

## MODELAGEM MULTI-ESCALA DO BIO COMPÓSITO ESMALTE DENTÁRIO

Sabrina Mascarenhas Vargas, Universidade Federal de Juiz de fora, [sabrina.vargas@engenharia.ufjf.br](mailto:sabrina.vargas@engenharia.ufjf.br)  
Flávia de Souza Bastos, Universidade Federal de Juiz de fora, [flavia.bastos@ufjf.edu.br](mailto:flavia.bastos@ufjf.edu.br)  
Michèle Farage Cristina Resende, Universidade Federal de Juiz de fora, [Michele.farage@ufjf.edu.br](mailto:Michele.farage@ufjf.edu.br)  
Estevam Barbosa de Las Casas, Universidade Federal de Minas Gerais, [estevam@dees.ufmg.br](mailto:estevam@dees.ufmg.br)

**Resumo.** *Esse trabalho tem como objetivo utilizar a modelagem multi-escala em 2D para a determinação dos tensores de propriedades mecânicas efetivas do esmalte dentário, por meio do programa HEA2D, que se baseia na técnica de Homogeneização Assintótica, aplicável em estrutura periódica ou repetitiva. Os dados de entrada do programa são as propriedades geométricas e mecânicas da célula periódica e a saída é o tensor de propriedades efetivas do material. A saída de dados do programa forneceu o tensor elástico efetivo do material compósito. A metodologia do estudo foi dividida em etapas: 1- Foi desenvolvido um modelo geométrico representativo de célula periódica de esmalte dentário, semelhante quanto à forma e quanto à proporção volumétrica de prisma e matriz quando comparado com a estrutura in vivo; 2- Utilizou-se o programa Abaqus para gerar malha de elementos finitos em cima do modelo geométrico; 3- Foi desenvolvida uma sub-rotina em Matlab para transcrever o arquivo de entrada de dados do Abaqus para um arquivo compatível com o programa HEA2D; 4- Foi utilizado o programa HEA2D para gerar os valores homogeneizados do módulo de elasticidade do esmalte dentário a partir dos módulos de elasticidade do prisma de esmalte (114 GPa) e da matriz orgânica (0.5 GPa). Foram calculados os valores homogeneizados dos módulos de elasticidade  $E1=40; 9 \text{ GPa}$  e  $E2 = 86; 5 \text{ GPa}$ , coerentes com medições experimentais encontradas na literatura. A identificação de características ortotrópicas do esmalte dentário é importante para análises de contato entre superfícies dentárias.*

**Palavras chave:** *Análise multi-escala, Biomecânica dental, Esmalte dentário.*

### 1. INTRODUÇÃO

O esmalte dentário é a camada mais externa do dente e reveste toda a coroa dentária, é também o tecido humano mais mineralizado. Possui um alto conteúdo mineral, composto principalmente por fosfato de cálcio cristalino (hidroxiapatita), que é responsável por torná-lo um material bastante duro, capaz de sustentar as forças mecânicas aplicadas durante as atividades funcionais (Giannini; Soares; Carvalho, 2004). No entanto, também o torna frágil, com pouca habilidade de suportar deformação plástica antes de sua fratura.

Para se caracterizarem, eficientemente, as propriedades mecânicas dos dentes, têm se tornado cada vez mais comum a execução de modernos testes de dureza instrumentada. Nesses testes os valores encontrados para o esmalte dentário apresentam uma alta divergência, diferenças significativas são encontradas na relação tensão-deformação entre esmalte e hidroxiapatita sinterizada. Esta diferença certamente tem a ver com a existência da rica camada orgânica em meio aos cristais de hidroxiapatita (Cunha *et al.* 2012; He e Swain,2007).

Como o desenvolvimento de um modelo biomecânico de dentes que possa descrever adequadamente seu comportamento altamente anisotrópico ainda é um desafio (Bar-on eWagner,2012), assim, para Cunha *et al.*( 2012) a modelagem multi-escala do material, se justifica devido o esmalte dentário apresentar características físicas de compósito ortotrópico, visto que, essa técnica tem sido empregada com este objetivo há algumas décadas com bastante sucesso.

