

# Estimativa de parâmetros constitutivos da mecânica cardíaca em alta resolução com cálculo de gradientes via método adjunto

Jorge G. B. Tohalino<sup>1</sup>, Joventino O. Campos<sup>1</sup>, Rodrigo W. dos Santos<sup>1</sup>,  
Bernardo M. Rocha<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional  
– Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF) – Juiz de Fora – MG – Brazil

jorge.tohalino@estudante.ufjf.br, bernardomartinsrocha@ufjf.br

**Abstract.** *This work investigates the estimation of constitutive parameters of cardiac mechanics at high resolution, considering conditions such as dilated cardiomyopathy and myocardial fibrosis. The problem is formulated as an inverse problem to estimate a constitutive parameter of tissue stiffness using the adjoint method for the efficient calculation of the gradient cost functional. Different formulations of the data functional are evaluated, based on displacements and the deformation gradient tensor. Two synthetic scenarios are considered: one with a smooth distribution and another with a discontinuous stiffness distribution. The results indicate better performance when the data functional is based on the deformation gradient tensor. The regularization parameter controls the trade-off between data fit, solution smoothing, and computational cost.*

**Resumo.** *Este trabalho investiga a estimativa de parâmetros constitutivos da mecânica cardíaca em alta resolução, tendo em vista condições como a cardiomiopatia dilatada e na fibrose miocárdica. O problema é formulado como um problema inverso para estimar um parâmetro constitutivo da rigidez do tecido utilizando o método adjunto para o cálculo eficiente do gradiente do funcional custo. São avaliadas diferentes formulações do funcional de dados, baseadas nos deslocamentos e no tensor gradiente de deformação. Dois cenários sintéticos são considerados: um com distribuição suave e outro com distribuição descontínua da rigidez. Os resultados indicam melhor desempenho quando o funcional de dados é baseado no gradiente de deformação. O parâmetro de regularização controla o compromisso entre ajuste aos dados, suavização da solução e custo computacional.*

## 1. Introdução

As doenças cardiovasculares continuam sendo uma das principais causas de mortalidade em nível mundial. Entre elas, a cardiomiopatia dilatada caracteriza-se por uma dilatação progressiva do ventrículo esquerdo, acompanhada por uma diminuição da função contrátil e por importantes processos de remodelação estrutural do miocárdio [Imanaka-Yoshida 2020]. Essas alterações mecânicas e geométricas conduzem frequentemente à insuficiência cardíaca e a uma deterioração significativa da qualidade de vida do paciente.

Nos últimos anos, os modelos computacionais de mecânica e eletromecânica cardíaca têm emergido como ferramentas fundamentais para o estudo desse tipo de patologia, uma vez que permitem integrar informações clínicas, geométricas e biomecânicas em um arcabouço quantitativo. Em particular, [Campos et al. 2024, Campos et al. 2025] demonstraram o potencial da simulação computacional para analisar a atividade eletromecânica cardíaca em pacientes com cardiomiopatia dilatada, ressaltando sua utilidade para compreender os mecanismos subjacentes à disfunção ventricular e sua possível aplicação em cenários clínicos personalizados. Nesse contexto, o desenvolvimento de modelos mecânicos confiáveis e personalizados apresenta-se como um passo fundamental para avançar na compreensão da doença e para o projeto de ferramentas de apoio à tomada de decisão clínica.

Um dos principais processos patológicos associados à cardiomiopatia dilatada e a outras doenças cardíacas é a fibrose miocárdica. Esse fenômeno consiste em um acúmulo anômalo de colágeno no tecido cardíaco, o que provoca um aumento local da rigidez e uma alteração significativa do comportamento mecânico do miocárdio. Do ponto de vista biomecânico, a fibrose introduz heterogeneidades espaciais nas propriedades do tecido, afetando a transmissão de esforços e a capacidade de deformação do ventrículo.

Para que os modelos computacionais de mecânica cardíaca sejam clinicamente relevantes, é necessário que sejam personalizados em nível de paciente. Isso requer a estimativa de parâmetros constitutivos a partir de dados observacionais, como campos de deslocamento ou deformação obtidos por meio de técnicas de imagem médica [Balaban et al. 2016]. Esse processo é naturalmente formulado como um problema inverso, no qual se busca identificar os parâmetros do modelo que melhor reproduzem a resposta mecânica observada. Em particular, a estimativa de campos espaciais de rigidez permite capturar heterogeneidades mecânicas espaciais associadas à fibrose miocárdica, sendo essencial para representar de forma realista o estado mecânico do ventrículo.

