UNIVERSIDAD NACIONAL DE MAR DEL PLATA

Facultad de Ingeniería

Estudio del Comportamiento Mecánico del Hueso Trabecular Mediante Técnicas de Homogenización

Trabajo presentado por Ariel A. Ibarra Pino para optar por el grado académico de

Magister Scientiae en Ciencia y Tecnología de Materiales

Trabajo desarrollado en el Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, INTEMA (UNMdP-CONICET) Mar del Plata, Buenos Aires, Argentina

> Director: Ph.D. Adrián P. Cisilino Co-director: Dr. Mirco D. Chapetti

> > Octubre de 2011



RINFI se desarrolla en forma conjunta entre el INTEMA y la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Mar del Plata. Tiene como objetivo recopilar, organizar, gestionar, difundir y preservar documentos digitales en Ingeniería, Ciencia y Tecnología de Materiales y Ciencias Afines. A través del Acceso Abierto, se pretende aumentar la visibilidad y el impacto de los resultados de la investigación, asumiendo las políticas y cumpliendo con los protocolos y estándares internacionales para la interoperabilidad entre repositorios

Esta obra está bajo una <u>Licencia Creative Commons Atribución</u>-NoComercial-Compartirlgual 4.0 Internacional.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE MAR DEL PLATA

Facultad de Ingeniería

Estudio del Comportamiento Mecánico del Hueso Trabecular Mediante Técnicas de Homogenización

Trabajo presentado por Ariel A. Ibarra Pino para optar por el grado académico de

Magister Scientiae en Ciencia y Tecnología de Materiales

Trabajo desarrollado en el Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, INTEMA (UNMdP-CONICET) Mar del Plata, Buenos Aires, Argentina

> Director: Ph.D. Adrián P. Cisilino Co-director: Dr. Mirco D. Chapetti

> > Octubre de 2011

Resumen

En este trabajo se desarrollan e implementan herramientas numéricas para el análisis mecánico multiescala del hueso trabecular y, las herramientas computacionales para la reconstrucción de modelos tridimensionales de la geometría trabecular a partir de imágenes médicas.

Se presenta una revisión de los métodos de homogenización. Sus características son analizadas y discutidas considerando su aplicacIón al hueso trabecular. A partir de los resultados de este estudio, se seleccionan a los métodos de homogenización directa y asintótica como los más adecuados para computar el tensor de elasticidad del material aparente que caracteriza el comportamiento mecánico de una muestra de hueso trabecular.

Los métodos de homogenización directo y asintótico se implementan numéricamente usando el método de los elementos finitos. Con este propósito, varios programas se implementaron usando Matlab y Abaqus. La implementación de los métodos de homogenización se discute detalladamente. Las formulaciones e implementaciones se verifican y validan. De este modo, se demuestra que el método de homogenización asintótica provee los mejores resultados para el análisis del hueso trabecular

Se presenta un novedoso procedimiento para la construcción de los modelos de elementos finitos de la geometría trabecular. Este procedimiento permite analizar muestras detalladas de hueso trabecular discretizadas con elementos hexaédricos. Se propone un nuevo índice para la evaluación de la calidad de la representación geométrica de los modelos reconstruidos.

Se presenta una revisión de las técnicas disponibles para la medición de las propiedades elásticas del tejido trabecular. Se determina que las técnicas de indentación instrumentada son las más adecuadas. Por consiguiente, se desarrollaron e implementaron procedimientos para la conservación, preparación y ensayo de muestras de hueso trabecular. Las propiedades del tejido trabecular se emplean luego como datos de entrada para los estudios de homogenización.

Finalmente, los procedimientos numéricos y experimentales desarrollados e implementados en este trabajo se aplican a una muestra de hueso trabecular de origen bovino.

Abstract

This thesis is devoted to the developing and implementation of a computational and experimental procedure for multi-scale analysis of the mechanical properties of the trabecular bone.

A review of homogenization methods in the context of linear elasticity is presented first. The pros and cons of the different techniques are analyzed and discussed considering its application to trabecular bone. As a result, the direct and asymptotic homogenization methods are selected as the most suitable techniques for the computation of the homogenized apparent elastic tensor of trabecular bone samples.

The direct and asymptotic homogenization methods are numerically implemented using the finite element method. To this end, a number of programs are developed using Matlab and Abaqus. Implementation issues are discussed in detail. The formulations and implementations are verified and validated. As a result of verification and validation analyses, the asymptotic homogenization method is found to provide the best results for the analysis of trabecular bone.

A novel procedure to build finite element models of the trabecular architecture from microtomographic images is developed. The procedure enables analysis of trabecular bone in full detail using hexahedral elements. A new index is proposed to assess the quality of the finite element reconstruction.

Experimental techniques available in order to measure the elastic properties of trabecular tissue are reviewed. Instrumented indentation is found to be the most suitable. Thus, procedures for storage, preparation and testing of trabecular bone samples are developed and implemented. The elastic properties of trabecular tissue are input data for the homogenization analyses.

Both, experimental and numerical procedures developed and implemented in the thesis, are applied for the homogenization of samples of bovine trabecular bone.

Agradecimientos

La conclusión de este trabajo es el fruto de varios años de trabajo y aprendizaje. En ese sentido, sería injusto referirme exclusivamente a quienes me acompañaron durante este período como estudiante de post-grado en ciencia de materiales. En estas líneas, aún con el riesgo de olvidarme de alguien (o algo), trataré de ser justo con todos.

Deseo comenzar por agradecer a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica (ANPCyP), la Universidad Nacional de Mar del Plata (UNMdP) y al Concejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por financiar este trabajo. En este sentido, merecen un reconocimiento particular la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Mar del Plata y el Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA) por haberme brindado el mejor lugar que pudieron para el desarrollo de mi trabajo de investigación.

A través de estas instituciones, deseo extender mi agradecimiento a todos aquellos que, con su esfuerzo, me han otorgado el privilegio de una educación pública. Es imposible nombrarlos a todos, mil disculpas. Pese a ello, aún a riesgo de ser injusto con los demás, quiero verdaderamente agradecer a mis maestros de primaria, secundaria y de grado por hacer de mi el profesional que soy.

Ahora, ya en un plano más personal, deseo agradecer al Prof. Santiago Urquiza. Gracias a él (o por culpa de él) me interesé por el modelado de sistemas físicos desde un punto de vista físico-matemático durante mi tercer año como estudiante de grado. A José Luis Otegui, por introducirme al mundo de la investigación y la docencia. A Aníbal Márquez por permitirme aprender de él y demostrarme que, sin importar cuál sea mi formación y cuánto me esfuerce, jamás voy a tener su talento. A los miembros de comisión de seguimiento por sus comentarios y sugerencias. A Mirco Chapetti y a Adrián Cisilino por aceptar guiarme en este trabajo, por darme la libertad necesaria para avanzar en la dirección en que fui al descubrir una oportunidad de mejora, por mantener mi mente activa y por su comprensión cuando los tiempos no fueron buenos. Adrián, su interminable apoyo, paciencia e interés han sido una verdadera inspiración.

El trabajo experimental presentado en este documento no hubiese sido posible sin la colaboración del Prof. José Marcos Alves y Alessandro Márcio Hakme da Silva, del programa de Post-grado Interuindades de Bioingeniería de la Escuela de Ingeniería de San Carlos (USP, Brasil). Ellos gentilmente cedieron imágenes microtomográficas de su trabajo de investigación para que yo pueda continuar con el mío. El personal técnico del Laboratorio de Superficies, Ing. Bernardo Daga y la Dra. Patricia Suarez, me asistieron pacientemente durante los ensayos de microindentación. Agradezco profundamente la paciencia y tolerancia de la Dra. Josefina Ballarre, quien obró como supervisora en aspectos experimentales, por dedicarme su tiempo aún dentro de su ajustada agenda. Las discusiones con la Dra. Laura Fasce acerca de los procedimientos de indentación y las "manías" del equipo han sido invaluables. Agradezco también a la Veterinaria Mariela Radicioni por su paciencia y desinteresado esfuerzo para hacerme comprender la anatomía animal. No puedo olvidar a Néstor Calvo, quien proveyó el programa MeshSuite con el cual comenzamos nuestro camino hacia la generación de mallas y grillas de elementos finitos, ni de los participantes de los Talleres sobre modelado multiescala de materiales, sus comentarios y guía han sido invaluables.

El entorno del grupo de trabajo ha logrado hacer que realizar este trabajo sea un verdadero placer: Nacho (gracias por compartir un sueño), Marco, Mariano, Agustín (gracias por todo a los tres) y el resto del grupo de la Div. Soldadura y Fractomecánica, mil gracias por proveerme de semejante atmósfera.

Gracias a mis alumnos de las cátedras de Integridad, Cañerías, Mecánica del Sólido, Estática del Sólido y Mecánica Computacional por tolerarme y permitirme compartir lo que aprendí. Gracias a Fede por enseñarme el valor que esto tiene.

Deseo agradecer a los Dres. Gustavo Abraham, Santiago Urquiza y Martín Idiart por sus siempre oportunos comentarios, por aceptar la tediosa tarea de leer este trabajo y servir como evaluadores. Es un honor tener semejante comité evaluador. Espero algún día ser capaz de hacer una contribución científica del calibre que Uds. ya han hecho.

Finalmente, la finalización de un trabajo, al menos de uno mío, no es fruto del trabajo de un sólo hombre. Muchas personas hicieron un esfuerzo grande y un sacrificio enorme. Debo agradecer profundamente, y pedir perdón a la vez, a mis amigos, compañeros de entrenamiento y de trabajo, pero principalmente a mi familia por el tiempo que no les dediqué. Gracias por comprender cuánto disfruto esto.

Índice general

esum	en	Ι
ostra	\mathbf{ct}	II
grade	ecimientos	III
Intr	oducción	1
1.1.	Contexto y motivación	1
1.2.	Objetivos y alcance	2
1.3.	Estudio mecánico óseo: Antecedentes	3
1.4.	Organización de este trabajo	5
Des	cripción del hueso trabecular	7
2.1.	Composición y escalas del hueso	7
2.2.	El hueso y el tejido trabecular como materiales compuestos	8
2.3.	Propiedades mecánicas del hueso y el tejido trabecular	9
2.4.	Discusión y conclusiones	13
Noc	iones de elasticidad lineal y homogenización	15
3.1.	Noción de medio continuo	15
	3.1.1. Homogeneidad e isotropía en medios continuos	16
	3.1.2. Fuerzas de volumen y de superficie	16
3.2.	Tensiones	16
	3.2.1. Tensor de tensiones	17
	3.2.2. Cantidad de movimiento lineal y angular	18
	3.2.3. Conservación de la cantidad de movimiento: equilibrio y	
	simetría del tensor de tensiones \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	19
3.3.	Deformaciones	20
	3.3.1. Gradiente y tensores de deformación	20
3.4.	Elasticidad lineal	21
3.5.	Nociones elementales de materiales compuestos	22
	3.5.1. Homogeneidad, dimensiones y separación de escalas	23
	3.5.2. Homogenización y localización	24
	3.5.3. Concepto de elemento de volumen representativo: escalas y	
	propiedades	24
	3.5.4. Condiciones de contorno	26
	3.5.5. Teoremas de valor medio y propiedades	27
	3.5.6. Propiedades globales	28
3.6.	Métodos de homogenización	29
	3.6.1. Modelos de campo medio	29
	esum pstra grade Intr 1.1. 1.2. 1.3. 1.4. Dese 2.1. 2.2. 2.3. 2.4. Noc 3.1. 3.2. 3.3. 3.4. 3.5. 3.6.	ssumen sstract gradecimientos Introducción 1.1 Contexto y motivación 1.2 Objetivos y alcance 1.3 Estudio mecánico óseo: Antecedentes 1.4 Organización de este trabajo Descripción del hueso trabecular 2.1 Composición y escalas del hueso 2.2 El hueso y el tejido trabecular como materiales compuestos 2.3 Propiedades mecánicas del hueso y el tejido trabecular 2.4 Discusión y conclusiones Nociones de elasticidad lineal y homogenización 3.1. Noción de medio continuo 3.1.1. Homogeneidad e isotropía en medios continuos 3.1.2. Fuerzas de volumen y de superficie 3.2.1 Tensor de tensiones 3.2.2. Cantidad de movimiento lineal y angular 3.2.3. Conservación de la cantidad de movimiento: equilibrio y simetría del tensor de tensiones 3.3.1. Gradiente y tensores de deformación 3.4. Elasticidad lineal 3.5. Nociones elementales de materiales compuestos 3.5.1. Homogeneidad, dimensiones y separación de escalas 3.5.2. Homogenización y localización 3.5.3. Concepto de elemento de volumen representativo: escalas y propiedades 3.5.6. Propiedades globales 3.6. Métodos de homogenización 3.6.1. Modelos de campo medio

		3.6.2. Métodos de acotación	32
		3.6.3. Métodos de celdas embebidas y de ventana	34
		3.6.4. El método mecánico directo	35
		3.6.5. El método de homogenización asintótica	36
	3.7.	Discusión y conclusiones	37
4.	Cor	nstrucción modelos 3D a partir de microTC	39
	4.1.	Introducción	39
	4.2.	Funcionamiento de un microtomógrafo	40
	4.3.	Procedimiento de construcción de modelos de elementos finitos	42
		4.3.1. Adquisición v segmentación	42
		4.3.2. Binarización	43
		4.3.3. Construcción de la nube de puntos	44
		434 Generación de la malla de elementos finitos	44
	44	Fuentes principales de error	45
	1.1.	4 4 1 Errores de segmentación	46
		4 4 2 Errores de discretización	47
	4 5	Casos de estudio	50
	1.0.	4.5.1 Métodos	50
		4.5.2 Resultados	53
		4.5.3 Discusión	56
	4.6	Discusión y conclusiones	58
	1.0.		00
5.	Mé	todo de homogenización directo	61
	5.1.	Introducción	61
	5.2.	Condiciones de contorno	63
		5.2.1. Modelos 3D \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	64
		5.2.2. Modelos 2D \ldots	68
	5.3.	Cómputo de los tensores	70
	5.4.	Cotas a las propiedades estimadas	72
	5.5.	Resumen	74
6.	Mé	todo de homogenización asintótico	77
	6.1.	$Introducción \ldots \ldots$	77
	6.2.	Condiciones de contorno	80
		6.2.1. Aspectos teóricos	80
		6.2.2. Aspectos prácticos	84
	6.3.	Cómputo del tensor de localización y de elasticidad	85
	6.4.	Resumen	87
7.	Ver	ificación y validación	89
	7.1.	Modelos, verificación y presentación de este capítulo	89
	7.2.	Selección del tipo de elemento	90
	7.3.	Verificación de las herramientas computacionales 2D	92

		7.3.1. Métodos \ldots	92
		7.3.2. Resultados	93
		7.3.3. Discusión	95
	7.4.	Modelos idealizados de trabéculas óseas en 2D	96
		7.4.1. Métodos	96
		7.4.2. Resultados	97
		7.4.3. Discusión	98
	7.5.	Modelos 2D reconstruidos a partir de imágenes de MicroTC	100
		7.5.1. Métodos	100
		7.5.2. Resultados y discusión	101
	7.6.	Verificación de las herramientas computacionales 3D	102
		7.6.1. Métodos	102
		7.6.2. Resultados	103
		7.6.3. Discusión	105
	7.7.	Validación de los modelos	106
		7.7.1. Métodos	107
		7.7.2. Resultados	109
		7.7.3. Discusión y conclusiones	109
	7.8.	Modelos 3D reconstruidos a partir de imágenes de microTC	110
		7.8.1. Métodos	110
		7.8.2. Resultados	111
		7.8.3. Discusión	120
	7.9.	Resumen	122
8.	7.9. Det	Resumen	122 1 25
8.	7.9. Det 8.1.	Resumen	122 1 25 125
8.	7.9.Det8.1.8.2.	Resumen	122 1 25 125 126
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 	Resumen	122 125 125 126 126
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 	Resumen	122 125 125 126 126 127
8.	7.9.Det8.1.8.2.8.3.	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 125 126 126 127 or 134
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 	Resumen	122 125 125 126 126 127 or 134 135 135
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 	Resumen	122 125 126 126 127 0r 134 135 135 137
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 	Resumen	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138 140
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138 140 140
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138 140 140 140
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138 140 140 140 141
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 8.6. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138 140 140 140 141 142
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 8.6. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138 140 140 140 141 142 142
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 8.6. 	Resumen erminación del módulo E del tejido trabecular Introducción	122 125 126 126 127 or 134 135 137 138 140 140 140 141 142 142 146
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 8.6. 	Resumen	122 125 126 126 127 07 134 135 135 137 138 140 140 140 141 142 142 146 150
8.	 7.9. Det 8.1. 8.2. 8.3. 8.4. 8.5. 8.6. 	Resumen	122 125 126 126 127 or 134 135 135 137 138 140 140 140 140 141 142 142 142 146 150 152

9.). Caso de estudio		
	9.1.	Materiales y métodos	. 155
	9.2.	Resultados	. 157
	9.3.	Discusión y conclusiones	. 159
10.Conclusiones y trabajo futuro161			
Lo	167		
Bi	bliog	grafía	169

1.1. Contexto y motivación

Durante las últimas décadas, el empleo de prótesis para el reemplazo de articulaciones se ha convertido en una práctica habitual de la cirugía ortopédica. Sin embargo, la fijación de las prótesis al hueso es uno de los mayores problemas en el diseño de implantes. Se ha reportado que las prótesis cementadas implantadas en pacientes jóvenes tienen tasas de falla del orden del 33 % dentro de un período de 5 a 15 años posteriores a su implante (Dorr et al., 1990). En muchos casos, esto es consecuencia del deterioro mecánico de la fijación debido al llamado proceso de adaptación o remodelado del tejido óseo.

El proceso de adaptación ósea consiste en la diferenciación del tejido germinal a fibroso y de cartílago a hueso. Los osteoclastos y osteoblastos construyen las microestructuras características del hueso cortical (tejido denso y compacto que forma la pared externa de los huesos) y trabecular (tejido poroso ubicado en el interior de los huesos) (Frost, 1988). Se estima que este proceso de adaptación estructural o remodelado esta gobernado por leyes mecánicas (Wolff, 1892).

Las teorías de remodelado actuales consideran que algún tipo de estímulo es responsable de la composición, forma y densidad de la estructura ósea. Los mecanismos que gobiernan este proceso se clasifican según corresponda su aplicación al tejido cortical o trabecular (Hart, 2001). En particular, para éste último se dispone de las teorías de elasticidad adaptiva (Cowin, 1986), densidad de energía de deformación (Carter et al., 1987), daño mecánico (Levenston y Carter, 1998), (García Aznar, 1999) y, de funciones de influencia para predecir la densidad y orientación de las trabéculas (Mullender et al., 1994).

Las teorías enumeradas precedentemente emplean varios parámetros de ajuste y métodos empíricos para relacionar la respuesta mecánica de porciones de tejido óseo con su comportamiento mecánico global. Muchas de ellas utilizan suposiciones acerca de la simetría material del hueso trabecular¹, siendo la más común la hipótesis de ortotropía. Así, se omite la influencia de las características microestructurales (espesor de las trabéculas, arreglo y orientación de las fases, etc.) sobre la respuesta aparente de la muestra o se condiciona la respuesta de dicha muestra. Dicho de otro modo, las mencionadas teorías de remodelado no incorporan información acerca de la microestructura ósea en forma explícita, por lo tanto al ser empleados para la predicción del comportamiento del sistema hueso-implante, los resultados obtenidos

¹Entiéndase que nos referimos a hueso trabecular cuando consideramos una muestra de hueso compuesta por las fases tejido y hueco.

proveen de información incompleta acerca de lo que ocurre en la intercara de la fijación. Además, presentan poco valor para el estudio del proceso de remodelado en sí mismo, un área de intenso trabajo e investigación en la actualidad.

Para evaluar el efecto macroscópico del remodelado interno es necesario vincular las múltiples escalas de problema. Parra ello, puesto que el hueso puede considerarse como un material heterogéneo (Keaveny et al., 2001), pueden emplearse los métodos de homogenización desarrollados para el estudio de materiales polifásicos. Con éstos métodos, la respuesta mecánica aparente de una muestra de hueso trabecular, o las propiedades globales que caracterizan dicha respuesta, resulta una función de las propiedades mecánicas del tejido y su arquitectura (van Rietbergen et al., 1995). Dada la compleja geometría trabecular el uso de técnicas numéricas, típicamente el método de los elementos finitos, en conjunto con los métodos de homogenización se hace mandatorio.

Numerosos especialistas consideran que los esquemas de homogenización y las técnicas numéricas pueden proveer de una base para el entendimiento tanto del proceso de adaptación, como para la mejora y diseño de implantes, (Ching-Chang et al., 1996; Hollister, 2005). Pero los beneficios de una combinación entre las técnicas de homogenización y las numéricas no se limitan al estudio biomecánico óseo, sino que pueden ser de utilidad para una moderna rama de la bioingeniería, la ingeniería de tejidos. Ésta última rama, emplea un novedoso concepto para la reparación de tejidos y órganos que consiste en el transplante de biofactores dentro de un material poroso y degradable conocido como "scaffold" (Hollister et al., 2005). Éstos componentes requieren de un cuidadoso diseño en una escala métrica que va de los 10 a los 1000 micrómetros y juegan un importante papel en la regeneración del tejido al preservar su volumen, permitir la liberación de biofactores y, en la provisión del soporte mecánico temporario necesario durante el período de remodelado y reparación (Hollister et al., 2005). El diseño de "scaffolds" con propiedades mecánicas y de transporte de masa específicos e incluso la estimación de su degradación, al igual que las teorías de remodelado óseo, requiere de un marco de estudio multiescala.

1.2. Objetivos y alcance

Este trabajo se enmarca dentro de un proyecto que tiene como objetivo desarrollar una herramienta computacional para el análisis biomecánico predictivo del comportamiento óseo que, incorporando el proceso de adaptación del tejido a escala microscópica, contribuya a la mejora del diseño de prótesis e implantes intracorpóreos, el desarrollo de scaffolds y, brinde un marco para la evaluación de teorías de remodelado a escala microestructural.

Para llevar a cabo este ambicioso proyecto se han establecido las siguientes etapas: estudio micromecánico, estudio e implementación de teorías de remodelado a nivel microscópico y el análisis multiescala del proceso de adaptación en piezas óseas completas. El presente trabajo comprende la primera etapa de estudio micromecánico y tiene objetivo desarrollar e implementar las herramientas numéricas para el análisis mecánico multiescala del tejido óseo, en particular, del hueso trabecular. Para ello, se evalúan y seleccionan métodos para la estimación de las propiedades mecánicas macroscópicas del hueso trabecular a partir de sus características microscópicas, esto incluye además, la determinación experimental de los parámetros físicos que tales métodos requieren.

Los métodos de homogenización necesitan de una adecuada descripción de la microestructura del hueso trabecular a efectos de que las estimaciones de tensión y deformación (o de cualquier otro estímulo mecánico bajo consideración), sean representativas del estado *in situ*. Por este motivo, otro objetivo de este trabajo consiste en desarrollar e implementar las herramientas computacionales para la construcción de modelos de elementos finitos del hueso trabecular a partir de imágenes médicas.

1.3. Estudio mecánico óseo: Antecedentes

La biomecánica puede considerarse como la ciencia dedicada a estudiar la mecánica de los seres vivos para entender su funcionamiento y predecir su comportamiento (Turner y Burr, 2001). Uno de sus objetivos principales es caracterizar el funcionamiento de los sistemas vivos en un intento por comprender la "operación" de los tejidos y órganos vivos desde un punto de vista mecánico. De este modo, tanto la predicción de los cambios debido a los estímulos que sufren dichos sistemas, como la propuesta y el desarrollo de métodos o procedimientos de intervención artificial sobre los mismos, quedan englobados por esta disciplina (García Aznar, 1999).

Las primeras publicaciones de biomecánica aplicada al tejido óseo datan del siglo diecinueve. En una de ellas, Wolff sentó las bases de lo que hoy se conoce como remodelado o adaptación ósea (Wolff, 1892). Pese a que en las décadas siguientes hubo algunos intentos en formular una teoría constitutiva del modelo de adaptación ósea, no fue sino hasta después de la aparición de las primeras computadoras que el interés en el estudio mecánico de piezas óseas fue impulsado nuevamente (García Aznar, 1999; Cowin, 2001).

El principal método numérico empleado para el estudio de piezas óseas es el método de los elementos finitos. En sus principios, se utilizó para el análisis de piezas óseas considerando al hueso como un material homogéneo y continuo. Posteriormente se empleó para el análisis de dispositivos de fijación y, eventualmente en el estudio combinado de prótesis de articulaciones. Una interesante revisión de los primeros trabajos en este campo puede hallarse en Huiskes y Chao (1983), mientras que los aspectos históricos pueden encontrarse en forma cronológica en García Aznar (1999). No obstante, en aquellos primeros estudios no se consideraba la influencia microestructura que era estudiada por separado (Hollister y Kikuchi, 1994), de hecho el hueso era considerado como un material isótropo.

Si bien buena parte de los primeros trabajos en biomecánica ósea y ortopedia empleando herramientas numéricas se centraron en la estimación de tensiones en piezas óseas e implantes, las décadas siguientes trajeron consigo un interés en el desarrollo de correlaciones para la predicción de los cambios en la estructura macroscópica ósea a partir de reglas matemáticas que contemplaban el estímulo y la geometría del hueso (Huiskes y Hollister, 1993). Nuevamente, el método de los elementos finitos fue empleado en forma intensiva, esta vez usando esquemas de adaptación típicamente iterativos. La mayoría de estos trabajos se basaron en los desarrollos de Cowin y Hegedus (1976).

La limitación de los modelos del continuo se hacía evidente conforme se avanzaba hacia una teoría de remodelado que no consideraba al hueso como un material isotrópico. Pese a que se realizaron esfuerzos tendientes a predecir el comportamiento mecánico del hueso trabecular empleando medidas escalares de masa o densidad, el uso de estos métodos no permite predecir las importantes diferencias en resistencia ni rigidez óseas (Goldstein et al., 1993). Poco a poco, la llamada "simulación de procesos" fue dando lugar a una nueva forma de estudiar el comportamiento mecánico óseo, el "modelado microestructural" (Huiskes y Hollister, 1993).

El modelado microestructural del tejido óseo se vio impulsado por la aparición de dos técnicas de adquisición de imágenes: la microtomografía computarizada (microTC) y la reconstrucción serial a partir de cortes con microtomo². Hasta el desarrollo de estas técnicas, sólo se habían empleado modelos idealizados de estructuras trabeculares, ver Hollister et al. (1991); Sadegh et al. (1993); Luo et al. (1995) y las referencias citadas allí. Por ejemplo, Hollister et al. (1991) construyó modelos de elementos finitos de geometrías idealizadas de hueso trabecular haciendo que la fracción volumétrica ósea, el espesor de las trabéculas y su separación resultasen similares a los del hueso trabecular. Observó grandes discrepancias en la rigidez respecto del hueso real por cuanto concluyó que para minimizar tales discrepancias eran necesarios modelos más precisos de la microestructura (Huiskes y Hollister, 1993).

