación de sub-rutinas de usuario denominadas UMAT. La programación de una UMAT ha de seguir las convenciones del lenguaje FORTRAN77 o C. En el desarrollo de este capítulo se describirá el proceso seguido en la concepción —en FORTRAN77— e implementación en ABAQUS de una sub-rutina UMAT para el modelo de Steinwachs, así como también se mostrarán las pruebas realizadas con el fin de validar dicha implementación.

5.1. Contexto

El equilibrio de un cuerpo deformable viene dado por la expresión escalar fundamental consecuencia de la aplicación del *Principio de Trabajos Virtuales* en configuración espacial,

$$\delta W = \int_v \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dv - \int_v \rho \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dv - \int_{\partial v} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} da = 0 \quad (5.1)$$

en donde $\delta \mathbf{u}$ denota el desplazamiento virtual, v el volumen actual, ρ la densidad actual, \mathbf{b} el vector de fuerzas volumétricas, $\delta \boldsymbol{\varepsilon}$ el tensor de deformaciones lineal virtual, \mathbf{t} el vector tracción resultante del producto entre el tensor de tensiones de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ y el vector normal a la superficie ∂v \mathbf{n} . La expresión (5.1) es no lineal, y en el marco de una discretización por elementos finitos tendrá que ser linealizada a través de un esquema iterativo de Newton-Raphson-Kantorovich. Considerando una solución de prueba ϕ_k , dicha linealización se realiza tomando la derivada direccional del trabajo virtual en la dirección de un incremento $\Delta \mathbf{u}$,

$$\delta W(\phi_k, \delta \mathbf{u}) + D\delta W(\phi_k, \delta \mathbf{u})[\Delta \mathbf{u}] = 0 \quad (5.2)$$

En el planteamiento de este esquema iterativo linealizado, ABAQUS emplea la formulación *Lagrangiana Actualizada* o *Euleriana*, la cual se basa en la versión espacial del principio de trabajos virtuales. Expresando en configuración material las integrales de volumen en (5.1) se tiene,

$$\delta W = \int_V \boldsymbol{\tau} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV - \int_V \rho_o \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\partial v} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} da = 0, \quad \delta \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\nabla \delta \mathbf{u} + [\nabla \delta \mathbf{u}]^T \right] \quad (5.3)$$

donde $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de tensiones de Kirchhoff. En general, las derivadas temporales de los tensores de tensión no son objetivas, esto es, dependen del sistema de referencia desde el que se observa

— $\dot{\boldsymbol{\sigma}}^* \neq R\dot{\boldsymbol{\sigma}}R^T$, véase el capítulo cuarto de [20] para más información al respecto. Sin embargo, a la hora de linealizar (5.3), ABAQUS aproxima el término de fuerzas internas mediante la derivada de *Jaumann* o derivada *co-rotacional*, la cual es objetiva,

$$\begin{aligned} D \left[\int_V \boldsymbol{\tau} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV \right] [\Delta \mathbf{u}] &= \int_V D[\boldsymbol{\tau} : \delta \boldsymbol{\varepsilon}] [\Delta \mathbf{u}] dV = \\ &= \int_V \left[\nabla \delta \mathbf{u} : [J \mathbb{c}_J - \mathbb{H}] : \nabla \delta \mathbf{u} + \boldsymbol{\tau} : \left[[\nabla \delta \mathbf{u}]^T \nabla \Delta \mathbf{u} \right] \right] dV \end{aligned} \quad (5.4)$$

en donde \mathbb{c}_J es el tensor de elasticidad de Jaumann, que puede obtenerse como,

$$J \mathbb{c}_J = J \mathbb{c} + \mathbb{H}, \quad H_{ijkl} = \frac{1}{2} [\delta_{jk} \tau_{il} + \delta_{ik} \tau_{jl} + \delta_{jl} \tau_{ik} + \delta_{il} \tau_{jk}] \quad (5.5)$$

siendo \mathbb{c} el tensor de elasticidad espacial o *Cuarto Tensor de Elasticidad de Cauchy*,

$$\mathbb{c} = \frac{1}{J} \phi_* [\mathbf{C}], \quad c_{ijkl} = \frac{1}{J} F_{iI} F_{jJ} F_{kK} F_{lL} C_{IJKL} \quad (5.6)$$

en donde se ha empleado la notación de *Einstein*.

