

CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO ELÁSTICO DEL HUESO TRABECULAR HACIENDO USO DE LA TRANSFORMADA RÁPIDA DE FOURIER

Lucas Colabella y Adrián Cisilino

Facultad de Ingeniería - INTEMA, Universidad Nacional de Mar del Plata – CONICET. Av. Juan B. Justo 4302, 7600 Mar del Plata, Argentina, <http://www.intema.gov.ar> lcolabella@fi.mdp.edu.

Palabras clave: homogenización asintótica

Resumen. Durante las últimas décadas, el empleo de prótesis para el remplazo de articulaciones se ha convertido en una práctica habitual de la cirugía ortopédica. La fijación de las prótesis al hueso es uno de los mayores problemas en el diseño de implantes. En muchos casos, esto es consecuencia del deterioro mecánico de la fijación debido al llamado proceso de adaptación o remodelado del tejido óseo. Este proceso permite al hueso completar sus funciones estructurales y metabólicas. El remodelado del hueso durante la adultez lleva a la reparación del daño y el mantenimiento de la integridad estructural del esqueleto. Las teorías de remodelado actuales consideran que algún tipo de estímulo es responsable de la composición, forma y densidad de la estructura ósea.

En el marco del desarrollo de las herramientas numéricas necesarias para el análisis mecánico multiescala del proceso de remodelado, se presenta en este trabajo la aplicación de un método computacional para homogenizar el comportamiento elástico anisótropo del hueso trabecular.

Se utiliza un método numérico iterativo basado en la transformada rápida de Fourier propuesto por Moulinec y Souquet (2001 – A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 52, pp. 139-160), como una alternativa al método de elementos finitos. El método está basado en la expresión exacta de la función de Green para un material lineal elástico. En el caso de fases lineales elásticas, el problema es reducido a una ecuación integral, la cual es resuelta iterativamente.

El algoritmo se implementó en C y se programó en paralelo haciendo uso de OpenMP. Con esto se logra una disminución significativa del costo computacional. La estructura del hueso trabecular fue obtenida mediante imágenes de micro-tomografía computada (microTC) segmentadas y binarizadas. Los resultados del proceso de homogenización son verificados comparando con los resultados obtenidos por Ibarra Pino y Cisilino (2011 - Estimación del Comportamiento Elástico Aparente del Hueso Trabecular mediante Métodos de Homogenización. *Mecánica Computacional*, vol. 30, págs. 3413-3430) utilizando el método de homogenización asintótica implementado en el entorno de Matlab, el cual se vale del método de elementos finitos.

1 INTRODUCCIÓN

Es extremadamente difícil analizar estructuras tales como la del hueso trabecular, incluyendo cada microestructura individual, debido al alto grado de heterogeneidad del material. Una manera de superar esta dificultad es encontrando un modelo de material equivalente con el cual no sea necesario representar cada microestructura individual. Este modelo debe caracterizar el comportamiento promedio del material así como también representar el efecto de las heterogeneidades del material.

En la teoría de homogenización usualmente se asume que el material compuesto está localmente formado por la repetición espacial de microestructuras muy pequeñas, celdas microscópicas cuando se las compara con las dimensiones macroscópicas de la estructura de interés. En otras palabras, se asume que las propiedades del material son funciones periódicas de la variable microscópica, donde el periodo es muy pequeño comparado con la variable macroscópica. Esta suposición permite el cálculo de las propiedades equivalentes del material por un proceso de límite cuando el tamaño de la celda microscópica es reducido a cero.

El método de homogenización es ventajoso ya que se basa sobre una teoría matemática rigurosa. También puede proveer soluciones razonables para algunos problemas donde los datos experimentales no están disponibles, o para los cuales solo se pueden obtener límites de las constantes equivalentes del material mediante otras teorías.

El proceso de homogenización requiere de la solución del campo de tensiones y deformaciones en la celda unitaria para seis casos de carga: tres tracciones longitudinales y tres cortes. Con este objetivo [Moulinec y Souquet \(1998\)](#) propusieron un método numérico iterativo basado en la transformada rápida de Fourier (FFT) para investigar las propiedades efectivas de materiales compuestos con microestructuras complejas así como también sus respuestas locales. Este método hace uso directo de imágenes digitales de la microestructura global del compuesto. Está basado en la expresión exacta de la función de Green para un material homogéneo lineal elástico. En el caso de fases lineal-elásticas, el problema se reduce a una ecuación integral (la ecuación de Lippman-Schwinger), la cual es resuelta iterativamente. La tasa de convergencia del método está directamente relacionada con el contraste entre las fases. Cuando se tiene fases lineales, el número de iteraciones necesario para alcanzar la convergencia varía linealmente con el contraste elástico, es decir, aproximadamente la relación entre los módulos elásticos de las fases.

Se propone en este trabajo aplicar el método basado en la FFT de [Moulinec y Souquet \(1998\)](#) a la homogenización del comportamiento elástico del tejido óseo trabecular y comparar su desempeño con resultados de elementos finitos. Según el conocimiento de los autores, no existen antecedentes sobre la utilización del método de la FFT con este propósito.

2 FORMULACIÓN DEL MÉTODO BASADO EN LA FFT

2.1 Volumen representativo y condiciones periódicas

El comportamiento global de un compuesto es gobernado por el comportamiento individual de sus constituyentes y su microestructura. Su respuesta efectiva a una deformación macroscópica prescrita puede ser determinada numéricamente a través de la resolución del así denominado “problema local” en un elemento de volumen representativo (RVE). En este trabajo, la información representativa de la microestructura es provista por una imagen (micrografía) de la microestructura con una complejidad arbitraria. La imagen contiene N píxeles, a los cuales son asignadas propiedades mecánicas independientes. La mayor parte de las aplicaciones involucran solo un número limitado de fases, aunque en principio cada píxel puede ser considerado como un constituyente diferente. El problema local consiste de

ecuaciones de equilibrio, ecuaciones constitutivas, y condiciones de contorno e interface. Se considera que todas las fases se encuentran perfectamente unidas (los desplazamientos son continuos y las tracciones se encuentran en equilibrio en las interfaces). El problema se cierra eligiendo condiciones de contorno periódicas. El campo de deformaciones local $\varepsilon_\mu(u_\mu(x))$ es dividido en su promedio ε y un término de fluctuación $\varepsilon_\mu(u_\mu^*(x))$:

$$\varepsilon_\mu(u_\mu(x)) = \varepsilon_\mu(u_\mu^*(x)) + \varepsilon, \quad (1)$$

o de manera equivalente

$$u_\mu(x) = u_\mu^*(x) + \varepsilon \cdot x. \quad (2)$$

Al utilizar condiciones de contorno periódicas se asume que el término de fluctuación u_μ^* es periódico (notación: $u_\mu^* \#$), y que la fuerza de tracción $\sigma_\mu \cdot n$ es anti-periódica a fin de satisfacer las ecuaciones de equilibrio entre dos celdas vecinas (notación: $\sigma_\mu \cdot n - \#$).