Goldstein et al. (1993) analizó ciento cuatro probetas de hueso trabecular procesando imágenes de microTC y determinó que más de un 80 % de las diferencias en el comportamiento mecánico del hueso trabecular pueden justificarse considerando la densidad y la orientación del tejido. Posteriormente aparecieron numerosos artículos en los cuales se empleaban medidas estereológicas (Fyhrie et al., 1993; Goulet et al., 1994; Kabel et al., 1999; Zysset, 2003) para estimar la orientación trabecular tanto en modelos idealizados como en aquellos obtenidos a partir de imágenes de microTC, muchos de ellos basados en los conceptos presentados por Cowin (1985). Otros autores, aprovecharon aquellos resultados para analizar la simetría material de hueso trabecular: Cowin et al. (1991) propuso una fórmula para la corrección de los ejes de simetría material para hallar las direcciones principales de ortotropía. Por su parte, van Rietbergen et al. (1996) consideró que no siempre es posible disponer de muestras de hueso alineadas según los ejes principales de ortotropía y, propuso el uso de un procedimiento de optimización para hallar el sistema coordenado que mejor representa el comportamiento ortotrópico del hueso trabecular. Estos méto-

²Posteriormente se desarrollaron otras técnicas similares como la de desbaste.

dos se basan en la premisa de que el hueso trabecular en equilibrio³ se comporta de forma ortótropa (Cowin, 2001).

Los resultados de varios investigadores Yang et al. (1996); van Rietbergen et al. (1996); Cowin (2001); Cowin y Doty (2007) y las referencias en estos, permitieron justificar inductivamente la hipótesis de ortotropía pero, también hicieron evidente la necesidad de determinar las propiedades elásticas del hueso trabecular en direcciones no necesariamente coincidentes con las principales, e incluso contemplar el caso general de anisotropía fuera del equilibrio.

Pese a los numerosos intentos por determinar experimentalmente el comportamiento microscópico y macroscópico del hueso trabecular, el tamaño de las trabéculas y las condiciones de suportación, entre otras, dificultan la tarea cuando se emplean métodos de ensayo tradicionales (Liu et al., 1999; Rho y Pharr, 2000; Ascenzi et al., 2000; Currey, 2006). Por este motivo se introdujeron métodos basados en reconstrucciones tridimensionales de microestructuras óseas en conjunto con técnicas experimentales con el objeto de analizar los campos de tensiones y deformaciones a nivel microestructural (van Rietbergen et al., 1995). Posteriormente, comenzaron a aplicarse técnicas de homogenización ya que no requieren de suposiciones acerca de las simetrías materiales, mediciones estereológicas ni de ensayos mecánicos a escala macroscópica (Hollister et al., 1994; van Rietbergen et al., 1996). No obstante, como indica Hou et al. (1998), en el análisis de los resultados hallados a partir de modelos construidos usando de imágenes de microTC se deben considerar aspectos tales como la anisotropía y heterogeneidad del tejido, la sensibilidad de las propiedades determinadas y la fracción volumétrica, el tamaño del elemento empleado, la influencia del procedimiento de construcción de los modelos y, del tipo de método de homogenización usado (Hollister y Kikuchi, 1992). El presente trabajo se ocupa en buena medida del análisis crítico de tales aspectos.

1.4. Organización de este trabajo

Esta tesis está organizada de la siguiente forma. Los Capítulos 2 y 3 constituyen la primera parte de este trabajo. En el Capítulo 2 se describe la jerarquía ósea y, en función de los resultados reportados en la literatura, se justifica el enfoque adoptado en este estudio. En el Capítulo 3 se presentan las nociones elementales de la mecánica de medios continuos para materiales lineales elásticos, se describen aspectos generales de los métodos de homogenización, se incorporan los conceptos de separación de escalas, de elemento de volumen de representativo en el sentido convencional y, se presentan los teoremas de acotación.

El Capítulo 4 constituye la segunda parte del trabajo. En él se presenta el principio de funcionamiento de los tomógrafos empleados para la obtención de imágenes médicas. Además, se describen los procedimientos desarrollados para la construcción de los modelos tridimensionales de geometrías óseas. Se analizan críticamente las principales fuentes de error y se proponen alternativas para su mitigación. Tam-

³Esto es, cuando los estímulos se encuentran dentro de un rango que no provoca remodelado.

bién se introduce un nuevo parámetro o índice (IG) como medida cuantitativa de la calidad de la representación geométrica de los modelos. Finalmente se presentan y discuten los resultados de algunos casos de estudio.

Los Capítulos 5 a 8 forman la tercera parte del trabajo. En los Capítulos 5 y 6 se describen en detalle los llamados métodos de homogenización directo y asintótico y su implementación aplicados al análisis del tejido trabecular⁴. Se discute la influencia de las condiciones de contorno y el tamaño de la muestra sobre las componentes del tensor de elasticidad del material aparente estimadas mediante cada uno de los métodos. En el Capítulo 7 se presenta la verificación y validación de las herramientas computacionales implementadas. Con este objeto, ambos métodos de homogenización se aplican a modelos con solución analítica, a modelos idealizados de trabéculas (en dos y tres dimensiones) y a modelos construidos mediante el procedimiento descrito en el Capítulo 4. Se analizan aspectos tales como el tipo de elemento, las condiciones de contorno, la influencia de la calidad de la representación y se define cuál de los métodos de homogenización implementados resulta más adecuado para el estudio del comportamiento mecánico del hueso trabecular. En el Capítulo 8 se presentan los protocolos y procedimientos desarrollados para la determinación experimental del módulo de elasticidad del tejido trabecular mediante indentación instrumentada. Estos procedimientos y protocolos se aplican para hallar el módulo de elasticidad de una muestra de tejido bovino.

La cuarta y última parte de este trabajo constituye un ejemplo de aplicación. En el Capítulo 9 se reporta la aplicación de los métodos y procedimientos desarrollados a una muestra de hueso trabecular bovino.

Finalmente las conclusiones principales de este trabajo se resumen en el Capítulo 10 donde también se proponen algunos trabajos futuros. Además, este trabajo contiene 7 apéndices, con el material no incluido en el cuerpo de los capítulos a efectos de no entorpecer la presentación.

⁴Es necesario aclarar que tales métodos son generales y su aplicación al tejido trabecular no excluye otras aplicaciones, ver Capítulo 3.

Se presentan las características jerárquicas del hueso comenzando con las diferencias entre el hueso cortical y trabecular. Puesto que buena parte de los procesos de remodelado ocurren en las superficies y dada la elevada relación entre la superficie y volumen de tejido, en el resto del trabajo nos concentraremos en el estudio del hueso trabecular.

Con el objeto de comprender el comportamiento mecánico del hueso trabecular se efectúa una revisión bibliográfica acerca de los métodos empleados para determinar sus propiedades mecánicas.

2.1. Composición y escalas del hueso

Los huesos están formados por un material heterogéneo con una microestructura compleja optimizada para soportar cargas funcionales. Su baja masa y su elevada rigidez y resistencia permiten que un organismo pueda desplazarse minimizando los costos metabólicos (Keaveny et al., 2001; Rincón Rincón et al., 2004).

El material de los huesos está compuesto por fases orgánicas e inorgánicas y agua. Aproximadamente 60 % en peso del hueso es inorgánico, un 30 % es orgánico y el 10 % restante es agua. Las evidentes diferencias en densidad hacen que desde un punto de vista volumétrico estas proporciones sean 40, 35 y 25 % respectivamente. La fase inorgánica del hueso es un mineral cerámico de tipo cristalino que es una forma impura¹ del fosfato de calcio llamada hidroxiapatita $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ (Kutz, 2002). La fase orgánica del hueso consiste de colágeno (principalmente tipo I), alrededor del 89 % en peso, el 11 % restante está constituido por una mezcla de proteínas no colágenas ² y pequeñas cantidades de lípidos y carbohidratos (Prat Pastor, 1999; Bonucci, 2000).

El hueso posee una estructura jerárquica y heterogénea, Keaveny et al. (2001). Tal estructura jerárquica se clasifica desde un punto de vista biológico en cinco niveles (Rho et al., 1998): la macroestructura en la cual se identifica el hueso trabecular y cortical; la microestructura, donde se identifican los canales harvesianos y las osteonas; la sub-microestructura, del tamaño de las lamelas; la nanoestructura escala en la que se estudian las fibrillas de colágeno y los minerales embebidos y; la

¹Se dice que la hidroxiapatita no es pura, porque contiene cristales de apatita y otras impurezas tales como el potasio, magnesio, estroncio y sodio (en el lugar de los iones calcio), carbonato (en el lugar de los iones fosfato) y otras.

²Tales como la osteocalcina, osteonectina, sialoproteínas, proteoglicanos, etc.



Figura 2.1: Estructura jerárquica del hueso (Adaptado de Rho et al. (1998) y Keaveny et al. (2001) con figuras de los anteriores, de Bonucci (2000) y Fyhrie y Kimura (1999)).

sub-nanoestructura, nivel en el cual se analizan los constituyentes elementales y la estructura molecular, Figura 2.1.

2.2. El hueso y el tejido trabecular como materiales compuestos

El hueso trabecular resulta fácil de identificar en los extremos de todos los huesos largos (por ej. fémur) y en el centro de los huesos planos e irregulares (por ej. vértebras). Si bien existen varios tipos de hueso trabecular, morfológicamente presentan características similares, como una especie de puntales (trabéculas) que encierran poros conectados en tres dimensiones. Esta característica ha llevado a muchos autores a considerarlo como un sólido celular poroso e interconectado (Keaveny et al., 2001). Las fases que lo componen son el tejido trabecular y el espacio hueco lleno de médula *in vivo*. Las trabéculas se orientan en la dirección que el hueso presenta mayor rigidez dándole al hueso trabecular características anisótropas. Por estos motivos se lo considera como un material heterogéneo y anisótropo.

A lo largo de todo el trabajo efectuamos una diferencia entre el tejido trabecular

y el hueso trabecular. Llamamos tejido al material del que "están construidas" las trabéculas, mientras que al compuesto formado por el tejido y el espacio intertrabecular lo denominamos hueso³.

El tejido trabecular puede considerarse como un material heterogéneo formado por una fase orgánica y otra inorgánica. Con el objeto de predecir las propiedades mecánicas del tejido a partir de las propiedades mecánicas de sus fases constituyentes varios autores aplicaron teorías de materiales compuestos, ver Prat Pastor (1999) y las referencias citadas allí. No obstante, los modelos existentes para el análisis del tejido trabecular y las fases que lo componen están lejos de ser universalmente aceptados y se ha indicado que la hipótesis del continuo es de dudoso valor en esta escala métrica (Harrigan et al., 1988). Los estados actuales de la ciencia y técnica impiden conocer el arreglo y disposición de las fases⁴ que componen el tejido, por cuanto los valores de las predicciones efectuadas no pueden ser extrapolados a casos generales y requeriría de un tratamiento estadístico intensivo, ver métodos en Torquato (2002).

Otro enfoque consiste en suponer que la anisotropía del tejido tiene un efecto despreciable sobre las propiedades del hueso trabecular. De este modo se puede emplear un módulo de elasticidad efectivo e isotrópico y un único coeficiente de Poisson para caracterizar el comportamiento mecánico del tejido.

2.3. Propiedades mecánicas del hueso y el tejido trabecular

El hueso trabecular fluye en compresión cuando la deformación alcanza aproximadamente el 1 % pero puede deformarse hasta un 50 % antes de perder su capacidad de soportar cargas. Pese a presentar características no lineales aún a bajas deformaciones, se ha observado experimentalmente que a tensiones menores que la de fluencia, y mayores que una precarga, su comportamiento resulta lineal y elástico. Puesto que las deformaciones fisiológicas que experimenta rara vez superan el $0.4 \%^5$, la teoría de deformaciones infinitesimales resulta adecuada para su estudio (Cowin, 1999).

Las propiedades mecánicas anisotrópicas dependen tanto de la porosidad como el arreglo microestructural de las trabéculas individuales. Es este el motivo por el cual las mediciones escalares, como las de densidad, fallan en su intento por estimar el comportamiento mecánico global del hueso trabecular . Una buena parte de las investigaciones en mecánica del hueso trabecular ha estado dedicada a comprender

³Esta notación difiere de la empleada por Currey (2006).

⁴En la actualidad esto es imposible en forma no destructiva. Por otro lado, la información que hoy se puede obtener es incompleta debido a las variaciones observadas en la orientación lamelar y la mineralización, entre otros factores. Algunos resultados recientes de estas investigaciones pueden consultarse en Currey (2006) Cap. 5 y Rho et al. (1999).

⁵Los resultados experimentales a nivel del hueso completo sugieren que las deformaciones en el rango fisiológico rondan entre los 500 y los 3200 microstrain (Hollister y Kikuchi, 1994).

las contribuciones y los roles de la porosidad, arquitectura y propiedades del tejido a nivel aparente (Kutz, 2002).

Las propiedades elásticas del hueso trabecular muestran variaciones importantes considerando la edad de los individuos, su salud, la región anatómica, la dirección y el modo de carga (Morgan et al., 2003; Kutz, 2002; An y Draughn, 2000). En particular, el módulo de elasticidad disminuye conforme la edad de los individuos aumenta (Anglin et al., 1999). Se ha reportado que dicho módulo puede variar 100 veces dentro de una misma epífisis y hasta tres veces dependiendo de la dirección de carga, ver por ejemplo la Figura 2.2. El módulo de elasticidad del hueso trabecular resulta difícil de medir y es común tener incertezas comparables con la magnitud que se busca determinar. En la Tabla 2.1 se resumen los valores de los módulos elásticos determinados por varios autores a partir de cilindros (o cubos) de entre 5 y 8 mm de radio (lado) a la compresión (An y Draughn, 2000)⁶. Nótese que en todos los casos las bandas de error o la dispersión son significativas.



Figura 2.2: Módulo elástico en Mpa en una sección trasversal del extremo proximal de una tibia humana. Tomada de Keaveny et al. (2001).

Se ha reportado que en algunas regiones de huesos sometidos a cargas de compresión, como en la cabeza femoral, la anisotropía del hueso trabecular aumenta con la edad y la disminución de la densidad (Kutz, 2002). El valor de carga de rotura depende de los modos de carga. Los valores más altos se obtienen en compresión mientras que los más bajos se obtienen al corte. Las relaciones entre la resistencia en compresión y tracción y entre compresión y corte no son constantes y parecen depender de los módulos de elasticidad y la densidad. Ambos, el módulo de elasticidad y la resistencia, parecen depender en buena parte de la densidad aparente. Al

 $^{^6\}mathrm{No}$ se tiene información acerca de la edad de los sujetos empleados para la extracción de las muestras.

Región	Referencia	Módulo de Elasticidad [Mpa]
Cabeza femoral	Martens, 1983	900 ± 710
Fémur (proximal)	Martens, 1983	$616~\pm~707$
Fémur (distal)	Kuhn, 1989	298 ± 224
	Carter, 1977	entre 10 a 500
	Odgaard, 1989	entre $103 y 1058$
Tibia (proximal)	Linde, 1989	445 ± 257
Vértebra	Keaveny, 1997	165 ± 110

Tabla 2.1: Módulo de elasticidad del hueso trabecular (An y Draughn, 2000).

mismo tiempo, estas relaciones varían según los distintos tipos de hueso trabecular debido a las variaciones en la región anatómica, la edad y las enfermedades que alteran la arquitectura trabecular. A los fines prácticos es usual emplear relaciones lineales y potenciales para describir la dependencia del módulo elástico y resistencia con la densidad aparente (García Aznar, 1999; D'amico, 2005).

Es interesante observar que las deformaciones hasta fluencia y rotura del hueso trabecular tienen solamente una dependencia débil, si es que existe, con la densidad aparente y el módulo de elasticidad. Los resultados de un estudio diseñado para considerar las diferencias entre distintas regiones anatómicas muestran que las deformaciones hasta fluencia son aproximadamente uniformes en una región anatómica con desviaciones estándar de aproximadamente un décimo del valor medio pese a que los valores medios sean diferentes en distintas regiones anatómicas (Keaveny et al., 2001). Por estos motivos, "las deformaciones hasta fluencia pueden considerarse constantes dentro de una región pero heterogéneas entre las regiones" (Keaveny et al., 2001). Sin importar cuál sea la región, las deformaciones hasta fluencia son mayores en compresión que en tracción. Turner (1989) concluyó, a partir del análisis de varias definiciones del punto de fluencia y del cero de deformación, que las deformaciones en fluencia son isotrópicas pese a la anisotropía del módulo y resistencia, al menos en el caso del hueso bovino.

A nivel de hueso completo el efecto de endurecimiento provocado por la presencia de la médula se considera despreciable excepto para altas velocidades de deformación (aprox. 10 strain/s), pese a que hay evidencia de que la restricción de la cáscara cortical puede permitir algo de endurecimiento hidráulico in vivo bajo cargas dinámicas (Kutz, 2002).

Debe notarse que los ensayos mecánicos in vitro convencionales introducen errores significativos en los datos. En parte debido al daño introducido durante las etapas de corte de las probetas y al provocado cuando se comprimen muestras entre las pletinas y mordazas de las máquinas de ensayo. Además, la fricción en las pletinas provoca un estado de tensión triaxial que puede resultar en una sobreestimación del módulo de elasticidad. Si las deformaciones se computan a partir de los desplazamientos de las pletinas, se pueden introducir importantes errores sistemáticos y aleatorios (An y Draughn, 2000). Además del evidente interés ortopédico en las propiedades del hueso trabecular a nivel macroscópico, las propiedades del tejido también son estudiadas intensamente puesto que es en esta escala donde se obtiene información fundamental para comprender el proceso de remodelado. En particular, en la escala del tejido, se puede obtener información para diseñar nuevas alterativas para el tratamiento de enfermedades tales como la osteoporosis y la artritis. La idea fundamental detrás de este enfoque es que los cambios provocados por éstas enfermedades resultan evidentes en el nivel del tejido mucho antes de volverse aparentes en la escala macroscópica.

Las propiedades del tejido trabecular son las definidas por las trabéculas individuales, y han sido medidas mediante diversos métodos. Sin embargo, la forma irregular y el pequeño tamaño de las trabéculas convierten a la tarea medición en un verdadero desafío. En la Tabla 2.2 se reportan los módulos de elasticidad del tejido obtenidos por varios autores en distintas regiones anatómicas y, mediante varios métodos de ensayo (Evans et al., 1990; Currey y Brear, 1990; An y Draughn, 2000; Cowin, 2001; Currey, 2006).

Las diferencias entre las distintas regiones, sumada a la dispersión, en los módulos de elasticidad determinados experimentalmente sumergieron al tema en una gran controversia. Pese a que en la actualidad se reconoce la dependencia del módulo de elasticidad con la región anatómica (y la especie), la cual es evidente en la Tabla 2.2, las correlaciones entre la dureza y el módulo de elasticidad propuestas por Evans et al. (1990) (posteriormente reformuladas por Currey y Brear (1990)) aún son ampliamente usadas. Nótese que los menores módulos de elasticidad fueron obtenidos en la cresta ilíaca pero mediante métodos que, pese a ser tradicionales, resultan difíciles de aplicar a una única trabécula. En el fémur la diferencia entre los distintos estudios es menor aunque una comparación directa de los resultados de Townsend (1975) y Runkle (1975) muestran diferencias del orden del 60% en muestras secas. Las diferencias son notablemente menores cuando se comparan los resultados de Ashman (1988) y Zysset (1998) en muestras hidratadas pese a que los métodos de medición son distintos. Una observación idéntica hizo Turner (1999) usando nanoindentación y microscopía acústica. Estos resultados permiten inferir que in vivo el módulo de elasticidad del tejido trabecular del fémur se encuentra entre $6 \ge 19$ GPa. En la tibia los valores del módulo de elasticidad determinados mediante diversos métodos se encuentran en el rango que van desde los 4,6 a 15 GPa en muestras hidratadas. Sin embargo, los valores más altos fueron obtenidos mediante ultrasonido y ensayos de tracción, con todos los demás métodos se obtuvieron valores entre 4 y 8 GPa. Estos mismos rangos fueron hallados en vértebras humanas a partir de reconstrucciones de microTC y análisis inversos usando el método de los elementos finitos (FEM en la tabla). Sin embargo, se obtuvieron valores dos veces mayores mediante nanoindentación.

Región	Referencia	Método	Módulo de Elásticidad [GPa]	
Cresta ilíaca	Ryan, 1989	Tracción	0.8 ± 0.4	
Cresta ilíaca	Kuhn, 1989	Flexión en 3 ptos.	3,81	
Femur (distal)	Runkle, 1975	Pandeo	$8,\!69\pm3,\!17~(m seco)$	
Femur	Ashman,1988	Ultrasonido	$12,7\pm2,00$ (hidr.)	
Fémur	Turner, 1999	Indentación	$18,14 \pm 1,7 \;(m seco)$	
		${ m Instrumentada}$		
Fémur	Turner, 1999	Microscopía	$17,\!50\pm1,\!12$	
		acústica		
Fémur (cuello)	Zysset, 1998	Indentación	$11,4\pm$ 5,6 (hidr.)	
		${ m Instrumentada}$		
${ m F}{ m \acute{e}}{ m mur}$	Townsend, 1975	Pandeo	$14,1 \; (seco)$	
(proximal)				
Femur y tibia	Mente, 1989	Voladizo y FEM	$7,\!80\pm5,\!40~(m seco)$	
Tibia	Mente, 1989	Voladizo y FEM	$6,\!20$	
Tibia	Choi, 1990	Flexión en 3 ptos.	$4,59 ~({ m hidr.})$	
(proximal)				
Tibia	Choi, 1990	Flexión en 4 ptos.	$5,70\pm1,30$	
Tibia	Choi, 1992	Flexión en 4 ptos.	$5,72 \pm 1,27$	
Tibia	$\mathrm{Rho},1993$	Tracción	$10,4\pm 3,50 \ (seco)$	
Tibia	$\mathrm{Rho},1993$	Ultrasonido	$14.8 \pm 1.4 \ (hidr.)$	
Tibia	$\mathrm{Rho},1993$	Ultrasonido	$20,70 \ (m seco)$	
Tibia	van Rietbergen, 1995	Reconst. 3D y FEM	4 a 8 (hidr.)	
Vértebra	Jensen, 1990	Modelo 3D.	$3,\!80$	
Vértebra	$\mathrm{Rho},1997$	Indentación	$13,4\pm\ 2,0$	
		${ m Instrumentada}$		
Vértebra	Hou, 1998	MicroCT y FEM	$5,7\pm 1,6$	
Vértebra	Lad, 1998	MicroCT y FEM	$6{,}6{\pm}~1{,}1$	
Vértebra	Riemer, 1995	Flexión en 4 ptos.	$2,\!11\pm1,\!89$	
Varios	Evans et al,1990	Indentación convencional	$10-20^{7}$	

Tabla 2.2: Módulo de elasticidad del tejido trabecular.

2.4. Discusión y conclusiones

En este capítulo se describió al tejido trabecular como un material compuesto por una fase inorgánica y otra orgánica cuyas propiedades mecánicas difieren notablemente. A su vez, el tejido y el espacio entre las trabéculas constituyen las fases de lo que llamamos hueso trabecular. Esto hace que podamos considerar al hueso como un material heterogéneo en ambas escalas de la estructura jerárquica ósea. La evidencia experimental permite el tratamiento de las deformaciones fisiológicas como deformaciones infinitesimales. En cuanto a las simetrías materiales, y en un todo de acuerdo con los resultados de la bibliografía, puede considerarse al tejido trabecular como un material lineal, elástico e isotrópico por lo tanto su respuesta mecánica está caracterizada por módulo de elasticidad E y el coeficiente de Poisson v. Bajo estas consideraciones, el hueso trabecular se comportará de forma elástica también, salvo para altas velocidades de carga donde debería considerarse el efecto de la médula. Su comportamiento, sin embargo, no será necesariamente isotrópico debido a la influencia de la microestructura.

La influencia de la orientación de la microestructura y el espesor de las trabéculas sobre el módulo de elasticidad del hueso son fundamentales, pero no son las únicas variables que lo afectan, la edad, la región anatómica y algunas enfermedades son también importantes. Numerosos autores han tratado de correlacionar la rigidez del hueso trabecular con la densidad o la fracción volumétrica mediante relaciones lineales o potenciales. Sin embargo, estas no son correlaciones universales ya que los módulos de elasticidad del hueso trabecular determinados experimentalmente muestran variaciones significativas en una misma pieza ósea y entre piezas óseas.

Se indagó acerca de los métodos para la determinación del módulo de elasticidad del tejido trabecular. Se observaron discrepancias significativas entre los resultados reportados para una misma región anatómica (y especie) con distintos métodos de ensayo. Se determinó que los ensayos de indentación (convencionales e instrumentados) y los métodos inversos pueden emplearse para determinar el módulo de elasticidad del tejido trabecular.

Debe notarse que las propiedades mecánicas determinadas mediante los métodos de indentación varían sensiblemente con el tipo de punta y la carga, entre otras variables. Además, es posible introducir errores debido a la modificación de la superficie durante la preparación de las muestras. El grado de hidratación, el almacenamiento y la formación de mecanismos durante el ensayo mecánico también constituyen otras fuentes de error (An y Draughn, 2000).

En general, la dispersión de los resultados de los ensayos mecánicos tanto a nivel del hueso como del tejido, la orientación de las trabéculas y, la imprecisión introducida al ignorar la anisotropía o los efectos de borde en los ensayos mecánicos constituyen las principales fuentes de error. Los efectos de borde son provocados por el daño existente y el provocado en los contornos de las probetas al ser ensayadas a la compresión sin medios de ajuste al cuadro o pletinas. Cuando las deformaciones se computan a partir del desplazamiento relativo de las pletinas se provoca una subestimación significativa del módulo y otros errores aleatorios. La variación del módulo elástico con las direcciones de carga implica que los protocolos experimentales deben controlar o corregir el efecto de la anisotropía de la probeta.

Capítulo 3 Nociones de elasticidad lineal y homogenización

En este capítulo se presentan en forma sucinta los conceptos de elasticidad lineal y micromecánica de materiales compuestos que se utilizan en el resto del trabajo.

En la primera parte se presentan los conceptos de continuo, homogeneidad e isotropía; los conceptos de tensión y deformación junto a sus respectivos tensores y; las ecuaciones de la elasticidad lineal en términos del tensor de elasticidad y de compliancia. La bibliografía fundamental empleada en estas secciones es Malvern (1969); Mase y Mase (1999); Otegui (2004) y Chapetti (2005).

En la segunda parte se presentan los aspectos fundamentales de los métodos de homogenización en materiales con comportamiento lineal; se discuten brevemente algunos métodos y se los analiza críticamente. La bibliografía se cita en las distintas secciones. El lector interesado puede consultar más información sobre los aspectos generales en Kanouté et al. (2009) y Böhm (2010) mientras que Nemat-Nasser y Hori (1999); Torquato (2002); Buryachenko (2007) presentan una descripción más profunda de los métodos y su aplicación.

3.1. Noción de medio continuo

La mecánica de medios continuos es una rama de la mecánica que ofrece un marco para el estudio de sólidos, líquidos y gases. En mecánica se emplea el adjetivo "continuo" para designar a los materiales en los que no se considera la estructura molecular de la materia. A este material hipotético normalmente se le llama medio continuo o simplemente continuo.