A la hora de escribir la sub-rutina UMAT, hay que definir explícitamente el tensor de tensiones de Cauchy en función del tensor gradiente de deformación, y la matriz de rigidez tangente DDSD-DE, la cual coincide con la cantidad $J \mathbb{c}_J$. Aprovechando las simetrías de ambas magnitudes, éstas habrán de ser expresadas en la versión particular de la notación de *Voigt* que ABAQUS emplea,

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} \quad \text{DDSDDE} = \begin{bmatrix} D_{1111} & D_{1122} & D_{1133} & D_{1112} & D_{1113} & D_{1123} \\ D_{2211} & D_{2222} & D_{2233} & D_{2212} & D_{2213} & D_{2223} \\ D_{3311} & D_{3322} & D_{3333} & D_{3312} & D_{3313} & D_{3323} \\ D_{1211} & D_{1222} & D_{1233} & D_{1212} & D_{1213} & D_{1223} \\ D_{1311} & D_{1322} & D_{1333} & D_{1312} & D_{1313} & D_{1323} \\ D_{2311} & D_{2322} & D_{2333} & D_{2312} & D_{2313} & D_{2323} \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

5.2. Tensor de tensiones de Cauchy

Recordando la formulación en configuración mixta de la ley constitutiva dada en la sección 2.2.3, el tensor de tensiones de Cauchy puede obtenerse aplicando la operación de empuje sobre el Primer Tensor de Piola-Kirchhoff,

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \phi_* [\mathbf{P}] = \frac{1}{J} \mathbf{P} \mathbf{F}^T = \frac{1}{J} \left[\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi'(\lambda) \frac{[\mathbf{F} \mathbf{e}_\Omega] \otimes \mathbf{e}_\Omega}{\|\mathbf{F} \mathbf{e}_\Omega\|} \sin \theta d\theta d\phi \right] \cdot \mathbf{F}^T \quad (5.8)$$

aproximándose la integral sobre la superficie de la esfera unitaria mediante el método de cuadratura de Gauss-Legendre descrito en la sección 2.2.2.

5.3. Tensor de elasticidad material

A diferencia con el resto, el tensor de elasticidad espacial no puede obtenerse directamente a través del potencial elástico. Alternativamente, dicho tensor ha de obtenerse a través de la relación que guarda con el tensor de elasticidad material (5.6). Recuperando la expresión (2.15), puede obtenerse el tensor de elasticidad en configuración mixta como,

$$\mathcal{A} = \frac{\partial \mathbf{P}(\lambda(\mathbf{F}), \mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \lambda} \otimes \left\langle \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{F}} \right\rangle_{\Omega} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{F}} : \mathbf{41} \quad (5.9)$$

que en notación indicial,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{iJkL} &= \frac{\partial P_{iJ}}{\partial F_{kL}} = \frac{\partial P_{iJ}}{\partial \lambda} \left\langle \frac{\partial \lambda}{\partial F_{kL}} \right\rangle_{\Omega} + \frac{\partial P_{iJ}}{\partial F_{mn}} \delta_{mk} \delta_{nL} = \\ &= \left\langle e_{\Omega J} e_{\Omega L} \left[\frac{\|\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}\| \Psi''(\lambda) - \Psi'(\lambda)}{\|\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}\|^2} \cdot \frac{[\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}]_i [\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}]_k}{\|\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}\|} + \Psi'(\lambda) \frac{1}{\|\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}\|} \delta_{ik} \right] \right\rangle_{\Omega} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Puede probarse ([21]) que los tensores mixto y material se relacionan mediante,

$$\mathcal{A}_{iJkL} = \delta_{ik} S_{JL} + F_{iN} \mathcal{C}_{NJML} F_{kM} \quad (5.11)$$