2.2 Problema auxiliar

Primero, se considera el problema preliminar de un cuerpo lineal elástico homogéneo con una rigidez \mathbb{C}^0 sometido a un campo de polarización $\tau(x)$.

$$\begin{cases} \sigma(x) = \mathbb{C}^0 : \varepsilon_\mu(u_\mu^*(x)) + \tau(x) & \forall x \in V \\ \text{div } \sigma_\mu(x) = 0 & \forall x \in V, u_\mu^* \#, \sigma_\mu \cdot n - \# \end{cases} \quad (3)$$

La solución de (3) puede ser expresada en los espacios real y de Fourier, respectivamente, haciendo uso del operador de Green Γ^0 asociado con \mathbb{C}^0 :

$$\varepsilon_\mu(u_\mu^*(x)) = -\Gamma^0 * \tau(x) \quad \forall x \in V, \quad (4)$$

o

$$\hat{\varepsilon}_\mu(u_\mu^*(x)) = -\hat{\Gamma}^0(\xi) : \hat{\tau}(\xi) \quad \forall \xi \neq 0, \hat{\varepsilon}_\mu(0) = 0. \quad (5)$$

donde el operador $*$ indica la convolución entre dos funciones.

El operador Γ^0 es conocido explícitamente en el espacio de Fourier. Cuando el material de referencia es isotrópico (con coeficientes de Lamé λ^0 y μ^0) toma la forma:

$$\hat{\Gamma}_{ijkl}^0(\xi) = \frac{1}{4\mu^0|\xi|^2} (\delta_{ki}\xi_h\xi_j + \delta_{hi}\xi_k\xi_j + \delta_{kj}\xi_h\xi_i + \delta_{hj}\xi_k\xi_i) - \frac{\lambda^0 + \mu^0}{\mu^0(\lambda^0 + 2\mu^0)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_h}{|\xi|^4}. \quad (6)$$

2.3 La ecuación periódica de Lippman-Schwinger

El problema auxiliar puede ser usado para resolver el problema de un material compuesto lineal heterogéneo con rigidez $c(x)$ en el punto x sometido a una deformación prescrita $\bar{\varepsilon}$:

$$\begin{cases} \sigma_\mu(x) = \mathbb{C}_\mu(x) : \varepsilon_\mu(u_\mu^*(x)) + \varepsilon & \forall x \in V \\ \text{div } \sigma_\mu(x) = 0 & \forall x \in V, u_\mu^* \#, \sigma_\mu \cdot n - \# \end{cases} \quad (7)$$

Con este propósito se introduce un material de referencia homogéneo con una rigidez \mathbb{C}^0 y un tensor de polarización $\tau(x)$, el cual no se conoce a priori, definido como:

$$\tau(x) = \delta \mathbb{C}_\mu(x) : \varepsilon_\mu(u_\mu(x)), \quad \delta \mathbb{C}_\mu(x) = \mathbb{C}_\mu(x) - \mathbb{C}^0. \quad (8)$$

De este modo, el problema se reduce a la ecuación de Lippman-Schwinger, la cual se define en el espacio real y el espacio de Fourier respectivamente como:

$$\begin{cases} \varepsilon_\mu(u_\mu(x)) = -\Gamma^0 * \tau(x) + \varepsilon \\ \hat{\varepsilon}_\mu(\xi) = -\hat{\Gamma}^0(\xi): \hat{\tau}(\xi) \quad \forall \xi \neq 0, \quad \hat{\varepsilon}_\mu(0) = 0, \end{cases} \quad (9)$$

donde τ esta dado por (8).

2.4 Algoritmo

El principio del algoritmo se basa en usar alternativamente (8) y (9), en el espacio real y de Fourier, respectivamente, en un esquema iterativo, para resolver (7):

$$\begin{aligned} \text{Inicialización: } & \varepsilon_\mu^0(x) = \varepsilon, \quad \forall x \in V \\ & \sigma_\mu^0(x) = \mathbb{C}_\mu(x): \varepsilon_\mu^0(x), \quad \forall x \in V \\ \text{Iteración } i + 1 & \quad \varepsilon_\mu^i \text{ y } \sigma_\mu^i \text{ conocidos} \\ & (a) \quad \tau^i(x) = \sigma_\mu^i(x) - \mathbb{C}^0: \varepsilon_\mu^i(x) \\ & (b) \quad \hat{\tau}^i = \mathcal{F}(\tau^i) \\ & (c) \quad \text{Test de convergencia} \\ & (d) \quad \hat{\varepsilon}_\mu^{i+1}(\xi) = -\hat{\Gamma}^0(\xi): \hat{\tau}^i(\xi) \quad \forall \xi \neq 0, \quad \hat{\varepsilon}_\mu^{i+1}(0) = \varepsilon \\ & (e) \quad \varepsilon_\mu^{i+1} = \mathcal{F}^{-1}(\hat{\varepsilon}_\mu^{i+1}) \\ & (f) \quad \sigma_\mu^{i+1}(x) = \mathbb{C}_\mu(x): \varepsilon_\mu^{i+1}(x) \end{aligned} \quad (10)$$

\mathcal{F} y \mathcal{F}^{-1} denotan la transformada de Fourier y la transformada inversa de Fourier. El algoritmo se puede simplificar notando que:

$$\Gamma^0 * (\mathbb{C}^0: \varepsilon_\mu) = \varepsilon_\mu \quad (11)$$

El algoritmo modificado queda:

$$\begin{aligned} \text{Inicialización: } & \varepsilon_\mu^0(x) = \varepsilon, \quad \forall x \in V \\ & \sigma_\mu^0(x) = \mathbb{C}_\mu(x): \varepsilon_\mu^0(x), \quad \forall x \in V \\ \text{Iteración } i + 1 & \quad \varepsilon_\mu^i \text{ y } \sigma_\mu^i \text{ conocidos} \\ & (a) \quad \hat{\sigma}_\mu^i = \mathcal{F}(\sigma_\mu^i) \\ & (b) \quad \text{Test de convergencia} \\ & (c) \quad \hat{\varepsilon}_\mu^{i+1}(\xi) = \hat{\varepsilon}_\mu^i(\xi) - \hat{\Gamma}^0(\xi): \hat{\sigma}_\mu^i(\xi) \quad \forall \xi \neq 0, \quad \hat{\varepsilon}_\mu^{i+1}(0) = \varepsilon \\ & (d) \quad \varepsilon_\mu^{i+1} = \mathcal{F}^{-1}(\hat{\varepsilon}_\mu^{i+1}) \\ & (e) \quad \sigma_\mu^{i+1}(x) = \mathbb{C}_\mu(x): \varepsilon_\mu^{i+1}(x), \quad \forall x \in V \end{aligned} \quad (12)$$

La convergencia se alcanza cuando σ_μ^{i+1} está en equilibrio.