En los modelos matemáticos basados en la teoría de medios continuos se supone que todas las funciones empleadas, y sus derivadas, son continuas a excepción de un número finito de superficies internas que separan regiones de continuidad.

Las teorías basadas en el concepto de un material continuo¹ permiten obtener predicciones cuantitativas de tensiones y deformaciones para muchos de los problemas que se presentan en ingeniería. Tales predicciones están prácticamente en un todo de acuerdo con la experiencia en un amplio rango de condiciones. Existen excepciones, ya que una teoría que no considera la naturaleza molecular o atomística de la materia no puede emplearse para explicar todas las propiedades observadas de la materia incluso a escala macroscópica, de allí la existencia de modelos multiescala y micromecánicos algunos de los cuales se discutirán más adelante.

¹Por ejemplo las de elasticidad, plasticidad y mecánica de fluidos.

3.1.1. Homogeneidad e isotropía en medios continuos

En mecánica de continuo se suelen hacer implícitamente dos suposiciones acerca de la naturaleza del material: la de *homogeneidad*, que implica idénticas propiedades en todos los puntos que se consideren, y la de *isotropía*, que implica que una propiedad no presenta una dirección preferencial. Resulta importante indicar que los conceptos de continuo, homogeneidad e isotropía son independientes. Los dos últimos sólo se vuelven importantes en mecánica de medios continuos cuando se analiza el comportamiento constitutivo de un material. En este sentido y, debido al interés de este trabajo (ver sección 2.4 en pág. 14), sólo discutiremos con algún detalle los modelos elásticos lineales.

3.1.2. Fuerzas de volumen y de superficie

Las fuerzas que actúan sobre el volumen y en toda la extensión de un continuo se conocen como *fuerzas de volumen*, la gravedad es un ejemplo clásico. En este trabajo las designaremos como b_i o p_i , en notación de índices, siendo las primeras por unidad de masa y las segundas por unidad de volumen. A partir de los conceptos precedentes, la fuerza por unidad de volumen también llamada másica, en notación vectorial **b**, queda definida por

$$\mathbf{b} = b_i = \lim_{n \to \infty} \left[\frac{\Delta \mathbf{f}}{\rho \Delta V} \right] \tag{3.1}$$

Las fuerzas que actúan y están distribuidas sobre una superficie se denominan *fuerzas de de superficie* o *superficiales*. Es una práctica usual diferenciar entre aquellas existentes dentro de un material y las aplicadas sobre superficies externas. En lo que sigue llamaremos a las primeras *tensiones* y a las demás tracciones. Ambas tienen unidades de fuerza por unidad de área.

3.2. Tensiones

A efectos de explicar el concepto de tensión considérese un cuerpo B que tiene una superficie exterior S, y un volumen V. El cuerpo B está solicitado por fuerzas de superficie f_i y de volumen b_i . Sea P un punto en el interior de B contenido en un plano de corte S^* que divide al cuerpo en las porciones I y II, Figura 3.1.

El punto P está contenido en un elemento de área ΔS^* del plano de corte S^* definido por el vector normal n_i . Los esfuerzos externos sobre la porción II se transmiten hacia la porción I provocando una distribución de fuerza sobre ΔS^* equivalente a una fuerza Δf_i y un momento resultante ΔM_i en P. En el límite cuando ΔS^* tiende a cero, se tiene

$$\lim_{\Delta S^* \to 0} \frac{\Delta f_i}{\Delta S^*} = \frac{df_i}{dS^*} = t_i^n \qquad \text{y} \qquad \lim_{\Delta S^* \to 0} \frac{\Delta M_i}{\Delta S^*} = 0.$$
(3.2)

Al vector t_i^n se lo denomina tracción o vector tensión. Nótese además que en la segunda expresión de (3.2) implícitamente se supuso que no existen momentos



Figura 3.1: Concepto de tensión: Plano de corte S^* que pasa por P (Izq.). Fuerza, Momento y normales en P sobre ΔS^* .

concentrados. El supraíndice n se emplea para indicar que el vector tensión t_i^n solamente está definido en conjunto con la normal n en P. En adelante se omitirá su uso salvo que sea necesario.

3.2.1. Tensor de tensiones

Se puede asociar al punto P de la Fig. 3.1 un volumen infinitesimal definido por tres planos ortogonales. De este modo, a cada uno de estos planos le corresponde un vector normal unitario coincidente con los tres ejes coordenados cartesianos, Figura 3.2.



Figura 3.2: Vectores tensión sobre los tres planos coordenados en P.

El conjunto de todos los pares posibles de vectores t_i^n y *n* define el estado de tensión del punto *P*. Sin embargo, conociendo el vector tensión en tres planos ortogonales, como los indicados arriba, y empleando las ecuaciones de transformación de coordenadas se pueden obtener los vectores en cualquier otro plano que contenga al punto *P*. Usando los planos coordenados y descomponiendo los vectores tensión en la dirección normal a ellos se tiene

$$\mathbf{t}^{e_1} = t_i^{e_1} = t_1^{e_1} e_1 + t_2^{e_1} e_2 + t_3^{e_1} e_3 \tag{3.3}$$

$$\mathbf{t}^{e_2} = t_i^{e_2} = t_1^{e_2} e_1 + t_2^{e_2} e_2 + t_3^{e_2} e_3 \tag{3.4}$$

$$\mathbf{t}^{e_3} = t_i^{e_3} = t_1^{e_3} e_1 + t_2^{e_3} e_2 + t_3^{e_3} e_3 \tag{3.5}$$

Las nueve componentes de los tres vectores tensión forman un tensor cartesiano de segundo orden denominado tensor de tensiones σ_{ij} que está relacionado con los vectores tensión mediante

$$t_{i}^{e_{j}} = \sigma_{ij}e_{j} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{1} \\ e_{2} \\ e_{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{i}^{e_{1}} \\ t_{i}^{e_{2}} \\ t_{i}^{e_{3}} \end{bmatrix}.$$
 (3.6)

Las componentes del tensor de tensiones perpendiculares a los planos, σ_{11} , σ_{22} y σ_{33} , se denominan *tensiones normales* mientras que las restantes se denominan *tensiones de corte*. A lo largo de este trabajo, se considera que las componentes son positivas si su sentido coincide con el sentido positivo de los ejes coordenados, Figura 3.3.



Figura 3.3: Relación entre vectores tensión (Izq.) y el tensor de tensiones (Der.).

Se puede demostrar que el vector tensión $t_i^{n_j}$ en una dirección cualquiera n_j y el tensor de tensiones σ_{ij} están relacionados por

$$t_i^{n_j} = \sigma_{ij} n_j. \tag{3.7}$$

3.2.2. Cantidad de movimiento lineal y angular

La cantidad de movimiento lineal de una masa está definida por el vector

$$P_i(t) = \int_V v_i dm = \int_V \frac{dx_i}{dt} \rho dV, \qquad (3.8)$$

donde v es la velocidad, dm es un elemento diferencial de masa, V representa el volumen del cuerpo bajo consideración, x_i la posición actual, t el tiempo y, ρ la densidad.

El momento angular o cantidad de movimiento angular es el momento de la cantidad de movimiento respecto de un punto. Si este punto es el origen se tiene

$$N_i(t) = \int_V \varepsilon_{ijk} x_j \frac{dx_k}{dt} \rho dV, \qquad (3.9)$$

siendo ε_{ijk} el símbolo de permutación² y x_j la posición del elemento de volumen dV.

3.2.3. Conservación de la cantidad de movimiento: equilibrio y simetría del tensor de tensiones

De acuerdo con la segunda ley de Newton, la suma de las fuerzas de volumen y superficie que actúan sobre un cuerpo deben ser iguales a la velocidad de cambio del momento lineal del cuerpo

$$\int_{S} t_i dS + \int_{V} \rho b_i dV = \frac{d}{dt} \int_{V} \frac{dx_i}{dt} \rho dV.$$
(3.10)

Usando (3.7) en el primer término de la izquierda, aplicando el teorema de la divergencia de Gauss y operando sobre el término de la derecha se obtiene

$$\int_{V} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dV + \int_{V} \rho b_i dV = \int_{V} \frac{dv_i}{dt} \rho dV.$$
(3.11)

Dado que esta expresión debe satisfacerse en todo el volumen, resulta lícito escribir la llamada ecuación de movimiento local como $\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho b_i = \rho \frac{dv_i}{dt}$ o en notación indicial $\sigma_{ij,j} + \rho b_i = \rho \dot{v}_i$. El término de la derecha es nulo en el caso elastostático, obteniéndose de este modo la ecuación de equilibrio local

$$\sigma_{ij,j} + \rho b_i = 0. \tag{3.12}$$

Siguiendo un desarrollo similar, pero a partir de la definición de la cantidad de movimiento angular y utilizando las propiedades del símbolo de permutación se puede demostrar que el tensor de tensiones es simétrico,

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}.\tag{3.13}$$

Los detalles de su derivación pueden consultarse en Malvern (1969); Paris (1998); Otegui (2004) y Chapetti (2005).

²Toma el valor 1 si i,j,k están en la secuencia 12312; -1 si i,j,k está en la secuencia 32132 y; cero en cualquier otro caso.

3.3. Deformaciones

El término deformación se emplea para indicar el cambio de forma de un continuo entre dos configuraciones llamadas de referencia y actual. En la configuración de referencia, una partícula o punto material del continuo ocupa un punto P_0 del espacio y puede ubicarse mediante el vector de posición **X** cuyas componentes son X_1, X_2 y X_3 . En la configuración actual la partícula P_0 se ubica en el punto P cuya posición puede expresarse en términos de otro vector posición **x** mediante las coordenadas x_1, x_2 y x_3 , Figura 3.4.



Figura 3.4: Posición de una partícula en los sistemas de referencia y actual.

Resulta evidente entonces que el desplazamiento³ u de un punto originalmente en X con las coordenadas finales x está dado por la diferencia $\mathbf{x} - \mathbf{X}$.

3.3.1. Gradiente y tensores de deformación

Cuando un medio continuo sufre una deformación, las partículas siguen distintas trayectorias en el espacio. Este movimiento puede ser expresado como

$$x_i = x_i(X_1, X_2, X_3, t)$$
 o $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t).$ (3.14)

La diferenciación parcial de (3.14) con respecto a X_j da como resultado el tensor gradiente de deformación $\partial x_i / \partial X_j$ que se representa mediante

$$\mathbf{F} = F_{ij} = \frac{\partial x_1}{\partial X_1} e_1 + \frac{\partial x_2}{\partial X_2} e_2 + \frac{\partial x_3}{\partial X_3} e_3 = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial X_1} & \frac{\partial x_1}{\partial X_2} & \frac{\partial x_1}{\partial X_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial X_1} & \frac{\partial x_2}{\partial X_2} & \frac{\partial x_2}{\partial X_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial X_1} & \frac{\partial x_3}{\partial X_2} & \frac{\partial x_3}{\partial X_3} \end{bmatrix}.$$
 (3.15)

 $^{{}^{3}}$ En rigor, lo indicado es cierto si las triadas que definen tanto al sistema de referencia como al actual son coincidentes.

Por definición, el tensor de deformaciones finitas (lagrangiano o de Green) es

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_i}{\partial X_k} \frac{\partial u_i}{\partial X_j} \right), \tag{3.16}$$

siendo δ_{ij} la delta de Kronecker⁴, un tensor unitario, y donde las demás cantidades fueron definidas previamente.

Cuando las deformaciones son pequeñas, el término de segundo orden en el tensor de deformaciones finitas se vuelve despreciable respecto de los términos de primer orden. Si los gradientes de deformaciones también son pequeños se obtiene que $\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \cong \frac{\partial u_i}{\partial X_j}$. De este modo se llega a la definición convencional del tensor de deformaciones infinitesimales

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \tag{3.17}$$

3.4. Elasticidad lineal

Con el objeto de caracterizar y predecir la respuesta de un material ante alguna solicitación o carga aplicada se emplean ecuaciones constitutivas. Normalmente se recurre a la concepción de una respuesta ideal del material a partir de la cual se plantea un modelo matemático que aproxima las observaciones experimentales (soporte empírico) en un rango adecuado.

Uno de tales modelos es el descrito por la teoría de la elasticidad lineal. En el marco de esta teoría se supone que los desplazamientos y sus gradientes son pequeños, por cuanto el estado de deformaciones lineal está dado por el tensor de deformaciones infinitesimales de la ec. (3.17).

A lo largo de todo este trabajo se supondrá que los procesos de deformación son adiabáticos e isotérmicos. De este modo, las ecuaciones (constitutivas) que relacionan los tensores de tensión y de deformación, están dadas por la *ley de Hooke generalizada* cuya expresión es

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \qquad o \qquad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \ \boldsymbol{\varepsilon}. \tag{3.18}$$

El tensor de constantes elásticas, tensor de elasticidad o simplemente tensor elástico C_{ijkl} tiene ochenta y una componentes. Sin embargo, debido a la simetría de los tensores de tensión y deformación, el número de componentes elásticas distintas se reduce a treinta y seis. Aún para el caso general de anisotropía material, este número puede reducirse a veintiuno a partir de consideraciones energéticas (Paris, 1998; Ting, 1996), lo que implica la total simetría del tensor elástico.

Muchas veces resulta útil utilizar la relación inversa de (3.18), es decir

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \qquad o \qquad \varepsilon = \mathbf{S} \ \boldsymbol{\sigma},$$
(3.19)

⁴Toma el valor 1 cuando $i = j \ge 0$ en cualquier otro caso.

donde S_{ijkl} se denomina *tensor de compliancia* y el resto de las cantidades ya fueron definidas.

Frecuentemente se usa la llamada notación contraída o reducida de Voigt mediante la cual los tensores de tensión y deformación son representados por pseudovectores (Mehrabadi et al., 1994; Ting, 1996). La notación de Voigt y la de doble índice están relacionadas por

Considerando la ec. (3.20), la ley de Hooke generalizada (3.18) se puede escribir como

$$\sigma_i = C_{ij} \ \varepsilon_j, \tag{3.21}$$

donde ahora los subíndices i,j pueden tomar valores enteros entre 1 y 6. En estas condiciones, el tensor elástico se representa por la matriz simétrica C_{ij} y no por un tensor. Operando de forma análoga para (3.19) se obtiene

$$\varepsilon_i = S_{ij} \ \sigma_j. \tag{3.22}$$

3.5. Nociones elementales de materiales compuestos

La determinación de las propiedades mecánicas de un material heterogéneo es un problema de gran importancia tecnológica. El estudio de la relación entre los fenómenos microestructurales y el comportamiento como continuo de un material no solamente permite predecir el comportamiento de los materiales existentes, sino que provee de una herramienta para el diseño de microestructuras tales que las propiedades macroscópicas resultantes exhiban las características requeridas para una dada función, Bendsoe y Kikuchi (1988); Guedes et al. (2010); da Silveira y Fonseca (2010).

En ciencia de materiales es común denominar a los materiales heterogéneos como compuestos. Los compuestos están formados por dos o mas fases con propiedades diferentes separadas por sus respectivas intercaras. En general, a la fase continua se la denomina "matriz" y a las fases inmersas o embebidas se la llama "refuerzos". Los materiales compuestos pueden clasificarse según la geometría de tales refuerzos (ya sea por su naturaleza, tamaños relativos o disposición), sus propiedades mecánicas, tipo de matriz (compuestos de matriz polimérica, cerámica, metálica, carbono-carbono e híbridos) y sus métodos de fabricación sean estos artificiales o naturales (Buryachenko, 2007). Las propiedades mecánicas de un material compuesto dependen tanto de las propiedades mecánicas de las fases e intercaras como de la fracción volumétrica de las fases, su geometría y distribución espacial. En la actualidad, el estudio de los fenómenos de daño (rotura de refuerzos o matriz, decohesión, etc.) en materiales compuestos y de las modificaciones microestructurales que sufren los materiales tradicionales como el acero debido a las nuevas operaciones de conformado, constituyen importantes áreas de investigación. No obstante, la predicción de las propiedades de un material compuesto conociendo sus componentes y geometría no es una tarea trivial y requiere de modelos micromecánicos adecuados.

En las subsecciones siguientes, y antes de describir los aspectos elementales de los modelos micromecánicos y de homogenización, se presentan algunos conceptos e hipótesis fundamentales para el entendimiento de los primeros.

3.5.1. Homogeneidad, dimensiones y separación de escalas

En prácticamente todos los modelos de homogenización se hacen dos suposiciones, a saber: que el material es macroscópicamente homogéneo aunque microscópicamente no lo sea y, que la escala microscópica es mayor que las dimensiones moleculares, de forma tal que se puedan aplicar las hipótesis de la teoría de medios continuos, ver Figura 3.5 (Kouznetsova, 2002).



Figura 3.5: Estructura continua y detalle de la microestructura heterogénea asociada a un punto P.

Para que las hipótesis de la mecánica de medios continuos sean válidas, se debe satisfacer el principio de separación de escalas, esto es, la longitud característica de la escala microscópica d debe ser menor que el tamaño característico de la muestra macroscópica L

$$d \ll L. \tag{3.23}$$

En este contexto, se pueden considerar tres escalas a saber: la microescala caracterizada por la heterogeneidad del material, la mesoescala⁵ que es la escala de un volumen de dimensiones considerables respecto de las características microestructurales pero, menores que la escala del continuo o macroescala empleada para modelar una estructura (Nemat-Nasser y Hori, 1999).

Para considerar a un material heterogéneo como uno homogéneo Hashin (1983) introdujo el concepto material estadísticamente homogéneo. Una definición estricta de este concepto debería expresarse en términos de probabilidades de n-puntos y promedios (Torquato, 2002). A los fines prácticos, y siguiendo a Hashin (1983), podemos decir que "en un compuesto estadísticamente homogéneo todas sus características geométricas (macroscópicas) tales como las fracciones volumétricas, las correlaciones de dos puntos, etc. son las mismas en cualquier RVE, sin importar cuál sea su posición" en el cuerpo macroscópico.

Las definiciones anteriores en conjunto con el principio de separación de escalas restringen el tamaño del volumen de la escala mesoscópica l. Por su importancia, volveremos sobre este concepto al presentar la noción de elemento de volumen representativo.

3.5.2. Homogenización y localización

El comportamiento de un material puede ser estimado o acotado empleando la información de una escala menor. Los problemas de este tipo se denominan problemas de *homogenización*. Cuando el objetivo, en cambio, es estimar la respuesta local de un material a partir de las condiciones de carga impuestas sobre una escala mayor, se dice que el problema es de *localización* (Böhm, 2010).

3.5.3. Concepto de elemento de volumen representativo: escalas y propiedades

En general, en materiales heterogéneos es posible encontrar un volumen suficientemente grande tal que este pueda considerarse una muestra estadísticamente representativa del compuesto (Hashin, 1983). Es decir, que incluya una muestra de todas las heterogeneidades presentes en el material. A este volumen se lo denomina elemento de volumen representativo o RVE (por sus siglas en inglés).

Existen numerosas definiciones del RVE. La indicada precedentemente es la más utilizada pero posee una importante desventaja: al incluir un gran número de heterogeneidades su tamaño puede resultar demasiado grande. Esto atenta contra la validez de los métodos de homogenización ya que, de acuerdo al principio de separación de escalas, es necesario que el RVE sea suficientemente pequeño, respecto de la escala macroscópica, para que la mecánica del continuo pueda aplicarse.

Otra definición propuesta por Willis (2002), consiste en considerar al RVE como un volumen suficientemente grande para que una propiedad macroscópica específica

⁵El término usado por Hashin (1983) es "*mini*" o miniescala.
sea independiente de las condiciones de contorno, al menos hasta un nivel especificado de precisión. A diferencia de los grandes tamaños de RVE que se obtienen a partir de la primera definición, los tamaños de los RVE encontrados con la última son más pequeños. Además, con esta última definición, el tamaño del RVE resulta dependiente de las propiedades morfológicas y físicas consideradas por cuanto, al estudiarse varias propiedades deben considerarse varios RVE o el mayor de ellos.

Las técnicas numéricas pueden usarse para determinar el tamaño del elemento de volumen representativo (Hollister y Kikuchi, 1992; Terada et al., 2003; Kanit, 2003). En este sentido, una definición de RVE basada en fundamentos estadísticos fue propuesta por Kanit et al. (2003). La definición, particularizando para el caso lineal elástico, sería: el elemento de volumen representativo debe ser de un tamaño suficiente para "asegurar una dada precisión de la propiedad estimada obtenida mediante el promedio espacial de los campos de tensión, deformación o energía [...]".

Se pueden aplicar distintas condiciones de contorno al elemento de volumen representativo. Si bien estas pueden ser de distinto tipo, una condición adicional que debe satisfacer un RVE es que su respuesta sea independiente de tales condiciones (Kouznetsova, 2002).

Como se indicó precedentemente, el uso de volúmenes de gran tamaño resulta poco práctico tanto para el trabajo experimental como para el numérico. Por este motivo, muchos autores trataron de determinar las propiedades de materiales heterogéneos a partir de muestras de menor tamaño que el RVE. Las propiedades estimadas mediante muestras individuales ya no representan las propiedades *efecti*vas del material compuesto sino que se denominan propiedades *aparentes* (Hazanov y Huet, 1994).

El empleo de volúmenes más pequeños que el RVE debe ser compensado mediante el análisis estadístico de muchas muestras con el objeto de tener una adecuada precisión en una determinada propiedad (Zohdi y Wriggers, 2005). Implícitamente se está haciendo otra suposición, la de *ergodicidad*. La suposición de ergodicidad permite reemplazar el concepto de un RVE grande (homogeneidad estadística) por la de promedios sobre varias muestras⁶. Sin embargo, Kanit (2003) determinó que las propiedades determinadas promediando en dominios pequeños de material compuesto no siempre son idénticas a las que se obtienen con un RVE grande.

De este modo, sin importar cuál sea la definición de RVE adoptada, la diferencia entre las propiedades de las fases, la fracción volumétrica y la propiedad que se propone homogenizar alteran el tamaño de la muestra representativa o RVE. Algunos enfoques consideran el empleo de muestras de menor tamaño que el RVE y un análisis estadístico de los resultados. Esta alternativa requiere de varias muestras para tener una dada precisión conforme el tamaño de las muestras disminuye.

En forma resumida sin importar cuál sea la definición que se adopte, el RVE debe ser de un tamaño suficientemente pequeño, idealmente un punto material frente a las dimensiones del nivel macroscópico, para que la mecánica del continuo pueda apli-

⁶Nótese la diferencia entre el concepto de sólido "estadísticamente homogéneo" y el "análisis estadístico" sobre muestras pequeñas.

carse y su respuesta mecánica debe ser independiente de las condiciones de contorno empleadas. Esta condición es excesivamente estricta para tejidos biológicos al punto que muchas veces son necesarias muestras tan grandes que quizás no existan en la naturaleza. Esto es una consecuencia de la naturaleza heterogénea de los materiales biológicos que no satisfacen la definición convencional de continuo. Por consiguiente, para los materiales heterogéneos a lo sumo puede hallarse un tamaño de muestra en la cual la fluctuación de una propiedad respecto de su valor medio es mínima. Harrigan et al. (1988) estudió la evolución del error en la desviación estándar de la fracción volumétrica ósea⁷ de muestras de tejido trabecular a partir de imágenes en dos dimensiones mediante mediciones estereológicas, en particular el método de a longitud de intercepción media (MIL, por sus siglas en inglés). Los autores sugirieron que, en tres dimensiones, se requiere de un volumen cúbico de cinco longitudes intertrabeculares por lado para minimizar el error en la determinación de la fracción volumétrica.

En lo que resta de este trabajo, debilitamos el concepto de elemento de volumen representativo y usamos volúmenes en los cuales, al menos, se satisface la condición precedente. De este modo, y como ocurre cuando se opera con muestras de un tamaño menor que el del RVE, las propiedades computadas ya no serán efectivas sino propiedades aparentes del volumen bajo estudio.

3.5.4. Condiciones de contorno

A efectos de determinar las propiedades homogéneas equivalentes de un material heterogéneo es necesario efectuar ensayos sobre una muestra representativa. Con este objeto se imponen *condiciones de contorno* específicas para cada método. Las más utilizadas son las condiciones cinemáticas, estáticas, mixtas y periódicas.

Las condiciones de contorno cinemáticas son conocidas también como desplazamientos lineales puros (Kanit et al., 2003; Zohdi y Wriggers, 2005). La expresión que relaciona la posición en el contorno con los desplazamientos impuestos es

$$\mathbf{u} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}.\tag{3.24}$$

Cuando se emplean condiciones de contorno estáticas, también llamadas tracciones uniformes o puras (Kanit et al., 2003; Zohdi y Wriggers, 2005), la expresión es

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}. \tag{3.25}$$

En las expresiones (3.24) y (3.25) \mathbf{E} y Σ representan tensores simétricos de segundo orden independientes de la posición \mathbf{x} . La notación de mayúsculas para la escala macroscópica y minúsculas para la microscópica tiene orígenes históricos, más adelante, se introducirá una notación de índices adecuada para el tratamiento de

⁷En el artículo original los autores se refieren a la densidad de la muestra bajo estudio, la cual definieron como la relación entre la fracción de área de tejido óseo respecto del área considerada.

múltiples escalas que, pese a no ser necesaria en este trabajo, resulta conveniente para el análisis de piezas óseas completas y de scaffolds.

Las condiciones de contorno mixtas, que combinan desplazamientos y tracciones, fueron introducidas por Huet con el objeto lograr una comparación más directa entre las condiciones experimentales y las empleadas en estimaciones numéricas, ver Hazanov y Huet (1994) y Hazanov y Amieur (1995). Éstas se mencionan aquí por razones de completitud pero, al no efectuar mediciones experimentales sobre bloques de material heterogéneo, no serán utilizadas en este trabajo.

Las condiciones de contorno periódicas (Sanchez-Palencia, 1986), en cambio fueron desarrolladas para el análisis asintótico de cuerpos que exhiben una microestructura periódica (Bensoussan et al., 1978). Sin embargo, un estudio relativamente reciente sugiere que las condiciones de contorno periódicas pueden aplicarse a materiales heterogéneos aún cuando el medio no posee periodicidad, resultando en estimaciones razonables de las propiedades efectivas (Terada et al., 2003).

Cuando se emplean condiciones de contorno periódicas el campo de desplazamientos, que toma valores idénticos en caras opuestas de un volumen (prismático) V, está dado por

$$\mathbf{u} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^*, \tag{3.26}$$

donde \mathbf{u}^* representa una fluctuación periódica del campo de desplazamientos.

3.5.5. Teoremas de valor medio y propiedades

Del estudio de funciones oscilatorias se sabe que el valor macroscópico F de una cantidad f está definido como el promedio microscópico, en nuestro caso en el dominio V bajo consideración, de dicha cantidad (Suquet, 1987; Pierard, 2006). Matemáticamente

$$F = \langle f(x) \rangle = \frac{1}{V} \int_{V} f(x) dV, \qquad (3.27)$$

donde \mathbf{x} es el vector posición del elemento dV dentro del volumen V. Los corchetes de McCauley denotan la operación de promedio en el dominio.