A modelagem multi-escala utilizada no estudo é a Homogeneização por Expansão Assintótica (HEA), que é aplicável a meios que apresentem estrutura periódica ou repetitiva. Como ferramenta de simulação será utilizado o programa HEA2D para calcular propriedades mecânicas efetivas da estrutura do esmalte dentário, com base em dados experimentais disponíveis na literatura.

O objetivo principal da aplicação escolhida é o de avaliar a capacidade da técnica de multi-escala estudada para determinar o módulo de elasticidade do esmalte dentário humano, considerando que o esmalte se comporta como um material compósito ortotrópico no âmbito cristalino (He e Swain,2007).

### 2. METODOLOGIA

#### 2.1 Homogeneização por Expansão Assintótica (HEA)

A HEA é uma técnica numérica fundamentada na aproximação de um corpo global, que apresente estrutura periódica em sua composição, por um corpo local, célula periódica, capaz de representar o meio heterogêneo,

Sabrina Mascarenhas Vargas, Flávia de Souza Bastos, Michèle Farage Cristina Resende e Estevam Barbosa de Las Casas.  
 Modelagem Multi-escala do Bio Compósito Esmalte Dentário.

objetivando determinar as propriedades homogeneizadas capazes de representar o corpo multifásico, a partir das propriedades mecânicas de cada fase.

A técnica baseia-se no desacoplamento de diferentes escalas de um material, extrapolando os resultados de escalas inferiores ou heterogêneas para escalas macroscópicas de modo a se obter propriedades homogeneizadas ou efetivas. Um aspecto muito importante é a definição das características geométricas e físicas da célula periódica, que é o menor volume microestrutural capaz de representar adequadamente o comportamento constitutivo global do meio em estudo. A partir das propriedades heterogêneas de uma célula, considera-se que tais propriedades repitam-se de modo periódico através da estrutura. Baseia-se na resolução de Equações Diferenciais parciais. Para isso utiliza-se um programa- base desenvolvido originalmente na COPPE/UFRJ (Cunha *et al.* 2012), que já sofreu algumas alterações nesse período, sendo a última por Quintela.(2011) de tempo e que é a implementação da HEA para a análise de problemas mecânicos contínuos em 3D via MEF, em linguagem Matlab (versão R2014a).

Os dados de entrada do programa são: malhas, condições de contorno e propriedades mecânicas da célula periódica, módulos de elasticidade (E) e coeficientes de Poisson ( $\nu$ ) de cada fase ( $\alpha$ ) a saída é o tensor de propriedades efetivas do material, esmalte dentário.

## 2.2 HEA aplicada à Elasticidade Linear e Implementação da HEA

As premissas básicas da HEA são: 1- Relação entre as escalas e 2- Expansão assintótica. Para a premissa 1, admite-se a existência de duas escalas distintas. O meio global é representado por  $x$  enquanto que, o meio local por  $y$ . A relação entre os meios é representada por um parâmetro de escala definido  $\epsilon \rightarrow 0$ , onde  $y = x/\epsilon$ . A segunda premissa da HEA é a expansão assintótica da variável central do problema, que é o deslocamento ( $u_{ei}(x;y)$ ) em torno de  $\epsilon$ . Nesse estudo, têm-se pequenas deformações no regime linear elástico.

$$\mu_i^\epsilon = \mu_i^0(x, y) + \epsilon \mu_i^1(x, y) + \epsilon^2 \mu_i^2(x, y) \dots \quad (1)$$

onde  $\mu_i^0$  é o deslocamento macroscópico e representam os deslocamentos periódicos em escalas mais refinadas.