Trabalhos anteriores apresentaram diferentes estratégias para estimar parâmetros de modelos constitutivos do tecido cardíaco [Campos et al. 2023]; entretanto, na maioria desses estudos, tais parâmetros são assumidos espacialmente constantes. O trabalho de [Balaban et al. 2016] demonstrou a viabilidade da estimativa precisa de parâmetros de modelos constitutivos cardíacos com alta resolução a partir de dados de imagens médicas, por meio da formulação de problemas de otimização baseados no método adjunto para o cálculo eficiente do gradiente. Em problemas inversos da mecânica cardíaca, a determinação do gradiente do funcional de custo em relação aos parâmetros do modelo é um aspecto central. Métodos baseados em diferenças finitas, embora conceitualmente simples, apresentam elevado custo computacional quando o número de parâmetros é grande, o que ocorre quando estima-se os parâmetros constitutivos localmente em cada elemento [Balaban et al. 2017]. Sendo assim, a sua aplicação em modelos de órgão completo ou na estimação de campos espaciais é limitada. Nesse contexto, o método adjunto destaca-se por permitir o cálculo do gradiente a partir da solução de um único problema adjunto, com custo computacional comparável ao de uma simulação direta e independente do número de parâmetros, sendo particularmente adequado para problemas de alta dimensão, como a estimativa de campos constitutivos distribuídos.

O objetivo deste trabalho é investigar diferentes formulações do funcional asso-

ciadas ao problema inverso da mecânica cardíaca, empregando o método adjunto para o cálculo eficiente de seu gradiente. São considerados dois casos sintéticos representativos de cenários de fibrose e de aumento da rigidez do material, nos quais a rigidez é prescrita com distribuições suaves e descontínuas, permitindo avaliar a robustez e a eficiência do método em ambas as situações.

## 2. Métodos

### 2.1. Cinemática de deformação

Seja  $\mathbf{X} \in \Omega_0$  a posição de um ponto material na configuração de referência  $\Omega_0$  e  $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X})$  a sua posição correspondente na configuração deformada  $\Omega$ . O campo de deslocamentos é definido como  $\mathbf{u}(\mathbf{X}) = \mathbf{x} - \mathbf{X}$ . O tensor gradiente de deformação é definido por [Lai et al. 2009]

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}, \quad (1)$$

o qual também pode ser escrito como  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}$ , onde  $\mathbf{I}$  denota o tensor identidade e  $\nabla \mathbf{u}$  representa o gradiente do deslocamento em relação à configuração de referência. Uma medida de deformação importante nesse contexto é o tensor de deformação de Green–Lagrange, o qual é definido como:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}). \quad (2)$$

A variação local de volume associada à deformação é medida pelo Jacobiano

$$J = \det(\mathbf{F}), \quad (3)$$

sendo que valores de  $J > 1$  indicam expansão volumétrica, enquanto  $J < 1$  correspondem a compressão. Para materiais incompressíveis ou quase incompressíveis, impõe-se aproximadamente  $J = 1$ .

Sejam  $\mathbf{f}_0$ ,  $\mathbf{s}_0$ , e  $\mathbf{n}_0$  os vetores unitários associados, respectivamente, às direções da fibra, transversal e normal (ou laminar). As componentes do tensor de deformação de Green–Lagrange nessa base são dadas por

$$E_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{E} \mathbf{e}_j), \quad i, j \in \{f, s, n\},$$

onde  $\mathbf{e}_f = \mathbf{f}_0$ ,  $\mathbf{e}_s = \mathbf{s}_0$  e  $\mathbf{e}_n = \mathbf{n}_0$ .

### 2.2. Equações governantes

A equação de equilíbrio mecânico, oriunda do balanço de momento linear, na configuração de referência é dada por:

$$\text{Div } \mathbf{P} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Omega_0, \quad (4)$$

onde  $\mathbf{P}$  é o primeiro tensor de tensões de Piola–Kirchhoff. Na base do ventrículo, são impostas condições de contorno essenciais de Dirichlet homogêneas, fixando completamente o deslocamento, isto é:  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  em  $\Gamma_{\text{base}}$ . Na superfície endocárdica, é aplicada uma condição de contorno natural de Neumann correspondente a uma pressão interna  $p_{\text{endo}}$ , responsável pelo enchimento passivo do ventrículo. Essa condição é expressa por

$$\mathbf{P} \mathbf{N} = -p_{\text{endo}} \mathbf{n} \quad \text{em } \Gamma_{\text{endo}},$$

onde  $\mathbf{P}$  é o tensor da relação (4),  $\mathbf{N}$  o vetor normal na configuração de referência e  $\mathbf{n}$  o vetor normal na configuração deformada.

### 2.3. Modelo constitutivo

O comportamento mecânico passivo do miocárdio é modelado por meio do modelo hiperelástico anisotrópico proposto por [Guccione et al. 1995]. O potencial de energia de deformação é definido como

$$\Psi = \frac{C}{2} (\exp(Q) - 1), \quad (5)$$

onde  $C > 0$  é um parâmetro material associado à rigidez do tecido, e  $Q$  é uma forma quadrática das componentes do tensor de deformação de Green–Lagrange projetadas sobre a base material das fibras. A função escalar  $Q$  é dada por

$$Q = b_f E_{11}^2 + b_t (E_{22}^2 + E_{33}^2 + 2E_{23}^2) + 2b_{ft} (E_{12}^2 + E_{13}^2),$$

onde  $E_{11}$  representa a deformação na direção da fibra;  $E_{22}$  e  $E_{33}$  correspondem às deformações nas direções transversal e normal;  $E_{12}$ ,  $E_{13}$  e  $E_{23}$  são componentes de cisalhamento;  $b_f$ ,  $b_t$  e  $b_{ft}$  são parâmetros adimensionais que controlam a anisotropia do material.