Considerando la ec. (3.27) se puede probar que el valor medio $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ del campo de deformaciones microscópico $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ en el dominio de un elemento de volumen representativo V_{RVE} es igual al tensor **E** de (3.24) y (3.26) siempre y cuando no ocurran despegues en las intercaras

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{V_{RVE}} \varepsilon_{ij}(x) dV_{RVE} = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{S_{RVE}} \frac{1}{2} \left(u_i n_j + u_j n_i \right) dS_{RVE} = \mathbf{E}.$$
(3.28)

Análogamente, el valor medio $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ del campo de tensiones en equilibrio $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ resulta igual al tensor $\boldsymbol{\Sigma}$ de (3.25) si no existen fuerzas en el volumen \mathbf{f} ,

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{V_{RVE}} \sigma_{ij}(x) dV_{RVE} = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{S_{RVE}} \frac{1}{2} \left(t_i x_j + t_j x_i \right) dS_{RVE} = \boldsymbol{\Sigma}.$$
(3.29)

Nótese que cuando se emplean tracciones uniformes en el contorno la tensión media puede obtenerse conociendo la tracción t en la superficie. Cuando se aplican desplazamientos lineales en el contorno, las deformaciones medias en el cuerpo pueden obtenerse midiendo los desplazamientos superficiales (Willis, 2002). La prueba de los teoremas anteriores puede encontrase en Nemat-Nasser y Hori (1999); Stein et al. (2004); Zohdi y Wriggers (2005). Para el caso de las condiciones periódicas el procedimiento es similar, la única consideración adicional es recordar que el promedio de las cantidades periódicas resulta nulo en el volumen del RVE (Böhm, 2010).

3.5.6. Propiedades globales

Las expresiones (3.28) y (3.29) ponen de manifiesto una relación entre los campos deformación y tensión microscópicos con los valores medios en el RVE. Formalmente, y en particular en problemas de localización, los campos deformación $\boldsymbol{\varepsilon}$ y de tensión $\boldsymbol{\sigma}$ dentro del volumen del V_{RVE} están relacionados con sus homólogos macroscópicos $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ y $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ mediante

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{M}(\mathbf{x}) \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \qquad o \qquad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \qquad (3.30)$$

siendo $\mathbf{M}(x)$ y $\mathbf{N}(x)$ los tensores de localización o concentración de deformación y tensión respectivamente (Segurado Escudero, 2004).

Las relaciones expresadas en (3.28), (3.29) y (3.30) junto al concepto de elemento de volumen representativo se pueden emplear para hallar la respuesta global de un material compuesto. Sabiendo que ésta es lineal elástica, la relación entre las tensiones y deformaciones macroscópicas son

$$\left\langle \boldsymbol{\sigma} \right\rangle = \mathbf{C}^* \left\langle \boldsymbol{\varepsilon} \right\rangle, \tag{3.31}$$

у

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \mathbf{S}^* \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \,.$$
 (3.32)

Partiendo de la ley de Hooke generalizada (3.18) o de su inversa (3.19), para los campos microscópicos y usando (3.27) se puede probar que los tensores elástico y de compliancia del material homogéneo equivalente están dados por las expresiones

$$C_{ijkl}^* = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} C_{ijpm}(x) M_{pmkl}(x) dV_{RVE} \qquad \text{y}$$
(3.33)

$$S_{ijkl}^{*} = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} S_{ijpm}(x) N_{pmkl}(x) dV_{RVE}.$$
 (3.34)

3.6. Métodos de homogenización

Uno de los objetivos de la micromecánica es acotar o estimar las propiedades efectivas de los materiales a partir del conocimiento de las ecuaciones constitutivas y la distribución espacial de las fases. Los métodos de homogenización han sido diseñados para este propósito y han alcanzado un desarrollo importante en el caso de propiedades lineales tales como la conductividad térmica o la elasticidad (Sanchez-Palencia, 1986; Nemat-Nasser y Hori, 1999; Torquato, 2002; Buryachenko, 2007).

A continuación se resumen las hipótesis y resultados principales de estos métodos para el caso particular de materiales bifásicos formados. Debido a la naturaleza y objetivos de este trabajo nos concentraremos en las propiedades lineales y elásticas. Esta revisión no pretende ser exhaustiva, detalles y otros métodos pueden consultarse en la bibliografía citada y sus respectivas referencias.

3.6.1. Modelos de campo medio

En los modelos de campo medio se considera que los campos de tensiones y deformaciones dentro de las fases se pueden representar por sus medias volumétricas $\langle \sigma_m \rangle$ y $\langle \varepsilon_m \rangle$ para la matriz y $\langle \sigma_i \rangle$ y $\langle \varepsilon_i \rangle$ para los refuerzos o inclusiones respectivamente. Estos valores se pueden determinar empleando las ecs. (3.28) y (3.29) con una salvedad, la integral debe evaluarse en el volumen de la fase correspondiente y no sobre el RVE completo. La suma de los volúmenes de la matriz V_m y de las inclusiones V_i representan el total del volumen V bajo evaluación (igual a V_{RVE}).

Si la matriz y las inclusiones se comportan como sólidos elásticos, la relación entre las tensiones y las deformaciones medias en cada fase se puede escribir como $\langle \sigma_m \rangle = \mathbf{C}_m \varepsilon_m \text{ y } \langle \sigma_i \rangle = \mathbf{C}_i \varepsilon_i$, donde $\mathbf{C}_m \text{ y } \mathbf{C}_i$ son los tensores elásticos de la matriz y las inclusiones. De una forma análoga se pueden definir los respectivos tensores de compliancia, \mathbf{S}_m y \mathbf{S}_i . Luego, las tensiones y deformaciones en las fases están relacionadas con las tensiones y deformaciones medias de cada fase mediante los correspondientes tensores de localización \mathbf{M}_m y \mathbf{M}_i o \mathbf{N}_m y \mathbf{N}_i (Gonzáles Martínez, 2000)

$$\langle \sigma \rangle_m = \mathbf{N}_m \langle \sigma \rangle \qquad y \qquad \langle \sigma \rangle_i = \mathbf{N}_i \langle \sigma \rangle, \qquad (3.35)$$

$$\langle \varepsilon \rangle_m = \mathbf{M}_m \langle \varepsilon \rangle \qquad y \qquad \langle \varepsilon \rangle_i = \mathbf{M}_i \langle \varepsilon \rangle.$$
 (3.36)

Luego, reemplazando las expresiones anteriores en las ecs. (3.28) y (3.29) para tener el promedio volumétrico de las tensiones o deformaciones en todo el RVE, se obtiene

$$\langle \sigma \rangle = (1 - \xi) \langle \sigma \rangle_m + \xi \langle \sigma \rangle_i \qquad y \qquad \langle \varepsilon \rangle = (1 - \xi) \langle \varepsilon \rangle_m + \xi \langle \varepsilon \rangle_i , \qquad (3.37)$$

donde ξ es la fracción volumétrica de las inclusiones en el material compuesto⁸.

 $^{{}^{8}}$ En rigor, se pueden utilizar otros descriptores estadísticos, por cuanto se puede agregar información acerca de la anisotropía y distribución de las fases

Usando las expresiones anteriores, se puede demostrar que

$$(1-\xi)\mathbf{M}_m + \xi\mathbf{M}_i = \mathbf{I},\tag{3.38}$$

$$(1-\xi)\mathbf{N}_m + \xi\mathbf{N}_i = \mathbf{I}.$$
(3.39)

Las constantes elásticas efectivas quedan determinadas si se conoce alguno de los cuatro tensores de localización. Es decir, el problema elástico se reduce a hallar uno de los tensores de localización (Böhm, 2010).

Las estrategias representativas de este tipo de métodos son las de campo efectivo y las aproximaciones de medio efectivo. El costo computacional de estos métodos es bajo y se han empleado exitosamente para describir la respuesta termoelástica de materiales heterogéneos. Sin embargo, tienen la limitación de no considerar la interacción entre partículas Böhm (2010).

3.6.1.1. El modelo de Eshelby

Una buena parte de la literatura acerca de los métodos de campo medio se basa en el trabajo de Eshelby (1957), quien analizó el comportamiento de una inclusión elástica de forma elipsoidal que sufre una deformación uniforme. De este modo aparecen tensiones en el resto del material y en la inclusión misma.

El tensor de concentración de la deformación, M_i^{dil} , que se obtiene a partir del modelo de Eshelby, no tiene en cuenta las interacciones entre las partículas dentro del material compuesto y sólo puede emplearse para obtener las propiedades de materiales compuestos cuando la fracción volumétrica del refuerzo permite considerarlo como diluido en la matriz (de allí el uso del supraíndice "dil"). Una observación similar se puede hacer respecto del tensor de concentración de tensiones.

Existen numerosos métodos basados en el modelo de Eshelby para calcular propiedades efectivas de un compuesto cuando la fracción volumétrica de inclusiones es finita, dos de los más conocidos son los modelos de Mori-Tanaka y los métodos autoconsistentes.

3.6.1.2. El modelo de Mori-Tanaka

En el modelo de Mori-Tanaka, los tensores de concentración de deformaciones o tensiones de la inclusión se calculan interpolando los tensores de concentración para el caso diluido y para el caso en que la fracción volumétrica tiende a uno, es decir, cuando el valor del tensor de concentración es igual a la matriz identidad.

La hipótesis principal del modelo de Mori-Tanaka reside en la descripción de las inclusiones como elipsoides con una relación de aspecto conocida que se mantiene mientras avanza la deformación. Sin embargo, en materiales con una alta fracción volumétrica de huecos, las paredes o los puntales característicos de los materiales con esta microestructura se deforman por flexión o por pandeo por cuanto existe un cambio en la forma de los huecos. Estos efectos no son debidamente considerados por el modelo de Mori-Tanaka. La implementación numérica del método es relativamente sencilla una vez que se tiene el tensor de Eshelby. A pesar de sus limitaciones, el método ha demostrado ser práctico para muchos compuestos que presentan características de "inclusión embebida en una matriz".

3.6.1.3. Métodos Autoconsistentes

Otro método, en el que se considera que existe una fase embebida en un material efectivo, es el llamado autoconsistente. Es usual distinguir entre dos tipos de modelo autoconsistente: el convencional o clásico y el generalizado.



Figura 3.6: Modelos autoconsistentes: (a) convencional, (b) generalizado.

En el modelo autoconsistente convencional el tensor de concentración de la deformación se calcula suponiendo que la inclusión está embebida en el material efectivo cuyas propiedades no son conocidas *a priori*, de hecho son la solución del problema, ver Figura 3.6. Este modelo es particularmente adecuado para materiales polifásicos donde las fases se encuentran dispersas sin que exista una matriz continua, como ocurre, por ejemplo, en los sólidos policristalinos.

En el modelo autoconsistente generalizado se supone que el material está compuesto por inclusiones esféricas o fibras alineadas de distinto tamaño, rodeadas por una especie de corona del material de la matriz. La relación entre los radios de la inclusión y la corona es constante, ver Figura 3.6. La corona está embebida en un medio efectivo cuyas constantes elásticas son las incógnitas del método. Existen soluciones cerradas para este problema cuando las solicitaciones son una compresión hidrostática o un corte simple (Segurado Escudero, 2004). Rigurosamente, el método autoconsistente generalizado no es un método de campo medio ya que no se basa en las medias volumétricas de las tensiones ni deformaciones en las fases.

Con el método autoconsistente generalizado se obtienen muy buenos resultados en materiales con una topología del tipo matriz-inclusión y resultan adecuados para estimar el módulo elástico y térmico de materiales compuestos reforzados con esferas, partículas equiaxiales o fibras alineadas.

3.6.2. Métodos de acotación

Los métodos de acotación solamente se utilizan para homogenización, es decir, no se emplean en procedimientos de localización. Las cotas a las propiedades elásticas de materiales heterogéneos se obtienen a partir de principios variacionales. Entre la basta bibliografía en la cual se puede encontrar una descripción completa de estos métodos mencionaremos a Buryachenko (2007) y Böhm (2010) como referencias autocontenidas. Detalles de las correlaciones de n-puntos pueden encontrarse en Torquato (2002).

3.6.2.1. Cotas de Reuss y Voigt

Sea un material polifásico con N fases que ocupa un dominio Ω y, en donde cada fase ocupa un subdominio $\Omega^{(r)}$ tal que r puede tomar valores entre 1 y N. La distribución de cada fase r se caracteriza por los indicadores $\chi^{(r)}(\mathbf{x})$. Estas funciones son iguales a 1 si $\mathbf{x} \in \Omega^{(r)}$ e igual a 0 en cualquier otro caso (Idiart, 2006).

Bajo estas condiciones la función densidad de energía $w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon})$ y la función densidad de energía complementaria $u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma})$ pueden expresarse a partir de los potenciales homogéneos de las fases $w(\boldsymbol{\varepsilon})$ y $u(\boldsymbol{\sigma})$ como

$$w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{r=1}^{N} \chi^{(r)} w^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}), \qquad (3.40)$$

$$u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{r=1}^{N} \chi^{(r)} u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}).$$
(3.41)

La caracterización del comportamiento efectivo de un material heterogéneo se puede efectuar a partir del principio de mínima energía potencial (PMEP). Éste establece que de todos los estados de deformaciones admisibles que satisfacen el equilibrio, el correcto es aquel que minimiza la energía potencial del cuerpo o estructura bajo análisis. De este modo y usando la expresión (3.27) se define al potencial \widetilde{W} del compuesto como

$$\widetilde{W} = \min_{\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{X}) \in K(\overline{\boldsymbol{\varepsilon}})} \left\langle w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\varepsilon}) \right\rangle = \min_{\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{X}) \in K(\overline{\boldsymbol{\varepsilon}})} \sum_{r=1}^{N} \xi^{(r)} \left\langle w^{(r)}(\boldsymbol{\varepsilon}) \right\rangle^{(r)}, \quad (3.42)$$

donde se enfatiza la definición en términos de la media volumétrica de las deformaciones $\overline{\varepsilon} = \langle \varepsilon \rangle$, $K_{(\overline{\varepsilon})}$ representa el juego de deformaciones cinemáticamente admisibles, $\xi^{(r)}$ es la fracción volumétrica de la fase r y el resto de las cantidades fueron definidas previamente. Análogamente, y a partir del *principio de la mínima energía complementaria* (PMEC) se define al potencial efectivo en términos de las tensiones como

$$\widetilde{U} = \min_{\sigma(\mathbf{X})\in E(\overline{\sigma})} \langle u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}) \rangle = \min_{\sigma(\mathbf{X})\in E(\overline{\sigma})} \sum_{r=1}^{N} \xi^{(r)} \left\langle u^{(r)}(\boldsymbol{\sigma}) \right\rangle^{(r)}, \quad (3.43)$$

donde se enfatiza la definición en términos de la media volumétrica de las tensiones $\overline{\sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ y $E_{l}\overline{\sigma}$) es el juego de tensiones estáticamente admisibles.

De este modo, si el comportamiento de las fases es lineal y elástico los potenciales efectivos de deformación y tensión resultan iguales a

$$\widetilde{W}(\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \frac{1}{2} \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \ \mathbf{C}^* \ \overline{\boldsymbol{\varepsilon}},\tag{3.44}$$

$$\widetilde{U}(\overline{\boldsymbol{\sigma}}) = \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{\sigma}} \ \mathbf{S}^* \ \overline{\boldsymbol{\sigma}}.$$
(3.45)

En el modelo de Voigt se supone que la deformación de cada fase dentro del RVE es idéntica, esto es, una deformación constante dentro del RVE. En el modelo de Reuss, en cambio, se supone que la tensión es constante e idéntica dentro las fases del RVE. Por lo tanto, los tensores de localización de deformaciones **M** para el primero de los modelos y, de localización de tensiones **N** para el segundo (ver (3.30)) resultan iguales a la matriz identidad, **I**. De este modo, de acuerdo con (3.33) y (3.34) los tensores de elasticidad y de compliancia quedan determinados solamente por las propiedades mecánicas $C_{ijpm}^{(r)}$ y las fracciones volumétricas $\xi^{(r)} = 1/V_{RVE} \int_{V_{PVE}}^{(r)} \mathbf{I} \ dV_{RVE}$ de las N fases constituyentes

$$\mathbf{C}_{Voigt} = \sum_{r=1}^{N} \xi^{(r)} \mathbf{C}^{(r)}, \qquad (3.46)$$

$$(\mathbf{S}_{Reuss})^{-1} = \left[\sum_{r=1}^{N} \xi^{(r)} \mathbf{S}^{(r)}\right]^{(-1)}.$$
(3.47)

Con esta información se pueden establecer cotas rigurosas a los potenciales efectivos \widetilde{W} y \widetilde{U} empleando valores adecuados para los campos de deformación ε y tensión σ en las expresiones (3.42) y (3.43). Hill empleó los estudios de Voigt y Reuss con este propósito al advertir que los campos uniformes $\varepsilon(\mathbf{x}) = \overline{\varepsilon}$ y $\sigma(\mathbf{x}) = \overline{\sigma}$ de estos modelos determinan las siguientes cotas superior e inferior a los potenciales \widetilde{W} y \widetilde{U} ,

$$\widetilde{W}(\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}) \leq \frac{1}{2} \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \ \mathbf{C}_{Voigt} \ \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}, \tag{3.48}$$

$$\widetilde{U}(\overline{\sigma}) \le \frac{1}{2}\overline{\sigma} \ \mathbf{S}_{Reuss} \ \overline{\sigma}.$$
 (3.49)

De este modo, Hill estableció una cota superior \mathbf{C}_{Voigt} e inferior $\mathbf{C}_{Reuss} = \mathbf{S}_{Reuss}^{-1}$ al tensor de elasticidad efectivo \mathbf{C}^* . Por lo tanto, es lícito considerar que los campos de Voigt y Reuss proveen de extremos a los microcampos, ya que el campo de tensiones de Voigt las tensiones en los contornos de las fases no pueden estar en equilibrio (estáticamente inadmisible), mientras que las deformaciones de Reuss son tales que las heterogeneidades y la matriz no pueden estar perfectamente adheridas (cinemáticamente inadmisible) (Zohdi y Wriggers, 2005; Kanouté et al., 2009). Estas cotas proveen una forma rápida de determinar la respuesta de materiales agregados microheterogéneos. Sin embargo, puesto que sólo poseen información acerca de la fracción volumétrica de las fases, no consideran la forma en que las fases están distribuidas dentro del compuesto. Por este motivo, la separación entre estas cotas crece al aumentar las diferencias en las fracciones volumétricas de las inhomogeneidades y la diferencia entre las propiedades de las fases.

3.6.2.2. Cotas de Hashin-Shtrikman

Las cotas de Hashin y Shtrikman utilizan principios variacionales y el concepto de polarización de campos para materiales estadísticamente isotrópicos (Hashin, 1983; Böhm, 2010). Estas cotas son sensibles al tamaño de la muestra y son rigurosamente válidas sólo asintóticamente, por lo tanto son útiles cuando el tamaño de la muestra (mesoescala) es infinito respecto de la escala de los microconstituyentes (Zohdi y Wriggers, 2005).

Las cotas de Hashin y Shtrikman son las más ajustadas que se pueden obtener cuando la única información disponible para describir la microestructura es la fracción volumétrica y la distribución del refuerzo es isótropa (Segurado Escudero, 2004). De hecho, estas cotas coinciden con los valores obtenidos mediante el modelo de Mori-Tanaka para materiales compuestos reforzados con partículas esféricas, por cuanto este último puede considerarse un caso particular del método desarrollado por Hashin y Shrikman.

Puesto que el hueso trabecular, ni el tejido trabecular, son estadísticamente isotrópicos este método no resulta adecuado para nuestros propósitos.

3.6.3. Métodos de celdas embebidas y de ventana

En los métodos de celdas embebidas se aproxima al material heterogéneo mediante un "núcleo" que representa la microestructura real del compuesto embebido en una región con propiedades efectivas descritas mediante alguna ley constitutiva apropiada. Las propiedades de la región externa pueden determinarse mediante procedimientos similares a los autoconsistentes o mediante métodos iterativos (Segurado Escudero, 2004). Las condiciones de contorno se aplican al material efectivo, Figura 3.7.

La estrategia de embeber el núcleo fue desarrollada con el propósito de evitar efectuar suposiciones acerca de la periodicidad de la geometría en la escala microscópica (Qingsheng et al., 1994). Pese a ser computacionalmente onerosos, con estos métodos se pueden resolver en forma detallada los campos de tensión y deformación del núcleo (Böhm, 2010).

En los métodos de ventana se seleccionan regiones⁹ de un dado material sobre las cuales se imponen, por ejemplo, las condiciones de contorno indicadas en la Seccción 3.5.4. Resulta evidente que la diferencia principal con los métodos de celda embebida reside en la aplicación directa de las condiciones de contorno directamente a la

⁹En el análisis espacial de materiales resulta más adecuado hablar de regiones que de ventanas.



Figura 3.7: Representación esquemática de un modelo de celda embebida.

región de interés en lugar de usar un material efectivo. Las ventanas seleccionadas constituyen la escala mesoscópica del análisis y usualmente son menores que el elemento de volumen representativo. De este modo, con los métodos de ventana se obtienen propiedades *aparentes* en lugar de propiedades *efectivas*, ver Sección 3.5.3. Sin embargo, cuando se utilizan muestras suficientemente grandes, es posible obtener cotas al comportamiento global de los materiales.

3.6.4. El método mecánico directo

A este método para computar de las propiedades aparentes se lo denomina comúnmente enfoque directo (Hashin, 1983) o estándard (Hollister y Kikuchi, 1992). Para su implementación se necesita conocer los campos de tensiones o deformaciones ante condiciones de contorno impuestas a una muestra. Estas condiciones, según Hashin (1983), deben provocar campos homogéneos en un cuerpo homogéneo. En cuerpos elásticos, dos condiciones de contorno que satisfacen este requerimiento están dadas por las expresiones (3.24) y (3.25).

En la práctica, y a efectos de considerar geometrías complejas, es usual emplear el método de los elementos finitos para resolver los estados de tensión y deformación en el RVE. Con esta información se computan los tensores de localización que permiten determinar las propiedades elásticas efectivas mediante las relaciones (3.33) y (3.34).

Nótese que las propiedades determinadas serán efectivas solamente si el tamaño de la muestra es mayor que el RVE. Sin embargo, este concepto fue debilitado en la Sec. 3.5.3 para considerar las características del hueso. Como consecuencia, con el método directo se obtienen cotas a las propiedades elásticas de las muestras.

3.6.5. El método de homogenización asintótica

El método de homogenización asintótica o simplemente homogenización¹⁰, se basa en la teoría para el análisis de materiales heterogéneos desarrollada a partir del estudio de ecuaciones diferenciales parciales con coeficientes que varían rápidamente (Bensoussan et al., 1978; Sanchez-Palencia, 1986; Bendsoe y Kikuchi, 1988). Rigurosamente, es un método válido para materiales con una microestructura periódica, es decir, aquellos materiales en los cuales una muestra macroscópica está compuesta por unidades o celdas que se repiten espacialmente (Buryachenko, 2007).

Los campos de tensiones y deformaciones están relacionados con sus homólogos macroscópicos mediante los tensores de localización según la ec. (3.30). Las condiciones de contorno, dadas por la ec. (3.26), provocan campos de tensión y deformación periódicos. Por ejemplo, considérese el caso de una barra con una estructura periódica compuesta de segmentos intercalados de los materiales A y B, ver Figura 3.8. En este caso, cada celda (C_u) contribuye con el mismo incremento al vector desplazamiento $\Delta \mathbf{u}$ (Nemat-Nasser y Hori, 1999; Böhm, 2010). Se justifica así el empleo de una única celda como RVE.



Figura 3.8: Variación de las deformaciones y los desplazamientos en una barra de material bifásico, la periodicidad de los campos es evidente. De Böhm (2010).

Se puede demostrar que si el campo de desplazamientos **u** satisface la condición de periodicidad impuesta sobre el tensor de elasticidad $\mathbf{C}(\mathbf{x} + \mathbf{d}) = \mathbf{C}(\mathbf{x})$ (o de compliancia) su gradiente y el campo de deformaciones también son periódicos (Nemat-Nasser y Hori, 1999). Además, en el método se supone que la deformación y/o tensión total puede separarse en una componente aparente $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ y otra oscilatoria $\boldsymbol{\varepsilon}^*$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle + \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad y \quad \boldsymbol{\sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + \boldsymbol{\sigma}^*.$$
 (3.50)

¹⁰El nombre parece haber sido acuñado por Babuska, citado en Bensoussan et al. (1978), debido a la expansión empleada para el desplazamiento microestructural.

Los tensores de elasticidad y de compliancia responden a las ecuaciones (3.31) y (3.32). De esta forma, para hallar los tensores de elasticidad o de compliancia representativos del comportamiento del material, ecs. (3.33) y (3.34), es necesario computar el valor alguno de los tensores de localización. Para esto, normalmente se resuelven problemas de valor de contorno empleando el método de los elementos finitos.

El método de homogenización asintótica puede usarse en materiales localmente periódicos. La diferencia entre los conceptos de periodicidad global y local se muestra gráficamente en la Figura 3.9. El concepto de periodicidad local permite considerar los efectos de una microestructura no uniforme en la respuesta macroscópica de materiales compuestos. Terada et al. (2003) demostró que las estimaciones de las propiedades efectivas de un material heterogéneo resultan razonables aún cuando el material no es periódico.



Figura 3.9: Esquema de una estructura macroscópica con una microestructura: (a) globalmente periódica y, (b) localmente periódica. De Kouznetsova (2002).

3.7. Discusión y conclusiones

Se presentó la teoría de la elasticidad lineal en el marco de la mecánica de medios continuos. Se introdujeron sus principales hipótesis y limitaciones en cuanto a la heterogeneidad de materiales compuestos, los cuales fueron discutidos brevemente en términos generales desde el punto de vista de la ciencia de materiales.

La extensión de los conceptos e hipótesis de la mecánica del continuo a materiales compuestos fue realizada mediante los conceptos de separación de escalas, homogeneidad estadística y de elemento de volumen representativo (RVE). La determinación del tamaño del RVE es aún hoy motivo de discusión aunque se imponen los enfoques pragmáticos que requieren del empleo de de técnicas numéricas. En función de los resultados de la revisión bibliográfica, se debilitó el concepto de elemento de volumen representativo (RVE) tal que las hipótesis de la teoría de medios continuos sean válidas en el dominio de la muestra. Siguiendo a Harrigan et al. (1988) en este trabajo se emplean muestras de al menos cinco longitudes intertrabeculares. Puesto que este trabajo forma parte de un proyecto de mayor envergadura, que necesitará del análisis multiescala del hueso trabecular (Sec. 1.2), se presentaron los conceptos de homogenización y localización. El concepto de localización será utilizado cuando se incorporen los métodos de remodelado interno, ya que se requerirá del conocimiento de los campos tensión o deformación a nivel microestructural cuando las solicitaciones se aplican sobre la escala del hueso completo.

Se presentó una revisión de los métodos de homogenización aplicados a problemas de elasticidad lineal. Varios de estos métodos se basan en el trabajo de Eshelby ¹¹ acerca del campo de tensiones en una inclusión aislada embebida en una matriz tales como los modelos de Mori-Tanaka y el método autoconsistente (convencional).