Como o meio heterogêneo real é representado por dois sistemas de coordenadas ( $x$  e  $y = \frac{x}{\epsilon}$ ), as derivadas originalmente em relação a  $x^\epsilon$  devem ser expandidas em regra da cadeia, conforme segue:

$$\frac{\partial}{\partial x_i^\epsilon} = \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} \quad (2)$$

De acordo com Chung *et al.* 2001, materiais heterogêneos que sejam compostos por estruturas periódicas, tem propriedades periódicas do material definida pela seguinte relação:

$$D_{(ijkl)}^\epsilon = D_{(ijkl)} \left( \frac{x}{\epsilon} \right) \quad (3)$$

onde  $D_{(ijkl)}^\epsilon$  é a estrutura heterogênea e a função  $D_{(ijkl)}$  representa as variações de propriedades do material na microestrutura.

O problema elástico-linear é modelado com um conjunto de equações:

$$\frac{\partial \sigma_{eij}}{\partial x} e_j + f_i = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (4)$$

$$u_{ei} = 0 \quad \text{em } \partial_i \Omega \quad (5)$$

$$\sigma_{ei} n_j = F_i \quad \text{em } \partial_s \Omega \quad (6)$$

$$\epsilon_{ij}(u_e) = 1/2 \left( \frac{\partial u_{ei}}{\partial x_{ej}} + \frac{\partial u_{ej}}{\partial x_{ei}} \right) \quad (7)$$

Sabrina Mascarenhas Vargas, Flávia de Souza Bastos, Michèle Farage Cristina Resende e Estevam Barbosa de Las Casas. Modelagem Multi-escala do Bio Compósito Esmalte Dentário.

$$\sigma_{eij} = D_{ijkl} \epsilon_{kl} (u_e) \quad (8)$$

Onde, a eq.4 é a equação de equilíbrio, as eq. 5 e eq. 6 são condições de contorno, e as eq. 7 e eq. 8 são a relação deformação-deslocamento e relação constitutiva, respectivamente. E, além disso,  $\epsilon$  identifica os valores relacionados ao comportamento do material heterogêneo,  $\sigma_{eij}$  é o termo  $i j$  do tensor de tensões internas e  $f_i$  é a força de volume no domínio  $\Omega$ ;  $u_{ei}$  é o deslocamento na direção  $i$ ;  $n_j$  é o vetor normal ao contorno  $\partial_2\Omega$ ;  $F_i$  é a força por unidade de área no contorno  $\partial_2\Omega$  e  $\epsilon_{ij}$  é o termo  $i j$  do tensor de deformações.

A equação diferencial que é resolvida, na forma fraca, é:

$$\int_y D_{ijkl} \frac{\partial \mu_k^1}{\partial y_l} \frac{\partial v}{\partial y_1} dy = - \frac{\partial \mu_k^0}{\partial x_l} \int_y \frac{\partial D_{ijkl}}{\partial y_j} dy \quad (9)$$

Tais equações são aproximadas pelo método numérico dos elementos finitos (MEF). Para representar a implementação em elementos finitos, utilizou-se o elemento triangular quadrático de 6 nós.

Foi realizada uma análise computacional disponível da HEA na versão bidimensional criada no ambiente de processamento algébrico Matlab, que objetivou o cálculo de propriedades mecânicas elásticas homogeneizadas do esmalte a partir de células periódicas (contendo prisma de hidroxiapatita e matriz orgânica) criadas com o software Abaqus.

Como dados de entrada, devem ser fornecidos os módulos de elasticidade (E) de cada fase da célula periódica, que para esse estudo foi atribuído os valores de E=114 GPa para prismas de esmalte e E=0.5 GPa para matriz orgânica (Baron e Wagner,2012); o número de nós e as coordenadas nodais dos elementos finitos, números de elementos e os nós que compõem os elementos, obtidos a partir da malha de elementos finitos gerada em cima da geometria da célula periódica representativa de esmalte dentário.

Uma característica importante é que as malhas de elementos finitos, geradas no software Abaqus, devem ser capazes de aceitar imposição de condições de contorno periódicas nos nós localizados nas arestas, e,além disso, possuir domínio retangular.