O primeiro tensor de tensões de Piola–Kirchhoff é obtido a partir do potencial hiperelástico da seguinte forma:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}}.$$

### 2.4. Geometria do ventrículo esquerdo e orientação de fibras

O ventrículo esquerdo (VE) foi representado através de uma geometria simplificada e idealizada como um elipsoide tridimensional truncado. Essa escolha é bastante comum em modelagem cardíaca, pois o elipsoide consegue reproduzir bem a forma global do ventrículo esquerdo real, que é alongado na direção longitudinal e mais estreito nas direções radiais.

A geometria representa apenas o miocárdio, isto é, a parede muscular do ventrículo, incluindo uma superfície interna (endocárdio) e uma superfície externa (epicárdio). A base do ventrículo é considerada plana e fixada, o que simula o acoplamento do coração com as estruturas superiores, enquanto o restante da geometria permanece livre para se deformar.

A Figura 1 apresenta a geometria idealizada do VE e a orientação de fibras associadas à malha computacional. As fibras musculares não possuem a mesma orientação em toda a espessura da parede ventricular. No modelo, essa variação é representada por um ângulo de fibra que muda gradualmente do endocárdio para o epicárdio. No endocárdio, as fibras apresentam um ângulo de aproximadamente  $+40^\circ$  em relação à direção circunferencial. Já no epicárdio, o ângulo é de aproximadamente  $-50^\circ$ . Entre essas duas superfícies, o ângulo varia de forma contínua ao longo da espessura da parede.

As dimensões do ventrículo são definidas pelos raios curto e longo do endocárdio,  $r_{\text{endo}}^{\text{short}}$  e  $r_{\text{endo}}^{\text{long}}$ , e pelos raios curto e longo do epicárdio,  $r_{\text{epi}}^{\text{short}}$  e  $r_{\text{epi}}^{\text{long}}$ , correspondentes, respectivamente, aos semieixos transversal e longitudinal do elipsoide. Assim, os raios característicos do ventrículo esquerdo utilizados neste trabalho são:  $r_{\text{epi}}^{\text{short}} = 10.0$  mm,  $r_{\text{epi}}^{\text{long}} = 20.0$  mm,  $r_{\text{endo}}^{\text{short}} = 7.0$  mm e  $r_{\text{endo}}^{\text{long}} = 17.0$  mm.

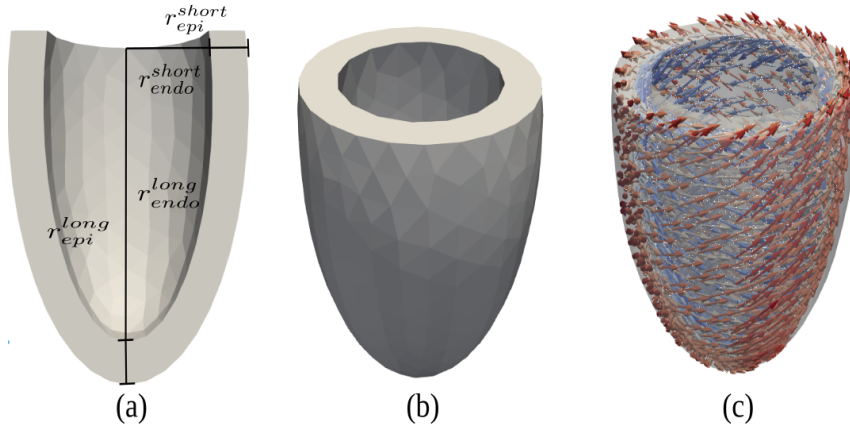


Figura 1. Medidas e geometria do ventrículo esquerdo; orientação das fibras.

## 2.5. Assimilação de dados

Considera-se o seguinte problema de otimização com restrição [Balaban et al. 2017, Balaban et al. 2016]:

$$\min_C J = \min_C (J_{\text{data}} + \alpha J_{\text{smooth}}), \quad (6)$$

onde  $J$  é o funcional custo,  $J_{\text{data}}$  a parte associada aos dados,  $J_{\text{smooth}}$  o termo de regularização, e  $C$  é o parâmetro constitutivo do modelo Guccione (5) a ser estimado. As seguintes opções para o termo  $J_{\text{data}}$  foram exploradas

$$J_{\text{data}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_d\|^2 dx, \quad \text{ou} \quad J_{\text{data}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \|\mathbf{F}_h - \mathbf{F}_d\|^2 dx, \quad (7)$$

enquanto que para o termo de regularização avaliou-se os seguintes:

$$J_{\text{smooth}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} C^2 dx, \quad \text{e} \quad J_{\text{smooth}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \|\nabla C\|^2 dx. \quad (8)$$

Isto é, para o termo de dados considerou-se o mesmo baseado no deslocamento ou no tensor gradiente de deformação, enquanto o termo de regularização foi considerado com base no parâmetro ou na norma do seu gradiente.