El modelo de Mori-Tanaka es adecuado para el estudio de compuestos del tipo inclusión embebida en matriz, pero es inadecuado para materiales con una alta fracción volumétrica de huecos. Por este motivo se lo considera inapropiado para el estudio del hueso trabecular. Un comentario similar puede efectuarse respecto de los métodos autoconsistente. El método autoconsistente clásico también da buenos resultados para el caso de materiales policristalinos pero, este arreglo de fases dista mucho del existente en el hueso trabecular.

Cuando la microestructura es suficientemente regular como para ser considerada periódica (o verdaderamente lo es), las propiedades globales pueden determinarse a partir del estudio de celdas unitarias con condiciones de contorno periódicas. En este sentido, el método de homogenización asintótica puede emplearse para determinar las propiedades de un material compuesto sin importar cuál sea el arreglo de las fases. Usado en conjunto con el método de los elementos finitos constituye una herramienta poderosa para el estudio micromecánico del hueso trabecular.

Por otro lado, los métodos de acotación también pueden combinarse con el método de los elementos finitos para obtener cotas a las propiedades elásticas del hueso trabecular. Las cotas obtenidas con este método, llamado directo o estándar, resultan más estrechas que las cotas tradicionales de Voigt y Reuss. Con estas últimas se obtienen cotas tan apartadas que carecen de utilidad cuando la diferencia entre las propiedades de las fases es significativa. De todos modos, pueden utilizarse con propósitos de verificación de las anteriores.

Las cotas de Hashin y Shtrikman, pese a ser rigurosas en el contexto de isotropía, son sensibles al tamaño de la muestra. Por lo tanto resultan inadecuadas para la evaluación de muestras de menor tamaño que el RVE. Considerando el tamaño de muestra que a utilizar en este trabajo y la reconocida orientación de las fases en el hueso trabecular, resulta inapropiado su empleo para los propósitos de este trabajo.

En virtud de lo indicado más arriba, los métodos mecánico directo y de homogenización asintótica se adoptan los más adecuados para el estudio micromecánico del tejido trabecular. La estrategia a seguir involucra el uso de modelos tridimensionales obtenidos a partir de imágenes médicas. Los métodos de construcción y la implementación de ambos métodos se detallan y discuten en los capítulos 4 a 6.

 $^{^{11}{\}rm Reportado}$ en Eshelby (1957) y Eshelby (1959) pese a que en la bibliografía especializada resulta usual referirse sólo al primero de ellos.

Capítulo 4

Construcción de modelos tridimensionales de elementos finitos a partir de imágenes de microtomografía computarizada

En este capítulo se presenta una detallada descripción del procedimiento desarrollado para construir modelos de elementos finitos a partir de imágenes microtomográficas. Con este propósito, se presenta una descripción breve del funcionamiento y operación de un microtomógrafo computarizado (microTC), se discuten las fuentes principales de error asociadas al proceso de adquisición, procesamiento y construcción de los modelos y se proponen alternativas de mitigación antes de aplicar el método a algunos casos de estudio. El capítulo finaliza con una breve discusión de los conceptos y resultados obtenidos.

4.1. Introducción

Los métodos tradicionales de de microscopía permiten el estudio imágenes bidimensionales de la superficie de una muestra o secciones delgadas. La limitación a la superficie de la microscopía convencional fue superada con la introducción de las radiografías (rayos X). Éstos sistemas permitieron obtener información acerca de la estructura de los objetos en imágenes bidimensionales (2D), aunque carecen de profundidad. Sin embargo, para el estudio del hueso trabecular debe considerarse la conectividad espacial de las trabéculas, por cuanto deben contemplarse las tres dimensiones (3D) (Ibarra Pino y Cisilino, 2010), ver Sec. 7.5.2.

La tomografía computarizada de rayos X, en adelante TC, constituye una herramienta poderosa para el análisis tridimensional de piezas óseas al permitir visualizar el interior de los objetos en 3D prácticamente sin acondicionamiento previo de las muestras. No obstante, su resolución espacial está en el rango de unos cuántos milímetros, por lo que los vóxeles¹ resultantes son, a lo sumo, tan pequeños como 1 mm³. Esta resolución no es suficiente para considerar detalles microestructurales. Por su parte, la microtomografía computarizada de rayos X, en adelante microTC,

¹Es una unidad cúbica análoga al píxel en 2D, de hecho la palabra inglesa voxel significa "volumetric pixel". Representa la mínima unidad procesable de una matriz tridimensional.

posee una resolución siete órdenes de magnitud superior². Por este motivo, la microTC un método invaluable para el análisis tridimensional de muestras de tejido óseo, al permitir la caracterización cuantitativa de la arquitectura trabecular con alta resolución en forma no destructiva.

4.2. Funcionamiento de un microtomógrafo

Una imagen de rayos X es una proyección bidimensional de un objeto en tres dimensiones iluminado por un haz de rayos X. De esta forma, cada punto en la imagen contiene información acerca del objeto tridimensional atravesado por el correspondiente haz, Figura 4.1. El haz de rayos X se crea mediante una fuente de foco pequeño cuyo rango de energía va desde los 10 a 130 KeV (Sasov y Dyck, 1998; SkyScan, 2010b).



Figura 4.1: Imagen proyectada de un objeto iluminado por un haz de rayos X.

La interpretación de la imagen proyectada puede efectuarse en términos de la atenuación de los rayos X y el objeto. La atenuación de un material puede caracterizarse mediante la longitud de atenuación, definida como la distancia a la cual la intensidad del haz de rayos X se reduce a un 37%. La longitud de atenuación, que disminuye con la densidad del material y aumenta con la energía de la fuente, puede diferir hasta en dos órdenes de magnitud entre materiales livianos y pesados. Por este motivo, el estudio de los últimos requiere de valores de energía altos (Sasov y Dyck, 1998).

En cuanto a los campos de visión, estos pueden ser menores a 20×20 mm y tan grandes como para tomar el volumen completo de un roedor³ vivo, dependiendo del

 $^{^{2}}$ La resolución está limitada, en parte, por el tipo de fuente de rayos X. Recientemente se ha comenzado a comercializar equipos con resolución superior a fracciones de micrómetro.

³Del tamaño de un ratón de laboratorio, *Mus musculus*.

fabricante y modelo del equipo.

Si bien existen diversas configuraciones posibles para un microtomógrafo (Stock, 2009), sólo a efectos de describir el principio de funcionamiento consideremos una configuración de rayos paralelos como en la Fig. 4.1. En la configuración presentada, la proyección tiene idénticas dimensiones al objeto iluminado, pero existen otras disposiciones donde la imagen puede estar magnificada dependiendo de las distancias relativas entre los pares fuente-detector y fuente-objeto.

La reconstrucción tridimensional de un objeto se realiza a partir de imágenes de secciones transversales o lajas que, a su vez, se obtienen a partir de múltiples proyecciones adquiridas conforme el objeto rota⁴.

Para la construcción de las secciones transversales se emplean técnicas como la de *back-projection*⁵ que permite identificar la posición de, por ejemplo regiones con absorción significativa (atenuación) en el seno de un objeto, a partir de la superposición de proyecciones o vistas en distintos ángulos (Russ, 2002). Este concepto se ilustra en la Figura 4.2 para un fantoma⁶.



Figura 4.2: Método de *back-projection*, vistas convolucionadas de un fantoma: (a) 1 vista, (b) 2 vistas, (c) 8 vistas, (d) 180 vistas. Adaptado de Russ (2002).

Empleando un número elevado de proyecciones (varias decenas o cientos de ellas) se puede obtener una imagen con una buena definición de la posición de la región de atenuación dentro del objeto. Debido al método de construcción, la sección reconstruida posee una zona difusa alrededor de la región de mayor absorción como consecuencia de la superposición de líneas de proyección o de sombra. Para mitigar este efecto se utilizan diversas técnicas, que normalmente consisten en algoritmos de convolución (Stock, 2009). Una vez efectuado este proceso se obtiene una imagen de la sección transversal del objeto en escala de grises que se almacena en formato .bmp o .jpg, típicamente en 1024×1024 píxeles.

Los algoritmos empleados para construir las secciones transversales son sensibles a las perturbaciones del haz, por lo tanto, pueden provocar importantes errores en la reconstrucción. Además, existen numerosos problemas prácticos que afectan a la calidad de las imágenes obtenidas. Una lista de los defectos en la reconstrucción,

⁴Sólo en el caso animales vivos se emplea la rotación del sistema y no de la muestra.

 $^{^{5}}$ Otros dos métodos de reconstrucción por proyecciones son el algebraico y el de transformadas de Fourier.

⁶Objeto para calibración de equipo con formas y densidades conocidas.

junto algunas alternativas de corrección o mitigación, puede encontrarse en Stock (2009), mientras que los detalles acerca de los métodos de reducción de ruido pueden consultarse en Gonzalez y Woods (2002) y Gonzalez et al. (2003).

4.3. Procedimiento de construcción de modelos de elementos finitos

El procedimiento de construcción de los modelos de elementos finitos a partir de imágenes de microTC involucra varias etapas a saber: adquisición y segmentación; binarización⁷; construcción de una nube de puntos, siendo los puntos píxeles separados por una distancia o *paso* definido; y la generación de la malla de elementos finitos. La malla se importa al entorno de cálculo Abaqus 6.9 (2009) previa asignación de las propiedades mecánicas a las fases correspondientes. La Figura 4.3 ilustra el procedimiento utilizado.



Figura 4.3: Esquema de procedimiento de construcción del modelo de elementos finitos a partir de imágenes de microTC.

4.3.1. Adquisición y segmentación

La adquisición de las imágenes correspondientes a las secciones transversales de una muestra se realiza mediante algún equipo de microtomografía computada. Los fundamentos y generalidades de este procedimiento fueron descriptos en la sección anterior.

El proceso de segmentación constituye un paso crítico para lograr una adecuada representación de la geometría trabecular. El método empleado casi universalmente

⁷Nótese que en este trabajo se hace una diferencia entre segmentación y binarización. La convención que se adoptó está motivada por el marco interdisciplinario en el que se desarrolló el presente trabajo: las imágenes fueron segmentadas por otros grupos y la binarización fue realizada por el autor. Los detalles de cada procedimiento se encuentran en las subsecciones correspondientes.

para el análisis de tejido óseo es el método de umbrales⁸ (Hollister y Kikuchi, 1994; Terada et al., 1997; Perilli et al., 2007; Argenta et al., 2010; Ibarra Pino et al., 2010). En particular, en sistemas polifásicos, se emplea el método de doble umbral que consiste en la selección de dos valores en la escala de grises (0 a 255) que limitan el rango de una fase de interés permitiendo su identificación.

4.3.2. Binarización

Una vez realizada la segmentación de las imágenes se procede a su binarización, es decir, la conversión de las imágenes disponibles en escalas de grises a imágenes que contienen únicamente píxeles blancos y negros representando alguna de las fases consideradas. En esencia, este procedimiento es similar al de segmentación.

En los casos en que existe un alto contraste entre las fases es posible identificarlas mediante segmentación binaria de doble umbral. En estos casos, los picos en el histograma de la escala de grises están separados y basta con seleccionar un valor de umbral entre ellos y otro por encima o por debajo del valor que delimita la fase de interés, Figura 4.4. Frecuentemente, después de explorar varios valores de umbral en algunas de las imágenes de microtomografía de un mismo objeto, es posible hallar un valor que es adecuado para todo el juego.



Figura 4.4: Ejemplo de segmentación binaria en huesos: (a) imagen original en escala de grises, (b) imagen binarizada. El histograma muestra la existencia de dos fases y los umbrales seleccionados.

Las imágenes fueron binarizadas y almacenadas en formato .tif empleando un programa desarrollado a tales efectos en el entorno MatLab (MatLab, 2004). En el Apéndice A se lista el código implementado.

⁸Además del métodos de umbrales existen otras técnicas de segmentación: de puntos, línea y borde y sus variantes para cada una; por regiones y watershed, Gonzalez y Woods (2002).

4.3.3. Construcción de la nube de puntos

Puesto que para la construcción de los modelos se requieren varias centenas de imágenes de microTC y, normalmente, una cantidad n^2 de píxeles por cada una de ellas, el uso de toda la información disponible implicaría procesar datos de decenas de millones de píxeles por cada modelo. Aún si semejante modelo puede construirse, éste tendría tantas incógnitas que sólo sería posible resolverlo empleando grandes sistemas de cómputo. Por ello, durante la construcción de los modelos de elementos finitos sólo se usa la información de píxeles separados por una distancia arbitraria que en este trabajo denominamos "*paso*". El paso es la distancia en píxeles (en el plano de la imagen) y en imágenes (en el sentido del apilamiento de éstas) entre los píxeles cuyos datos son leídos. De esta forma, el tamaño del modelo computacional es reducido a costa de disminuir la calidad de la representación geométrica.

La técnica para discretizar la microestructura fue adaptada del trabajo de Buroni et al. (2004), originalmente desarrollada para construir modelos de piezas óseas a partir de imágenes de TC en formato DICOM⁹ (NEMA, 2004). Ésta comienza con la exploración de las imágenes microtomográficas binarizadas donde el analista define el tamaño del paso. A modo de ejemplo en la Figura 4.5 se muestra una imagen de microTC y un detalle con los píxeles empleados para la construcción de la nube de puntos con un paso igual a seis píxeles. El procedimiento se repite en la dirección del apilamiento de las imágenes aprovechando que la separación entre las imágenes es idéntica al tamaño de píxel. De este modo, sólo se exploran las imágenes del estudio que son múltiplos del paso seleccionado.

La información obtenida mediante la exploración de las imágenes con el paso especificado se almacena en archivos de datos en formato ASCII que contienen las coordenadas de cada uno de los puntos y un valor que identifica el color del píxel que, a su vez, está asociado a una de las fases bajo estudio. Todas estas operaciones fueron realizadas mediante un código desarrollado a tales efectos en el entorno MatLab, Apéndice B.

4.3.4. Generación de la malla de elementos finitos

A partir de los archivos con la información de la nube de puntos se construye la red de elementos finitos haciendo que cada uno de tales puntos coincida con el vértice de un elemento. Para ello, se emplearon dos estrategias en función del tipo de elemento empleado para la construcción de los modelos: para los modelos discretizados con elementos tetraédricos se utilizó el código MeshSuite (Calvo, 2005) mientras que para los modelos construidos con elementos hexaédricos se desarrolló un código en el entorno MatLab.

La salida de estos códigos se almacena en archivos de texto ASCII capaces de ser interpretados por un programa que elimina elementos de volumen nulo (sólo para tetraedros), asigna las propiedades mecánicas a los elementos y escribe archivos en

⁹Del inglés Digital Imaging and Communications in Medicine. DICOM es el estándar mundial para el intercambio de imágenes médicas.



Figura 4.5: Imagen de microTC y detalle de una región con píxeles empleados en la construcción de la nube de puntos.

formato .inp que luego pueden ser importados al programa de cálculo Abaqus 6.9 (2009). Estas operaciones también fueron realizadas con códigos específicos desarrollados en el entorno MatLab. Los códigos empleados se listan en el Apéndice C.

El código para la escritura de los archivos en .inp de elementos tetraédricos puede considerarse un traductor de formatos accesorio, si se quiere, al programa desarrollado por Calvo (2005). El código desarrollado para la construcción de modelos de elementos hexaédricos, en cambio, constituye un desarrollo novedoso. Tradicionalmente, programas de mallado, incluso los de remallado adaptivo, aprovechan la característica de los elementos tetraédricos de ser capaces de discretizar, con mayor o menor dificultad, cualquier geometría en tres dimensiones por compleja que ésta sea. La discretización con elementos hexaédricos, en cambio, presenta dificultades significativas que los hacen inadecuados para representar geometrías complejas. Sin embargo, en este trabajo se aprovechó la regularidad y densidad de la nube de puntos para construir un modelo discretizado con elementos hexaédricos sin distorsión.

4.4. Fuentes principales de error, alternativas de mitigación y cuantificación

Por el momento, supongamos una adquisición perfecta y sin errores. En lo que sigue nos concentraremos en analizar las fuentes de error asociadas a las etapas posteriores a la adquisición. En este sentido, existen dos fuentes principales de error que en este trabajo llamaremos *errores de segmentación* y *de discretización*. A continuación se describen los detalles de cada uno, algunas estrategias implementadas para cuantificarlos y, cuando es posible, minimizar sus efectos.

4.4.1. Errores de segmentación

Una de las fuentes de error del método de construcción propuesto reside en los procesos de segmentación y binarización, donde es el usuario quien define el rango de la escala de grises "que parece adecuado" para identificar al tejido óseo en las imágenes de microTC. Puede ocurrir que parte del tejido quede por debajo o arriba del rango definido, en cuyo caso las imágenes resultan con un defecto en la cantidad de tejido. El caso opuesto también es posible, esto es, que el rango de la escala de grises sea suficientemente amplio como para que los defectos de la imagen, otros tejidos o polímero inyectado¹⁰ puedan ser confundidos con hueso por lo tanto, las imágenes resultan con hueso por exceso.

Se han desarrollado una gran variedad de métodos de segmentación por umbrales que en general requieren de la evaluación crítica de los resultados por parte del operador. En los métodos de segmentación global o plana, en los que se asigna idénticos parámetros para la binarización a toda una imagen y a cada una de las que conforman el estudio, no es raro observar la pérdida de conectividad en algunas regiones o el adelgazamiento de las trabéculas en otras (Hara et al., 2002). Algunos autores han utilizado la fracción volumétrica ósea como una medida del error de segmentación (van Rietbergen et al., 1995). Otro método de segmentación es el de umbrales adaptivos, donde no se utilizan parámetros idénticos en cada imagen. De todas formas, este método resulta también subjetivo ya que los resultados dependen del juicio del operador al comparar las imágenes originales en escalas de grises y las binarizadas SkyScan (2010a). Una alternativa distinta constituye el método de compensación de masa (descrito en Homminga et al., 2001), que presenta la ventaja de compensar el valor de la fracción volumétrica de la fase de interés pero, de existir pérdida de conectividad, compensa engrosando las trabéculas restantes alterando la representación de la microestructura. Homminga et al. (2001) propuso un método basado en la escala de grises de las secciones transversales pero, requiere del uso de parámetros sin significado físico que deben ser elegidos por el operador.

Los errores de segmentación se arrastran hacia la etapa cómputo afectando la estimación de las propiedades mecánicas. A efectos de cuantificar estos errores son necesarias comparaciones entre las imágenes de las secciones transversales (o de la reconstrucción en tres dimensiones) con la muestra verdadera, situación que no siempre es posible empleando ensayos no destructivos.

Considerando la discusión precedente, en este trabajo se adoptó el método de segmentación y binarización global. Puesto que se en este trabajo se emplean muestras segmentadas por terceras partes, el estándar de comparación o mejor valor de la fracción volumétrica, corresponde al obtenido a partir de las imágenes binarizadas. De este modo, en este trabajo no se analizan los errores de segmentación que

 $^{^{10}}$ En muchas ocasiones se rellena el espacio intertrabecular con polímero a efectos de facilitar la manipulación y/o ensayo posterior de la muestra, ver 8.

preceden a la etapa de binarización.

Otro de los problemas recurrentes observados en la literatura es la escasa importancia que se le da a la selección del tamaño de píxel o vóxel respecto del tamaño característico de la microestructura al momento de efectuar la adquisición. Se encontraron trabajos en los que el tamaño de píxel fue seleccionado en función de los resultados de otra especie o región anatómica (Perilli y Baruffaldi, 2003; Homminga et al., 2001), en consecuencia los resultados de la segmentación no son satisfactorios y se recurre a alguno de los métodos de compensación o simplemente se omite un tratamiento detallado. Pese a ello, la verdadera magnitud del problema se vuelve evidente al construir los modelos debido al error de discretización inducido, tal como se discute en las secciones siguientes.

4.4.2. Errores de discretización

Debido al método empleado para la generación de los modelos, y en particular al procedimiento empleado para la construcción de la nube de puntos, no todo el contorno de las interfaces es delineado, por cuanto puede existir fase hueso por defecto o exceso en el modelo resultante dependiendo de la fase cuya detección se priorice, Figura 4.6.



Figura 4.6: Esquema 2D mostrando la sobre y subestimación de la fase tejido cuando se prioriza su detección (curva azul) o la de la fase hueco (rojo).

Figura 4.7: Esquema representando la variación de fracción volumétrica ósea (del tejido trabecular) en función de la cantidad de nodos.

El error de discretización geométrico puede analizarse cuantitativamente observando la fracción volumétrica (FV) obtenida en varios modelos de una misma microestructura considerando distinto tamaño de paso. Esta información puede presentarse mediante gráficos de la fracción volumétrica en función de la cantidad de nodos del modelo. Una gráfica de este tipo debería converger a un valor denominado fracción volumétrica ósea de referencia (FVR), ver Figura 4.7. Este valor corresponde al cociente entre el número de píxeles de la fase hueso y el número total de píxeles totales de cada una de las imágenes empleadas para la construcción de un modelo. Resulta evidente que la FVR está afectada por los errores provenientes de la etapa de adquisición y segmentación-binarización, no obstante es el valor más preciso que puede calcularse a partir de la información brindada por las imágenes de microTC.

Se define como error de discretización geométrico (ED) a la diferencia porcentual entre la fracción volumétrica de un modelo dado y el valor de referencia (FVR). Resulta evidente que el ED disminuye conforme aumenta del número de píxeles leídos, es decir, con la disminución del paso. Sin embargo, el ED varía muy poco con el tamaño de paso cuando éste es pequeño, aún cuando la relación entre el tamaño de *píxel/espesor trabecular* es elevada, haciéndolo inadecuado como una medida de la calidad de la representación microestructural.

Puesto que el error de discretización es arrastrado a la fase de cómputo es necesario minimizar su influencia. Con este objeto, se implementó un algoritmo que minimiza el error en la FV de una de las fases elegidas por el usuario.

Dicho algoritmo se incorporó al código que asigna las propiedades mecánicas de las fases a los elementos, Apéndice C. El criterio empleado para modelos discretizados con tetraedros consistió en asignar las propiedades de una determinada fase a un elemento si y sólo si al menos tres de los cuatro nodos (vértices) de un elemento corresponden a la fase seleccionada. El procedimiento es ligeramente diferente cuando se emplean elementos hexaédricos. En este caso el algoritmo identifica cuál es la fase dominante dentro del dominio del elemento utilizando como patrón de comparación un cubo formado por seis tetraedros, Figura 4.8. Las propiedades de una determinada fase se asignan si y sólo si al menos cinco de los seis tetraedros corresponden a la fase seleccionada. De este modo, el algoritmo de asignación de propiedades opera privilegiando la detección de una u otra fase y por lo tanto, minimizando el error en la fracción volumétrica de la fase elegida.



Figura 4.8: Hexaedro patrón y los tetraedros que lo componen.

Con el objeto de evaluar el algoritmo, este procedimiento fue aplicado a la reconstrucción de modelos tridimensionales en forma de lajas, es decir, la reconstrucción de un modelo de la geometría trabecular considerando dos imágenes separadas entre por un número de imágenes idéntico al paso empleado para la exploración de las imágenes. Para una muestra cuya fracción volumétrica de referencia (FVR) es igual a 0,555 se obtuvieron modelos con fracciones volumétricas óseas (FV) iguales a 0,35 y 0,65 priorizando la detección de la fase hueco y tejido respectivamente, mientras que con el algoritmo implementado la FV del modelo reconstruido fue 0,55. Estos resultados se ilustran en la Figura 4.9.



Fase detectada: hueco Frac. Vol.=0.35

Fase detectada: hueso Frac. Vol. =0.65

Fase detectada: hueco Frac. Vol. =0.55

Figura 4.9: Comparación de la fracción volumétrica ósea de modelos reconstruidos: (a) favoreciendo la detección de la fase hueco; (b) favoreciendo la detección del fase hueso, (c) Favoreciendo la detección de la fase hueso con el algoritmo que minimiza el error en la fracción volumétrica.

Puesto que es posible favorecer la detección de una u otra fase durante la asignación de propiedades a los elementos, se propone emplear a la diferencia porcentual entre las fracciones volumétricas de tejido óseo (hueso) hallada en esos modelos como medida de la calidad de la representación microestructural. Este nuevo indicador, denominado de ahora en más *índice geométrico* (IG), cuya expresión es

$$IG = \frac{FV_{priorizando\ hueso}}{FV_{priorizando\ hueco}},$$
(4.1)

puede usarse como medida de la calidad de la representación geométrica de la microestructura trabecular.

El IG se basa en el hecho que, por defecto, los modelos construidos favoreciendo la detección de una u otra fase difieren en la cantidad de elementos asociados a las fases pero, poseen idéntico número total de nodos y elementos. Por lo tanto para un paso igual a un píxel, el número de elementos correspondiente a la fase tejido o hueso debe ser idéntico cualquiera sea la fase cuya detección se priorice.

4.5. Casos de estudio

En esta sección se aplican los métodos desarrollados para reconstruir modelos de elementos finitos a dos muestras de hueso trabecular de distinta especie. Se construyen modelos discretizados con elementos tetraédricos y hexaédricos y, se analiza la calidad de su representación geométrica cuantitativamente. Los resultados se comparan y analizan críticamente con el objeto de seleccionar la familia de elementos que permite obtener el menor error en la representación geométrica de las muestras óseas. Los resultados se analizan en términos de la diferencia entre la fracción volumétrica de tejido o fase hueso y un valor de referencia (ED) como también usando el índice geométrico propuesto (IG).

4.5.1. Métodos

Se empleó la información de dos estudios de microTC provenientes de muestras que denominaremos Muestra#1 y Muestra#2. La primera corresponde a una porción de una cabeza femoral de un adulto de 61 años (Perilli y Baruffaldi, 2003), y la segunda a una cabeza femoral vacuna (Silva et al., 2009). Estos estudios, cuyas imágenes originales se encontraban ya segmentadas y en formato .jpg y .bmp respectivamente, fueron seleccionados por su notable diferencia en términos de la fracción volumétrica de tejido óseo (baja y alta para las Muestras #1 y #2 respectivamente) y, por su diferente relación *píxel/espesor trabecular* (alta en la Muestra #1 y baja en la #2).

Para la construcción de los modelos se emplearon 150 imágenes del primer estudio y 750 imágenes del segundo con un tamaño de píxel de 19.5 μ m y 6.62 μ m respectivamente. Los equipos empleados fueron dos microtomógrafos SkyScan 1072 (SkyScan Inc. Bélgica). En la Figura 4.10 se aprecian las imágenes originales de cada estudio: en la imagen de la Muestra#1 se observa al tejido trabecular en gris oscuro, mientras que en la correspondiente a la Muestra# 2 el tejido se aprecia en un tono gris claro.

Nótese que en su estado original las imágenes de la Muestra#1 poseían ruido en forma de puntos oscuros en la zona de la médula debido al bajo valor del umbral seleccionado durante el proceso de segmentación. Para eliminarlos se modificó el contraste y brillo de todas las imágenes que conforman el estudio mediante el programa PicasaTM (Google, 2010).