2.5 Esquema basado en el campo de polarización

Cuando una fase es un hueco o una fase rígida, el contraste del material compuesto es infinito. En estas condiciones, la convergencia del esquema básico (12) no está asegurada. Para superar este problema se empleará en este trabajo un esquema introducido por [Monchiet y Bonnet \(2012\)](#), el cual hace uso de un campo de polarización definido como

$$\tau = (\mathbb{C}_\mu - \mathbb{C}^0): \varepsilon_\mu \quad (13)$$

para resolver el problema de un material lineal elástico heterogéneo sometido a una polarización macroscópica prescripta \mathbf{T} . La relación iterativa asociada se puede escribir como:

$$\tau^{i+1} = \tau^i - \alpha \mathbb{C}^0 : \mathbf{\Gamma}^0 * \mathbb{C}_\mu : \varepsilon_\mu^i - \beta \mathbf{\Delta}^0 * \varepsilon_\mu^i - \langle \tau^i \rangle + \mathbf{T}, \quad (14)$$

donde α y β son constantes y

$$\widehat{\mathbf{\Delta}}^0(\xi) = \mathbb{C}^0 - \mathbb{C}^0 : \widehat{\mathbf{\Gamma}}^0 : \mathbb{C}^0, \quad \forall \xi \neq 0 \text{ y } \widehat{\mathbf{\Delta}}^0(\xi) = 0, \text{ cuando } \xi = 0. \quad (15)$$

Si se reemplaza por \mathbb{C}^0 y $-\mathbb{C}^0$ se cambia β por $-\beta$, el esquema resulta:

$$\begin{aligned} (\mathbb{C}_\mu + \mathbb{C}^0) : \varepsilon_\mu^{i+1} = & (\mathbb{C}_\mu + \mathbb{C}^0) : \varepsilon_\mu^i - \alpha \mathbb{C}^0 : \mathbf{\Gamma}^0 * \mathbb{C}_\mu : \varepsilon_\mu^i - \\ & \beta \mathbf{\Delta}^0 * \varepsilon_\mu^i - \langle (\mathbb{C}_\mu + \mathbb{C}^0) : \varepsilon_\mu^i \rangle + \mathbf{T} \end{aligned} \quad (16)$$

El algoritmo presentado en la Sección 2.4 puede ser modificado para hacer uso de una deformación macroscópica prescripta en lugar de una polarización macroscópica prescripta, lo cual es más comúnmente utilizado en la práctica:

$$\begin{aligned} (\mathbb{C}_\mu + \mathbb{C}^0) : \varepsilon_\mu^{i+1} = & (\mathbb{C}_\mu + \mathbb{C}^0) : \varepsilon_\mu^i - \alpha \mathbb{C}^0 : \mathbf{\Gamma}^0 * \mathbb{C}_\mu : \varepsilon_\mu^i - \\ & \beta \mathbf{\Delta}^0 * \varepsilon_\mu^i - \beta \mathbb{C}^0 : (\langle \varepsilon_\mu^i \rangle - \varepsilon). \end{aligned} \quad (17)$$

Este algoritmo asegura que el promedio de la deformación cuando se alcanza la convergencia es igual a la deformación macroscópica prescripta $\bar{\varepsilon}$. De hecho, se tiene la siguiente relación sobre el promedio de los campos de deformación y tensión:

$$\langle (\mathbb{C}_\mu + \mathbb{C}^0) : \varepsilon_\mu^{i+1} \rangle = \langle (\mathbb{C}_\mu + \mathbb{C}^0) : \varepsilon_\mu^i \rangle - \beta \mathbb{C}^0 : (\langle \varepsilon_\mu^i \rangle - \varepsilon), \quad (18)$$

lo que implica que: $\langle \varepsilon_\mu^{i=\infty} \rangle = \varepsilon$

El algoritmo iterativo utilizado para hacer uso de este esquema con una deformación prescripta $\bar{\varepsilon}$ es el siguiente:

$$\begin{aligned} \text{Iteración } i + 1 \quad & \varepsilon_\mu^i \text{ y } \sigma_\mu^i \text{ conocidos} \\ (a) \quad & s_a^i(x) = \sigma_\mu^i(x) + (1 - \beta) \cdot \mathbb{C}^0 : \varepsilon_\mu^i(x) \\ & s_b^i(x) = \alpha \cdot \sigma_\mu^i(x) - \beta \cdot \mathbb{C}^0 : \varepsilon_\mu^i(x) \\ (b) \quad & \widehat{s}_b^i = \mathcal{F}(s_b^i) \\ (c) \quad & \widehat{\varepsilon}_b^i(\xi) = -\widehat{\mathbf{\Gamma}}^0(\xi) : \widehat{s}_b^i(\xi) \quad \forall \xi \neq 0 \quad \widehat{\varepsilon}_b^i(0) = \beta \cdot \varepsilon \\ (d) \quad & \varepsilon_b^i(x) = \mathcal{F}(\widehat{\varepsilon}_b^i(\xi)) \\ (e) \quad & \varepsilon_\mu^{i+1}(x) = (\mathbb{C}_\mu(x) + \mathbb{C}^0)^{-1} : (s_a^i(x) + \mathbb{C}^0 : \varepsilon_b^i(x)) \\ (f) \quad & \sigma_\mu^{i+1}(x) = \mathbb{C}_\mu(x) : \varepsilon_\mu^{i+1}(x) \\ (g) \quad & \text{Test de convergencia} \end{aligned} \quad (19)$$

Para este trabajo se utilizó $\alpha = \beta = 1.5$ ya que con estos valores se logra una tasa de convergencia óptima.

2.6 Test de convergencia

El test de convergencia en cada iteración consiste en comparar las desviaciones del equilibrio, de la compatibilidad y de las condiciones de carga prescriptas con una tolerancia preestablecida.

Los test de convergencia elegidos son los siguientes:

- Criterio sobre el equilibrio de las tensiones

La desviación del equilibrio en la iteración i puede ser evaluada usando la norma L2 de la divergencia de las tensiones definida como:

$$\|\text{div}(\sigma_\mu^i)\|_2 = \sqrt{\frac{1}{V} \int_V |\text{div}(\sigma_\mu^i)|^2 dx}, \quad (20)$$

donde $|\cdot|$ denota la norma euclidiana de un vector.