O problema de minimização (6) é sujeito à seguinte restrição de equação de estado:

$$F(c, u) = 0, \quad (9)$$

onde  $F$  denota o operador residual associado à forma fraca do modelo mecânico definido na Equação (4) e  $c$  é algum parâmetro. No que segue, usa-se  $c$  para representar o parâmetro constitutivo  $C$  do modelo Guccione.

## 2.6. Cálculo do gradiente pelo método adjunto

O cálculo do gradiente durante o procedimento de otimização definido na Equação (6) representa um dos maiores desafios computacionais do problema. A abordagem adjunta representa uma forma eficiente de se calcular o gradiente do funcional custo sujeito a restrições baseadas em EDPs [Hinze et al. 2008]. Para isso, é introduzida a seguinte função lagrangiana:

$$\mathcal{L}(c, u, \lambda) := J(c, u) + \lambda F(c, u), \quad (10)$$

onde  $\lambda$  é o multiplicador de Lagrange associado à restrição imposta por  $F(c, u)$ . Omitindo os argumentos das funções para maior clareza, a derivada total da lagrangiana em relação ao parâmetro  $c$  pode ser escrita como [Commandeur et al. 2025]

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}}{dc} &= \frac{dJ}{dc} + \frac{d}{dc}(\lambda F), \\ &= \frac{\partial J}{\partial u} \frac{du}{dc} + \frac{\partial J}{\partial c} + \frac{d\lambda}{dc} F + \lambda \left( \frac{\partial F}{\partial u} \frac{du}{dc} + \frac{\partial F}{\partial c} \right), \\ &= \left( \frac{\partial J}{\partial u} + \lambda \frac{\partial F}{\partial u} \right) \frac{du}{dc} + \lambda \frac{\partial F}{\partial c} + \frac{\partial J}{\partial c},\end{aligned}\tag{11}$$

O multiplicador de Lagrange  $\lambda$  pode ser escolhido livremente. Para tanto, este é determinado tal que o termo proporcional a  $\frac{du}{dc}$  seja nulo, isto é:

$$\frac{\partial J}{\partial u} + \lambda \frac{\partial F}{\partial u} = 0,\tag{12}$$

agora, considerando a definição de operador adjunto [Hinze et al. 2008], temos a equação adjunta dada por:

$$\frac{\partial F^*}{\partial u} \lambda = -\frac{\partial J}{\partial u},\tag{13}$$

cuja solução fornece  $\lambda$ . Finalmente, o primeiro termo na Equação (11) é anulado, usando a Equação (12). A derivada da lagrangiana pode ser obtida resolvendo (14) como segue:

$$\frac{d\mathcal{L}(c, u, \lambda)}{dc} = \lambda \frac{\partial F}{\partial c} + \frac{\partial J}{\partial c}.\tag{14}$$

Dessa maneira, evita-se o cálculo direto do termo  $\frac{du}{dc}$  para se obter o gradiente do funcional, uma vez que, em problemas com um grande número de variáveis, esse termo se torna muito caro computacionalmente.

## 2.7. Implementação computacional

O problema de otimização foi resolvido utilizando o método L-BFGS-B através da interface disponível pela biblioteca `SciPy` da linguagem de programação Python. A cada iteração do método, uma ou mais avaliações do funcional são realizadas, bem como do gradiente do funcional. Para isso, a cada passo o problema direto e a equação adjunta são resolvidos usando a biblioteca de elementos finitos `FEniCSx`. A equação adjunta foi obtida simbolicamente usando o método `adjoint` da biblioteca `UFL` do `FEniCSx`, a partir da definição da equação de estado.

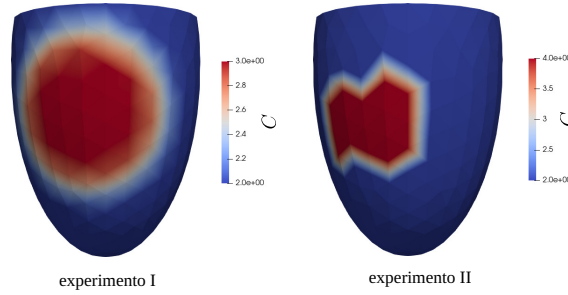
Todas as otimizações foram realizadas até que fosse atingida uma tolerância absoluta de  $10^{-6}$  na norma do gradiente do funcional. Os experimentos computacionais deste trabalho foram executados em uma máquina equipada com processador 12th Gen Intel Core i7-1255U e um total de 7,4 GiB de memória RAM, rodando o sistema operacional Linux (Ubuntu 20.04.6 LTS).

### 3. Resultados

#### 3.1. Descrição dos experimentos

Foram realizados dois experimentos computacionais para estimar os parâmetros constitutivos do modelo de Guccione durante uma simulação de inflação passiva do ventrículo esquerdo. Ambos os casos consideram uma caracterização elástica heterogênea no tecido cardíaco.