Las imágenes fueron convertidas a blanco y negro empleando un proceso de binarización global. Las imágenes resultantes se muestran en la Figura 4.11. A efectos de minimizar los errores de segmentación se seleccionaron imágenes binarizadas al azar de ambos estudios que fueron inspeccionadas visualmente y comparadas con las imágenes originales. No se observaron diferencias significativas.

Con el objeto de incluir solamente hueso trabecular y eliminar cualquier efecto de borde, las muestras fueron recortadas digitalmente. Se construyeron modelos utilizando tanto elementos tetraédricos como hexaédricos.

Las dimensiones de los modelos resultantes de las Muestras#1 fueron 4.91×4.91



Figura 4.10: Detalle de dos imágenes segmentadas empleadas en las reconstrucciones: (a) Muestra#1, (b) Muestra#2.



Figura 4.11: Detalle de dos imágenes binarizadas empleadas en las reconstrucciones: (a) Muestra#1, (b) Muestra#2.

 $\times 2.81$ mm. En la Figura 4.12 se muestra la geometría discretizada de dos modelos construidos empleando elementos tetraédricos con pasos iguales a 6 y 3, mientras que en la Figura 4.13 se muestran dos modelos construidos empleando elementos hexaédricos e idéntico paso.



Figura 4.12: Modelos de la Muestra#1 (tetraedros): (a) paso=6, (b) paso=3.



Figura 4.13: Modelos de la Muestra#1 (hexaedros): (a) paso=6, (b) paso=3.

Las dimensiones de los modelos de la Muestra# 2 fueron $4.96 \times 4.96 \times 4.96$ mm. Detalles de la geometría discretizada de los modelos construidos con el mayor y el menor paso se muestran en la Figura 4.14.



Figura 4.14: Modelos de la Muestra#2 (hexaedros): (a) paso=9, (b) paso=15.

4.5.2. Resultados

Resultados Muestra #1

Se construyeron modelos de elementos finitos tetraédricos y hexaédricos utilizando pasos iguales a 6,5,4 y 3 píxeles, priorizando la detección de la fase hueso y la fase vacío. Para cada modelo se reportan: el número de nodos, coincidente con el número de píxeles leídos y empleados en la reconstrucción; el número de elementos de la fase hueso y el número total de elementos. Con estos datos se determinó: la fracción de volumen óseo (FV) computada como el cociente entre el número de elementos que corresponden a la fase hueso y el número total de elementos del modelo; el error de discretización (ED), calculado como la diferencia porcentual entre la FV y el valor de referencia FVR, que fue igual a 0,1774; y el indicador para la estimación de la calidad de la representación geométrica del modelo (IG). En la Tabla 4.1 se reportan los valores asociados a las redes de elementos finitos correspondientes

En la Figura 4.15 se grafica la fracción volumétrica ósea FV en función del número de nodos para los modelos construidos. Las curvas en líneas de trazos largos y cortos corresponden a la FV de los modelos construidos con tetraedros mientras que las líneas llenas representan los valores homólogos para los modelos construidos con hexaedros. A efectos de comparación, se muestra el valor de referencia FVR. Se aprecia que el error en la discretización, ED, en los modelos construidos con hexaedros es menor que en aquellos construidos con tetraedros.

Resultados Muestra #2

En función de los resultados hallados para la Muestra#1, los modelos de la Muestra #2 fueron construidos empleando elementos hexaédricos únicamente. La fracción volumétrica de tejido óseo de referencia (FVR) fue 0,5057. Los datos de las redes de elementos finitos de los modelos construidos se reportan en la Tabla 4.2, y en la Figura 4.16 se grafica la fracción volumétrica ósea FV en función del número de nodos y el valor de referencia.

Paso	Tipo Elem. y	Nro.	Nro. Elem.	Nro. Total	\mathbf{FV}	\mathbf{ED}	IG
	Fase	Nodos	Hueso	Elementos		[%]	[%]
6	Tetraedro/Vacío	46225	27509	248342	0,1108	-60,23	
	Tetraedro/Hueso	46225	53301	248342	$0,\!2146$	$17,\!31$	$48,\!39$
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Vacío}$	46225	6593	42336	$0,\!1557$	$-13,\!96$	
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Hueso}$	46225	7767	42336	$0,\!1835$	3,26	$15,\!12$
5	${\rm Tetraedro}/{\rm Vac}$ ío	81120	55092	42263	$0,\!1835$	3,26	
	Tetraedro/Hueso	81120	93812	42263	$0,\!2121$	$16,\!33$	$41,\!27$
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Vacío}$	81120	12305	75429	$0,\!1631$	-8,79	
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Hueso}$	81120	13757	75429	$0,\!1824$	$2,\!69$	$10,\!56$
4	${\rm Tetraedro}/{\rm Vac}$ ío	155648	118031	860959	$0,\!1371$	-29,46	
	Tetraedro/Hueso	155648	178809	860959	$0,\!2077$	$14,\!56$	$33,\!99$
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Vacío}$	155648	24692	146853	$0,\!1681$	$-5,\!55$	
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Hueso}$	155648	26687	146853	$0,\!1817$	$2,\!34$	$7,\!48$
3	Tetraedro/Hueso	369800	307805	2075862	$0,\!1483$	$-19,\!69$	
	${\rm Tetraedro}/{\rm Vac}$ ío	369800	418764	2075862	$0,\!2017$	$12,\!02$	$26,\!50$
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Vacío}$	369800	60632	354025	$0,\!1713$	$-3,\!626$	
	Hexaedro/Hueso	369800	63992	354025	$0,\!1875$	$1,\!82$	5,25

Tabla 4.1: Resumen de los datos de los Modelos para la Muestra
#1



Figura 4.15: Fracción volumétrica del tejido en función del número de nodos.

Paso	Tipo Elem. y	Nro.	Nro. Elem.	Nro. Total	\mathbf{FV}	\mathbf{ED}	IG
	Fase	\mathbf{Nodos}	Hueso	$\mathbf{Elementos}$		[%]	[%]
18	${\rm Hexaedro}/{ m Vac}$ ío	74088	32969	68921	$0,\!4784$	-5,73	
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Hueso}$	74088	37781	68921	$0,\!5482$	7,74	12,74
15	${ m Hexaedro}/{ m Vac}$ ío	132651	60228	125000	$0,\!4818$	-4,96	
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Hueso}$	132651	67509	125000	$0,\!5401$	6,36	10,79
11	${ m Hexaedro}/{ m Vac}$ ío	328509	153347	314432	$0,\!4877$	-3,70	
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Hueso}$	166920	314432	314432	$0,\!5309$	4,73	8,13
9	${ m Hexaedro}/{ m Vac}$ ío	592074	280570	571787	$0,\!4907$	-3,07	
	$\operatorname{Hexaedro}/\operatorname{Hueso}$	592704	300585	571787	$0,\!5257$	3,74	$6,\!66$

Tabla 4.2: Resuman de los datos de los Modelos para la Muestra
#2



Figura 4.16: Fracción volumétrica del tejido en función del número de nodos.

4.5.3. Discusión

De la comparación de las fracciones volumétricas de referencia (FVR) con las obtenidas en los modelos reconstruidos de ambas muestras se concluye que, el error de discretización geométrico (ED) es por defecto en la cantidad de hueso, o fase tejido, cuando en el algoritmo de asignación de propiedades se prioriza la detección del espacio intertrabecular o fase vacío, mientras que el error es por exceso cuando se prioriza la detección de la fase tejido. Independientemente de la fase cuya detección se priorice, la FV en función del número de nodos converge al valor de referencia.

Los resultados permiten inferir que, con los parámetros empleados en la reconstrucción de los modelos de la Muestra#1, el error de discretización geométrico (ED) es menor cuando se favorece la detección de la fase tejido. En la Muestra#2, en cambio, el error es menor cuando se favorece la detección de la fase hueco.

En los modelos de la Muestra#1 el ED supera el 12 % cuando se emplean elementos tetraédricos mientras que se mantiene por debajo del 14 % cuando se usan elementos hexaédricos. Estos resultados justifican el empleo de elementos hexaédricos en los modelos de la Muestra#2, donde el ED resultó inferior al 8 %. Sin embargo, como se observa en las Figs. 4.12, 4.13 y 4.14, la calidad de la representación geométrica difiere notablemente entre los modelos construidos usando el mayor y el menor paso en ambas muestras, aún cuando el cambio en el ED es pequeño. Esta característica es notablemente más acentuada en los modelos de la Muestra#1.

Un modelo poco detallado puede introducir tanto errores debido a una inadecuada representación geométrica, como también acrecentar aquellos inherentes al método de los elementos finitos en los cómputos posteriores. Sin embargo, identificar si un modelo es representativo de la microestructura que se desea analizar es una tarea difícil. Este problema fue abordado mediante tres métodos: analizando la evolución del error en la fracción volumétrica, ED; mediante la inspección visual de los modelos reconstruidos y; analizando la evolución de la diferencia porcentual entre el número de elementos de la fase hueso que resultan de priorizar la detección de una u otra fase durante la asignación de propiedades usando el indicador IG.

El error en la discretización considerando únicamente la FV es un pobre indicador de la calidad de la representación geométrica de la microestructura. A modo de ejemplo ver la Fig. 4.13, donde se muestran dos modelos de la Muestra# 1 construidos con tamaños de paso diferentes. Se observa que la calidad de la representación geométrica usando pasos pequeños es superior, aún cuando los errores en la FV para ambas muestras son bajos (3,263 y 1,815 % para pasos iguales a 3 y 6 respectivamente).

Es evidente que un análisis riguroso no debe emplear parámetros cualitativos como la comparación visual de los modelos reconstruidos. Una alternativa, consiste en analizar la evolución del IG y emplearlo como un indicador cuantitativo para evaluar la calidad de la representación geométrica.

Considerando este último método se determinó que en los modelos de la Muestra# 1 discretizados con tetraedros empleando un paso igual a 6 el IG supera el 48 %. Empleando hexaedros la diferencia es menor pero aún supera el 15 %. En virtud de

lo anterior y lo indicado respecto de la calidad de la representación geométrica evaluada únicamente con la FV, se concluye que la representación geométrica de este modelo resulta pobre.

En los demás modelos de la Muestra#1 se observa que el valor de IG hallado para modelos construidos empleando tetraedros es hasta 5 veces el valor obtenido para su homólogo construido con hexaedros. De hecho, la diferencia crece conforme el paso se reduce. Se aprecia una pérdida de la conectividad de las trabéculas incluso entre los modelos con paso igual a 3 y 4, Fig. 4.17. El "engrosamiento" de las trabéculas en el modelo con el mayor paso también es evidente. Estos resultados se complementan con los obtenidos a partir del análisis del error en la FV. En los modelos de la Muestra#2, se obtuvieron valores de IG inferiores al 13 %, prácticamente del orden del mayor valor de IG confiable para la Muestra#1.



Figura 4.17: Pérdida de conectividad en las trabéculas de los modelos con elementos hexaédricos de la Muestra#1: paso igual a 4 izquierda y paso igual a 3, derecha.

En general los valores de IG fueron bajos para todos los modelos de la Muestra# 2. La inspección de los modelos muestra que las diferencias geométricas son prácticamente despreciables entre aquellos construidos usando pasos iguales a 9 y 11 píxeles. El modelo con paso igual a 15 no presenta pérdida de conectividad respecto de los modelos más detallados, sin embargo es evidente el "engrosamiento" de las trabéculas, Figura 4.14.

Del análisis de los resultados hallados para ambas muestras se concluye la importancia de utilizar un tamaño de píxel pequeño respecto del espesor trabecular durante la adquisición. En este sentido, pese a la sensibilidad del IG, nada reemplaza a un adecuado diseño del experimento y la adecuada selección de las variables de interés.

Pese a que intuitivamente se espera que un modelo construido con tetraedros represente la microestructura con mayor detalle que uno construido con hexaedros, la evaluación de la calidad de la representación mediante los métodos descritos precedentemente permite inferir que los modelos construidos con hexaedros representan adecuadamente la geometría y minimizan el error en la fracción volumétrica. Además, desde un punto de vista estrictamente numérico, los modelos construidos con hexaedros poseen dos ventajas sobre los construidos con tetraedros: proveen de una solución de precisión equivalente a un costo computacional menor y, con una tasa de convergencia superior (Simulia, 2010).

4.6. Discusión y conclusiones

Para la construcción de los modelos tridimensionales de elementos finitos se emplean imágenes en escalas de grises obtenidas mediante microtomografía computarizada. Por su importancia se describió el funcionamiento de los equipos de microtomografía y el procedimiento de adquisición.

Pese a que la mayoría los errores existentes durante la etapa de adquisición está bien documentado, y existen tanto procedimientos como software adecuado para su corrección, nada reemplaza un adecuado diseño del experimento.

Se desarrolló e implementó un procedimiento para la construcción de los modelos de elementos finitos a partir de imágenes microtomográficas. Se determinó que los llamados errores de segmentación y de discretización constituyen las fuentes principales de error en cuanto a la representación de la microestructura y se desarrollaron e implementaron estrategias para mitigar y cuantificar tales errores, en particular, el error de discretización. Con este objeto, la fracción volumétrica ósea de modelos de la geometría del hueso trabecular, reconstruidos empleando varios tamaño de paso, fue comparada con un valor de referencia computado a partir de la exploración exhaustiva de todas las imágenes binarizadas que conforman los estudios microtomográficos.

El error de discretización fue reducido significativamente favoreciendo la detección de la fase tejido óseo durante la asignación de propiedades a los elementos. Sin embargo, no se puede predecir a priori cuán cerca del valor de referencia estará la FV del modelo reconstruido. A partir del análisis de dos casos de estudio se determinó que el ED del modelo reconstruido es menor cuando la FV la muestra es alta.

En virtud de los resultados reportados se concluyó que, con el método de construcción empleado, no se puede predecir cuál es la fase que debe priorizarse durante la asignación de propiedades a efectos de disminuir el ED. Sin embargo, se obtuvo un ED bajo cuando la fracción volumétrica de la muestra es baja y se prioriza la detección de la fase hueso. Por este motivo, en lo que sigue, se emplearán modelos construidos mediante este procedimiento a efectos de hallar las propiedades de muestras de hueso trabecular.

Por otro lado, se determinó que la fracción volumétrica es un pobre indicador de la representación microestructural, ya que es poco sensible a los cambios en el tamaño de paso. Se propuso el empleo de un nuevo índice IG como un indicador de la calidad de la representación geométrica del modelo. Este se define como la

 $\mathbf{59}$

diferencia porcentual entre los números de elementos de la fase hueso que resultan de priorizar la detección de hueso y vacío durante el proceso de discretización. Para las muestras evaluadas, se determinó que un valor de IG del 10 % garantiza una adecuada representación geométrica de los modelos. A efectos de generalizar el uso de este parámetro se propone, para trabajos futuros, aplicar la técnica a muestras de otras regiones anatómicas para verificar este resultado.
CAPÍTULO 5 Implementación del método de homogenización directo

En este capítulo se presenta formalmente el método de homogenización directo basado en elementos de volumen representativo (RVE). Se introduce una notación adecuada para el estudio de materiales heterogéneos con múltiples escalas, se describen los procedimientos para el cómputo de los tensores de localización y para la determinación de los tensores de elasticidad o de compliancia utilizando el método de los elementos finitos.

5.1. Introducción

El análisis de la respuesta mecánica del hueso considerando cada una de sus características microestructurales es un problema numéricamente intratable debido a la escala de la microestructura respecto de las dimensiones del problema macroscópico (Zohdi y Wriggers, 2005). Uno de los métodos para superar esta dificultad consiste en hallar un modelo de material homogéneo equivalente que caracterice el comportamiento del hueso a escala macroscópica analizando Elementos de Volumen Representativo (RVE). En el análisis multiescala mediante RVE la respuesta mecánica de cada nivel estructural se analiza separadamente. Es decir, si se tuviera información suficiente acerca de las fases en la escala del tejido se debería emplear un RVE para "homogenizar" esta escala; luego, las propiedades homogenizadas del tejido serían utilizadas en un RVE "más grande" que considere una escala mayor, en este caso, las fases hueco y tejido, para obtener las propiedades homogenizadas del hueso trabecular, ver Fig. 2.1.

Antes de continuar resulta conveniente hacer una aclaración respecto de las escalas. Para el estudio de la jerarquía del hueso trabecular se definieron escalas que fueron asociadas con las dimensiones o escala métrica de los componentes que las constituyen. Para el análisis multiescala de materiales mediante elementos de volumen representativo (RVE) la escala métrica es irrelevante, es decir, mientras sea posible seleccionar un RVE que permita computar las propiedades del material homogéneo equivalente, y en la escala "más macroscópica" inmediata siguiente pueda hacerse lo mismo, el procedimiento puede continuar. De este modo, las convenciones basadas en la escala métrica, como la presentada en el Cap. 2, resultan inadecuadas o al menos incómodas para el estudio multiescala de materiales, por cuanto, de ahora en adelante, se empleará la notación de supraíndices donde el cero representa al nivel más macroscópico y los enteros positivos a las escalas métricas menores en orden decreciente.

Puesto que en este estudio nos limitamos al estudio del hueso trabecular (o compuesto tejido trabecular-espacio intertrabecular) y a una muestra de hueso trabecular, esto es la macroestructura y una muestra de la macroestructura según fue presentado en en el Cap. 2, sólo se emplearán los índices 1 y 0. Implícitamente, de este modo estamos re-bautizando las escalas para hacerlas coincidir con la nomenclatura, abstracta y no métrica del Cap. 3, donde se emplean tres escalas: la macroscópica, en este caso comparable con el tamaño de una pieza ósea; la mesoscópica, del tamaño del RVE; y la microscópica, cuya dimensión característica es el espesor trabecular. De este modo las expresiones (3.31) y (3.32) toman la forma

$$\langle \boldsymbol{\sigma}^1 \rangle = \mathbf{C}^0 \langle \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle \qquad y \qquad \langle \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle = \mathbf{S}^0 \langle \boldsymbol{\sigma}^1 \rangle.$$
 (5.1)

Las expresiones (3.33) y (3.34) permiten computar los tensores de elasticidad **C** y de compliancia **S** en función de los tensores de localización de deformación **M** y de tensión **N**. Estos últimos relacionan los campos de deformación y tensión entre las escalas según las ecs. (3.30). Las últimas expresiones, considerando la notación de escalas, toman la forma

$$\boldsymbol{\varepsilon}^1 = \mathbf{M}^1 \boldsymbol{\varepsilon}^0 \qquad y \qquad \boldsymbol{\sigma}^1 = \mathbf{N}^1 \boldsymbol{\sigma}^0.$$
 (5.2)

Resumiendo, el comportamiento macroscópico está definido por alguna de las expresiones (5.1) y puede ser caracterizado por el tensor de elasticidad \mathbf{C}^{0} , ec. (3.33) o de compliancia \mathbf{S}^{0} , ec. (3.34). De estas dos últimas expresiones resulta evidente que para estimar alguno de los tensores, \mathbf{C}^{0} o \mathbf{S}^{0} , es necesario conocer al menos uno de los tensores de localización. Con el objeto de computar los tensores de localización en cada uno de los subdominios que conforman el RVE se puede emplear la relación existente entre los campos de deformación o tensión de las escalas 1 y 0 dadas por la ec. (5.2). Esto implica conocer de antemano los valores de las deformaciones o tensiones en ambas escalas mediante algún método apropiado. Para ello es necesario resolver el *problema elastostático* asociado.

Como se dijo anteriormente, el tensor de elasticidad o el de compliancia de una muestra de hueso trabecular se estima a partir del material homogéneo solicitado por condiciones de carga específicas. En particular, se considera a un sólido sometido a un estado de deformación media $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ o de tensión media $\langle \sigma_{ij} \rangle$. El problema requiere hallar el campo de desplazamientos u_i , de deformaciones ε_{ij} y de tensiones σ_{ij} en la escala 1 que satisfacen las ecuaciones de equilibrio (3.12) en ausencia de fuerzas de volumen¹ ($\mathbf{b} = 0$) y las relaciones de promedios (3.28) y (3.29), es decir (Luciano y Sacco, 1998; Suquet, 1987)

$$\sigma_{ij,j}^1(\mathbf{x}) = 0,$$

¹En rigor, al formular los problemas de valor de contorno sobre un RVE, no es necesario incluir las fuerzas de volumen, ver Nemat-Nasser y Hori (1999).

$$\varepsilon_{ij}^{1}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left[u_{i,j}^{1}(\mathbf{x}) + u_{j,i}^{1}(\mathbf{x}) \right], \qquad (5.3)$$
$$\sigma_{ij}^{1}(\mathbf{x}) = C_{ijkl}^{1}(\mathbf{x}) \varepsilon_{kl}^{1}(\mathbf{x}), \qquad (5.3)$$
$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{V_{RVE}} \varepsilon_{ij}(x) dV_{RVE} = \boldsymbol{\varepsilon}^{0}.$$
$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{V_{RVE}} \sigma_{ij}(x) dV_{RVE} = \boldsymbol{\sigma}^{0}.$$

Una forma alternativa de la relación constitutiva en las expresiones (5.3) puede darse en términos del tensor de compliancia, ec. (3.19),

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = S_{ijkl}(\mathbf{x}) \ \sigma_{kl}(\mathbf{x})$$

Para resolver el problema elastostático anterior, ec. (5.3), en este trabajo se emplea el método de los elementos finitos. De este modo, una vez resuelto un problema en el cual se somete al RVE a alguna dada condición de contorno, los campos en la escala 1 quedan inmediatamente definidos y pueden computarse en el centroide de los elementos. Luego, los campos equivalentes en la escala 0 se obtienen como promedio en el volumen del RVE de los anteriores usando las versiones discretas de las ecs. (3.28) y (3.29), es decir

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{0} = \frac{1}{|V_{RVE}|} \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{ij} V_{i}.$$
(5.4)

у

$$\boldsymbol{\sigma}^{0} = \frac{1}{|V_{RVE}|} \sum_{i=1}^{N} \sigma_{ij} V_{i}.$$
(5.5)

donde N representa el total de elementos en el modelo de la muestra representativa, RVE, y V_i el volumen de los elementos. Posteriormente, conociendo los campos de deformación o tensión en ambas escalas es posible efectuar el cómputo de los tensores de localización y de los tensores de elasticidad o compliancia.

En las secciones siguientes, se presentan los procedimientos desarrollados e implementados para computar los tensores de localización y de elasticidad o compliancia.

5.2. Condiciones de contorno

El tensor \mathbf{M}^1 se representa mediante una matriz de 6×6 . En problemas en dos dimensiones se puede usar una matriz de 3×3 . Para computarlo se requiere la solución de seis o tres problemas de valor de contorno linealmente independientes (en 3D y 2D respectivamente), también llamados casos de carga. En esta sección se describen y discuten las condiciones de contorno del RVE de para cada caso de carga. Puesto que las condiciones de contorno *in-situ* de las muestras tomadas como RVE son desconocidas, el método sólo puede proveer de una estimación de las propiedades efectivas y las deformaciones locales. La exactitud de estas estimaciones depende significativamente de las condiciones de contorno supuestas. En el método directo se aplican desplazamientos lineales (ec. 3.24) o tracciones uniformes (ec. 3.25). A efectos prácticos las expresiones correspondientes a ambas condiciones se transcriben a continuación

$$\mathbf{u} = \boldsymbol{\varepsilon}^0 \ \mathbf{x},\tag{5.6}$$

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma}^0 \ \mathbf{n}. \tag{5.7}$$

De esta forma el RVE puede someterse a una deformación ε^0 o a una tensión σ^0 de valor conocido² (Nemat-Nasser y Hori, 1999). El primero de los casos se puede escribir en formato matricial como

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^0 & \varepsilon_{12}^0 & \varepsilon_{13}^0 \\ \varepsilon_{12}^0 & \varepsilon_{22}^0 & \varepsilon_{23}^0 \\ \varepsilon_{13}^0 & \varepsilon_{23}^0 & \varepsilon_{33}^0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix},$$
(5.8)

y el segundo como

$$\begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix},$$
(5.9)

donde $u_i \ge t_i$ representan los desplazamientos y tensiones impuestos al contorno para obtener los estados de deformación o tensión indicados precedentemente, x_i son las coordenadas de los puntos (nodos) del contorno del RVE y n_i las normales a las caras. En la subsección siguiente se emplean las ecuaciones anteriores para presentar los casos de carga empleados para el cómputo de los tensores de localización.

5.2.1. Modelos 3D

Desplazamientos en el contorno

Los desplazamientos en el contorno del RVE están dados por la ec. (5.8). Por lo tanto, las deformaciones impuestas al elemento de volumen representativo son:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{0^{11}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{11}, \boldsymbol{\varepsilon}^{0^{22}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22}^{0} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{22}, \boldsymbol{\varepsilon}^{0^{33}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{0} \end{bmatrix}^{33}, \quad (5.10)$$
$$\boldsymbol{\varepsilon}^{0^{12}} = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{12}^{0} & 0 \\ \varepsilon_{12}^{0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{12}, \boldsymbol{\varepsilon}^{0^{13}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \varepsilon_{13}^{0} \\ 0 & 0 & 0 \\ \varepsilon_{13}^{0} & 0 & 0 \end{bmatrix}^{13}, \boldsymbol{\varepsilon}^{0^{23}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{23}^{0} \\ 0 & \varepsilon_{23}^{0} & 0 \end{bmatrix}^{23},$$

²Los valores son arbitrarios pues las fases se comportan de forma lineal y elástica, ver Sec. 2.4.

donde los pares de supraíndices representan cada uno de los seis pq casos de carga y, ε_{ij}^0 representa la deformación impuesta al RVE en el caso de carga correspondiente. Entonces, cuando se emplean desplazamientos como condiciones de contorno, ec. (5.6), las condiciones a ser impuestas a las caras del RVE son:

para el caso de carga 11

	$u_1 = \varepsilon_{11}^0 \ x_1$
	$u_2 = 0$
	$u_3 = 0$
para el caso de carga 22	
	$u_1 = 0$
	$u_2 = \varepsilon_{22}^0 \ x_2$
	$u_3 = 0$
para el caso de carga 33	
	$u_1 = 0$
	$u_2 = 0$
	$u_3 = \varepsilon_{33}^0 \ x_3$
para el caso de carga 12	
	$u_1 = \varepsilon_{12}^0 \ x_2$
	$u_2 = \varepsilon_{12}^0 \ x_1$
	$u_3 = 0$
para el caso de carga 13	
	$u_1 = \varepsilon_{13}^0 \ x_3$
	$u_2 = 0$
	$u_3 = \varepsilon_{13}^0 \ x_1$
y para el caso 23	
	$u_1 = 0$
	$u_2 = \varepsilon_{23}^0 \ x_3$
	$u_3 = \varepsilon_{23}^0 \ x_2.$

Nótese que estas condiciones de contorno deben aplicarse a todas y cada una de las caras que forman el RVE. Dicho de otro modo, las tres componentes de desplazamiento indicadas para los distintos casos de carga deben ser impuestas a cada nodo ubicado en la superficie del RVE. Las restricciones indicadas precedentemente se ilustran en la Figura 5.2 para cada caso de carga los cuales fueron identificados con la componente activa del tensor de deformaciones impuesto ε_{ij}^0 .