### 2.3 Aplicação ao esmalte dentário e o modelo multi-escala adotado

O esmalte dentário é a camada mais externa do órgão dentário e é o tecido mais mineralizado do corpo humano. Consiste, aproximadamente, de 92-98% de mineral, 1-2 % de material orgânico e 3-4% de água, sendo que sua composição exata varia entre os dentes e também entre diferentes partes de um mesmo dente (Anusavice e Philips, 2005; Arana e Katchaburian, 2012; Giannini et al., 2004). A parte mineral é formada por cristais de hidroxiapatita (fosfato de cálcio) (HAP) de aproximadamente 70nm de diâmetro (Cunha *et al.* 2012), que se unem para formarem os prismas de esmalte, semelhantes a fechaduras e medindo de 4 a 8  $\mu\text{m}$  (Arana e Katchaburian, 2012). Os prismas de esmalte se originam, aproximadamente, em ângulo reto com a superfície da dentina. Nas áreas cervicais têm curso aproximadamente horizontal, próximos à bordas incisais ou às pontas das cúspides, mudam sua direção gradualmente tornando-se oblíquos e até quase verticais (Bhaskar, 1989). Os prismas são intercalados por uma fina camada de proteína de aproximadamente 2nm de espessura.

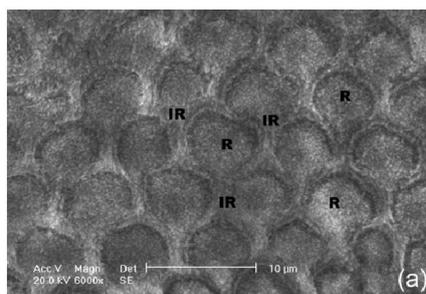


Figura1. Imagem por MEV na qual pode-se observar estruturas prismáticas, R, e interprismáticas, IR, de uma seção de esmalte dentário (He e Swain, 2007)

Sabrina Mascarenhas Vargas, Flávia de Souza Bastos, Michèle Farage Cristina Resende e Estevam Barbosa de Las Casas.  
Modelagem Multi-escala do Bio Compósito Esmalte Dentário.

Embora a maior fração volumétrica do esmalte seja composta de HAPs, diferenças consideráveis são encontradas na relação tensão-deformação entre esmalte e hidroxiapatita sinterizada, sendo o primeiro mais deformável que a segunda (He e Swain, 2007; Bar-on e Wagner, 2012). Esta diferença provavelmente está relacionada com a existência da camada orgânica em meio aos cristais de HAP. Tal camada é formada por proteínas, que são biopolímeros com propriedades visco elásticas decorrentes de rearranjos configuracionais, disposição e interação entre as macromoléculas; e água (Cunha *et al.* 2012; He e Swain, 2007). Além da composição química, a rigidez do esmalte também depende da orientação prismática. A rigidez perpendicular à orientação do cristal será, dessa forma, menor.

Adotou-se a geometria quadrada 1x1 (2D), fig. 2, com fração volumétrica de prismas em cada composição do esmalte sendo representada na célula periódica aqui adotada por inclusões: a relação entre o volume das inclusões e o volume total da célula é aproximadamente de 95%, representando de forma bem similar o que acontece na estrutura anatômica microscópica do esmalte dentário, além disso, a geometria do prisma se assemelha a sua característica de fechadura. O aspecto da malha de elementos finitos empregada no presente estudo é apresentado na fig. 3 gerada com o auxílio do programa Abaqus (versão 6.12).

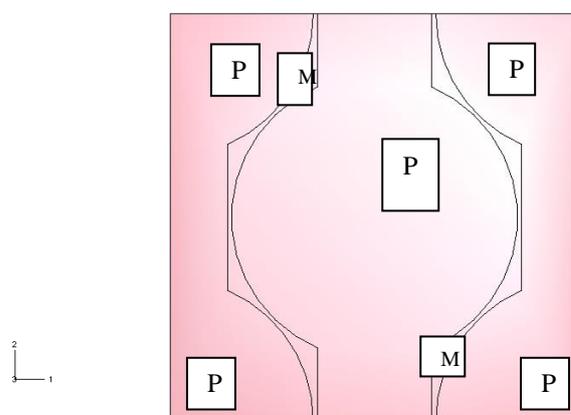


Figura 2. Modelo Geométrico representativo de célula periódica para esmalte dentário. Onde P é prisma de esmalte e M é matriz orgânica. Representa proporção volumétrica de prisma com o todo de 95%.