O primeiro exemplo considera um campo suave para o parâmetro  $C$  do modelo Guccione, enquanto o segundo caso considera uma representação descontínua para a sua distribuição espacial sendo dada por uma região da divisão do VE em 17 segmentos baseados no diagrama da American Heart Association (AHA). A Figura 2 ilustra as configurações adotadas para os experimentos I e II realizados.



**Figura 2. Configuração verdadeira (*ground-truth*) do parâmetro constitutivo  $C$  para os experimentos I (suave) e II (descontínua).**

Para o experimento I a seguinte função foi usada para representar a rigidez do tecido:

$$C(\mathbf{x}) = \begin{cases} c_{\text{center}}, & r(\mathbf{x}) \leq r_0, \\ c_{\text{far}}, & r(\mathbf{x}) \geq r_1, \\ c_{\text{far}} + (c_{\text{center}} - c_{\text{far}}) S\left(\frac{r_1 - r(\mathbf{x})}{r_1 - r_0}\right), & r_0 < r(\mathbf{x}) < r_1. \end{cases} \quad (15)$$

sendo que  $r(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_c\|_2$ , e  $S(t) = 3t^2 - 2t^3$ ,  $t \in [0, 1]$ , onde  $\mathbf{x}_c = (-5, -2, -9)$ ,  $c_{\text{center}} = 3$ ,  $c_{\text{far}} = 2$ ,  $r_0 = 5$ ,  $r_1 = 10$ . Ou seja, o coeficiente  $C$  é definido de forma suave, assumindo o valor 3 no interior da região de interesse e tendendo ao valor 2 no exterior, com uma transição contínua entre essas duas regiões.

Para o experimento II, a região correspondente ao bloco (segmento) de número 12 da divisão em 17 blocos do VE foi considerada com  $C = 3$ , enquanto para o restante do domínio foi assumido  $C = 2$ .

#### 3.2. Experimento I: parâmetro elástico distribuído e suave

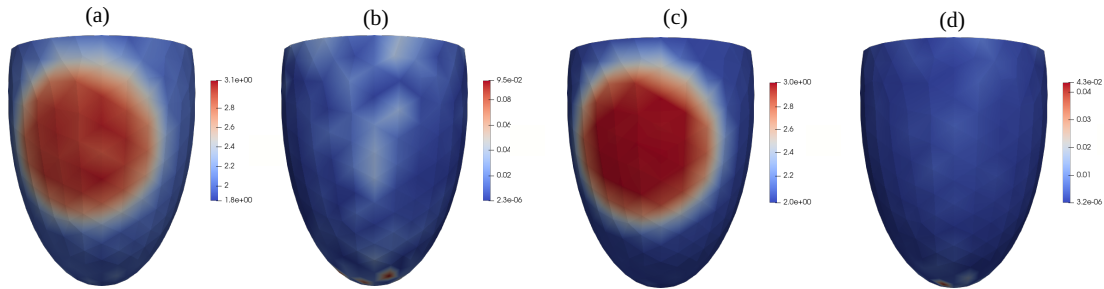
Inicialmente, foram avaliadas diferentes formulações do funcional objetivo, conforme descritas nas Equações (7) e (8), para distintos valores do parâmetro de regularização  $\alpha$ . Os resultados correspondentes ao Experimento I (caso suave) são apresentados na Tabela 1. Observa-se que a formulação do funcional de dados baseada no campo de deslocamentos converge, em geral, em um número menor de iterações; entretanto, apresenta

erros relativos máximos superiores a 10% na maioria dos casos analisados. Em contrapartida, quando o funcional de dados é definido a partir do tensor gradiente de deformação, obtêm-se erros relativos significativamente menores, ao custo de um aumento no número de iterações, o qual depende do valor adotado para o parâmetro de regularização. Esses resultados evidenciam o compromisso entre precisão e custo computacional inerente à escolha da formulação do funcional objetivo e do termo de regularização.

**Tabela 1. Erro relativo máximo e número de iterações para diferentes escolhas de termos do funcional objetivo e diferentes valores de  $\alpha$  para o experimento I (caso suave).**

$J_{\text{data}}$	$J_{\text{smooth}}$	$\alpha$	$\max e_{\text{rel}}$	$n_{\text{its}}$
	$C$	$10^{-2}$	$3.8272 \times 10^{-1}$	24
		$10^{-3}$	$4.7921 \times 10^{-1}$	24
		$10^{-4}$	$4.4074 \times 10^{-1}$	47
$\mathbf{u}$	$\nabla C$	$10^{-2}$	$7.3019 \times 10^{-2}$	31
		$10^{-3}$	$4.1479 \times 10^{-2}$	110
		$10^{-4}$	$1.9693 \times 10^{-1}$	81
	$C$	$10^{-2}$	$1.4873 \times 10^{-1}$	71
		$10^{-3}$	$9.5154 \times 10^{-2}$	112
		$10^{-4}$	$5.7153 \times 10^{-2}$	253
$\mathbf{F}$	$\nabla C$	$10^{-2}$	$1.9984 \times 10^{-2}$	151
		$10^{-3}$	$4.3385 \times 10^{-2}$	226
		$10^{-4}$	$6.8035 \times 10^{-2}$	200