Empleando el teorema de Parseval, puede ser fácilmente evaluada en el espacio de Fourier como:

$$\|\text{div}(\sigma_\mu^i)\|_2 = \sqrt{\sum_\xi |\xi \cdot \hat{\sigma}_\mu^i(\xi)|^2}, \quad (21)$$

y puede ser normalizada por las tensiones macroscópicas con el fin de que sea insensible a un factor lineal en la deformación prescripta:

$$\epsilon_{equilibrio} = \frac{\|\text{div}(\sigma_\mu^i)\|_2}{\|\langle \sigma_\mu^i \rangle\|} = \frac{\sqrt{\sum_\xi |\xi \cdot \hat{\sigma}_\mu^i(\xi)|^2}}{\|\hat{\sigma}_\mu^i(0)\|}, \quad (22)$$

donde $\|\cdot\|$ denota la norma de Frobenius de un tensor de Segundo orden.

- Criterio sobre las ecuaciones de compatibilidad

Hay ser relaciones que deben ser satisfechas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 11}}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 22}}{\partial x_2^2} - 2 \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 12}}{\partial x_1 \partial x_2} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 22}}{\partial x_3^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 33}}{\partial x_3^2} - 2 \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 23}}{\partial x_2 \partial x_3} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 33}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 11}}{\partial x_3^2} - 2 \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 13}}{\partial x_3 \partial x_1} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 11}}{\partial x_2 \partial x_3} - \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 13}}{\partial x_1 \partial x_2} - \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 12}}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 23}}{\partial x_1 \partial x_1} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 22}}{\partial x_3 \partial x_1} - \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 12}}{\partial x_2 \partial x_3} - \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 23}}{\partial x_2 \partial x_1} + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 13}}{\partial x_2 \partial x_2} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 33}}{\partial x_1 \partial x_2} - \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 23}}{\partial x_3 \partial x_2} - \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 13}}{\partial x_3 \partial x_2} + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mu 12}}{\partial x_3 \partial x_3} &= 0. \end{aligned} \quad (23)$$

La desviación de la compatibilidad puede ser fácilmente evaluada en el espacio de Fourier mediante:

$$\epsilon_{compatibilidad} = \frac{\max_\xi (\max_{j=1,\dots,6} (|\hat{c}_j(\xi)|))}{\sqrt{\sum_\xi \hat{\epsilon}_{\mu ij}(\xi) : \hat{\epsilon}_{\mu ij}^*(\xi)}}, \quad (24)$$

con:

$$\begin{aligned} \hat{c}_1(\xi) &= -\xi_2 \xi_2 \hat{\epsilon}_{\mu 11}(\xi) - \xi_1 \xi_1 \hat{\epsilon}_{\mu 22}(\xi) + 2 \xi_1 \xi_2 \hat{\epsilon}_{\mu 12}(\xi) \\ \hat{c}_2(\xi) &= -\xi_3 \xi_3 \hat{\epsilon}_{\mu 22}(\xi) - \xi_2 \xi_2 \hat{\epsilon}_{\mu 33}(\xi) + 2 \xi_2 \xi_3 \hat{\epsilon}_{\mu 23}(\xi) \\ \hat{c}_3(\xi) &= -\xi_1 \xi_1 \hat{\epsilon}_{\mu 33}(\xi) - \xi_3 \xi_3 \hat{\epsilon}_{\mu 11}(\xi) + \xi_3 \xi_1 \hat{\epsilon}_{\mu 13}(\xi) \\ \hat{c}_4(\xi) &= -\xi_2 \xi_3 \hat{\epsilon}_{\mu 11}(\xi) + \xi_1 \xi_2 \hat{\epsilon}_{\mu 13}(\xi) + \xi_1 \xi_3 \hat{\epsilon}_{\mu 12}(\xi) - \xi_1 \xi_1 \hat{\epsilon}_{\mu 23}(\xi) \\ \hat{c}_5(\xi) &= -\xi_3 \xi_1 \hat{\epsilon}_{\mu 22}(\xi) + \xi_2 \xi_3 \hat{\epsilon}_{\mu 12}(\xi) + \xi_2 \xi_1 \hat{\epsilon}_{\mu 23}(\xi) - \xi_2 \xi_2 \hat{\epsilon}_{\mu 13}(\xi) \\ \hat{c}_6(\xi) &= -\xi_1 \xi_2 \hat{\epsilon}_{\mu 33}(\xi) + \xi_3 \xi_1 \hat{\epsilon}_{\mu 23}(\xi) + \xi_3 \xi_2 \hat{\epsilon}_{\mu 13}(\xi) - \xi_3 \xi_3 \hat{\epsilon}_{\mu 12}(\xi), \end{aligned} \quad (25)$$

- Criterio sobre las condiciones de carga:
La convergencia sobre las condiciones de carga puede ser comprobada usando:

$$\epsilon_{carga} = \frac{\|(\epsilon_\mu) - \epsilon\|}{\|\epsilon\|} = \frac{\sqrt{((\epsilon_{\mu ij}) - \epsilon_{ij}) : ((\epsilon_{\mu ij}) - \epsilon_{ij})}}{\sqrt{\epsilon_{ij} : \epsilon_{ij}}}. \quad (26)$$

3 HOMOGENIZACIÓN

3.1 Formulación

El análisis de homogenización computacional usa el método asintótico introducido por [Hollister and Kikuchi \(1992\)](#). El método considera dos escalas: la macroescala para el continuo en el cual las propiedades elásticas homogenizadas son calculadas, y la microescala para la microestructura del material ([Figura 1](#)). El método asume la separación entre las escalas, es decir, la longitud característica de la microescala l , es mucho más pequeña que la longitud característica de la macroescala L .

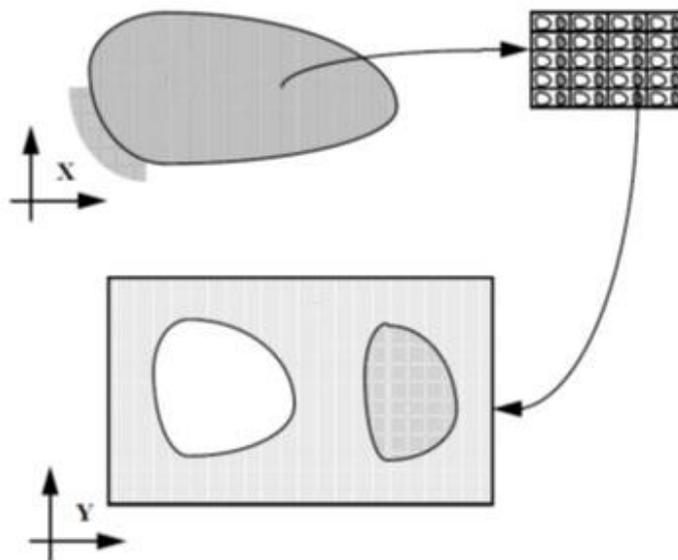


Figura 1: Material continuo en la macroescala (arriba) y RVE en la microescala (abajo).

