

## DETERMINACIÓN DE LA PERMEABILIDAD DE MICROESTRUCTURAS TRABECULARES MEDIANTE EL MÉTODO DE LA TRANSFORMADA RÁPIDA DE FOURIER

### DETERMINATION OF THE PERMEABILITY OF TRABECULAR MICROSTRUCTURES BY THE FAST FOURIER TRANSFORM METHOD

Lucas Colabella<sup>a</sup>, Nicolas Biocca<sup>b</sup>, Santiago Urquiza<sup>b</sup> y Adrián Cisilino<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*División Mecánica de Materiales – INTEMA, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata, Av. Juan B. Justo 4302, Mar del Plata, Argentina, <http://www.intema.gov.ar>*

<sup>b</sup>*GIAC, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata, Av. Juan B. Justo 4302, Mar del Plata, Argentina*

**Palabras clave:** Permeabilidad, Hueso, Andamios óseos, Microestructuras parametrizadas.

**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. En este sentido, es de relevancia la investigación para la construcción de andamios óseos que permitan inducir y guiar el crecimiento del hueso. Para ello, sus microestructuras necesitan conjugar capacidad de soporte estructural y morfologías que permitan el transporte de nutrientes y moléculas hacia su interior. Se presenta en este trabajo el desarrollo de un método computacional para caracterizar el flujo a través de microestructuras trabeculares naturales y artificiales. Con este objetivo, se implementó un método basado en la transformada rápida de Fourier (FFT) que permite determinar la permeabilidad de un medio poroso periódico saturado por un fluido viscoso. El método es computacionalmente eficiente y no requiere mallado, lo que hace que la construcción de los modelos sea rápida, versátil y robusta. La verificación del algoritmo se realizó utilizando modelos de microestructuras artificiales. Los resultados calculados presentan un excelente acuerdo con aquellos obtenidos empleando el método de elementos finitos.

**Keywords:** Permeability, Trabecular, Bone Scaffolds, Parameterized Microstructures.

**Abstract.** During the last decades, the use of prostheses for the replacement of joints has become a common practice of orthopedic surgery. In this sense, it is important the research for the construction of bone scaffolds to induce and guide bone growth. For this, their microstructures need to combine structural support capacity and morphologies that allow the transport of nutrients and molecules to the interior. This paper presents the development of a computational method to characterize the flow through natural and artificial trabecular microstructures. With this objective, a method based on the fast Fourier transform (FFT) that allows to determine the permeability of a periodic porous medium saturated by a viscous fluid is implemented. The method is computationally efficient and does not require meshing, which makes the construction of the models fast, versatile and robust. The verification of the algorithm was carried out using models of artificial microstructures. Computed results are in excellent agreement with those obtained using the finite element method.

## 1. INTRODUCCIÓN

Los huesos son materiales biocompuestos con una compleja geometría jerárquica multiescala (Carretta et al., 2013). El tejido óseo se organiza ya sea en una estructura compacta (hueso cortical) o en una estructura esponjosa (hueso esponjoso). El hueso esponjoso consiste en una red tridimensional de fragmentos óseos, llamados trabéculas, dispuestos a lo largo de líneas de tensión. Las trabéculas consisten en una matriz nanométrica extracelular que incorpora hidroxapatita, el mineral que da a los huesos su rigidez; y colágeno, una proteína elástica que mejora la resistencia a la fractura. El hueso esponjoso, también llamado hueso trabecular, se encuentra en los extremos de los huesos largos, próximo a las articulaciones y en el interior de las vértebras (Currey, 2006).

Los avances en la tecnología de imágenes 3D y la potencia computacional han mejorado los métodos clásicos para evaluar las propiedades del hueso trabecular (Lane, 2006; Blanchard et al., 2015). Modelos de elementos finitos (FE) de alta resolución pueden ser construidos a partir de microestructuras óseas digitalizadas mediante el uso de micro-tomografía computarizada (micro-CT). El análisis de elementos finitos (FEA) se usa para calcular las propiedades elásticas efectivas del hueso (van Rietbergen et al., 1998; Ulrich et al., 1999; Pistoia et al., 2001), para predecir la resistencia ósea (van Rietbergen y Ito, 2015) y como parte de sofisticados análisis multiescala (Podshivalov et al., 2011a,b). También hay modelos que explican la presencia de fluidos intersticiales en la microestructura esponjosa para evaluar los efectos viscosos (Gilbert et al., 2012) y la permeabilidad ósea (Widmer y Ferguson, 2013; Daish et al., 2017).

Otra estrategia consiste en el uso de microestructuras trabeculares artificiales equivalentes (Guo et al., 1994; Kowalczyk, 2003). Este método ha sido ampliamente aceptado empíricamente ya que las microestructuras trabeculares se asemejan a patrones típicos de barras y/o placas tridimensionales interconectadas. Las microestructuras óseas artificiales son descritas típicamente mediante un número reducido de parámetros geométricos, lo que las hace prácticas para realizar estudios cualitativos de morfometría ósea (Stauber y Müller, 2006) y simulaciones de procesos de remodelación ósea (Ebinger et al., 2007; Kowalczyk, 2010). Estos modelos microestructurales equivalentes son generalmente diseñados y analizados usando FEA.