Os resultados correspondentes ao caso em que o funcional de dados é baseado no tensor gradiente de deformação, considerando ambas as escolhas para o termo de regularização, são apresentados na Figura 3. Observa-se uma boa concordância entre os valores estimados e os valores de referência (ver Figura 2), bem como a capacidade da metodologia proposta em identificar corretamente as regionalidades associadas à rigidez do material, evidenciando a adequada recuperação do padrão espacial do parâmetro estimado.



**Figura 3. Resultados do parâmetro estimado e do erro relativo no Experimento I: (a)-(b) funcional com  $\mathbf{F}$  e  $C$ ; (c)-(d) funcional com  $\mathbf{F}$  e  $\nabla C$ ;  $\alpha = 10^{-3}$ .**

Por fim, o efeito de uma ampla escolha de valores do parâmetro de regularização é

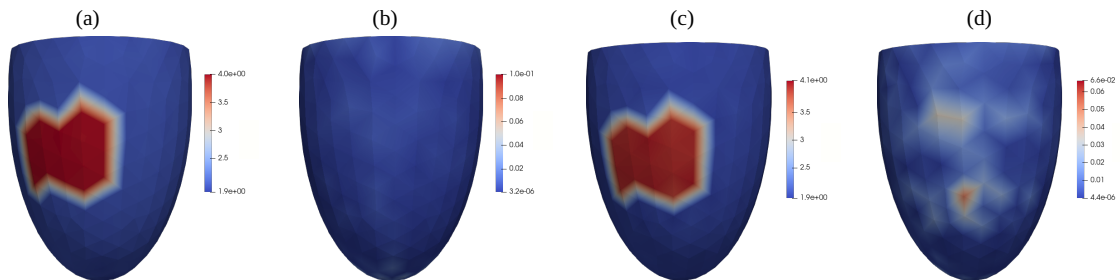
avaliada em cada termo do funcional objetivo (dados e regularização), conforme apresentado na Tabela 2. Os resultados referem-se ao Experimento I, considerando o funcional de dados definido a partir de  $\mathbf{F}$  e o termo de regularização baseado em  $\nabla C$ . Pode-se notar valores pequenos de  $\alpha$  privilegiam a minimização do termo de dados, enquanto valores elevados intensificam a influência do termo de regularização, resultando em soluções mais suaves e em um menor número de iterações.

**Tabela 2. Valores dos funcionais e número de iterações ( $n_{its}$ ) no experimento I para diferentes valores de  $\alpha$  com o funcional definido por  $\mathbf{F}$  e  $\nabla C$ .**

$\alpha$	$J_{data}$	$J_{smooth}$	$J$	$n_{its}$
0	$2.5760 \times 10^{-6}$	$9.7771 \times 10^{-3}$	$2.5760 \times 10^{-6}$	134
$10^{-3}$	$1.2198 \times 10^{-7}$	$8.8904 \times 10^{-3}$	$9.0124 \times 10^{-6}$	226
$10^{-2}$	$6.5234 \times 10^{-7}$	$8.7329 \times 10^{-3}$	$8.7981 \times 10^{-5}$	151
$10^{-1}$	$1.6664 \times 10^{-5}$	$8.4010 \times 10^{-3}$	$8.5676 \times 10^{-4}$	94
1	$4.4632 \times 10^{-4}$	$7.5014 \times 10^{-3}$	$7.9477 \times 10^{-3}$	44
10	$1.1930 \times 10^{-2}$	$4.9757 \times 10^{-3}$	$6.1687 \times 10^{-2}$	28
$10^2$	$1.6585 \times 10^{-1}$	$1.5306 \times 10^{-3}$	$3.1891 \times 10^{-1}$	23
$10^3$	$6.7514 \times 10^{-1}$	$2.6963 \times 10^{-4}$	$9.4477 \times 10^{-1}$	24

### 3.3. Experimento II: parâmetro elástico distribuído e descontínuo

O experimento II representa um cenário mais desafiador no qual a distribuição espacial do parâmetro  $C$  não é suave. Seguindo a análise prévia, aqui utilizou-se apenas do funcional de dados em termos do tensor gradiente de deformação. Os resultados para  $\alpha = 10^{-3}$  e diferentes escolhas do termo de regularização são mostradas na Figura 4. Em ambas as figuras, observa-se que o método é capaz de identificar a região de maior rigidez, reproduzindo de forma qualitativa a localização e o contraste do parâmetro verdadeiro. Para o mesmo valor de  $\alpha$ , o erro relativo máximo obtido com o termo de regularização baseado em  $\nabla C$  é menor (ver escala de cores da figura).