También se asume en este trabajo que el material tiene una respuesta lineal elástica isotrópica tanto en la macroescala como en la microescala. La relación entre las tensiones y las deformaciones en la macroescala está dada en términos del tensor de rigidez homogenizado \mathbb{C} tal que:

$$\sigma = \mathbb{C} \epsilon, \quad (27)$$

donde los campos macroscópicos pueden ser calculados como el promedio en volumen de los campos microscópicos sobre el dominio del RVE, es decir:

$$\sigma = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \sigma_\mu \, dV \quad y \quad (28)$$

$$\epsilon = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \epsilon_\mu \, dV. \quad (29)$$

Las tensiones y las deformaciones microscópicas están relacionadas por la siguiente ecuación:

$$\sigma_{\mu} = \mathbb{C}_{\mu} \varepsilon_{\mu}. \quad (30)$$

El campo de desplazamientos en la microescala, u_{μ} , se puede descomponer según (2). El campo de deformaciones microscópicas asociado al campo de desplazamientos en la ecuación (30) está dado por (1).

Aunque el método de homogenización asintótico es rigurosamente válido para microestructuras periódicas, es decir, aquellas compuestas por celdas unitarias repetitivas, Terada y Kikuchi (2000) mostraron que las condiciones de contorno periódicas pueden ser aplicadas a un medio heterogéneo no periódico para obtener una estimación de las propiedades mecánicas. Además, mostraron que los resultados obtenidos por medio de otras técnicas convergían a los resultados obtenidos usando condiciones de contorno periódicas cuando el tamaño de la muestra es suficientemente grande.

En general, el campo de deformaciones en la macroescala no es conocido de antemano. Sin embargo, debido a que el problema es lineal, cualquier ε arbitrario puede ser escrito como una combinación lineal de las deformaciones unitarias, las cuales se definen como:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{pm}^{11} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \varepsilon_{pm}^{22} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \varepsilon_{pm}^{33} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \varepsilon_{pm}^{12} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \varepsilon_{pm}^{13} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \varepsilon_{pm}^{23} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (31)$$

Una vez que los seis estados de deformación macroscópicos son conocidos, el tensor de localización local \mathbb{M}_{ijpm} , el cual relaciona la deformación macroscópica ε_{pm}^{kl} y la deformación microestructural total $\varepsilon_{\mu ij}^{kl}$, es calculado a partir de:

$$\varepsilon_{\mu ij}^{kl} = \mathbb{M}_{ijpm} \varepsilon_{pm}^{kl}. \quad (32)$$

Una vez que es conocido, la deformación local en cualquier punto dentro del RVE puede ser calculada a partir de una deformación macroscópica homogénea arbitraria como

$$\varepsilon_{\mu} = \mathbb{M} \varepsilon \quad (33)$$

El tensor de elasticidad homogenizado \mathbb{C} puede ser calculado también a partir de \mathbb{M} . Empleando la ley de Hooke a nivel microscópico (30), ambos lados son integrados sobre el RVE y divididos por el volumen total del RVE para dar

$$\frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \sigma_{\mu} dV = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \mathbb{C}_{\mu} \varepsilon_{\mu} dV. \quad (34)$$

Substituyendo ε_{μ} según (33) y utilizando (28) y (29) se obtiene:

$$\sigma = \left(\frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \mathbb{C}_{\mu} \mathbb{M} dV \right) \varepsilon, \quad (35)$$

donde el tensor de rigidez homogenizado está dado por

$$\mathbb{C} = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \mathbb{C}_{\mu} \mathbb{M} dV. \quad (36)$$

3.2 Implementación

El procedimiento descrito fue implementado utilizando el método de FFT presentado en la

Sección 2. De esta forma, los campos de deformaciones microscópicas $\varepsilon_{\mu ij}^{kl}$ asociado a las deformaciones macroscópicas ε_{pm}^{kl} se calculan utilizando el método de FFT. Luego el tensor de localización \mathbb{M} se calcula en cada voxel mediante la ecuación (27) y los valores de $\varepsilon_{\mu ij}^{kl}$ y ε_{pm}^{kl} . Haciendo uso de las simetrías en ε_{pm}^{kl} , $\varepsilon_{\mu ij}^{kl}$ y \mathbb{M}_{ijpm} , el tensor de localización resulta de la solución de seis sistemas de ecuaciones matriciales para las distintas combinaciones de los índices i y j :

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{ij}^{11} \\ \varepsilon_{ij}^{22} \\ \varepsilon_{ij}^{33} \\ \varepsilon_{ij}^{12} \\ \varepsilon_{ij}^{13} \\ \varepsilon_{ij}^{23} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{\mu 11}^{11} & \varepsilon_{\mu 22}^{11} & \varepsilon_{\mu 33}^{11} & \varepsilon_{\mu 12}^{11} & \varepsilon_{\mu 13}^{11} & \varepsilon_{\mu 23}^{11} \\ \varepsilon_{\mu 11}^{22} & \varepsilon_{\mu 22}^{22} & \varepsilon_{\mu 33}^{22} & \varepsilon_{\mu 12}^{22} & \varepsilon_{\mu 13}^{22} & \varepsilon_{\mu 23}^{22} \\ \varepsilon_{\mu 11}^{33} & \varepsilon_{\mu 22}^{33} & \varepsilon_{\mu 33}^{33} & \varepsilon_{\mu 12}^{33} & \varepsilon_{\mu 13}^{33} & \varepsilon_{\mu 23}^{33} \\ \varepsilon_{\mu 11}^{12} & \varepsilon_{\mu 22}^{12} & \varepsilon_{\mu 33}^{12} & \varepsilon_{\mu 12}^{12} & \varepsilon_{\mu 13}^{12} & \varepsilon_{\mu 23}^{12} \\ \varepsilon_{\mu 11}^{13} & \varepsilon_{\mu 22}^{13} & \varepsilon_{\mu 33}^{13} & \varepsilon_{\mu 12}^{13} & \varepsilon_{\mu 13}^{13} & \varepsilon_{\mu 23}^{13} \\ \varepsilon_{\mu 11}^{23} & \varepsilon_{\mu 22}^{23} & \varepsilon_{\mu 33}^{23} & \varepsilon_{\mu 12}^{23} & \varepsilon_{\mu 13}^{23} & \varepsilon_{\mu 23}^{23} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbb{M}_{ij11} \\ \mathbb{M}_{ij22} \\ \mathbb{M}_{ij33} \\ \mathbb{M}_{ij12} \\ \mathbb{M}_{ij13} \\ \mathbb{M}_{ij23} \end{Bmatrix} \quad (37)$$

Una vez que \mathbb{M} es conocido, el tensor de rigidez homogenizado se calcula usando (36). Puesto que solo un valor de \mathbb{M}_{ijkl} y $\mathbb{C}_{\mu ijkl}$ es dado para cada elemento, la integral en (36) es aproximada por la sumatoria

$$\mathbb{C} = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N \mathbb{C}_{\mu}^p \mathbb{M}^p \quad (38)$$

donde N es el número de voxels del RVE.