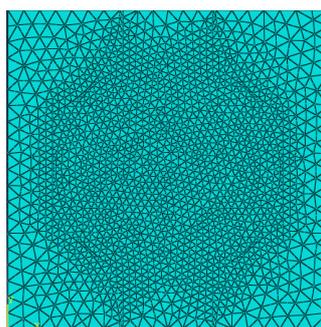


Figura 3. Malha de elementos finitos aplicada em cima do modelo geométrico por meio do software Abaqus (5.946 elementos).

De acordo com Bar-on e Wagner.(2012), módulo de elasticidade da hidroxiapatita é atribuído para representar as inclusões em tecido cristalino ( $E=114$  GPa), e o módulo de elasticidade da matriz orgânica ( $E=0.5$  GPa). Consideram-se ambos os materiais como isotrópicos, com coeficiente de Poisson de 0,33.

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A geometria de célula adotada no estudo apresenta comportamento mecânico ortotrópico, sendo a direção 2, paralela aos prismas, a que apresenta maior rigidez. A partir dos componentes do tensor elásticos de rigidez para material

Sabrina Mascarenhas Vargas, Flávia de Souza Bastos, Michèle Farage Cristina Resende e Estevam Barbosa de Las Casas.  
Modelagem Multi-escala do Bio Compósito Esmalte Dentário.

multidirecional foram calculados os valores homogeneizados dos módulos de elasticidade  $E1 = 40; 9 \text{ GPa}$  e  $E2 = 86; 5 \text{ GPa}$ , referentes às direções 1 e 2, respectivamente. Tais valores corroboram com os resultados encontrados na literatura a partir de medições experimentais. Habelitz et al. (2001) realizaram mais de 100 indentações sobre cada uma das seções longitudinais e oclusais de 4 terceiros molares hígidos e todas as amostras exibiram maiores módulo de elasticidade e dureza quando as indentações foram feitas paralelas aos eixos dos prismas. O módulo de elasticidade, para estes casos, variou entre  $85 \text{ GPa}$  e  $90 \text{ GPa}$ . Já quando as indentações foram realizadas perpendicularmente ao eixo dos prismas, o valor obtidos foram de  $70\text{-}77 \text{ GPa}$ . Cuy et al. (2002) obtiveram a dureza H e módulo de Young E para o esmalte dentário por meio de indentações com ponta Berkovich. Os resultados indicaram que H e E diminuíram a partir do esmalte superficial até a junção esmalte-dentina, em média de  $4,06$  a  $3,04 \text{ GPa}$  e  $120$  a  $47 \text{ GPa}$ , respectivamente. Ge et al.(2005), no estudo experimental, encontraram o módulo de elasticidade como sendo  $75.9 \pm 6.5 \text{ GPa}$ . Alguns estudos numéricos sobre módulo de elasticidade para o esmalte encontrados na literatura também apresentam resultados próximos aos encontrados nesse estudo. A variação dos resultados teóricos do módulo de elasticidade efetivo longitudinal para esmalte dentário encontrado por Bar-on e Wagner. (2012) foi de  $50 \text{ GPa}$  para proporção de 80% entre prisma e matriz a  $80 \text{ GPa}$  para proporção de 95% entre prisma e matriz.

#### 4. CONCLUSÃO

Neste trabalho, o módulo de elasticidade para o esmalte dentário de acordo com o modelo geométrico de característica ortotrópico apresentado foi avaliado por meio da homogeneização por expansão assintótica e o Método dos Elementos Finitos. Como dados iniciais atribuiu-se os valores de referência para módulo de elasticidade dos prismas de esmalte dentário=  $114 \text{ GPa}$  e para matriz orgânica=  $0.5 \text{ GPa}$  e para ambos atribui-se o valor de coeficiente de poisson=0.33 fornecem uma boa estimativa para dados experimentais. Os resultados numéricos estão em concordância com os de medições experimentais e outros estudos teórico- numéricos tomados como referência.