Recientemente, Monchiet et al. (2009) derivaron un método numérico basado en la transformada rápida de Fourier (FFT) para calcular la permeabilidad a partir de imágenes exactas de la microestructura. El método, introducido por primera vez por Moulinec y Suquet (1998) para compuestos elásticos lineales, permite manejar problemas con microestructuras complejas y particularmente imágenes digitales obtenidas, por ejemplo, mediante micro-CT. Tales métodos son atractivos por su velocidad, debido al uso de FFT, y por el ahorro de memoria, ya que utilizan solo unas pocas variables por punto en lugar de "matrices de rigidez" que contienen numerosos términos de acoplamiento, las cuales son utilizadas en el método de elementos finitos (FEM). Además, estas soluciones son infinitamente diferenciables Canuto et al. (2007), ya que las derivadas pueden ser obtenidas fácilmente usando las propiedades de las Transformadas de Fourier. Vale la pena mencionar que este método se puede utilizar para calcular las propiedades de medios aleatorios (no periódicos). De hecho, como lo muestran Kanit et al. (2003), se ha observado que las condiciones de periodicidad en las variables del problema, las cuales están implícitas cuando se usan las transformadas de Fourier, tienen una mejor tasa de convergencia cuando se trata con la media estocástica de las soluciones de problemas relacionados con diferentes muestras construidas a partir de propiedades aleatorias.

Se propone en este trabajo aplicar el método basado en la FFT de Ly et al. (2016) al cálculo de la permeabilidad de microestructuras trabeculares artificiales 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. Descripción del Problema

Se considera una celda unitaria que consiste en un sólido rígido  $\Omega_s$  y un espacio poroso abierto e interconectado  $\Omega_f$  saturado por un fluido. El flujo en  $\Omega_f$  puede ser descrito mediante las ecuaciones de Stokes de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mu_f \Delta \mathbf{v}^*(\mathbf{x}) - \nabla p(\mathbf{x}) &= 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ \text{div } \mathbf{v}^*(\mathbf{x}) &= 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ \mathbf{v}^*(\mathbf{x}) &= 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma \end{aligned} \quad (1)$$

donde  $\mathbf{v}^*(\mathbf{x})$  y  $p(\mathbf{x})$  son el campo de velocidad y la presión, respectivamente.  $\Gamma$  define la superficie del sólido. El flujo es generado por un gradiente de presión macroscópico prescrito, denotado por  $G = \nabla P$ . La presión local esta dada por

$$p(\mathbf{x}) = G_k x_k + p^*(\mathbf{x}), \quad (2)$$

con  $p^*(\mathbf{x})$  periódico. En la escala local, los componentes del campo de velocidad  $v_i^*(\mathbf{x})$  dependen de manera lineal de las componentes del gradiente de presión macroscópico:

$$v_i^*(\mathbf{x}) = A_{ij}(\mathbf{x}) G_j \quad (3)$$

donde  $A_{ij}$  depende del vector de posición,  $\mathbf{x}$ . Como se muestra en el marco de la homogenización aplicada a medios porosos, el valor promedio sobre la celda unitaria del campo de velocidad esta dado por:

$$\langle v_i^*(\mathbf{x}) \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V v_i^*(\mathbf{x}) dV = \langle A_{ij}(\mathbf{x}) \rangle_V G_j = -\frac{k_{ij}}{\mu_f} G_j \quad (4)$$

donde  $k_{ij}$  son las componentes del tensor de permeabilidad. Por lo tanto, el cálculo de la permeabilidad requiere determinar la velocidad local  $\mathbf{v}^*(\mathbf{x})$ , lo que puede ser logrado usando un método basado en la FFT.

### 2.2. Formulación basada en tensiones

En el fluido, la tensión local puede ser expresada como  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\sigma}^*$ , donde  $\boldsymbol{\sigma}^*$  es un campo de tensiones periódico y  $\Sigma_{ij}$  esta dado en función del gradiente de presión macroscópico,  $\Sigma_{ij} = G_k x_k \delta_{ij}$ . En el sólido la tensión no esta definida. Sin embargo, es posible extender  $\boldsymbol{\sigma}^*$  y  $\boldsymbol{\Sigma}$  por continuidad dentro del sólido. De esta manera, el problema local puede ser expresado de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \text{div}(\boldsymbol{\sigma}^*) + \mathbf{f}(\mathbf{x}) &= 0, \\ \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x}) &= \text{grad}_s(\mathbf{v}^*) \end{aligned} \quad (5)$$

donde  $\boldsymbol{\varepsilon}^*$  es el tensor tasa de deformación y  $\mathbf{f}_i = \Sigma_{ij,j}$ . El problema de Stokes se puede reestructurar entonces de la siguiente manera:

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{\boldsymbol{\Omega}}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \widehat{\mathbf{f}}(\boldsymbol{\xi}) - \widehat{\boldsymbol{\Delta}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) \quad (6)$$

donde la notación con el “sombbrero” indica la transformada de Fourier del tensor correspondiente. El tensor tasa de deformación se puede expresar como:

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}) * [\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) - p(\mathbf{x})\mathbf{I}] \quad (7)$$

con

$$A(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\mu_f} I_f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\mu_s} I_s(\mathbf{x}) \quad (8)$$

donde  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad de segundo orden y  $I_f(\mathbf{x})$  y  $I_s(\mathbf{x})$  son las funciones características del fluido y del sólido, respectivamente.  $I_f(\mathbf{x})$  es igual a 1 si el punto  $\mathbf{x}$  esta dentro del fluido, y es igual a 0 en cualquier otro punto;  $I_s(\mathbf{x}) = 1 - I_f(\mathbf{x})$ .

En la ecuación 6,  $\widehat{\Omega}$  es un tensor de tercer orden cuyas componentes están dadas por:

$$\widehat{\Omega}_{ijk}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{i}{|\boldsymbol{\xi}|} |2\bar{\xi}_i \bar{\xi}_j \bar{\xi}_k - \delta_{ij} \bar{\xi}_k - \delta_{ik} \bar{\xi}_j - \delta_{jk} \bar{\xi}_i|, \quad \bar{\xi} = \boldsymbol{\xi}/|\boldsymbol{\xi}|; \quad (9)$$

$\widehat{\Delta}^0$  es el operador de Green complementario asociado con un medio de referencia de viscosidad dinámica  $\mu_0$  definido como

$$\begin{aligned} \widehat{\Delta}^0(\boldsymbol{\xi}) &= 2\mu_0[\mathbf{k}^\perp \otimes \mathbf{k}^\perp + \mathbf{k}^\perp \underline{\otimes} \mathbf{k}^\perp], \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}, \\ \widehat{\Delta}^0(\mathbf{0}) &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (10)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|^2} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}, \\ \mathbf{k}^\perp &= \mathbf{I} - \mathbf{k}; \end{aligned} \quad (11)$$

y  $\mathbf{f}$  esta dado por:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{G} & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ -\frac{c_f}{c_s} \mathbf{G} & \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \end{cases} \quad (12)$$

donde  $c_f$  y  $c_s$  denotan la fracción de volumen de fluido y sólido, respectivamente.

El vector  $\mathbf{f}$  puede ser interpretado como un término fuente en la ecuación de Stokes que es igual al gradiente de presión aplicado en el fluido. En la fase sólida se considera un valor constante para  $\mathbf{f}$ , lo cual puede ser interpretado como una fuerza de arrastre producida por el flujo alrededor del sólido  $\Omega_s$ .

La ecuación 6 es resuelta por medio del siguiente proceso iterativo:

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{i+1} = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^i - \widehat{\Delta}^0 : \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (13)$$

el cual puede ser interpretado como un método iterativo de punto fijo asociado con el sistema lineal 6.  $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$  es inicializado como:

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^1 = \widehat{\Omega} : \widehat{\mathbf{f}} \quad (14)$$

Una vez que se alcanza la convergencia, el campo de velocidad puede ser calculado a partir del tensor tasa de deformación  $\widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ :

$$\widehat{\mathbf{v}} = \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}} : \widehat{\Omega} \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}. \quad (15)$$

La velocidad para  $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$  esta dada por una constante que representa su valor medio en  $\Omega$ . Esta constante puede ser determinada considerando la condición  $\mathbf{v} = \mathbf{0}$  en la fase sólida. Llamemos

$\widehat{v}^*$  al campo de velocidades calculado a partir de la ecuación 15 para cualquier  $\xi \neq 0$  y  $\widehat{v}^* = 0$  para  $\xi = 0$ . Este campo de velocidades tiene un promedio volumétrico nulo sobre  $\Omega$  y es constante dentro de  $\Omega_s$ . El campo de velocidades total  $v$  es entonces la suma de  $v^*$  y una velocidad constante  $V$  que representa el promedio de  $v$  sobre el volumen  $\Omega$ :

$$v = V + v^*. \quad (16)$$

Como  $v$  es nula en  $\Omega_s$ , el campo de velocidades macroscópico está dado por  $V = -v^*$  en  $\Omega_s$ . Desde un punto de vista práctico, la condición  $v(x) = 0$  no se cumple rigurosamente en todo  $\Omega_s$ . Por lo tanto, el campo de velocidades macroscópico es calculado tomando el promedio de  $v^*$  sobre el volumen  $\Omega_s$ .