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se utilizaron diferentes geometrías para verificar el correcto funcionamiento del método. Se comenzó con una geometría simple generada por computadora y luego se emplearon dos muestras de hueso trabecular de cabezas femorales bovinas, las cuales serán denominadas Muestra #1 y Muestra #2. Todos los resultados fueron comparados con los obtenidos por [Ibarra Pino \(2011\)](#), quien hizo uso del mismo método de homogenización asintótico utilizado en este trabajo, resolviendo los diferentes casos de carga mediante el método de elementos finitos.

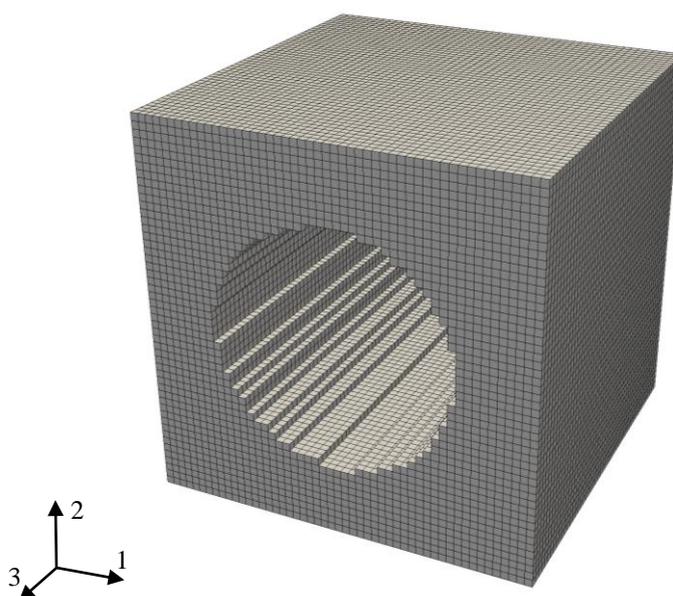


Figura 2: Celda cúbica repetitiva con un agujero cilíndrico en el centro.

La primera geometría consta de celdas repetitivas de forma cúbica con un agujero cilíndrico pasante en el centro con una fracción volumétrica igual a 0.697, como se muestra en la [Figura 2](#). Debido a que el tiempo de cómputo utilizando con un material de rigidez nula es elevado, el agujero fue modelado como un segundo material con propiedades mecánicas despreciables respecto a las de la parte sólida. Las propiedades utilizadas se muestran en la [Tabla 1](#).

	Parte sólida	Espacio hueco
Módulo de Elasticidad	1000 [MPa]	10^{-1} [MPa]
Coefficiente de Poisson	0.25	0

Tabla 1: Propiedades de los materiales empleados.

A fin de analizar la independencia del problema con la discretización se resolvieron para este caso modelos con diferente número de voxels. En la [Figura 3](#) se muestran los resultados obtenidos para las componentes no nulas del tensor de elasticidad homogenizado (se considera un tamaño de pixel igual a 1 [mm] para la discretización con mayor número de voxels). En base a estos resultados se decidió discretizar con $51 \times 51 \times 51$ voxels. Se necesitaron de 817 iteraciones para satisfacer el test de convergencia descrito en la [Sección 2.6](#) con una tolerancia de 10^{-5} . La matriz elástica homogenizada obtenida se muestra a continuación:

$$\mathbb{C}_{FFT} = \begin{bmatrix} 532 & 127 & 165 & 0 & 0 & 0 \\ 127 & 532 & 165 & 0 & 0 & 0 \\ 165 & 165 & 779 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 109 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 207 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 207 \end{bmatrix} [MPa] \quad (39)$$

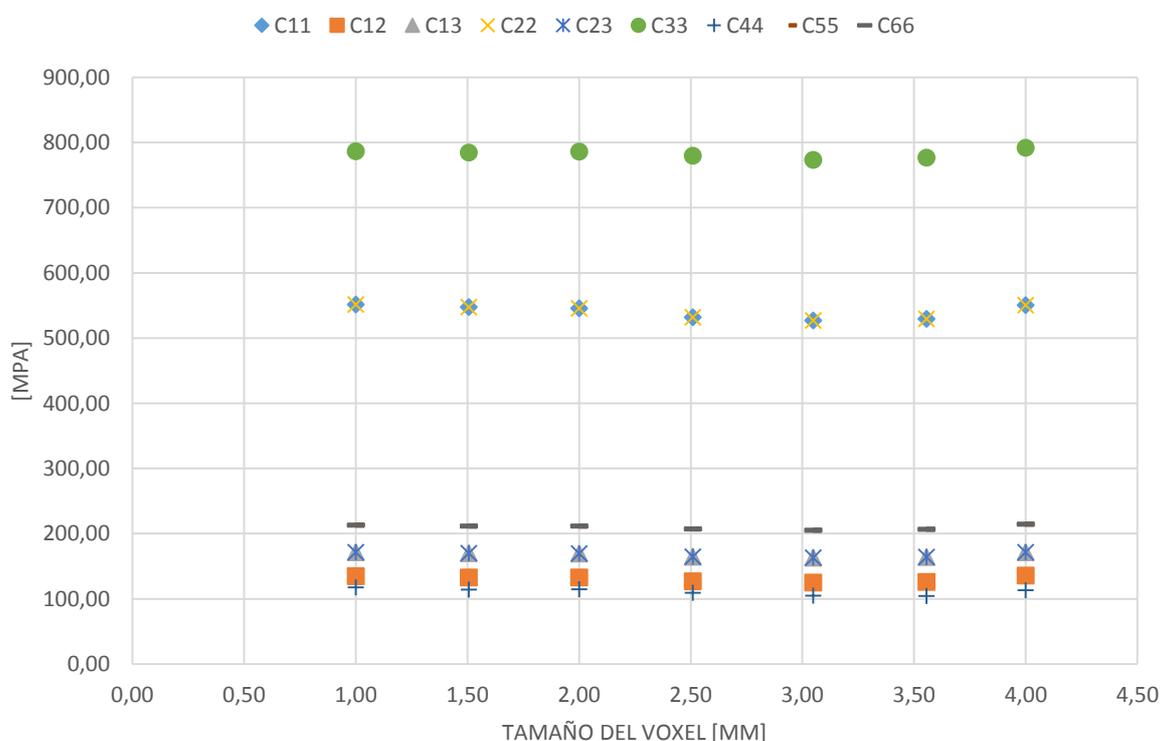


Figura 3: Comparación de las componentes del tensor de elasticidad homogenizado para distintas discretizaciones.

