

Metodologia 5D para previsão do comportamento mecânico de estruturas poliméricas biodegradáveis

Marcos V. H. Taguti¹, Marcelo L. Ribeiro¹, André F. C. Vieira^{1, 2}

¹Unidade de São Paulo, Escola de Engenharia de São Carlos, Brasil, taguti@usp.br

²Universidade da Beira Interior, Portugal, andre.costa.vieira@ubi.pt

RESUMO

O uso de polímeros biodegradáveis na medicina regenerativa e engenharia de tecidos possibilita a concepção de estruturas que substituem temporariamente as funções biomecânicas de tecidos. Durante a neoformação do tecido ocorre degradação hidrolítica do dispositivo biodegradável, e este é posteriormente absorvido pelo tecido hospedeiro. Um projeto adequado deve levar em consideração a compatibilidade entre a evolução do comportamento mecânico e o tempo de regeneração do tecido. O objetivo deste trabalho é apresentar uma metodologia numérica capaz de prever o comportamento mecânico de estruturas poliméricas biodegradáveis após certo tempo de degradação. Os resultados de ensaios de tração monotônicos em amostras degradadas serão futuramente utilizados para calibrar uma relação entre tensão e taxa de degradação e entre o módulo de cisalhamento do modelo constitutivo de neo-Hookean e o dano hidrolítico local. Assim, por meio do Método dos Elementos Finitos, o comportamento mecânico da estrutura após um dado período de degradação pode ser simulado.

Palavras-chave: Polímeros biodegradáveis, Degradação hidrolítica, Modelo hiperelástico, Comportamento mecânico

INTRODUÇÃO

A previsão do comportamento mecânico dos materiais é de grande importância no projeto e relações constitutivas são utilizadas com este propósito. Além das condições de compatibilidade biológica, os dispositivos biomédicos devem possuir uma compatibilidade entre a taxa de degradação e a recuperação do tecido biológico no qual o dispositivo foi implantado.

Na literatura são poucos os trabalhos encontrados a respeito de metodologias capazes de simular o comportamento mecânico de polímeros biodegradáveis [1, 2, 3, 4, 5, 6]. Nestas metodologias os parâmetros materiais dos modelos são obtidos em função de um campo escalar, que quantifica o dano hidrolítico do material. Porém estes modelos são aproximações, uma vez que não são considerados todas as variáveis que influenciam na taxa de degradação do material. Vieira et al. [3] desenvolveram uma metodologia capaz de prever o comportamento mecânico de estruturas biodegradáveis, considerando uma taxa de degradação constante do material. Conhecido como método 4D (geometria tridimensional mais tempo de degradação), esta metodologia combinou modelos da cinética da hidrólise com modelos constitutivos. O objetivo deste trabalho é implementar esta metodologia, considerando também a distribuição heterogênea do campo de tensões, uma vez que a taxa de degradação local depende do estado de tensão. Desta forma, será possível realizar simulações 5D, onde a taxa de degradação não será constante ao longo do volume.

DEGRADAÇÃO HIDROLÍTICA

De acordo com Göpferich (1996), o mecanismo de degradação mais importante em polímeros é a degradação química hidrolítica, que ocorre na presença de água e enzimas. Um dos modelos mais simples para descrever matematicamente a cinética da hidrólise, considera a hipótese da cisão aleatória das macromoléculas poliméricas e qualquer grupo éster no interior da molécula [3]. De acordo com este modelo, a redução do peso molecular médio do polímero é dada por:

$$M_{nt} = M_{no} e^{-kewt} = M_{no} e^{-wt} \quad (1)$$

sendo k a constante de taxa hidrolítica, e é a concentração de grupos éster, w é a concentração de água no polímero e t é o tempo de degradação. O produto u é a taxa de degradação. M_{nt} é o peso molecular do polímero após a degradação e M_{no} é o peso molecular inicial antes da degradação.

A taxa de degradação u é afetada por muitos fatores que podem variar ao longo do volume ou durante a degradação. Por exemplo, a temperatura aumentará a constante de taxa hidrolítica k , que está associada à probabilidade de cisão das ligações poliméricas. A influência de tensão mecânica na taxa de

degradação também foi relatada. Da mesma forma que a temperatura, a tensão mecânica e deformação também aumenta a probabilidade de cisão das ligações. No caso de geometrias e condições de fronteira complexas o campo de tensões vai variar ao longo do volume, promovendo assim uma degradação heterogênea.