Haciendo uso de una de las simetrías menores de \mathcal{C} , se tiene que,

$$F_{iN} \mathcal{C}_{NJML} F_{kM} = F_{iN} \mathcal{C}_{NJLM} F_{kM} \longrightarrow \mathbf{F} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{F}^T \quad (5.12)$$

No obstante, el tensor $\mathbf{F} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{F}^T$ no posee, en general, simetrías menores, por lo que en el contexto de (5.11) es necesario reflejar dicha transposición,

$$\mathcal{A} = \boldsymbol{\xi} + \left[\mathbf{F} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{F}^T \right]^{k \leftrightarrow L}, \quad \mathcal{A}_{iJkL} = \xi_{iJkL} + \left[\mathbf{F} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{F}^T \right]_{iJLk}, \quad \xi_{iJkL} = \delta_{ik} S_{JL} \quad (5.13)$$

donde la notación $k \leftrightarrow L$ indica transposición entre el par de índices k y L . Entonces, puede deducirse una expresión explícita para \mathcal{C} a través del despeje de la expresión anterior,

$$\mathcal{C} = \mathbf{F}^{-1} \cdot [\mathcal{A} - \boldsymbol{\xi}]^{K \leftrightarrow l} \cdot [\mathbf{F}^T]^{-1}, \quad \mathcal{C}_{IJKL} = F_{Ii}^{-1} [\mathcal{A} - \boldsymbol{\xi}]_{iJlK} [\mathbf{F}^T]_{lL}^{-1} \quad (5.14)$$

5.3.1. Procedimiento alternativo

Una forma alternativa, quizás más sencilla, de obtener el tensor de elasticidad material, es mediante la reformulación de la ley constitutiva en configuración material. Recordando la definición del cuarto invariante en la sección 2.2.2, puede extraerse que,

$$I_4 = \mathbf{e}_{\Omega}^T \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{e}_{\Omega} = \mathbf{e}_{\Omega}^T \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_{\Omega} = \|\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}\|^2 \quad (5.15)$$

observación que permite reescribir λ en términos del tensor de Cauchy por la derecha,

$$\lambda(\mathbf{F}) = \|\mathbf{F} \mathbf{e}_{\Omega}\| - 1 \quad \longrightarrow \quad \lambda(\mathbf{C}) = (I_4)^{1/2} - 1 \quad (5.16)$$

De este modo, la relación constitutiva en configuración material resulta,

$$\mathbf{S} = 2 \left\langle \frac{\partial \Psi(\lambda(\mathbf{C}))}{\partial \mathbf{C}} \right\rangle_{\Omega} = 2 \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} \right\rangle_{\Omega} = \langle [\lambda + 1]^{-1} \cdot \Psi'(\lambda) \cdot [\mathbf{e}_{\Omega} \otimes \mathbf{e}_{\Omega}] \rangle_{\Omega} \quad (5.17)$$

Atendiendo a la expresión (2.9), uno puede obtener el tensor de elasticidad material como,

$$\mathbf{c} = 2 \frac{\partial \mathbf{S}(\lambda(\mathbf{C}))}{\partial \mathbf{C}} = 2 \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \lambda} \otimes \left\langle \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} \right\rangle_{\Omega} \quad (5.18)$$

donde,

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \lambda} = \langle [-[\lambda + 1]^{-2} \cdot \Psi'(\lambda) + [\lambda + 1]^{-1} \cdot \Psi''(\lambda)] \cdot [\mathbf{e}_{\Omega} \otimes \mathbf{e}_{\Omega}] \rangle_{\Omega} \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{C}} = \frac{1}{2} [\lambda + 1]^{-1} \cdot [\mathbf{e}_{\Omega} \otimes \mathbf{e}_{\Omega}] \quad (5.20)$$