Figura 5.1: Seis casos de carga empleados para el cómputo del tensor de localización de deformaciones \mathbf{M} en modelos 3D. Las flechas en las caras indican las componentes de los desplazamientos no nulos impuestos a los nodos de la superficie del RVE.

Tracciones en el contorno

Cuando se imponen tracciones, ec. (5.9), los estados de tensiones impuestos al elemento de volumen representativo para cada uno de los casos de carga son:

$$\boldsymbol{\sigma}^{0^{11}} = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^{0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{11}, \boldsymbol{\sigma}^{0^{22}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22}^{0} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{22}, \boldsymbol{\sigma}^{0^{33}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33}^{0} \end{bmatrix}^{33}, \quad (5.11)$$
$$\boldsymbol{\sigma}^{0^{12}} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{12}^{0} & 0 \\ \sigma_{12}^{0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{12}, \boldsymbol{\sigma}^{0^{13}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \sigma_{13}^{0} \\ 0 & 0 & 0 \\ \sigma_{13}^{0} & 0 & 0 \end{bmatrix}^{13}, \boldsymbol{\sigma}^{0^{23}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{23}^{0} \\ 0 & \sigma_{23}^{0} & 0 \end{bmatrix}^{23}.$$

Considerando la relación entre el tensor de tensiones y el vector tracción, ver ec. (3.7) y ec. (5.7), las condiciones sobre el contorno del RVE son

para el caso de carga 11

$$t_1 = \sigma_{11}^0 \ n_1$$
$$t_2 = 0$$
$$t_3 = 0$$

para el caso de carga 22 $\,$

$$t_1 = 0$$

$$t_2 = \sigma_{22}^0 n_2$$

$$t_3 = 0$$

para el caso de carga 33

$$t_1 = 0$$

 $t_2 = 0$
 $t_3 = \sigma_{33}^0 n_3$

para el caso de carga 12

$$t_1 = \sigma_{12}^0 \ n_2$$

 $t_2 = \sigma_{12}^0 \ n_1$
 $t_3 = 0$

para el caso de carga 13

$$t_1 = \sigma_{13}^0 \ n_3$$

 $t_2 = 0$
 $t_3 = \sigma_{13}^0 \ n_1$

y para el caso 23

$$t_1 = 0$$

$$t_2 = \sigma_{23}^0 n_3$$

$$t_3 = \sigma_{23}^0 n_2.$$

La aplicación de las condiciones de contorno precedentes en códigos de elementos finitos estándar, formuladas en desplazamientos, puede provocar que el RVE se desplace indeseablemente como cuerpo rígido. Usualmente se recurre a impedir el desplazamiento de algunos nodos en direcciones particulares o a estabilizar el modelo, en este último caso es necesario verificar que la energía empleada para estabilizar el modelo sea de un valor muy bajo respecto al trabajo y energía elástica almacenada en el modelo.

5.2.2. Modelos 2D

Los modelos en dos dimensiones o 2D pueden computarse usando elementos de deformación y tensión plana. Cuando se consideran desplazamientos lineales en el contorno deben emplearse condiciones en desplazamiento también en la dirección perpendicular a la muestra 2D (RVE), es decir estados de deformación plana. Mientras que cuando se emplean tracciones en el contorno debe usarse la condición en tracciones, es decir estado de tensión plana.

Desplazamientos en el contorno: Estado de deformación plana

Cuando el estado de deformación es plano, el tensor de deformaciones impuesto toma la forma

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{0} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{0} & \varepsilon_{12}^{0} & 0\\ \varepsilon_{12}^{0} & \varepsilon_{22}^{0} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$
 (5.12)

Los desplazamientos en el plano de los puntos ubicados en el contorno del RVE (ec. 5.8) están dados por

$$u_1 = \varepsilon_{11}^0 \ x_1 + \varepsilon_{12}^0 \ x_2, \tag{5.13}$$

$$u_2 = \varepsilon_{12}^0 \ x_1 + \varepsilon_{22}^0 \ x_2, \tag{5.14}$$

y los tres casos de carga son:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{0^{11}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{0} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{11}, \boldsymbol{\varepsilon}^{0^{22}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_{22}^{0} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{22}, \boldsymbol{\varepsilon}^{0^{12}} = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{12}^{0} & 0\\ \overline{\varepsilon}_{12} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{12}. \quad (5.15)$$

Por lo tanto, cuando se emplean desplazamientos como condiciones de contorno (ec. 3.24 o ecs. 5.13 y 5.14), los desplazamientos que se deben imponer a los lados del RVE son:

para el caso de carga 11

$$u_1 = \varepsilon_{11}^0 x_1$$
$$u_2 = 0$$

para el caso de carga 22

$$u_1 = 0$$
$$u_2 = \varepsilon_{22}^0 x_2$$

y para el caso 12

$$u_1 = \varepsilon_{12}^0 x_1$$
$$u_2 = \varepsilon_{12}^0 x_2.$$

Tales desplazamientos y la geometría deformada del RVE se il
ustran en la Figura 5.2.



Figura 5.2: Casos de carga para el cómputo del tensor de M en modelos 2D.

Tracciones en el contorno: Estado de tensión plana

Cuando el estado de tensión es plano, el tensor de tensiones impuesto toma la forma

$$\boldsymbol{\sigma}^{0} = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^{0} & \sigma_{12}^{0} & 0\\ \sigma_{12}^{0} & \sigma_{22}^{0} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$
 (5.16)

Operando de forma análoga a la indicada en la subsección precedente, y considerando los tres casos de carga $\sigma^{0^{pq}}$ se obtienen las expresiones de las tracciones que deben imponerse a las aristas del RVE:

para el caso de carga 11

 $t_1 = \sigma_{11}^0 \ n_1$ $t_2 = 0$

para el caso de carga 22 $\,$

$$t_1 = 0$$

 $t_2 = \sigma_{22}^0 n_2$

para el caso de carga 12

$$t_1 = \sigma_{12}^0 \ n_2$$
$$t_2 = \sigma_{12}^0 \ n_1.$$

Al igual que en el caso tridimensional, las caras no permanecerán planas como en el caso del proceso controlado por deformaciones, salvo que el material sea homogéneo.

5.3. Cómputo de los tensores de localización, de elasticidad y compliancia

Una vez resueltos los casos de carga mediante el método de los elementos finitos, los valores de deformación ε_{ij}^1 o σ_{ij}^1 se computan en el centroide de los elementos (Hollister y Kikuchi, 1992). Las deformaciones o tensiones en la escala 1 se postprocesan para hallar sus homólogos en la escala 0 usando la ec. (5.4) o (5.5). Los valores hallados de este modo deben ser idénticos³ a los impuestos ε^0 o σ^0 .

Puesto que la primera de las expresiones (5.2) se debe satisfacer para cualquier pq caso de carga se tiene, en notación reducida de Voigt,

$$\varepsilon_i^{1^{pq}} = M_{ij}^1 \; \varepsilon_j^{0^{pq}}. \tag{5.17}$$

El valor de cada componente del tensor de deformaciones en el nivel 1 para cada uno de los casos pq de carga puede escribirse como producto de dos vectores. Para el caso particular de la componente ε_1^1 se tiene

$$\varepsilon_{1}^{1^{11}} = \left\{ \varepsilon_{1}^{0} \quad \varepsilon_{2}^{0} \quad \varepsilon_{3}^{0} \quad \varepsilon_{4}^{0} \quad \varepsilon_{5}^{0} \quad \varepsilon_{6}^{0} \right\}^{11} \left\{ M_{11}^{1} \quad M_{12}^{1} \quad M_{13}^{1} \quad M_{14}^{1} \quad M_{15}^{1} \quad M_{16}^{1} \right\}^{T}$$

$$\varepsilon_{1}^{1^{22}} = \left\{ \varepsilon_{1}^{0} \quad \varepsilon_{2}^{0} \quad \varepsilon_{3}^{0} \quad \varepsilon_{4}^{0} \quad \varepsilon_{5}^{0} \quad \varepsilon_{6}^{0} \right\}^{22} \left\{ M_{11}^{1} \quad M_{12}^{1} \quad M_{13}^{1} \quad M_{14}^{1} \quad M_{15}^{1} \quad M_{16}^{1} \right\}^{T}$$

$$\varepsilon_{1}^{1^{33}} = \left\{ \varepsilon_{1}^{0} \quad \varepsilon_{2}^{0} \quad \varepsilon_{3}^{0} \quad \varepsilon_{4}^{0} \quad \varepsilon_{5}^{0} \quad \varepsilon_{6}^{0} \right\}^{33} \left\{ M_{11}^{1} \quad M_{12}^{1} \quad M_{13}^{1} \quad M_{14}^{1} \quad M_{15}^{1} \quad M_{16}^{1} \right\}^{T} \quad (5.18)$$

 $^{^3{\}rm Computacionalmente}$ se admite que puede haber alguna diferencia numérica menor que algún valor o tolerancia.

$$\begin{split} \varepsilon_{1}^{1^{12}} &= \left\{ \varepsilon_{1}^{0} \quad \varepsilon_{2}^{0} \quad \varepsilon_{3}^{0} \quad \varepsilon_{4}^{0} \quad \varepsilon_{5}^{0} \quad \varepsilon_{6}^{0} \right\}^{12} \left\{ M_{11}^{1} \quad M_{12}^{1} \quad M_{13}^{1} \quad M_{14}^{1} \quad M_{15}^{1} \quad M_{16}^{1} \right\}^{T} \\ \varepsilon_{1}^{1^{23}} &= \left\{ \varepsilon_{1}^{0} \quad \varepsilon_{2}^{0} \quad \varepsilon_{3}^{0} \quad \varepsilon_{4}^{0} \quad \varepsilon_{5}^{0} \quad \varepsilon_{6}^{0} \right\}^{23} \left\{ M_{11}^{1} \quad M_{12}^{1} \quad M_{13}^{1} \quad M_{14}^{1} \quad M_{15}^{1} \quad M_{16}^{1} \right\}^{T} \\ \varepsilon_{1}^{1^{31}} &= \left\{ \varepsilon_{1}^{0} \quad \varepsilon_{2}^{0} \quad \varepsilon_{3}^{0} \quad \varepsilon_{4}^{0} \quad \varepsilon_{5}^{0} \quad \varepsilon_{6}^{0} \right\}^{31} \left\{ M_{11}^{1} \quad M_{12}^{1} \quad M_{13}^{1} \quad M_{14}^{1} \quad M_{15}^{1} \quad M_{16}^{1} \right\}^{T} \end{split}$$

Usando un desarrollo similar se pueden escribir las cinco i componentes restantes. Por lo tanto, puede escribirse el sistema de ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{i}^{111} \\ \varepsilon_{i}^{122} \\ \varepsilon_{i}^{133} \\ \varepsilon_{i}^{131} \\ \varepsilon_{i}^{131} \\ \varepsilon_{i}^{131} \\ \varepsilon_{i}^{131} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{1}^{0^{11}} & \varepsilon_{2}^{0^{11}} & \varepsilon_{3}^{0^{11}} & \varepsilon_{4}^{0^{11}} & \varepsilon_{5}^{0^{11}} & \varepsilon_{6}^{0^{11}} \\ \varepsilon_{1}^{0^{22}} & \varepsilon_{2}^{0^{22}} & \varepsilon_{3}^{0^{22}} & \varepsilon_{5}^{0^{22}} & \varepsilon_{6}^{0^{22}} \\ \varepsilon_{1}^{0^{33}} & \varepsilon_{2}^{0^{33}} & \varepsilon_{3}^{0^{33}} & \varepsilon_{4}^{0^{33}} & \varepsilon_{5}^{0^{33}} & \varepsilon_{6}^{0^{33}} \\ \varepsilon_{1}^{0^{12}} & \varepsilon_{2}^{0^{12}} & \varepsilon_{3}^{0^{12}} & \varepsilon_{4}^{0^{12}} & \varepsilon_{5}^{0^{12}} & \varepsilon_{6}^{0^{12}} \\ \varepsilon_{1}^{0^{23}} & \varepsilon_{2}^{0^{23}} & \varepsilon_{3}^{0^{23}} & \varepsilon_{4}^{0^{23}} & \varepsilon_{5}^{0^{23}} & \varepsilon_{6}^{0^{23}} \\ \varepsilon_{1}^{0^{31}} & \varepsilon_{2}^{0^{31}} & \varepsilon_{3}^{0^{31}} & \varepsilon_{4}^{0^{31}} & \varepsilon_{5}^{0^{31}} & \varepsilon_{6}^{0^{31}} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} M_{i1}^{1} \\ M_{i2}^{1} \\ M_{i3}^{1} \\ M_{i4}^{1} \\ M_{i5}^{1} \\ M_{i6}^{1} \end{pmatrix}$$

$$(5.19)$$

donde el término de la izquierda representa un vector que contiene las componentes ε_i^k para un valor de *i* fijo y para cada uno de los pq casos de carga. La expresión anterior representa un sistema de ecuaciones del tipo B = AX en donde X es una fila del tensor de localización. Resolviendo para cada una de las *i* componentes se obtienen las 6 filas del tensor de localización. Este procedimiento se implementó en un código desarrollado en el entorno MatLab (MatLab, 2004), ver Apéndice E. Se enfatiza que deben hallarse tantos tensores de localización como elementos finitos existan en el modelo ya que, en su versión discretizada, la integral la ecuación (3.33) se reemplaza por una sumatoria sobre el volumen de todos los elementos,

$$\mathbf{C}^{0} = \frac{1}{V_{RVE}} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{C}^{1}(x) \mathbf{M}^{1}(x) V_{i}, \qquad (5.20)$$

donde V_{RVE} representa el volumen total del elemento de volumen representativo calculado como suma de los volúmenes de cada elemento V_i y N es el número total de elementos.

Cuando se emplean tracciones, se debe satisfacer la segunda de las expresiones (5.2). Operando de un modo análogo al descrito previamente para las deformaciones se puede hallar el tensor de localización de tensiones N^1 para cada elemento. En cualquiera de los casos el cómputo del volumen de los elementos depende de su tipo, sean estos tetraedros o hexaedros.

Finalmente mediante otro programa desarrollado en MatLab se computa el tensor de elasticidad aparente \mathbf{C}^{0} , ec. (5.20) o el tensor de compliancia

$$\mathbf{S}^{0} = \frac{1}{V_{RVE}} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}^{1}(x) \mathbf{N}^{1}(x) V_{elem}.$$
 (5.21)

Los tensores de elasticidad \mathbf{C}^1 y compliancia \mathbf{S}^1 están dados por las expresiones

$$C_{ij}^{1} = \begin{bmatrix} \frac{E(1-v)}{(1+v)(1-2v)} & \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)} & \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)} & 0 & 0 & 0\\ \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)} & \frac{E(1-v)}{(1+v)(1-2v)} & 0 & 0 & 0\\ \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)} & \frac{E(1-v)}{(1+v)(1-2v)} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{E(1-v)}{(1+v)(1-2v)} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+v)} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+v)} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{E}{2(1+v)} \end{bmatrix}, \quad (5.22)$$

$$S_{ij}^{1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{v}{E} & -\frac{v}{E} & 0 & 0 & 0\\ -\frac{v}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{v}{E} & 0 & 0 & 0\\ -\frac{v}{E} & -\frac{v}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+v)}{E} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+v)}{E} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+v)}{E} \end{bmatrix}, \quad (5.23)$$

donde los módulos de elasticidad y coeficientes de Poisson son los de la fase correspondiente a la posición \mathbf{x} . En casos en dos dimensiones se tiene, cuando el estado de deformación es plano

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{E(1-v)}{(1+v)(1-2v)} & \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)} & 0\\ \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)} & \frac{E(1-v)}{(1+v)(1-2v)} & 0\\ 0 & 0 & \frac{E}{2(1+v)} \end{bmatrix}, S_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1-v^2}{E} & -\frac{v(1+v)}{E} & 0\\ -\frac{v(1+v)}{E} & \frac{1-v^2}{E} & 0\\ 0 & 0 & \frac{2(1+v)}{E} \end{bmatrix},$$
(5.24)

mientras que cuando el estado de tensión es plano se tiene

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{E}{1-v^2} & \frac{E}{1-v^2} & 0\\ \frac{E}{1-v^2} & \frac{E}{1-v^2} & 0\\ 0 & 0 & \frac{E}{2(1+v)} \end{bmatrix}, S_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{v}{E} & 0\\ -\frac{v}{E} & \frac{1}{E} & 0\\ 0 & 0 & \frac{2(1+v)}{E} \end{bmatrix}.$$
 (5.25)

5.4. Cotas a las propiedades estimadas

En el Capítulo 3 se indicó que es posible obtener cotas a las propiedades mecánicas representadas por los tensores de elasticidad y compliancia computados mediante el método directo. Siguiendo con la discusión acerca de las condiciones de contorno (Sec. 5.2), cualesquiera sean las empleadas para el análisis, éstas serán en general diferentes de las reales, por lo tanto, las propiedades estimadas (tensores de elasticidad o compliancia) serán diferentes también. Tales propiedades mecánicas se encuentran acotadas por valores que pueden obtenerse utilizando los principios de la mínima energía potencial (PMEP) y de la mínima energía potencial complementaria (PMEPC) (Kanouté et al., 2009).

El PMEP establece que de todos los estados de deformaciones admisibles que satisfacen el equilibrio, el correcto es aquel que minimiza la energía potencial del cuerpo o estructura bajo análisis. Cuando no se aplican esfuerzos externos sobre la muestra, la energía potencial es idéntica a la energía interna de deformación. Por lo tanto, en un análisis en el que se usan como condiciones de contorno desplazamientos lineales, la energía elástica potencial puede ser escrita como

$$\mathbf{U}_{RVE} = \int_{V_{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1^T} \mathbf{C}_{RVE}^{k-1} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1} dV_{RVE}, \qquad (5.26)$$

donde \mathbf{U}_{RVE} representa la energía potencial en el nivel k-1 y, \mathbf{C}_{RVE}^{k-1} es el tensor elástico aparente calculado. Sin haberlo hecho explícito, en la operación anterior admitimos que se satisface la condición de Hill (Zohdi y Wriggers, 2005),

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \ \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \ \boldsymbol{\varepsilon} \rangle.$$
 (5.27)

La energía potencial para las condiciones in-situ o reales del RVE puede expresarse como

$$\mathbf{U}_{in-situ} = \int_{V_{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1^T} \mathbf{C}^{k-1} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1} dV_{RVE}, \qquad (5.28)$$

donde todas las cantidades fueron definidas previamente.

Puesto que las condiciones de contorno empleadas en el análisis de la muestra pueden diferir o a lo sumo ser idénticas a las condiciones in-situ, la energía potencial del volumen analizado bajo las condiciones supuestas debe ser mayor o igual a la existente in-situ de acuerdo al PMEP, por lo tanto

$$\int_{V_{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1^T} \mathbf{C}_{RVE}^{k-1} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1} dV_{RVE} \geq = \int_{V_{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1^T} \mathbf{C}^{k-1} \boldsymbol{\varepsilon}^{k-1} dV_{RVE}.$$

Puesto que las deformaciones en el nivel k - 1 son idénticas ya que se trata de deformaciones promediadas en el dominio del RVE, se deduce que

$$\mathbf{C}_{RVE}^{k-1} \ge \mathbf{C}^{k-1}.\tag{5.29}$$

Cuando se aplican tracciones uniformes sobre el contorno de la muestra se considera el PMEPC. Operando de forma análoga al caso anterior se obtiene la siguiente desigualdad

$$\int_{V_{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^{k-1^T} \mathbf{S}_{RVE}^{k-1} \boldsymbol{\sigma}^{k-1} dV_{RVE} \geq = \int_{V_{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^{k-1^T} \mathbf{S}^{k-1} \boldsymbol{\sigma}^{k-1} dV_{RVE}$$

de donde resulta evidente que

$$\mathbf{S}_{RVE}^{k-1} \ge \mathbf{S}^{k-1}$$
, por lo tanto, $\mathbf{S}_{RVE}^{k-1^{-1}} = \mathbf{E}_{RVE}^{k-1} \le \mathbf{S}^{k-1^{-1}} = \mathbf{E}^{k-1}$. (5.30)

Por consiguiente, si se emplean desplazamientos lineales como condiciones de contorno se obtiene una cota superior a las propiedades aparentes del material. En cambio, cuando se emplean tracciones uniformes se obtiene una cota inferior. Lo que da origen a la conocida desigualdad,

$$\underbrace{\mathbf{S}_{RVE}^{k-1^{-1}}}_{Tracciones \ en \ el \ Contorno} \leq \mathbf{C}^{k-1} \leq \underbrace{\mathbf{C}_{RVE}^{k-1}}_{Desplazamientos \ en \ el \ Contorno} . \tag{5.31}$$

que es similar a las cotas de Reuss y Voigt (Stein et al., 2004; Zohdi y Wriggers, 2005; Kanit et al., 2003) presentadas en la Sec. 3.6.2.1, con la salvedad de que en este caso son las condiciones de contorno impuestas las que provocan campos de tensión uniformes en el RVE sin importar cuales sean los campos de tensión y deformación en las fases. Al emplearse más información que con los métodos de Reuss y Voigt, que sólo usan la fracción volumétrica de las fases, el rango entre las cotas impuestas por el PMEP y PMEPC es más estrecho. Pese a la rigurosidad matemática del método, no es posible hacer una estimación de cuán apartadas están estas cotas.

Como corolario del razonamiento anterior, con las condiciones de contorno empleadas en el método directo se obtienen estimaciones de los tensores de elasticidad y de compliancia que no necesariamente representan idéntico comportamiento del material aparente. En materiales policristalinos muchas veces puede seleccionarse un tamaño de muestra mayor que el RVE en su definición clásica, de este modo la respuesta mecánica del material resulta independiente de las condiciones de contorno. En el caso del hueso trabecular sin embargo, de acuerdo a lo indicado en la Sec. 3.5.3, las estimaciones del método directo con una u otra condición de contorno diferirán y representarán cotas a las propiedades del material aparente. Estos aspectos se ilustrarán en el Capítulo 7.

5.5. Resumen

Se presentó el método de homogenización directo como un procedimiento para el estudio de materiales heterogéneos en múltiples escalas en las cuales se emplean elementos de volumen representativo en cada una de ellas. Con este objeto se introdujo una notación de supraíndices adecuada para el análisis multiescala.

El método se introdujo a partir de las relaciones entre las tensiones y deformaciones macroscópicas con sus valores homólogos microscópicos en términos de promedios en el domino del RVE y, de la ley de Hooke en un marco de deformaciones infinitesimales. Esto define un problema elastostático con una característica particular a saber: la carga no se da en términos de fuerzas en la superficie o volumétricas sino como promedio de un campo (tensión o deformación), por lo tanto, no se indican explícitamente condiciones de contorno.

Al no existir condiciones de contorno el problema está mal condicionado, por lo tanto el empleo de dos condiciones distintas resultará en soluciones diferentes. Intuitivamente, las estimaciones del método serán más cercanas a la realidad conforme las diferencias entre los estados de deformación o tensión impuestos al RVE y los verdaderos, existentes en el seno del material, sean menores. Si bien esta observación es válida para cualquier condición de contorno, incluida la que se discute en el próximo capítulo, en el método directo se emplean solamente desplazamientos lineales o tracciones uniformes.

La aplicación del método de homogenización directo a materiales con microestructuras de geometrías arbitrarias requiere de la solución de problemas de valor de contorno. Estos problemas normalmente se resuelven usando métodos computacionales, típicamente del método de los elementos finitos.

La implementación formal de las condiciones de contorno en desplazamientos lineales requiere la imposición de desplazamientos prescritos a todas las caras (modelos 3D) o aristas (modelos 2D) del RVE, de forma tal que se satisfaga un valor impuesto de deformación igual al promedio volumétrico de las deformaciones de las fases dentro del RVE. Cuando se emplean tracciones uniformes, se deben imponer tracciones a las caras (modelos 3D) o aristas (modelos 2D) que provoquen una tensión igual al promedio volumétrico de las tensiones de las fases dentro del RVE. En este caso, es necesario evitar los desplazamientos y rotaciones como cuerpo rígido mediante algún método, típicamente impidiendo desplazamientos de algunos nodos o estabilizando el modelo.

La relación entre los campos micro y macroscópicos está dada por los tensores de localización. Para computarlos se resuelven seis problemas de valor de contorno si los modelos son tridimensionales, o tres si éstos son en dos dimensiones. En cada problema se calcula el tensor de deformaciones o de tensiones en el centroide de los elementos finitos. Conociendo las deformaciones y los volúmenes de los elementos se calculan los tensores homólogos macroscópicos. Posteriormente, conociendo alguno de los campos en ambas escalas se resuelve un sistema de ecuaciones que permite hallar cada fila del tensor de localización para cada una de las componentes del campo en cuestión (deformación o tensión). Finalmente, una vez ensamblados los tensores de localización para cada elemento, se los emplea para computar el tensor de de elasticidad o de compliancia que caracteriza el comportamiento macroscópico aparente del hueso trabecular. Las operaciones para el cómputo de los tensores de localización y la estimación de los tensores de elasticidad y compliancia fueron implementadas en códigos desarrollados a tales efectos en el entorno MatLab.

Debido al concepto de RVE empleado en este trabajo, los tensores de elasticidad hallados usando una u otra condición de contorno difieren, es decir dependen del tamaño de la muestra y de las condiciones de contorno empleadas. Aún así, los tensores determinados de esta forma son cotas más estrechas a las propiedades aparentes que las cotas de Reuss y Voigt.

Los procedimientos presentados fueron implementados utilizando programas desarrollados en el entorno MatLab. Estos programas postprocesan los resultados de los problemas de valor de contorno resueltos mediante el método de los elementos finitos usando Abaqus.

CAPÍTULO 6 Implementación del método de homogenización asintótico

En este capítulo se presentan en forma detallada las hipótesis fundamentales del método de homogenización asintótico con el objeto de comprender sus implicancias en términos de los desplazamientos y deformaciones sobre la muestra. Con esta información, se describen las condiciones de contorno impuestas a la muestra para computar los tensores de localización de deformaciones y de elasticidad empleando el método de los elementos finitos.

6.1. Introducción

La teoría de homogenización asintótica se desarrolla sobre la base de tres hipótesis fundamentales: que existe una relación entre el tamaño de la celda y la microestructura, que el desplazamiento se puede aproximar mediante una expansión asintótica, y que los desplazamientos son periódicos.

Para el tratamiento del método, al igual que con el método directo, consideramos tres escalas¹, ver Figura 6.1: la escala macroscópica, donde las coordenadas de cualquier punto se identifican mediante las coordenadas \mathbf{y} ; la mesoscópica correspondiente a un punto macroscópico; y la escala microscópica, identificada por las coordenadas \mathbf{x} .



Figura 6.1: Detalle de las escalas usadas y la nomenclatura empleada.

¹En la bibliografía es usual llamar \mathbf{x} a las dimensiones macroscópicas e \mathbf{y} a las microscópicas. En este trabajo se adoptó la convención opuesta para ser consistentes con el resto del documento.