### 2.3. Algoritmo iterativo

Para la construcción del esquema iterativo se utiliza en este trabajo  $1/\mu_s = 0$ , lo cual implica un valor muy alto para el coeficiente de penalización. Sin embargo, con este valor se logra una buena tasa de convergencia. Además, se selecciona la viscosidad del material de referencia  $\mu_0 = 2\mu_f$ , lo cual es óptimo para la convergencia del algoritmo.

El problema es discretizado en una grilla rectangular que consiste de  $N_1 \times N_2 \times N_3$  voxels. Los vectores de onda discretos  $\xi_n$  están dados por:

$$\xi_{n_i} = 2\pi n_i \zeta_i, \quad n_i = -N_i \dots N_i - 1, \quad \zeta_i = \frac{1}{h_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (17)$$

donde  $h_i$  son las dimensiones de la celda a lo largo de cada dirección del sistema cartesiano. El algoritmo discretizado es:

- 1 : calcular  $I_{f_n} = I_f(x_n)$
- 2 : calcular  $\widehat{\Omega}_n = \widehat{\Omega}(\xi_n)$  a partir de la ecuación 9
- 3 : calcular  $\widehat{\Delta}_n^0 = \widehat{\Delta}^0(\xi_n)$  a partir de la ecuación 10
- 4 :  $f_n = -\frac{1}{c_s} G I_{f_n}$
- 5 :  $\widehat{f}_n = FFT(f_n)$
- 6 : inicializar  $\widehat{\sigma}_n^1 = \widehat{\Omega}_n \cdot \widehat{f}_n$
- 7 : mientras  $test < \epsilon$
- 8 :  $\sigma_n^i = FFT^{-1}(\widehat{\sigma}_n^i)$  (18)
- 9 :  $p_n^i = \text{tr}(\sigma_n^i)/3$
- 10 :  $\epsilon_n^i = \frac{1}{\mu_f} I_{f_n} (\sigma_n^i - p_n^i I)$
- 11 :  $\widehat{\epsilon}_n^i = FFT(\epsilon_n^i)$
- 12 :  $test = \frac{\|\widehat{\epsilon}_n^i - \widehat{\epsilon}_n^{i-1}\|}{\|\widehat{\epsilon}_n^i\|}$
- 13 :  $\widehat{\sigma}_n^{i+1} = \widehat{\sigma}_n^i - \widehat{\Delta}_n^0 : \widehat{\epsilon}_n^i$
- 14 : finalizar

En el paso 7 se utiliza un test de convergencia basado en la norma de la diferencia entre la tasa de deformación calculada en la iteración  $i$  e  $i - 1$  con  $\epsilon = 10^{-2}$ .

Desde un punto de vista práctico, la permeabilidad es calculada tomando  $\mu_f = 1$  y aplicando un gradiente de presión  $\mathbf{G} = -\mathbf{e}_i$  para  $i = 1, 2, 3$  donde  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$  es el vector unitario de la base cartesiana. Con esta elección, el promedio del campo de velocidades,  $V_i = \langle v_i \rangle_\Omega$  es exactamente  $V_i = k_{ij}$  cuando  $\mathbf{G} = -\mathbf{e}_j$  es prescrito en el sistema.

## 2.4. Implementación

El esquema 18 se programó en C y se paralelizó utilizando MPI y OpenMP. Se usaron dos computadoras para probar la implementación, una HP ML350p equipada con 2 procesadores Intel E5-2620 Xeon y 136GB de RAM, y una Dell PowerEdge C6145 equipada con 4 procesadores AMD Opteron 6276s y 128GB de RAM. Con el objetivo de determinar el tiempo de cómputo, se utilizó un modelo de una celda unitaria con una esfera rígida en el centro como el mostrado en la Figura 1. El modelo fue discretizado utilizando una grilla regular de  $512 \times 512 \times 512$  voxels. Se requirieron 41 iteraciones para alcanzar la tolerancia preestablecida. El tiempo de solución fue de aproximadamente 10 minutos en el sistema HP en modo secuencial (1 procesador), mientras que en paralelo se logró un speedup de  $10\times$  utilizando 24 procesadores lógicos. En el sistema Dell el tiempo de cómputo fue de 8 minutos en modo secuencial; en paralelo se logró un speedup máximo de  $19\times$  con 64 procesadores lógicos. En lo que respecta al uso de memoria, este aumentó linealmente con el número de voxels de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\text{Memory [GB]} = 0,515 \frac{\text{Number of voxels}}{1 \times 10^6} \quad (19)$$

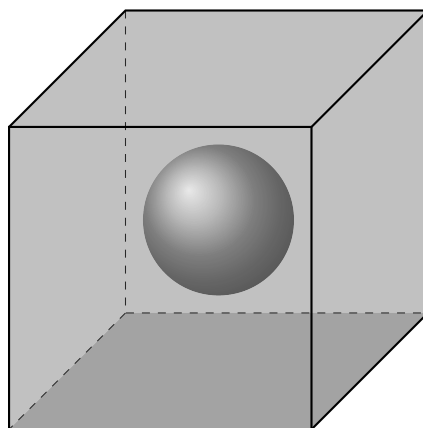


Figura 1: Celda unitaria conteniendo una esfera rígida en el centro.