5.4. Validación de la implementación

En esta sección se presentan algunas pruebas realizadas con el fin de comprobar la validez de la implementación. Las pruebas en concreto han sido extraídas de la guía proporcionada por ABAQUS para la programación de sub-rutinas UMAT [22]. Pueden distinguirse dos tipos esenciales de pruebas: aquellas diseñadas para verificar la implementación de la ley constitutiva, y aquellas diseñadas para verificar la implementación del Jacobiano, o matriz de rigidez tangente. Estas pruebas se efectúan sobre un cubo unitario mallado con un único elemento. Los resultados obtenidos tras la realización de las pruebas son entonces comparados con los obtenidos a través de la implementación de la ley constitutiva en MATLAB, a fin de verificar que la sub-rutina funciona correctamente. Los parámetros materiales empleados en dichas pruebas son arbitrarios y elegidos por conveniencia, en concreto, el parámetro de pandeo d_o se ha elegido con un valor lo suficientemente grande como para evitar el *plateau* característico de la curva de compresión que produce el modelo de Steinwachs, y así solventar potenciales problemas de convergencia. El conjunto de valores empleado es: $(\kappa_o, d_o, \lambda_s, d_s) = (200 \text{ Pa}, 1, 0.01, 5)$.

5.4.1. Verificación del algoritmo de integración de las tensiones

En estas pruebas se definen todos los desplazamientos existentes en la deformación en la sección de condiciones de contorno. De este modo, la simulación no depende de la definición del Jacobiano ya que el tensor gradiente de deformación está determinado desde el principio, y la obtención de las tensiones es directa.

Extensión uniaxial

Se parte del tensor gradiente de deformación,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1.5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

que proporciona el siguiente tensor de tensiones de Cauchy,

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 24.1106 & 0 & 0 \\ 0 & 4.1838 & 0 \\ 0 & 0 & 4.1838 \end{bmatrix} \text{ [Pa]} \quad (5.22)$$

Los resultados de la simulación revelan un estado tensional homogéneo idéntico a (5.22), tal y como ilustra la figura 5.1 en el caso de la componente σ_{11} . Aunque por compacidad no se presenten el resto de figuras, se ha comprobado la coincidencia de las seis componentes de la tensión de Cauchy.

Extensión uniaxial en dirección oblicua

Se parte del tensor gradiente de deformación,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1.5 & 0 & 0 \\ 0.125 & 1 & 0 \\ 0.25 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

que caracteriza un estado de extensión uniaxial en la dirección $[\sqrt{21}/8] \cdot [0.5, 0.125, 0.25]^T$. El tensor de tensiones de Cauchy asociado es,

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 24.8369 & 3.0366 & 6.0732 \\ 3.0366 & 4.6281 & 0.6150 \\ 6.0732 & 0.6150 & 5.5507 \end{bmatrix} \text{ [Pa]} \quad (5.24)$$

Los resultados de la simulación revelan un estado tensional homogéneo idéntico a (5.24), tal y como ilustra la figura 5.2 en el caso de la componente σ_{13} . Aunque por compacidad no se presenten el resto de figuras, se ha comprobado la coincidencia de las seis componentes de la tensión de Cauchy.