**Figura 4. Resultados do parâmetro estimado e do erro relativo no Experimento II: (a)-(b) funcional com  $\mathbf{F}$  e  $C$ ; (c)-(d) funcional com  $\mathbf{F}$  e  $\nabla C$ ;  $\alpha = 10^{-3}$ .**

A Tabela 3 apresenta os valores dos diferentes termos do funcional objetivo e do número de iterações necessárias para a convergência no Experimento II, considerando o funcional de dados definido a partir de  $\mathbf{F}$  e o termo de regularização baseado em  $\nabla C$ . Observa-se que, para valores pequenos de  $\alpha$ , o termo de dados  $J_{data}$  é fortemente minimizado, ao custo de um aumento significativo no número de iterações, refletindo o caráter

mais mal condicionado do problema quando a regularização é enfraquecida. À medida que  $\alpha$  aumenta, verifica-se uma redução progressiva do termo de regularização  $J_{\text{smooth}}$ , acompanhada por um aumento de  $J_{\text{data}}$ , evidenciando o compromisso entre ajuste aos dados e suavização da solução.

Quanto ao desempenho computacional, avaliado através do número de iterações, nota-se uma diminuição expressiva deste para valores maiores de  $\alpha$ , indicando uma melhoria nas propriedades numéricas do problema. Para valores muito elevados de  $\alpha$ , embora o número de iterações permaneça relativamente baixo, o funcional total passa a ser dominado pelo termo de dados, resultando em soluções excessivamente suavizadas e com menor fidelidade à distribuição verdadeira do parâmetro.

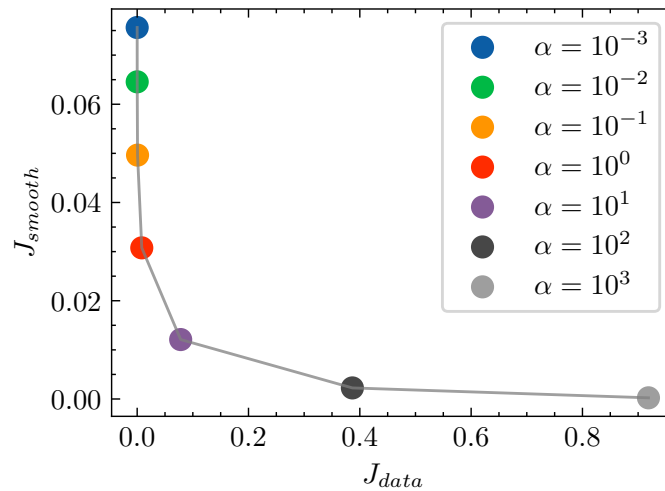
**Tabela 3. Valores dos funcionais e número de iterações ( $n_{\text{its}}$ ) no experimento II para diferentes valores de  $\alpha$  com o funcional definido por  $F$  e  $\nabla C$ .**

$\alpha$	$J_{\text{data}}$	$J_{\text{smooth}}$	$J$	$n_{\text{its}}$
0	$2.0852 \times 10^{-7}$	$7.9739 \times 10^{-2}$	$2.0852 \times 10^{-7}$	348
$10^{-3}$	$2.0812 \times 10^{-6}$	$7.5620 \times 10^{-2}$	$7.7701 \times 10^{-5}$	277
$10^{-2}$	$5.0136 \times 10^{-5}$	$6.4561 \times 10^{-2}$	$6.9575 \times 10^{-4}$	145
$10^{-1}$	$6.6493 \times 10^{-4}$	$4.9643 \times 10^{-2}$	$5.6292 \times 10^{-3}$	82
1	$8.2721 \times 10^{-3}$	$3.0765 \times 10^{-2}$	$3.9037 \times 10^{-2}$	39
10	$7.8151 \times 10^{-2}$	$1.2099 \times 10^{-2}$	$1.9915 \times 10^{-1}$	26
$10^2$	$3.8663 \times 10^{-1}$	$2.2533 \times 10^{-3}$	$6.1196 \times 10^{-1}$	32
$10^3$	$9.1860 \times 10^{-1}$	$2.3921 \times 10^{-4}$	$11.578 \times 10^{-1}$	68

Esses resultados reforçam a importância de uma escolha criteriosa do parâmetro de regularização, especialmente em cenários com descontinuidades, como o considerado neste experimento. Sendo assim, o critério definido por [Hansen and O’Leary 1993] pode ser usado para escolher  $\alpha$  que equilibre um compromisso entre ajuste aos dados e regularização e, conseqüentemente, desempenho computacional. A Figura 5 apresenta os valores dos termos do funcional objetivo para diferentes valores de  $\alpha$ , ilustrando a transição entre regimes dominados pelo ajuste aos dados e pela regularização, o que fornece subsídios para a seleção de um valor adequado do parâmetro de regularização.