## 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para verificar la aplicabilidad del método a geometrías trabeculares se construyeron microestructuras artificiales empleando un enfoque de diseño generativo, la estrategia de teselación de Voronoi, recientemente introducida por Fantini et al. (2016). Este método permite crear una microestructura porosa e interconectada, tal como la que se puede observar en el hueso natural. La figura 2 muestra la microestructura utilizada en este trabajo. Para que las dimensiones de la microestructura sean comparables con las de una muestra de hueso natural se le asignó un tamaño de  $4 \times 4 \times 4 [mm]$ . De esta manera la muestra artificial tiene una fracción de volumen sólida  $\phi = 0,33$ , un espesor trabecular  $t = 205 [\mu m]$  y un espaciado trabecular  $s = 439 [\mu m]$ .

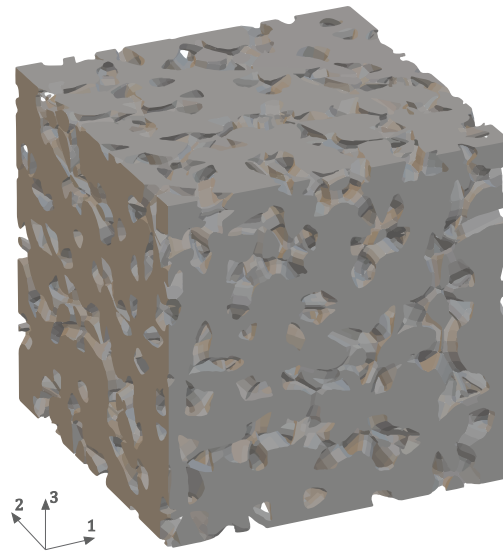


Figura 2: Microestructura artificial generada utilizando la estrategia de teselación de Voronoi.

Se realizaron modelos con diferentes discretizaciones y se analizó la convergencia del método. La figura 3 muestra los resultados obtenidos para  $k_{11}$ ,  $k_{22}$  y  $k_{33}$  en función del tamaño de voxel normalizado  $d/t$ . Las componentes  $k_{ij}$  con  $i \neq j$  no son mostradas aquí ya que, debido a la isotropía de la muestra, sus valores son cercanos a cero. Como se puede ver, las componentes  $k_{ii}$  varían linealmente con el tamaño de voxel. Los ajustes lineales tienen coeficientes de determinación  $R^2$  superiores a 0.99, por lo que es posible realizar extrapolaciones lineales precisas de las  $k_{ii}$  a tamaño de voxel cero. La Tabla 1 muestra los resultados obtenidos.

	FFT	FEM	Difference
$k_{11} [m^2]$	2,08E-09	2.17E-09	4 %
$k_{22} [m^2]$	2,08E-09	2.16E-09	4 %
$k_{33} [m^2]$	2,10E-09	2.21E-09	5 %

Tabla 1: Comparación de la permeabilidad obtenida con el método de FFT y FEM.

Los resultados fueron comparados con los obtenidos mediante FEM utilizando tres modelos como los que se muestran en la figura 4. La formulación del problema es la correspondiente a un flujo de Stokes de viscosidad uniforme, estabilizada por el método PSPG (Tezduyar et al., 1992). A fines de condicionar el sistema de ecuaciones resultante, se resuelve a través de una formulación transitoria hasta alcanzar el régimen estacionario buscado. La discretización del dominio se realiza con elementos tetraédricos y triangulares. En ambos casos los elementos son de interpolación lineal, lo cual es posible por el uso de la estabilización PSPG. Se imponen condiciones periódicas de forma fuerte, para lo cual fue necesario espejar la geometría (Figura 2) de manera de encontrar para cada nodo en la superficie exterior los pares correspondientes *master/slave*. Con el fin de simplificar el modelo y reducir el costo computacional, las condiciones precedentes se aplicaron únicamente en la dirección en la que se impone el gradiente de presión  $G$ . En las direcciones transversales a  $G$  se emplearon condiciones de simetría.