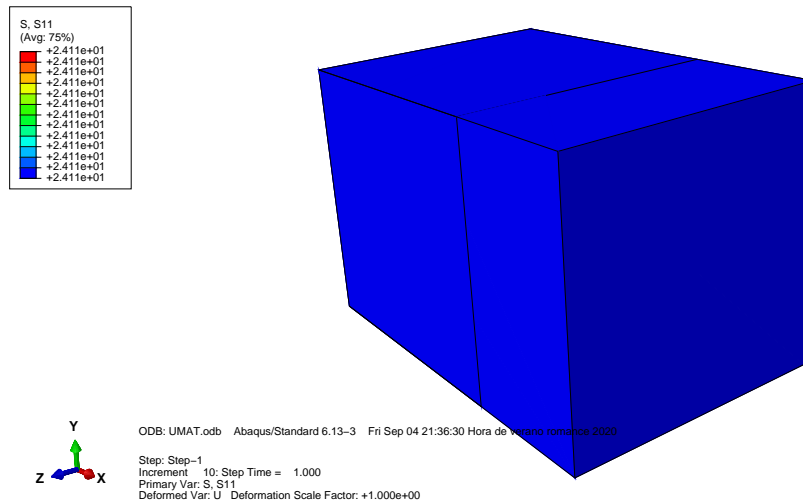


Figura 5.1: σ_{11} en extensión uniaxial.

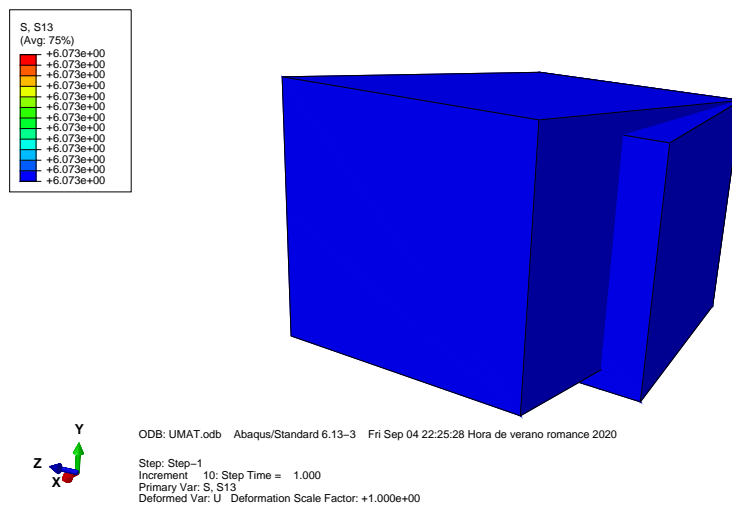


Figura 5.2: σ_{13} en extensión uniaxial en dirección oblicua.

5.4.2. Verificación de la precisión del Jacobiano

En este caso, se define un estado de tensiones en la sección de condiciones de contorno con el fin de obtener los desplazamientos correspondientes.

Tracción-Compresión

Se parte del siguiente estado tensional,

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 7.1545 & 0 & 0 \\ 0 & -3.6356 & 0 \\ 0 & 0 & -2.8580 \end{bmatrix} \text{ [Pa]} \quad (5.25)$$

asociado al tensor gradiente de deformación,

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0.85 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9 \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

que provoca una tracción en la dirección \mathbf{X} , y dos compresiones en las direcciones \mathbf{Y} y \mathbf{Z} . Los desplazamientos de tres puntos cualesquiera en cada una de las tres caras frontales recibirán los valores,

$$\mathbf{u}_X = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{u}_Y = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.15 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{u}_Z = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -0.1 \end{bmatrix} \quad (5.27)$$

Los resultados de la simulación revelan un campo de desplazamientos homogéneo idéntico a (5.27), tal y como ilustra la figura 5.3 en el caso de la componente u_2 (dirección \mathbf{Y}). Aunque por compacidad no se presenten el resto de figuras, se ha comprobado la coincidencia de los desplazamientos en las otras dos direcciones.