En la [Tabla 2](#) se puede ver la comparación de los resultados con aquellos obtenidos utilizando el PREM3D, el cual utiliza el método de homogenización asintótico con elementos finitos, ([Guedes y Kikuchi, 1990](#)) y los obtenidos por [Ibarra Pino \(2011\)](#).

Con el objetivo de analizar la diferencia entre los resultados obtenidos mediante los diferentes métodos, se utilizó la norma de Frobenius para medir la diferencia porcentual entre las matrices

$$Dist = \sqrt{\frac{\|C_{FEM} - C_{FFT}\|_F^2}{\|C_{FEM}\|_F^2}}, \quad (40)$$

obteniendo una diferencia del 2% cuando se compara con los resultados obtenidos con el método de Ibarra Pino y una diferencia del 4% en relación a aquellos dados por el PREM3D.

	FFT	Ibarra Pino	PREMAT3D
C11	532 [MPa]	543 [MPa]	562 [MPa]
C12	127 [MPa]	132 [MPa]	137 [MPa]
C13	165 [MPa]	169 [MPa]	175 [MPa]
C22	532 [MPa]	543 [MPa]	562 [MPa]
C23	165 [MPa]	169 [MPa]	175 [MPa]
C33	779 [MPa]	781 [MPa]	786 [MPa]
C44	109 [MPa]	114 [MPa]	122 [MPa]
C55	207 [MPa]	211 [MPa]	215 [MPa]
C66	207 [MPa]	211 [MPa]	215 [MPa]

Tabla 2: Comparación de las componentes del tensor de elasticidad homogenizado.

La Muestra #1 proviene de un estudio de microTC correspondiente a una porción de una cabeza femoral vacuna. Se emplearon 750 imágenes con un tamaño de pixel de $6.62 \mu m$. Las imágenes fueron convertidas a blanco y negro empleando un proceso de binarización global. En la [Figura 4](#) se puede ver una de las imágenes originales y la misma imagen binarizada.

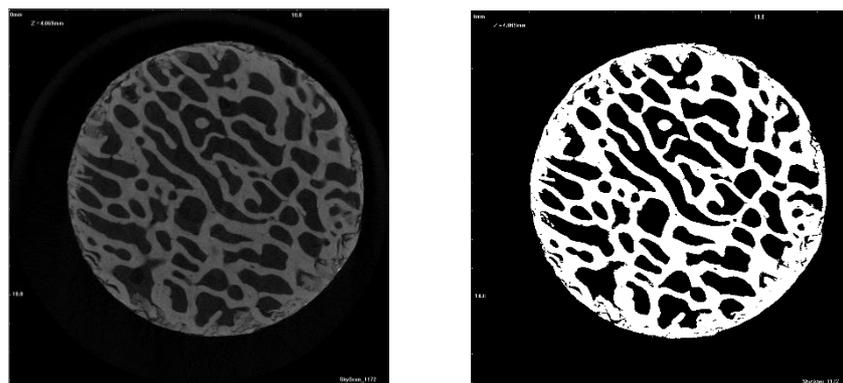


Figura 4: Imagen segmentada (izquierda) y binarizada (derecha) de la Muestra #1.

Con el objeto de incluir solamente hueso trabecular y eliminar cualquier efecto de borde, la muestra fue recortada digitalmente. Las dimensiones del modelo fueron $4.96 \times 4.96 \times 4.96 \text{ [mm]}$. En la [Figura 5](#) se muestra un detalle de la geometría discretizada.

El modelo resultante contiene 6644672 voxels y la fracción volumétrica es de 0.499. Las propiedades utilizadas se muestran en la [Tabla 3](#). Se necesitaron de 733 iteraciones para satisfacer el test de convergencia descrito en la [Sección 2.6](#) con una tolerancia de 10^{-5} . La matriz elástica homogenizada obtenida es:

$$\mathbb{C}_{FFT} = \begin{bmatrix} 252 & 85 & 86 & 32 & -5 & 1 \\ 85 & 245 & 85 & 25 & 0 & 4 \\ 86 & 85 & 265 & 7 & -8 & 4 \\ 32 & 25 & 7 & 87 & 0 & -2 \\ -5 & 0 & -8 & 0 & 88 & 12 \\ 1 & 4 & 4 & -2 & 12 & 85 \end{bmatrix} [MPa]. \quad (41)$$

	Parte sólida	Espacio hueco
Módulo de Elasticidad	1000 [MPa]	10^{-1} [MPa]
Coefficiente de Poisson	0.3	0

Tabla 3: Propiedades de los materiales empleados.

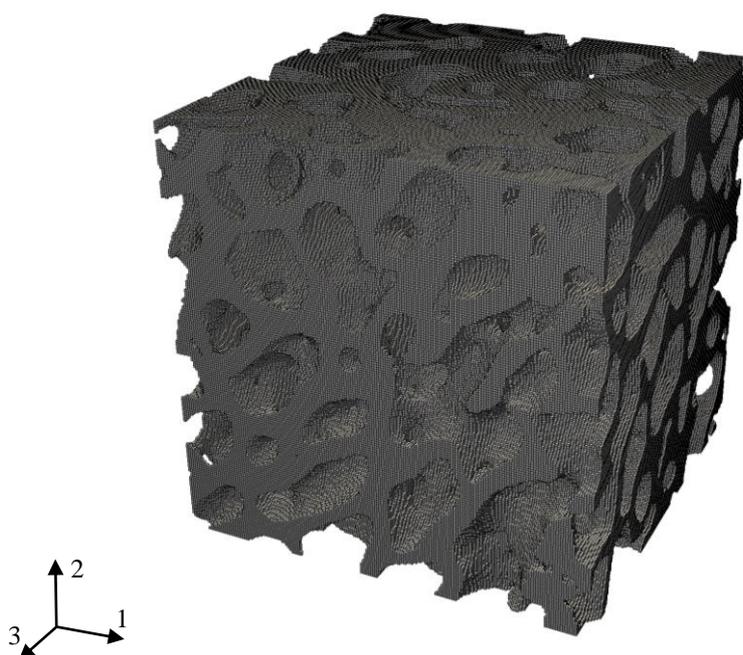


Figura 5: Celda cúbica repetitiva con un agujero cilíndrico en el centro.

La matriz obtenida con el método de elementos finitos es la siguiente:

$$\mathbb{C}_{FEM} = \begin{bmatrix} 292 & 97 & 98 & 32 & -4 & -1 \\ 97 & 277 & 97 & 25 & 0 & -4 \\ 98 & 97 & 299 & 7 & -6 & -4 \\ 32 & 25 & 7 & 99 & -2 & -2 \\ -4 & 0 & -6 & -2 & 100 & 12 \\ -1 & -4 & -4 & -2 & 12 & 97 \end{bmatrix} [MPa]. \quad (42)$$

Utilizando la ecuación (40) se obtiene una diferencia entre las matrices homogenizadas del 13%.