O comportamento mecânico dos polímeros biodegradáveis irá evoluir ao longo do tempo devido à redução do peso molecular. Como mostrado por Vieira et al. [3], a resistência mecânica durante a degradação pode ser prevista por:

$$S_t = S_0 e^{-ut} = S_0 e^{-k_{wet} t} \quad (2)$$

sendo S_t a resistência do polímero em um determinado período t de degradação e S_0 é a resistência inicial. Assim, o dano hidrolítico foi definido por Vieira et al. [3]:

$$d_h = 1 - \frac{S_t}{S_0} = 1 - \frac{M_{nt}}{M_{n0}} = 1 - e^{-ut} \quad (3)$$

Para simular a evolução do comportamento mecânico de polímeros biodegradáveis, os parâmetros materiais dos modelos constitutivos são função do dano hidrolítico que é considerado um campo escalar. Desta forma se relaciona o modelo da cinética da hidrólise com o modelo constitutivo. Neste trabalho será apresentado um método, baseado nos princípios até aqui estabelecidos, para simular o comportamento mecânico de uma estrutura que promove uma degradação heterogênea devido a um campo de tensões variável ao longo do volume.

Na metodologia proposta (ver Figura 1), o tempo de degradação é dividido em vários incrementos. Tendo encontrado a relação entre a tensão equivalente de von Mises e a taxa de degradação (com base em resultados experimentais), uma metodologia 5D pode ser implementada. Neste trabalho foi considerado que a taxa de degradação $u(\sigma')$ cresce linearmente em função da tensão equivalente de von Mises σ' . O software deve determinar, em cada elemento finito do modelo e em cada incremento de tempo, o dano hidrolítico acumulado até então, para posteriormente calcular o módulo de cisalhamento e atualizar o campo de tensões. O dano hidrolítico $d_h(u, t)$ acumulado em qualquer incremento de tempo e em um elemento determinado, depende do intervalo de tempo considerado e da taxa de degradação local, de acordo com a equação 3. Por sua vez a taxa de degradação $u(\sigma')$ depende do campo de tensão, e deve ser calculado considerando a tensão equivalente aplicada nesse elemento particular no incremento de tempo anterior. Isso permite um tipo de "modelação 5D", a quarta e quinta dimensões são o tempo de degradação e o campo de tensão, respectivamente. A metodologia foi implementada no software de elementos finitos ABAQUS®, utilizando User Material sub-routines (UMAT).

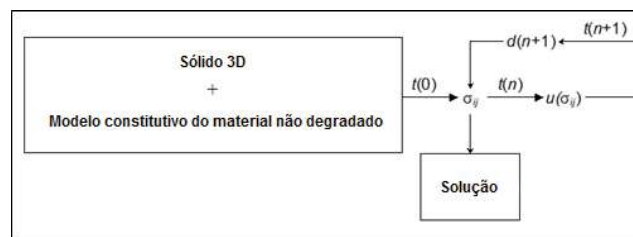


Figura 1. Fluxograma dos cálculos numéricos da metodologia 5D

REFERÊNCIAS

- Soares, J.S.; (2008) *Constitutive Modeling for Biodegradable Polymers for Applications in Endovascular Stents*. (PhD thesis, Texas A&M University).
- Soares, J.S.; Rajagopal, K.R.; Moore, J.E. (2010) Deformation induced hydrolysis of a degradable polymeric cylindrical annulus. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, 9, 177-186.
- Vieira, A.C.; Marques, A.T.; Guedes, R.M.; Tita, V. (2011) Material model proposal for biodegradable materials. *Procedia Engineering*, 10, 1597-1602.
- Vieira, A.C.; Guedes, R.M.; Tita, V. (2014) Constitutive modeling of biodegradable polymers: Hydrolytic degradation and time-dependent behavior. *International Journal of Solids and Structures*, 51, 1164-1174.
- Muliana, A.; Rajagopal, K. (2012) Modeling the response of nonlinear viscoelastic biodegradable polymeric stents. *International Journal of Solids and Structures*, 49, 989-1000.
- Khan, K.A.; El-Sayed, T. (2013) A phenomenological constitutive model for the nonlinear viscoelastic responses of biodegradable polymers. *Acta Mechanica*, 224, 287-305.