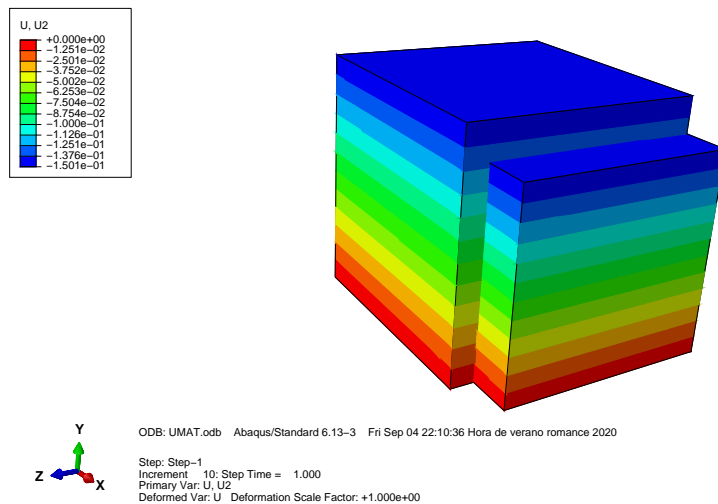


Figura 5.3: Desplazamiento en la dirección \mathbf{Y} en un estado de tracción-compresión.

Capítulo 6

Conclusión

Este Trabajo Fin de Máster se ha desarrollado en el seno de una colaboración con investigadores de la Universidad KU Leuven, una oportunidad única para contribuir con el trabajo realizado, aunque humildemente, a un proyecto de gran envergadura: la caracterización mecánica de hidrogeles de colágeno que aproximen con precisión las especificidades de la llamada matriz extracelular, entorno hospedador de la célula y factor determinante en su evolución; un pilar fundamental en el estudio de la técnica TFM. Desde un punto de vista personal, la consecución de este trabajo ha supuesto un notable complemento a los conocimientos adquiridos durante el transcurso de mis estudios universitarios, debido a que ha requerido el estudio profundo de conceptos avanzados de la mecánica del sólido deformable, desde meras intuiciones físicas hasta desarrollos matemáticos complejos y abstractos.

En esta sección final se expone una recapitulación de los principales resultados y observaciones presentados en el trabajo, así como las futuras tareas que siguen al mismo.

6.1. Resumen de los resultados

Se han ajustado con éxito los datos experimentales provenientes de los ensayos de cizalla simple y contracción vertical frente a extensión horizontal —efecto Poisson—, obtenidos por colaboradores en la Universidad de Lovaina, empleando tres leyes de comportamiento hiperelásticas: Neo-Hook, Holzapfel y Steinwachs. De los resultados se extrae que, aparentemente, la mejor opción para la caracterización de los hidrogeles es el modelo de Steinwachs. El modelo Neo-Hookeano falla a la hora de capturar el comportamiento no-lineal de los hidrogeles al mostrar una dependencia lineal entre la tensión y la deformación de cizalla. Si bien el modelo de Holzapfel solventa este problema —ajusta con precisión dicha curva—, sólo lo hace parcialmente, ya que falla por completo, al igual que la ley Neo-Hookeana, al predecir la curva de contracción vertical. Se ha verificado que la influencia del término de Holzapfel en la obtención de la última es insignificante en comparación con la del término Neo-Hookeano, por lo que ambos modelos producen curvas casi idénticas. El modelo de Steinwachs es el único que logra capturar con relativa precisión la curva de contracción vertical, a la vez que ajusta fielmente la curva de cizalla simple. No obstante, este último presenta algunos problemas que dificultan su implementación en problemas de mayor envergadura. El modelo de Steinwachs se cimenta sobre la asunción de que en un hidrogel la deformación de fibras y matriz se produce de forma independiente. Bajo esta hipótesis, el potencial elástico del hidrogel se concibe como el promedio de los potenciales elásticos de todas las fibras, excluyéndose la contribución de la matriz acuosa. En este sentido, debido a que la rigidez de una fibra a compresión se establece prácticamente nula —la fibra pandea—, el comportamiento promedio que ofrece el modelo muestra también rigidez nula ante compresión. La rigidez nula a compresión es fuente de abundantes problemas de carácter computacional: convergencia, distorsión de malla, pérdida de convexidad, entre otros. Asimismo, la hipótesis de deformaciones afines sólo es válida si la concentración de

fibras es lo suficientemente grande. En caso de que la concentración de fibras sea pequeña, la rigidez general del hidrogel será comparable a la de la matriz, y entonces sería necesario considerar la contribución de la misma en el comportamiento general del material.