La Muestra #2 proviene de un estudio de microTC correspondiente a una porción de una cabeza femoral vacuna. Se emplearon 695 imágenes con un tamaño de pixel de $5.96 \mu m$. En la Figura 6 se puede ver una de las imágenes originales y la misma imagen binarizada. Las dimensiones del modelo fueron $4.11 \times 4.11 \times 4.11 [mm]$. En la Figura 7 se muestra un detalle de la geometría discretizada. El modelo resultante contiene 5177717 voxels y la fracción volumétrica es de 0.391. Las propiedades utilizadas se muestran en la Tabla 3. Se necesitaron

de 2032 iteraciones para satisfacer el test de convergencia descrito en la [Sección 2.6](#) con una tolerancia de 10^{-5} .

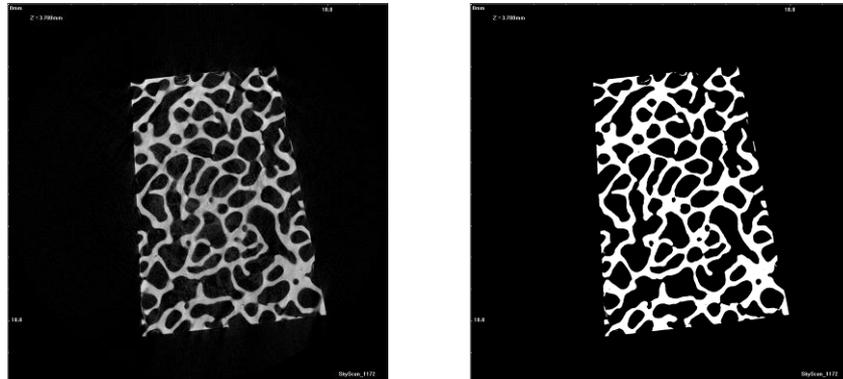


Figura 6: Imagen segmentada (izquierda) y binarizada (derecha) de la Muestra #2.

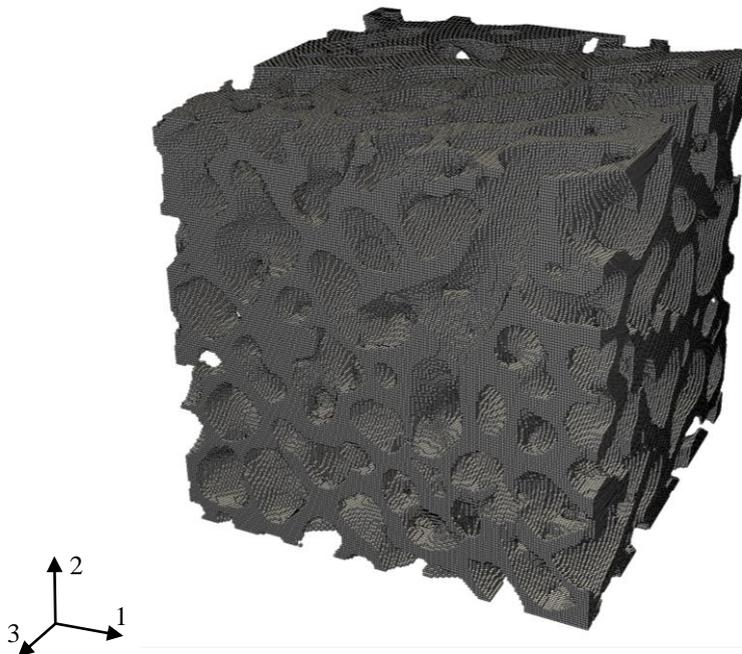


Figura 7: Celda cúbica repetitiva con un agujero cilíndrico en el centro.

La matriz elástica homogenizada obtenida es:

$$\mathbb{C}_{FFT} = \begin{bmatrix} 154 & 56 & 55 & -12 & -20 & -1 \\ 56 & 142 & 56 & -13 & 0 & -8 \\ 55 & 56 & 175 & -2 & -21 & -6 \\ -12 & -13 & -2 & 48 & -2 & -7 \\ -20 & 0 & -21 & -2 & 56 & -3 \\ -1 & -8 & -6 & -7 & -3 & 55 \end{bmatrix} [MPa] \quad (43)$$

La matriz obtenida con el método de elementos finitos es la siguiente:

$$\mathbb{C}_{FEM} = \begin{bmatrix} 172 & 62 & 61 & -14 & -22 & -2 \\ 62 & 161 & 62 & -14 & 0 & -10 \\ 61 & 62 & 197 & -2 & -24 & -8 \\ -14 & -14 & -2 & 55 & -2 & -7 \\ -22 & 0 & -24 & -2 & 64 & -4 \\ -2 & -10 & -8 & -7 & -4 & 63 \end{bmatrix} [MPa] \quad (44)$$

Utilizando la ecuación (40) se obtiene una diferencia entre las matrices homogenizadas del 19%.

5 CONCLUSIONES

Se realizó en este trabajo la homogenización del comportamiento elástico del tejido óseo trabecular aplicando un método basado en la transformada rápida de Fourier.

El método fue utilizado en la homogenización de dos estudios de microTC correspondientes a diferentes porciones de cabezas femorales vacunas. Los resultados fueron comparados con los obtenidos haciendo uso del método de los elementos finitos.

Se obtuvo un excelente acuerdo entre los resultados obtenidos con el método de FFT y aquellos obtenidos utilizando el método de elementos finitos cuando se utilizó una geometría simple generada por computadora, con diferencias menores al 4%. Para los estudios de microTC se obtuvieron diferencias menores al 19%, incrementándose a medida que la fracción volumétrica es más pequeña, es decir, un mayor porcentaje del RVE es hueco.

REFERENCES

- Guedes, J., y Kikuchi, N., Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 83:143–198, 1990.
- Hollister, S. J., y Kikuchi, N., A comparison of homogenization and standard mechanics analyses for periodic porous composites. *Computational Mechanics*, 10:73–95, 1992.
- Ibarra Pino, A., *Estudio del Comportamiento Mecánico del Hueso Trabecular Mediante Técnicas de Homogenización*. Tesis de Doctorado, Universidad Nacional de Mar del Plata – Facultad de Ingeniería, 2011.
- Monchiet, V., y Bonnet, G., A polarization based FFT iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 11:1419-1436, 2012.
- Moulinec, H., y Suquet, P., A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157:69-94, 1998.
- Terada, K., Hori, M., Kyoya, T., y Kikuchi, N., Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches. *International Journal of Solids and Structures*, 37(16):2285-2311, 2000.