#### 4. Conclusões

Neste trabalho, investigou-se a formulação de problemas inversos em mecânica cardíaca com foco na estimativa de parâmetros constitutivos distribuídos do miocárdio, empregando o método adjunto para o cálculo eficiente do gradiente. Foram analisadas diferentes combinações para o funcional de dados e para o termo de regularização, bem como o impacto do parâmetro de regularização  $\alpha$ , em dois cenários sintéticos representativos: um caso com distribuição suave de rigidez e outro com descontinuidades espaciais associadas a regiões fibróticas. Os resultados demonstram que a formulação baseada no tensor gradiente de deformação é mais informativa do ponto de vista mecânico, permitindo uma recuperação mais precisa do padrão espacial do parâmetro constitutivo quando comparada à formulação baseada apenas nos deslocamentos. Por outro lado, destaca-se que a formulação baseada nos deslocamentos pode ser uma alternativa computacional interessante para problemas com malhas muito grandes e refinadas, como é o caso em problemas com os dois ventrículos (direito e esquerdo).



**Figura 5. Relação do funcional de dados e de regularização para diferentes valores de  $\alpha$ .**

A análise numérica evidenciou ainda o papel central do termo de regularização na estabilidade e no desempenho computacional do problema inverso. Valores pequenos de  $\alpha$  favorecem um ajuste mais fiel aos dados, porém conduzem a problemas mais mal condicionados e a um aumento significativo no número de iterações necessárias para a convergência, especialmente no caso descontínuo. Por outro lado, valores elevados de  $\alpha$  resultam em soluções excessivamente suavizadas, com perda de contraste e de fidelidade em relação à distribuição verdadeira do parâmetro. Esses resultados reforçam a existência de um compromisso intrínseco entre ajuste aos dados, suavização da solução e custo computacional, particularmente relevante em problemas de alta dimensão.

Apesar dos resultados iniciais promissores, este estudo apresenta algumas limitações que devem ser destacadas. O modelo constitutivo adotado baseia-se na formulação de Guccione, enquanto modelos mais recentes e amplamente utilizados na literatura, como o de Holzapfel–Ogden, oferecem uma descrição mais refinada do comportamento anisotrópico do tecido cardíaco. Além disso, os experimentos foram conduzidos exclusivamente com dados sintéticos; a aplicação da metodologia a dados provenientes de pacientes constitui um passo essencial para avaliar sua robustez em cenários clínicos realistas. Do ponto de vista geométrico e funcional, considerou-se apenas o ventrículo esquerdo e exclusivamente a fase de enchimento passivo, o que limita a generalização dos resultados. Extensões naturais deste trabalho incluem a modelagem biventricular, a incorporação das fases ativas do ciclo cardíaco e a utilização de dados clínicos, visando uma representação mais completa e fisiologicamente realista da mecânica cardíaca.

## Referências

- Balaban, G., Alnæs, M. S., Sundnes, J., and Rognes, M. E. (2016). Adjoint multi-start-based estimation of cardiac hyperelastic material parameters using shear data. *Biomechanics and modeling in mechanobiology*, 15(6):1509–1521.
- Balaban, G., Finsberg, H., Odland, H. H., Rognes, M. E., Ross, S., Sundnes, J., and Wall, S. (2017). High-resolution data assimilation of cardiac mechanics applied to a

- dyssynchronous ventricle. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, 33(11):e2863.
- Campos, J. O., Almeida, D. K., Schmal, T. R., Vasconcelos, M. C., dos Santos, R. W., and Rocha, B. M. (2025). Personalized cardiac mechanics simulations of a patient with non-ischemic dilated cardiomyopathy.
- Campos, J. O. et al. (2024). Simulação computacional da atividade eletromecânica cardíaca de paciente com cardiomiopatia dilatada. In *Proceedings of the XXIX Congresso Brasileiro de Engenharia Biomédica (CBEB)*.
- Campos, J. O., Guedes, R. M., Werneck, Y. B., Barra, L. P. S., dos Santos, R. W., and Rocha, B. M. (2023). Polynomial chaos expansion surrogate modeling of passive cardiac mechanics using the holzapfel–ogden constitutive model. *Journal of Computational Science*, 71:102039.
- Commandeur, C., Stolk, C. C., Sprik, R., and Louwerse, G. (2025). Inversion of impact-echo data using a shape optimization approach. *Optimization and Engineering*, pages 1–28.
- Guccione, J. M., Costa, K. D., and McCulloch, A. D. (1995). Finite element stress analysis of left ventricular mechanics in the beating dog heart. *Journal of biomechanics*, 28(10):1167–1177.
- Hansen, P. C. and O’Leary, D. P. (1993). The use of the l-curve in the regularization of discrete ill-posed problems. *SIAM journal on scientific computing*, 14(6):1487–1503.
- Hinze, M., Pinnau, R., Ulbrich, M., and Ulbrich, S. (2008). *Optimization with PDE constraints*, volume 23. Springer Science & Business Media.
- Imanaka-Yoshida, K. (2020). Inflammation in myocardial disease: From myocarditis to dilated cardiomyopathy. *Pathology international*, 70(1):1–11.
- Lai, W. M., Rubin, D., and Krempl, E. (2009). *Introduction to continuum mechanics*. Butterworth-Heinemann.