6.2. Trabajos futuros

Los siguientes pasos a desarrollar en el marco de esta colaboración son:

- Corroboración de la participación de la matriz en la deformación de los hidrogeles, sirviéndose de datos correspondientes a ensayos de compresión que se espera recibir de Lovaina en el futuro próximo. Además, se espera recibir información acerca de la deformación de las fibras en el interior del gel, para así poder verificar la hipótesis de deformaciones afines.
- Desarrollo de un modelo que caracterice mejor el comportamiento del término de la fibra, a partir de los modelos de Holzapfel y Steinwachs, y que también incluya la contribución de la matriz en la definición de la función densidad de energía de deformación. En consecuencia, se espera poder conseguir mejores ajustes de las curvas experimentales en un rango más amplio de deformaciones, incluyendo la región de compresión. Este nuevo modelo sería por sí mismo una contribución interesante en el campo de la TFM.
- Una vez que el modelo se encuentre definido, y comprobadas las mejoras que conlleva, se adaptará la sub-rutina UMAT ya escrita para que incluya dicha ley constitutiva.
- Utilización de la subrutina desarrollada para su uso en problemas reales de TFM, en colaboración con la Universidad KU Leuven, para la investigación del microentorno mecánico de células ante diversas condiciones fisiológicas.

Bibliografía

- [1] F. Spill, D. S. Reynolds, R. D. Kamm, M. H. Zaman. *Impact of the physical microenvironment on tumor progression and metastasis*. Current Opinion in Biotechnology, Volumen 40, Páginas 41–18. Elsevier. Agosto de 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.copbio.2016.02.007>
- [2] F. Spill, C. Bakal, M. Mak. *Mechanical and Systems Biology of Cancer*. Computational and Structural Biotechnology Journal, Volumen 16, Páginas 237–245. Elsevier. 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.csbj.2018.07.002>
- [3] U. S. Schwarz, J. R. D. Soiné. *Traction force microscopy on soft elastic substrates: A guide to recent computational advances*. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular Cell Research, Volumen 1853, Edición 11, Parte B, Páginas 3095–3104. Elsevier. Noviembre de 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bbamcr.2015.05.028>
- [4] S. A. Maskarinec, C. Franck, D. A. Tirrell, G. Ravichandran. *Quantifying cellular traction forces in three dimensions*. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, Volumen 106, Número 52, Páginas 22108–22113. National Academy of Sciences. Diciembre de 2009. DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.0904565106>
- [5] L. G. Griffith, M. A. Swartz. *Capturing complex 3D tissue physiology in vitro*. Nature Reviews - Molecular Cell Biology, Volumen 7, Páginas 211–224. Nature. Marzo de 2006. DOI: <https://doi.org/10.1038/nrm1858>
- [6] J. Toyjanova, E. Bar-Kochba, C. López-Fagundo, J. Reichner, D. Hoffman-Kim, C. Franck. *High Resolution, Large Deformation 3D Traction Force Microscopy*. PLoS ONE 9(4). Abril de 2014. DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0090976>
- [7] Y. J. Suh. *Cancer Cell Mechanics*. Biofluidics Lab. Cornell University. Web. Enlace: <https://biofluidics.bee.cornell.edu/cancer-cell-mechanics.html>
- [8] Y. Huang, C. Schell, T. B. Huber, A. N. Şimşek, N. Hersch, R. Merkel, G. Gompper, B. Sabass. *Traction force microscopy with optimized regularization and automated Bayesian parameter selection for comparing cells*. Scientific Reports, Volumen 9, Número 539. Nature. Enero de 2019. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-018-36896-x>
- [9] P. C. Hansen. *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems: Numerical Aspects of Linear Inversion*. Mathematical Modeling and Computation. Society for Industrial and Applied Mathematics. 1998. DOI: <https://doi.org/10.1137/1.9780898719697>
- [10] G. A. Holzapfel. *Nonlinear Solid Mechanics: A Continuum Approach for Engineering*. John Wiley & Sons. 2000.
- [11] J. Bonet, R. D. Wood. *Nonlinear Continuum Mechanics For Finite Element Analysis*. Cambridge University Press. 1997.
- [12] R. W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Publications. Mineola, Nueva York. 1997.