#### 3. REFERÊNCIAS

- Anusavice, K.J., phillips – “Materiais Dentários”. 11a Ed, Elsevier LTDA, 2005
- Arana, V.; katchburian, E. “Histologia e Embriologia Oral”. 3 edição. São Paulo: Guanabara, 2012.
- Bhaskar, S.N., 1989. Histologia e Embriologia Oral de Orban. Artes Médicas.
- Braly a, L.A. Darnell a,b, A.B. Manna,1, M.F. Teaford c, T.P. Weihs. “The effect of prism orientation on the indentation testing of human molar enamel.
- Bar-on, Wagner. “Enamel and dentin as multi-scale bio-composites”. journal of the mechanical behavior of biomedical materials 12 (2012) 174 – 183; 2012.
- Chung, P.W., Tamma, K.K. , Namburu, R.R., 2001. Asymptotic expansion homogenization for heterogeneous media: computational issues and applications. Composites: Part A, vol. 32,pp. 1291–1301.
- Cunha et al. “Análise multiescala da estrutura do esmalte dentário”. Belo Horizonte. Anais do X simpósio de Mecânica computacional. SIMMEC; 2012.
- Cuy, J.L., et al., 2002. Nanoindentation mapping of the mechanical properties of human molar tooth enamel. Arch. Oral Biol. 47,281–291.
- Ge, J., et al., 2005. Property variations in the prism and the organic sheath within enamel by nanoindentation. Biomaterials 26,3333–3339.
- Giannini M, Soares CJ, deCarvalho RM. 2004. “Ultimate tensile strength of tooth structures. Dental Materials”, Vol 20, pp. 322-9.
- Habelitz, S., Marshall, S.J., Marshal Jr., G.W. , Balooch, M., 2001. Mechanical properties of human dental enamel on the nanometre scale. Archives of Oral Biology, vol. 46, pp.173–83.
- He, L.H. , Swain, M.V., 2007. Nanoindentation derived stress-strain properties of dental materials. dental Materials, vol. 23, n. 7, pp. 814 – 21.
- Quintela, B.M., 2011. Implementação computacional paralela da homogeneização por expansão assintótica para análise de problemas mecânicos em 3D. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação em modelagem computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora.

#### 4. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPEMIG, CAPES, CNPq e UFJF pelo apoio na forma de bolsas e financiamento de projetos de pesquisa.

Sabrina Mascarenhas Vargas, Flávia de Souza Bastos, Michèle Farage Cristina Resende e Estevam Barbosa de Las Casas.  
Modelagem Multi-escala do Bio Compósito Esmalte Dentário.

## 5. ABSTRACT

**Abstract.** *This work aims to use the 2D multi-scale modeling to determine the tensor of effective mechanical properties of dental enamel, through HEA2D program, which is based on the technique of asymptotic homogenization, applicable in periodic or repetitive structure. Program input data are geometrical and mechanical properties of the periodic cell and the output is the tensor of effective material properties. The program output data provided effective elastic tensor of the composite material. The study methodology was divided into stages: 1- We developed a geometric model representative of periodic cell enamel, similar in form and on the volume ratio of prism and matrix when compared to the in vivo structure; 2 was used to generate the program ABAQUS finite element mesh on the geometric model; 3- a subroutine was developed in Matlab to transcribe the data Abaqus input file to a compatible file HEA2D program; 4- HEA2D program was used to generate the values of homogenates of dental enamel modulus from enamel prism elastic modulus (114 GPa) and the organic matrix (0.5 GPa). Homogenates values of elastic modulus  $E1 = E2 = 40$  was calculated; 9 and  $E3 = 86$  GPa; 5 GPa consistent with experimental measurements in the literature. The identification of orthotropic characteristics of dental enamel is important for contact between tooth surfaces analysis*

**Keywords:** *multi-scale analysis, dental biomechanics, dental enamel.*

Os autores desse artigo são os únicos responsáveis pelas informações geradas.