El cálculo de la permeabilidad equivalente del sistema se realiza a partir de las ecuaciones de Darcy para medios porosos utilizando los valores resultantes de la solución del modelo de

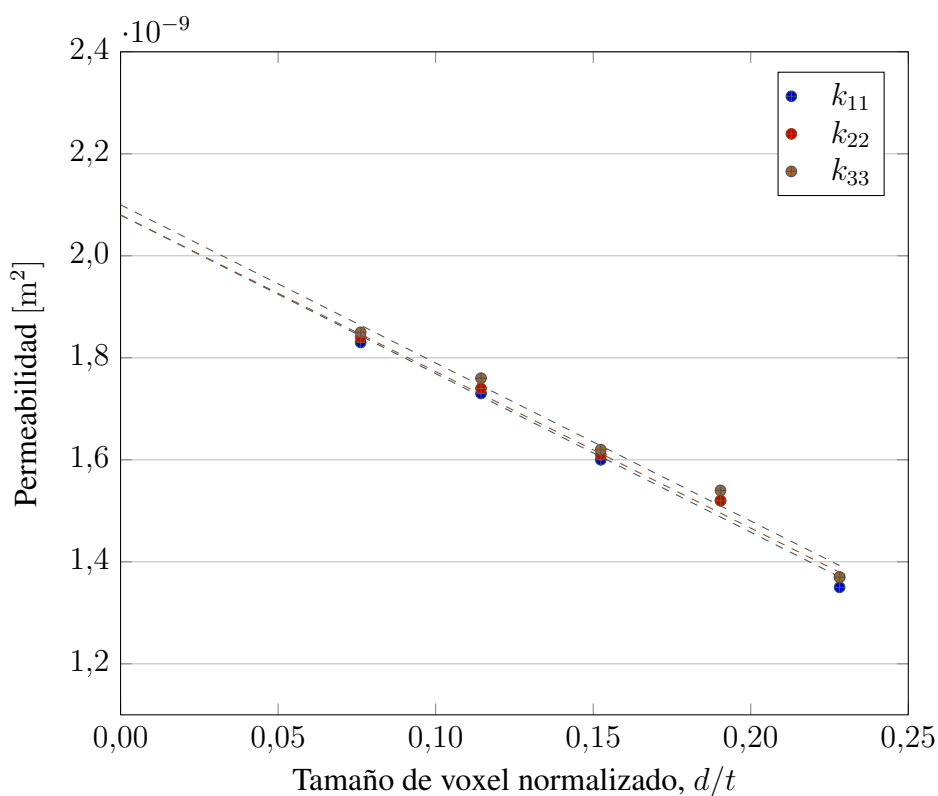


Figura 3: Permeabilidad de la microestructura artificial obtenida utilizando el método de FFT.

Stokes, para gradientes aplicados de acuerdo a la metodología de la sección 2.3:

$$q_i = \frac{1}{|S_i|} \int_{S_i} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS_i \quad (20)$$

siendo  $q_i$  el flujo a través de la sección  $S_i$  orientada según la dirección  $\mathbf{e}_i$  para  $i = 1, 2, 3$ , en cada una de las direcciones en las que se impone  $\mathbf{G}$ . De esta manera la permeabilidad puede computarse según la ecuación:

$$q_i = -\frac{k_{ij}}{\mu_f} G_j \quad (21)$$

siendo  $k_{ij}$  las componentes del tensor de permeabilidad y  $\mu_f$  la viscosidad del fluido. Por otro lado, resulta evidente notar de las ecuaciones 20 y 21 que, dadas las condiciones de simetría

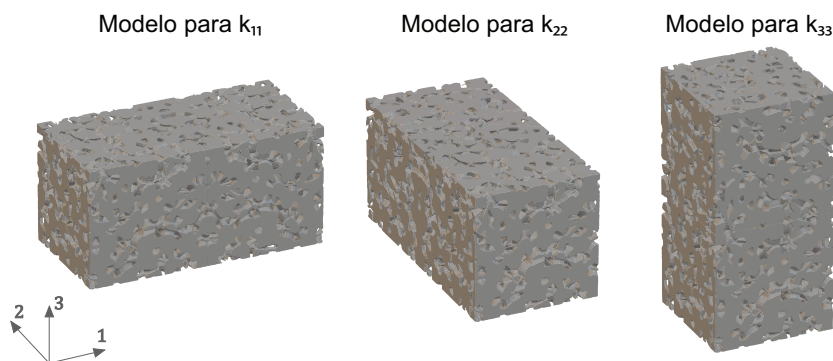


Figura 4: Modelos de elementos finitos utilizados para determinar la permeabilidad en las direcciones principales.



impuestas al flujo, el tensor permeabilidad  $k_{ij}$  es diagonal. A los fines prácticos, se utilizan valores unitarios de  $G$  y  $\mu_f$ , consistente con lo hecho en la sección 2.3.

La Figura 5 muestra los resultados obtenidos para las componentes  $k_{ii}$  en función del tamaño de elemento normalizado  $e/t$ . Se puede observar, al igual que con el método de FFT, una variación lineal con el tamaño del elemento. La Tabla 1 muestra los valores obtenidos cuando se realiza una extrapolación a tamaño de elemento cero. Cuando se compara con el método de FFT se puede observar que FEM produce resultados entre un 4 % y un 5 % mayores (ver Tabla 1).