- [13] T. J. Pence, K. Gou. *On compressible versions of the incompressible neo-Hookean material*. Mathematics and Mechanics of Solids, Volumen 20, Número 2, Páginas 157–182. SAGE journals. Febrero de 2015. DOI: <https://doi.org/10.1177/1081286514544258>
- [14] B. A. Lane, K. A. Harmon, R. L. Goodwin, M. J. Yost, T. Shazly, J. F. Eberth. *Constitutive modeling of compressible type-I collagen hydrogels*. Medical Engineering & Physics, Volumen 53, Páginas 39–48. Elsevier. Marzo de 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.medengphy.2018.01.003>
- [15] O. Gültekin, H. Dal, G. A. Holzapfel. *On the quasi-incompressible finite element analysis of anisotropic hyperelastic materials*. Computational Mechanics, Volumen 63, Páginas 443–453. Nature. Marzo de 2019. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00466-018-1602-9>
- [16] G. A. Holzapfel, H. W. Weizsäcker. *Biomechanical behavior of the arterial wall and its numerical characterization*. Computers in Biology and Medicine, Volumen 28, Edición 4, Páginas 377–392. Elsevier. Julio de 1998. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-4825\(98\)00022-5](https://doi.org/10.1016/S0010-4825(98)00022-5)
- [17] Y. C. Fung, K. Fronek, P. Patitucci. *Pseudoelasticity of arteries and the choice of its mathematical expression*. American Journal of Physiology — Heart and Circulatory Physiology, Volumen 237, Número 5, Páginas H620–H631. American Physiological Society. Noviembre de 1979. DOI: <https://doi.org/10.1152/ajpheart.1979.237.5.H620>
- [18] K. Atkinson. *Numerical Integration On The Sphere*. Journal of the Australian Mathematical Society, Volumen 23, Edición 3, Páginas 332–347. Cambridge University Press. Enero de 1982. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0334270000000278>
- [19] J. Steinwachs, C. Metzner, K. Skodzek, N. Lang, I. Thievessen, C. Mark, S. Münster, K. E. Aifantis, B. Fabry. *Three-dimensional force microscopy of cells in biopolymer networks*. Nature Methods, Volumen 13, Páginas 171–176. Nature. Diciembre de 2015. DOI: <https://doi.org/10.1038/nmeth.3685>
- [20] E. W. V. Chaves. *Notes on Continuum Mechanics*. Engineering Mechanics Lecture Notes on Numerical Methods in Engineering and Sciences. Springer. 2013.
- [21] "Nonlinear finite elements/Rate form of hyperelastic laws". *Wikiversity*. Wikimedia Foundation. Web. 2017. Enlace: https://en.wikiversity.org/wiki/Nonlinear_finite_elements/Rate_form_of_hyperelastic_laws
- [22] ABAQUS Online Guide. *Lecture 6: Writing a UMAT or VUMAT*. Writing User Subroutines with ABAQUS. Simulia ABAQUS. Web. Enlace: <https://imechanica.org/files/Writing%20a%20UMAT.pdf>
- [23] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, J. Z. Zhu. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*, séptima edición. Butterworth-Heinemann, Elsevier. 2013.
- [24] Greg von Winckel (2020). *Legendre-Gauss Quadrature Weights and Nodes*, MATLAB Central File Exchange. Accedido en septiembre de 2020. Enlace: <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/4540-legendre-gauss-quadrature-weights-and-nodes>
- [25] Mathworks (2020). *lsqnonlin: Solve nonlinear least-squares (nonlinear data-fitting) problems (r2016a)*. Accedido en septiembre de 2020. Enlace: <https://www.mathworks.com/help/optim/ug/lsqnonlin.html>