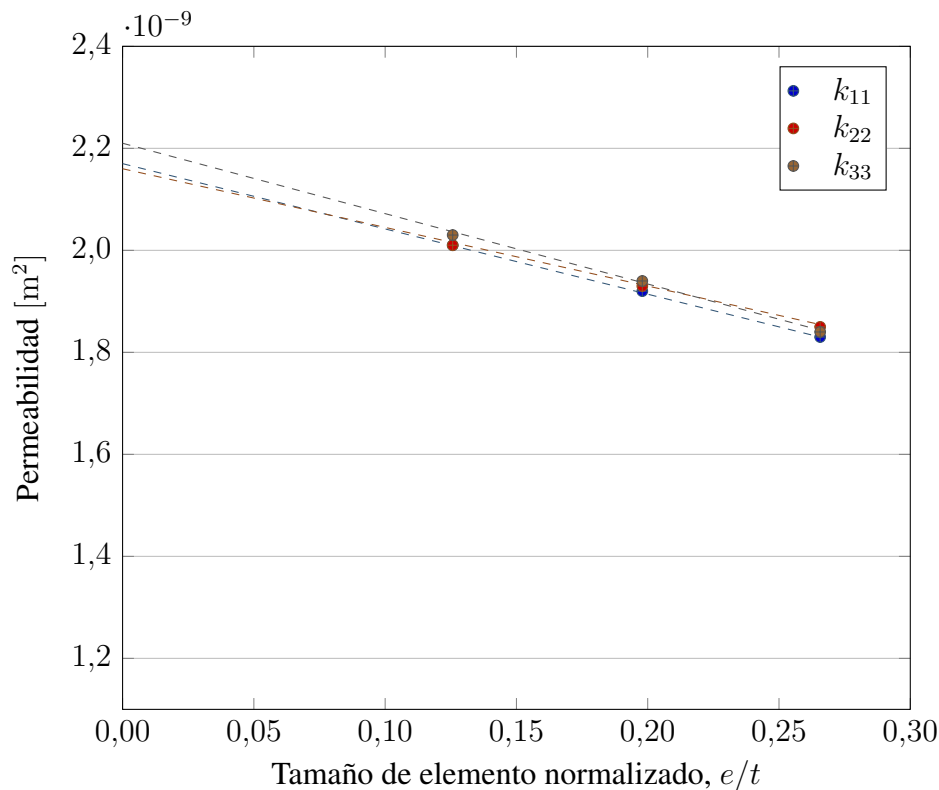


Figura 5: Permeabilidad de la microestructura artificial obtenida utilizando FEM.

#### 4. CONCLUSIONES

Se presentó en este trabajo la aplicación de un método computacional basado en la transformada rápida de Fourier al cálculo de la permeabilidad de microestructuras trabeculares artificiales.

El método fue verificado empleando una microestructura construida empleando un enfoque de diseño generativo, la estrategia de teselación de Voronoi. Los resultados fueron comparados con los obtenidos haciendo uso del método de los elementos finitos.

Se observó que las componentes del tensor de permeabilidad varían linealmente con el tamaño de voxel. Este mismo comportamiento también se presentó en los modelos realizados utilizando el método de elementos finitos. Las componentes del tensor de permeabilidad fueron entonces determinadas extrapolando a tamaño de voxel (o elemento en el caso de FEM) cero. Se obtuvo un excelente acuerdo entre los valores de permeabilidad obtenidos mediante FFT y aquellos obtenidos con FEM, con diferencias menores al 5 %.

## REFERENCIAS

- Blanchard R., Morin C., Malandrino A., Vella A., Sant Z., y Hellmich C. Patient-specific fracture risk assessment of vertebrae: a multiscale approach coupling X-ray physics and continuum micromechanics. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 26(1):n/a–n/a, 2015. ISSN 20407939. doi:10.1002/cnm.2760.
- Canuto C., Quarteroni A., Hussaini M.Y., y Zang T.A. *Spectral Methods*. Scientific Computation. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007. ISBN 978-3-540-30727-3. doi:10.1007/978-3-540-30728-0.
- Carretta R., Lorenzetti S., y Müller R. Towards patient-specific material modeling of trabecular bone post-yield behavior. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 29(2):250–272, 2013. ISSN 20407939. doi:10.1002/cnm.2516.
- Currey J.D. *Bones: Structure and Mechanics*. Princeton University Press, 2006. ISBN 9781400849505.
- Daish C., Blanchard R., Gulati K., Losic D., Findlay D., Harvie D., y Pivonka P. Estimation of anisotropic permeability in trabecular bone based on microCT imaging and pore-scale fluid dynamics simulations. *Bone Reports*, 6:129–139, 2017. ISSN 23521872. doi:10.1016/j.bonr.2016.12.002.
- Ebinger T., Diebels S., y Steeb H. Numerical homogenization techniques applied to growth and remodelling phenomena. *Computational Mechanics*, 39(6):815–830, 2007. ISSN 01787675. doi:10.1007/s00466-006-0071-8.
- Fantini M., Curto M., y De Crescenzo F. A method to design biomimetic scaffolds for bone tissue engineering based on Voronoi lattices. *Virtual and Physical Prototyping*, 11(2):77–90, 2016. ISSN 17452767. doi:10.1080/17452759.2016.1172301.
- Gilbert R.P., Guyenne P., y Yvonne Ou M. A quantitative ultrasound model of the bone with blood as the interstitial fluid. *Mathematical and Computer Modelling*, 55(9-10):2029–2039, 2012. ISSN 08957177. doi:10.1016/j.mcm.2011.12.004.
- Guo X.D.E., McMahon T.A., Keaveny T.M., Hayes W.C., y Gibson L.J. Finite element modeling of damage accumulation in trabecular bone under cyclic loading. *Journal of Biomechanics*, 27(2):145–155, 1994. ISSN 00219290. doi:10.1016/0021-9290(94)90203-8.
- Kanit T., Forest S., Galliet I., Mounoury V., y Jeulin D. Determination of the size of the representative volume element for random composites: Statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40(13-14):3647–3679, 2003. ISSN 00207683. doi:10.1016/S0020-7683(03)00143-4.
- Kowalczyk P. Elastic properties of cancellous bone derived from finite element models of parameterized microstructure cells. *Journal of Biomechanics*, 36(7):961–972, 2003. ISSN 00219290. doi:10.1016/S0021-9290(03)00065-4.
- Kowalczyk P. Simulation of orthotropic microstructure remodelling of cancellous bone. *Journal of Biomechanics*, 43(3):563–569, 2010. ISSN 00219290. doi:10.1016/j.jbiomech.2009.09.045.
- Lane N.E. Epidemiology, etiology, and diagnosis of osteoporosis. *American Journal of Obstetrics and Gynecology*, 194(2):S3–S11, 2006. ISSN 00029378. doi:10.1016/j.ajog.2005.08.047.
- Ly H.B., Monchiet V., y Grande D. Computation of permeability with Fast Fourier Transform from 3-D digital images of porous microstructures. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 26(5):1328 – 1345, 2016. ISSN 09615539. doi:10.1108/HFF-12-2014-0369.

- Monchiet V., Bonnet G., y Lauriat G. A FFT-based method to compute the permeability induced by a Stokes slip flow through a porous medium. *Comptes Rendus - Mecanique*, 337(4):192–197, 2009. ISSN 16310721. doi:10.1016/j.crme.2009.04.003.
- 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(1-2):69–94, 1998. ISSN 00457825. doi:10.1016/S0045-7825(97)00218-1.
- Pistoia W., van Rietbergen B., Laib A., y Rügsegger P. High-resolution three-dimensional-pQCT images can be an adequate basis for in-vivo microFE analysis of bone. *Journal of biomechanical engineering*, 123(2):176–183, 2001. ISSN 01480731. doi:10.1115/1.1352734.
- Podshivalov L., Fischer A., y Bar-Yoseph P.Z. 3D hierarchical geometric modeling and multiscale FE analysis as a base for individualized medical diagnosis of bone structure. *Bone*, 48(4):693–703, 2011a. ISSN 1873-2763. doi:10.1016/j.bone.2010.12.022.
- Podshivalov L., Fischer A., y Bar-Yoseph P.Z. Multiscale FE method for analysis of bone micro-structures. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 4(6):888–899, 2011b. ISSN 17516161. doi:10.1016/j.jmbbm.2011.03.003.
- Stauber M. y Müller R. Age-related changes in trabecular bone microstructures: global and local morphometry. *Osteoporosis International*, 17(4):616–626, 2006. ISSN 0937-941X. doi:10.1007/s00198-005-0025-6.
- Tezduyar T.E., Mittal S., Ray S.E., y Shih R. Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1992. ISSN 00457825. doi:10.1016/0045-7825(92)90141-6.
- Ulrich D., van Rietbergen B., Laib A., y Rügsegger P. The ability of three-dimensional structural indices to reflect mechanical aspects of trabecular bone. *Bone*, 25(1):55–60, 1999. ISSN 87563282. doi:10.1016/S8756-3282(99)00098-8.
- van Rietbergen B. y Ito K. A survey of micro-finite element analysis for clinical assessment of bone strength: the first decade. *Journal of biomechanics*, 48(5):832–41, 2015. ISSN 1873-2380. doi:10.1016/j.jbiomech.2014.12.024.
- van Rietbergen B., Odgaard A., Kabel J., y Huiskes R. Relationships between bone morphology and bone elastic properties can be accurately quantified using high-resolution computer reconstructions. *Journal of Orthopaedic Research*, 16(1):23–28, 1998. ISSN 07360266. doi:10.1002/jor.1100160105.
- Widmer R.P. y Ferguson S.J. On the interrelationship of permeability and structural parameters of vertebral trabecular bone: a parametric computational study. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 16(8):908–922, 2013. ISSN 1025-5842. doi:10.1080/10255842.2011.643787.