Nótese que en la escala mesoscópica, por tratarse de una muestra representativa de la microestructura, los puntos materiales deben identificarse según su posición en el sistema de coordenadas \mathbf{x} . Al cociente entre las escalas \mathbf{y} y \mathbf{x} se lo denomina η : matemáticamente, expresa la primera hipótesis del método.

$$\eta = \frac{\mathbf{y}}{\mathbf{x}}.\tag{6.1}$$

La segunda hipótesis, que el desplazamiento total de un material microestructurado multiescala puede ser representado por una expansión asintótica, se puede expresar en términos matemáticos como (Hollister y Kikuchi, 1992)

$$\mathbf{u}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{y}) + \eta \ \mathbf{u}_1(\mathbf{y}, \mathbf{x}) + \eta^2 \ \mathbf{u}_2(\mathbf{y}, \mathbf{x}) + \dots,$$
(6.2)

donde **u** es el valor exacto de la variable desplazamiento, \mathbf{u}_0 es el valor macroscópico o aparente del campo de desplazamientos y \mathbf{u}_i (i > 0) son perturbaciones del campo de desplazamientos debido a la microestructura. Nótese que, considerando la expresión (6.1), en (6.2) las cantidades en la escala microestructural varian $1/\eta$ veces más rápido que en el nivel aparente.

La tercera hipótesis está relacionada con las condiciones de contorno. En teoría de homogenización asintótica se suponen que los desplazamientos son periódicos esto es que los desplazamientos en una cara del RVE son idénticos a los desplazamientos de la cara opuesta por cuando no existe separación ni superposición de las celdas. Esta hipótesis está en un todo de acuerdo con la ec. (3.26) y el concepto de celda (Sec. 3.6.5).

El campo de deformaciones asociado resulta de reemplazar la ecuación de desplazamientos (6.2) en la expresión (3.17) considerando que la escala macroscópica es la **y**. Entonces, usando la regla de la cadena, $\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$, se obtiene

$$\varepsilon(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j}{\partial y_i} \right)$$
$$= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u_{0i}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_{0j}}{\partial y_i} \right) + \left(\frac{\partial u_{1i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} \right) + \eta \left(\frac{\partial u_{1i}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_{1j}}{\partial y_i} \right) \right] + \dots \quad (6.3)$$

Si bien los términos de mayor orden pueden incorporarse para aumentar la precisión del análisis (Kouznetsova, 2002), usualmente los términos de orden $0_{(\eta)}$ y superiores se desprecian frente a los de menor orden. En particular, cuando existen dos escalas el tensor de deformaciones puede aproximarse como

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{0i}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_{0j}}{\partial y_i} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{1i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} \right). \tag{6.4}$$

Recuperándose de este modo la expresión 3.50,

$$\varepsilon_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle + \varepsilon_{ij}^*$$
 o en notación multiescala $\varepsilon_{ij}(\mathbf{v}) = \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{v}) + \varepsilon_{ij}^1(\mathbf{v}),$

donde

$$\varepsilon_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{0i}}{\partial y_j} + \frac{\partial u_{0j}}{\partial y_i} \right), \quad y \quad \varepsilon_{ij}^* = \varepsilon_{ij}^1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{1i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{1j}}{\partial x_i} \right). \tag{6.5}$$

Para resolver el problema elástico se sustituye la primera de las expresiones (3.50) en la ecuación de equilibrio (3.12) en su forma débil, es decir

$$\int_{\Omega} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}(\mathbf{v}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}) \ d\Omega = \int_{\Gamma} t_i v_i d\Gamma, \tag{6.6}$$

siendo Ω el dominio total del problema, las tracciones t_i están sobre el contorno macroscópico Γ , $\varepsilon_{ij}(\mathbf{u})$ es el tensor de deformaciones de la ec. (6.4) y $\varepsilon_{ij}(\mathbf{v})$ es el tensor de deformaciones virtual. La forma del tensor de deformaciones virtual es

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{v}) = \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{v}) + \varepsilon_{ij}^1(\mathbf{v}),$$

 donde

$$\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_{0i}}{\partial y_{j}} + \frac{\partial v_{0j}}{\partial y_{i}} \right), \quad y \quad \varepsilon_{ij}^{*} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_{1i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial v_{1j}}{\partial x_{i}} \right),$$

siendo v_{0i} el desplazamiento virtual. Puesto que la microestructura se considera periódica, la expresión anterior puede separarse en los niveles microestructural y aparente. Esto implica que se tienen dos problemas: uno cuando **v** varía en el nivel macroscópico y es constante en el microscópico ($\varepsilon_{ij}^1(\mathbf{v})$ nulo), y otro cuando **v** varía en el nivel microscópico (en cuyo caso $\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{v})$ es cero). Matemáticamente, esto da lugar a dos problemas representados por las ecuaciones

$$\int_{\Omega'} \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{V_{RVE}} C_{ijkl} \, \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{v}) \, \left(\varepsilon_{kl}^0 + \varepsilon_{kl}^1\right) dV_{RVE} \, d\Omega' = \int_{\Gamma} t_i \, v_i \, d\Gamma \tag{6.7}$$

$$\int_{\Omega'} \frac{1}{|V_{RVE}|} \int_{V_{RVE}} C_{ijkl} \, \varepsilon_{ij}^1(\mathbf{v}) \, \left(\varepsilon_{kl}^0 + \varepsilon_{kl}^1\right) dV_{RVE} \, d\Omega' = 0 \tag{6.8}$$

donde se hace explícita la formulación periódica en términos de las celdas de volumen V_{RVE} y se usa a Ω' para denotar la integral sobre el dominio del problema considerando la presencia de las celdas, es decir $\int_{\Omega} d\Omega = \int 1/|V_{RVE}| \int_{\Omega'} dV_{RVE} d\Omega'$. El término de la derecha de la ec. (6.8) es cero porque no existen tracciones aplicadas en el nivel microestructural. Por otro lado, la ecuación se satisface si la integral en el dominio del RVE es nula, es decir,

$$\int_{V_{RVE}} C_{ijkl} \, \varepsilon_{ij}^1(\mathbf{v}) \, \left(\varepsilon_{kl}^0 + \varepsilon_{kl}^1\right) dV_{RVE} = 0, \qquad (6.9)$$

resultando un problema cuya forma es similar al expresado por la ec. (6.6). pero donde el término de la derecha es nulo. Así, el problema elastostático a resolver está mal condicionado debido a que no se expresan condiciones de contorno sobre el RVE (Suquet, 1987). Estas condiciones de contorno deben reproducir el estado de deformaciones y tensiones que el RVE tendría en el seno del material, es decir *in situ*, ver Sec. 5.4.

El procedimiento para el cómputo del tensor de elasticidad es similar al descrito para el método directo. Al igual que en éste último es necesario resolver problemas de valor de contorno con deformaciones impuestas, ε_{kl}^0 , al RVE a partir de las cuales se determinan las deformaciones ε_{ij}^1 . Los estados de deformación en ambas escalas se emplean luego para construir los sistemas de ecuaciones que permiten calcular los tensores de localización que, como se indicó en el Cap. 3, se usan para hallar el tensor de elasticidad. En las secciones siguientes se presentan las expresiones y las condiciones de contorno necesarias para cada uno de los casos de carga y se describen los procedimientos para su implementación.

6.2. Condiciones de contorno

Para calcular el tensor de elasticidad C_{ijkl}^0 se somete a la celda unitaria o RVE² a estados de deformaciones conocidos ε_{ij}^0 y se provee de las restricciones necesarias para que los desplazamientos sean periódicos según la ec. (3.26). De aquí en más consideraremos un RVE prismático con aristas iguales a 2a, 2b y 2c, ver Figura 6.2.



Figura 6.2: Nomenclatura de las caras, identificación de los nodos maestros y dimensiones de la muestra representativa.

6.2.1. Aspectos teóricos

Para implementar la ec. (3.26) en forma numérica (Berger et al., 2005) se procede a escribir los desplazamientos de un par de superficies opuestas como,

 $^{^2 \}rm El motivo por el cual una celda unitaria es un RVE está relacionado con el concepto de periodicidad. Este concepto y su extensión al caso microestructuras no periódicas fue discutido en la Sec. 3.6.5.$

$$u_i^{(+)} = E_{ij} x_j^{(+)} + u^* \quad y \quad u_i^{(-)} = E_{ij} x_j^{(-)} + u^*,$$
(6.10)

donde por definición E_{ij} es igual a ε_{ij}^0 (ec. 3.28); x_j es la posición de los puntos sobre caras opuestas; los signos '+' y '-' identifican las caras considerando el sentido positivo del eje cartesiano perpendicular a ambas (ver Figura 6.2) y; u^* es la componente fluctuante del desplazamiento.

Por lo tanto, la diferencia entre ambas ecuaciones es

$$u_i^{(+)} - u_i^{(-)} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle \ \left(x_j^{(+)} + x_j^{(-)} \right).$$
 (6.11)

Es decir, una deformación arbitraria ε_{ij}^0 , puede aplicarse a un RVE dado asegurándose que los puntos homólogos de caras opuestas satisfagan la ecuación precedente a efectos de garantizar la condición de periodicidad. Por lo tanto, las condiciones de contorno que se deben imponer al RVE son

$$u_i(a, x_2, x_3) - u_i(-a, x_2, x_3) = (2a)\varepsilon_{i1}^0 \quad \begin{array}{l} \forall x_2 \in [-b, b] \\ \forall x_3 \in [-c, c] \end{array}$$
(6.12)

$$u_i(x_1, b, x_3) - u_i(x_1, -b, x_3) = (2b)\varepsilon_{i2}^0 \quad \forall x_2 \in [-a, a] \\ \forall x_3 \in [-c, c]$$
(6.13)

$$u_i(x_1, x_2, c) - u_i(x_1, x_2, -c) = (2c)\varepsilon_{i3}^0 \quad \begin{array}{l} \forall x_1 \in [-a, a] \\ \forall x_2 \in [-b, b] \end{array}$$
(6.14)

donde se reemplazó la notación de caras ('+' y '-') por las coordenadas del plano. La notación empleada resulta conveniente también para indicar los casos de carga. Por ejemplo, para las caras ' $a^{(+)}$ ' y ' $a^{(-)}$ ' en la ec. (6.12) solamente interesan tres casos de carga, ya que el segundo subíndice de la deformación impuesta ε_{i1}^0 está fijo y el primero sólo puede tomar los valores de 1 a 3. Resulta ilustrativo desarrollar dichas ecuaciones:

• para ε_{11}^0 se tiene

$$u_1(a, x_2, x_3) - u_1(-a, x_2, x_3) = (2a)\varepsilon_{11}^0,$$

$$u_2(a, x_2, x_3) - u_2(-a, x_2, x_3) = 0,$$

$$u_3(a, x_2, x_3) - u_3(-a, x_2, x_3) = 0,$$

• para ε_{21}^0

$$u_1(a, x_2, x_3) - u_1(-a, x_2, x_3) = 0,$$

$$u_2(a, x_2, x_3) - u_2(-a, x_2, x_3) = (2a)\varepsilon_{21}^0,$$

$$u_3(a, x_2, x_3) - u_3(-a, x_2, x_3) = 0,$$

• y para ε_{31}^0

$$u_1(a, x_2, x_3) - u_1(-a, x_2, x_3) = 0,$$

$$u_2(a, x_2, x_3) - u_2(-a, x_2, x_3) = 0,$$

$$u_3(a, x_2, x_3) - u_3(-a, x_2, x_3) = (2a)\varepsilon_{31}^0.$$

De forma similar, se deduce que los desplazamientos en los demás casos de carga (cuyas deformaciones impuestas asociadas son ε_{22}^0 , ε_{33}^0 y ε_{23}^0) deben satisfacer la relación

$$u_i(a, x_2, x_3) - u_i(-a, x_2, x_3) = 0.$$

Nótese que las ecuaciones anteriores imponen restricciones a los desplazamientos pero no implican que su magnitud sea conocida de antemano. Las ecuaciones establecen relaciones entre los desplazamientos de puntos ubicados en caras opuestas de un RVE que resultan en valores prescritos de deformación. Operando de un modo análogo con las ecs. (6.13) y (6.14) se pueden obtener las ecuaciones homólogas para las caras b y c. Estas expresiones se reportan en el Apéndice D.

Las aristas, al estar formadas por la intersección de dos planos, responden a dos de las ecuaciones (6.12-6.14) simultáneamente. Por ejemplo, los desplazamientos de las aristas formadas por la intersección de las caras planas 'a' y 'b' (ver Fig. 6.2), están sujetos a las restricciones impuestas por las ecuaciones (6.12) y (6.13). Para hallar las restricciones sobre los desplazamientos de las aristas consideramos que estas son segmentos paralelos a los ejes coordenados (x_1, x_2, x_3) , donde dos de las x_i son conocidas y la tercera puede variar entre $\pm \alpha$ siendo α la longitud de la mitad de las aristas ($a, b \circ c$). Puesto que la intersección de las caras a y b genera 4 segmentos o aristas, es necesario definir cuáles son los pares de aristas que se van a considerar. Nótese que sólo pueden seleccionarse aristas diagonalmente opuestas ya que éstas deben estar relacionadas por las expresiones (6.12) y (6.13) a la vez. De forma arbitraria se elige las aristas representadas por los segmentos (a, b, x_3) y ($-a, -b, x_3$). Por lo tanto, las expresiones 6.12 y 6.13 especializadas en $x_2 = b$ y $x_1 = -a$ son

$$u_i(a, b, x_3) - u_i(-a, b, x_3) = (2a)\varepsilon_{i1}^0, u_i(-a, b, x_3) - u_i(-a, -b, x_3) = (2b)\varepsilon_{i2}^0.$$

Particularizando para el caso de carga cuya deformación impuesta es ε_{11}^0 y sumando ambas expresiones y se obtiene

$$u_1(a, b, x_3) - u_1(-a, -b, x_3) = (2a)\varepsilon_{11}^0,$$

donde queda explícitamente indicado la arista a la que corresponde cada desplazamiento. La misma operación debe efectuarse para hallar los desplazamientos en las direcciones $u_2 y u_3$. Las ecuaciones completas para este caso de carga, y para este par de aristas, son

$$u_1(a, b, x_3) - u_1(-a, -b, x_3) = (2a)\varepsilon_{11}^0,$$

$$u_2(a, b, x_3) - u_2(-a, -b, x_3) = 0,$$

$$u_3(a, b, x_3) - u_3(-a, -b, x_3) = 0.$$

Operando de una forma similar para los cinco casos de carga restantes se obtienen sus respectivas restricciones:

- para el caso de carga cuya deformación impuesta es $\varepsilon_{12}^0 = \varepsilon_{21}^0$

$$u_1(a, b, x_3) - u_1(-a, -b, x_3) = (2b)\varepsilon_{12}^0,$$

$$u_2(a, b, x_3) - u_2(-a, -b, x_3) = (2a)\varepsilon_{21}^0,$$

$$u_3(a, b, x_3) - u_3(-a, -b, x_3) = 0.$$

- para el caso de carga cuya deformación impuesta es $\varepsilon_{13}^0 = \varepsilon_{31}^0$

$$u_1(a, b, x_3) - u_1(-a, b, x_3) = 0$$

$$u_2(a, b, x_3) - u_2(-a, b, x_3) = 0,$$

$$u_3(a, b, x_3) - u_3(-a, b, x_3) = (2a)\varepsilon_{31}^0.$$

- para el caso de carga cuya deformación impuesta es ε_{22}^0

$$u_1(a, b, x_3) - u_1(-a, b, x_3) = 0,$$

$$u_2(a, b, x_3) - u_2(-a, b, x_3) = (2b)\varepsilon_{22}^0,$$

$$u_3(a, b, x_3) - u_3(-a, b, x_3) = 0.$$

- para el caso de carga cuya deformación impuesta es $\varepsilon_{23}^0 = \varepsilon_{32}^0$

$$u_1(a, b, x_3) - u_1(-a, b, x_3) = 0,$$

$$u_2(a, b, x_3) - u_2(-a, b, x_3) = 0,$$

$$u_3(a, b, x_3) - u_3(-a, b, x_3) = (2b)\varepsilon_{32}^0.$$

- para el caso de carga cuya deformación impuesta es ε_{33}^0

$$u_1(a, b, x_3) - u_1(-a, b, x_3) = 0,$$

$$u_2(a, b, x_3) - u_2(-a, b, x_3) = 0,$$

$$u_3(a, b, x_3) - u_3(-a, b, x_3) = 0.$$

El mismo procedimiento se emplea para hallar las restricciones a la arista $(a, -b, x_3)$ y $(-a, b, x_3)$ y para los restantes cuatro pares de aristas. Las ecuaciones correspondientes se muestran en el Apéndice D.

Las expresiones anteriores no son válidas para las esquinas, donde se intersecan tres planos y tres aristas, por lo tanto, deben considerarse tales restricciones. A modo de ejemplo, para las esquinas (a, b, c) y (a, -b, -c) y, para el caso de carga cuya deformación impuesta es ε_{11}^0 , los desplazamientos deben satisfacer

$$u_1(a, b, c) - u_1(a, -b, -c) = -(2a)\varepsilon_{11}^0,$$

$$u_2(a, b, c) - u_2(a, -b, -c) = 0,$$

$$u_3(a, b, c) - u_3(a, -b, -c) = 0.$$

De un modo semejante se pueden hallar relaciones para los cinco casos de carga restantes. Las expresiones completas para los cuatro vértices se presentan en el Apéndice D.

6.2.2. Aspectos prácticos

En este trabajo, para la implementación de las condiciones de contorno periódicas mediante el método de los elementos finitos se emplean mallas idénticas en caras opuestas del RVE, es decir, las componentes de las coordenadas de dos nodos $n_1(x_i)$ y $n_2(x_i)$ ubicados en caras opuestas deben ser iguales salvo una que difiere en un largo de arista (2a, 2b o 2c según el caso).

La expresión (6.11) establece relaciones entre los desplazamientos de los nodos ubicados sobre caras opuestas de la Figura 6.2, especializando para las caras a

$$u_i^{(+a)} - u_i^{(-a)} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle \ \left(x_j^{(+a)} + x_j^{(-a)} \right).$$
(6.15)

Repitiendo el procedimiento para el par de nodos O y A ubicados donde las caras -a y +a cortan al eje de coordenadas x_2 se obtiene

$$u_i^{(A)} - u_i^{(O)} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle \left(x_j^{(A)} + x_j^{(O)} \right).$$
 (6.16)

Si se impide el desplazamiento del nodo O, el desplazamiento del nodo A queda impuesto por la condición expresada en la ec. (6.16) ya que $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ es conocido e igual a la deformación impuesta ε_{ij}^0 y, la diferencia entre las posiciones de A y O es igual al largo de la arista 2a. Puesto que los términos de la derecha en las ecs. (6.15) y (6.16) son idénticos, operando se obtiene una expresión que puede emplearse para imponer las condiciones de contorno periódicas a todos los nodos ubicados en las caras a, considerando el desplazamiento del nodo maestro A

$$u_i^{(+a)} - u_i^{(-a)} = u_i^{(A)}.$$
(6.17)

Nótese que la expresión (6.17) posee la información del caso de carga, deformación impuesta, sólo en el término de la derecha, es decir

$$u_i^{(A)} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle \left(x_j^{(A)} + x_j^{(O)} \right) \text{ donde } x_j^{(A)} + x_j^{(O)} = 2a.$$
 (6.18)

Operando de forma análoga se pueden construir ecuaciones sencillas de implementar en códigos de elementos finitos para los nodos de las demás caras, las aristas y esquinas del RVE.

Las restricciones indicadas precedentemente constituyen un tipo particular de condiciones de contorno. Cuando se emplea el paquete comercial de cálculo por elementos finitos Abaqus 6.9 (2009), tales condiciones de contorno pueden implementarse utilizando el comando 'EQUATION' que hace uso de nodos maestros y esclavos.

Los nodos maestros se usan para imponer una deformación arbitraria ε_{ij}^0 al RVE, es decir, representan los desplazamientos del nodo A en la ec. (6.17). Por su parte, los nodos esclavos se usan para imponer los desplazamientos a los nodos opuestos de caras, aristas y vértices, $u_i^{(\pm a)}$. A efectos de usar el comando 'EQUATION', la expresión (6.17) debe escribirse en Abaqus como

$$u_i^{(+a)} - u_i^{(-a)} + u_i^{(A)} = 0. (6.19)$$

Los nodos $u^{(-)}$ en la expresión anterior son esclavos en ABAQUS y por ello no pueden usarse más de una vez en una ecuación de desplazamiento, de otro modo se impondrían desplazamientos inconsistentes. Los detalles del uso del comando 'EQUATION' están bien documentados en los manuales de usuario (Simulia, 2010). En la Figura 6.3 se muestran los desplazamientos que deben imponerse a los nodos maestros $A, B ext{ y } C$ en cada caso de carga para obtener las deformaciones prescritas ε_{ij}^0 . Esto se realiza empleando un programa desarrollado en el entorno MatLab, ver Apéndice F.

6.3. Cómputo del tensor de localización y de elasticidad

El cálculo de los tensores de localización \mathbf{M}^k es similar al descrito en la Sec. 5.3 para el método directo. En primer lugar, se resuelven problemas de valor de contorno para los casos de carga linealmente independientes (tres en casos en problemas en 2D y seis en problemas 3D). Con este propósito se utiliza el método de los elementos finitos, en particular el programa de cálculo Abaqus 6.9 (2009). Luego, se computan las deformaciones ε_{ij}^1 y se emplea la ec. (3.28) para hallar las deformaciones ε_{ij}^0 . Resolviendo un sistema de ecuaciones como el indicado en la ec. (5.19) se computa el tensor de localización \mathbf{M} de los elementos que forman el RVE. Una vez hallados los \mathbf{M} se computa el tensor de elasticidad usando la ec. 5.20.

El cómputo del los tensores \mathbf{M}^k y de elasticidad \mathbf{C}^0 fue implementado en dos códigos desarrollados en MatLab cuyos listados se adjuntan en el Apéndice E. El cómputo de los primeros a partir de los valores ε^1 , y del volumen de los elementos V_{elem} es trivial. Para el computo del tensor de elasticidad \mathbf{C}^0 en cambio, es necesario considerar también las propiedades mecánicas de los elementos de cada fase.



Figura 6.3: Detalle de los desplazamientos impuestos a los nodos maestros A, B y C para los seis casos de carga.

6.4. Resumen

Se presentó el método de homogenización asintótica a partir de sus tres hipótesis principales. Mediante operaciones matemáticas elementales se dedujo la expresión del tensor de deformaciones para el caso particular de un material con dos escalas. Se demostró que el método es adecuado para el estudio en múltiples escalas y se hicieron explícitas las diferencias en cuanto a las condiciones de contorno existentes en los problemas en la escala microscópica y macroscópica. En particular, el primero de ellos fue descrito como un problema de celdas similar al descrito en el método directo (ec. 5.3) donde la celda constituye el RVE empleado en el método.

Los problemas de contorno y en particular, las condiciones de contorno que deben imponerse a las celdas fueron tratados en detalle para el caso de modelos en tres dimensiones (3D). El caso bidimensional no fue tratado, pero las condiciones de contorno a emplearse son idénticas las impuestas en modelos 3D (ε_{11}^0 , ε_{22}^0 y ε_{12}^0) en un marco de deformación plana. Se demostró también que a los fines prácticos se pueden emplear nodos maestros para referenciar los desplazamientos de las caras, aristas y esquinas de la celda. Las características de similitud de las mallas en caras opuestas fueron indicadas.

Puesto que la formulación del método está basada en el campo desplazamientos, resulta más sencillo computar el tensor de elasticidad que el de compliancia. El procedimiento para hallar el tensor de elasticidad fue descrito con analogías al método directo. Otros métodos para hallar el tensor de elasticidad pueden consultarse en Berger et al. (2005) y Hollister y Kikuchi (1992).

Los procedimientos presentados para la homogenización asintótica fueron implementados utilizando programas desarrollados en el entorno MatLab. Estos programas postprocesan los resultados de los problemas de valor de contorno resueltos mediante el método de los elementos finitos usando Abaqus.

Capítulo 7 Verificación y validación de los métodos de homogenización

Los objetivos de este capítulo son verificar las herramientas computacionales implementadas, evaluar su desempeño y definir pautas para su utilización aplicada al estudio del comportamiento mecánico del hueso trabecular. Con estos propósitos se aplica el método de homogenización directo a estructuras bidimensionales con solución analítica y a modelos idealizados del hueso trabecular. Del análisis de estos resultados se definen las condiciones de contorno apropiadas para el estudio de muestras óseas reconstruidas a partir de imágenes microtomográficas y se introducen algunas de las dificultades asociadas al estudio de tales muestras en dos dimensiones. De este modo, se justifica el empleo de modelos tridimensionales para el estudio del comportamiento mecánico del hueso trabecular.

Los procedimientos de homogenización directo y asintótico en tres dimensiones son verificados y validados experimentalmente. Finalmente, los procedimientos desarrollados se aplican a modelos reconstruidos de hueso trabecular con el objeto de seleccionar el más adecuado para los propósitos de este trabajo. Además, se estudia y discute la influencia de la discretización sobre las propiedades elásticas aparentes y el error en la representación geométrica de los modelos reconstruidos. Sobre la base de estos resultados se identifica el tipo y orden de los elementos más apropiados para resolver los problemas de valor de contorno.

7.1. Modelos, verificación y presentación de este capítulo

Antes de utilizar los códigos implementados es necesario determinar si el modelo computacional representa adecuadamente al modelo matemático¹ subyacente y su solución. Este proceso se denomina verificación y está compuesto por dos partes: la verificación de los códigos que permite establecer la confianza de que el modelo matemático y sus algoritmos de solución funcionan correctamente y; la verificación de los cómputos mediante la cual se establece la confianza de que la solución numérica del modelo es precisa.

Existen numerosas técnicas para la verificar códigos, una lista y una descripción de las comúnmente utilizadas puede encontrarse en Collofelo (1988). En este

¹El modelo matemático incluye las ecuaciones, condiciones de contorno, y demás datos necesarios para describir matemáticamente el *modelo conceptual*. El modelo conceptual está constituido por las hipótesis y descripciones de los procesos físicos que representan el comportamiento mecánico de la *realidad de interés*, en nuestro caso el hueso trabecular.

trabajo, los códigos de homogenización implementados se verificaron mediante la comparación con soluciones analíticas. En particular se utilizan dos casos: una celda de material lineal elástico, homogéneo e isótropo de propiedades conocidas y, un material bifásico cuya solución analítica es conocida para el caso unidimensional.

En cuanto a la verificación de los cómputos, y puesto que en este trabajo se emplean programas comerciales de elementos finitos (Abaqus 6.9, 2009), el error que debemos analizar es el de discretización. Un aspecto importante a tener en cuenta es, que cuando se construyen modelos a partir de imágenes microtomográficas (microTC), las diferencias entre las geometrías reales y del modelo discretizado afectan las estimaciones de las propiedades elásticas aparentes.

Si bien todo código necesita ser verificado, no se pretende presentar un Plan de Verificación y Validación (Schwer, 2007), sino utilizar esta necesidad como introducción al estudio y cómputo de casos reales en forma pedagógica, desde los caso más sencilos hasta los más complejos. En lo que sigue, se presentan casos de estudio cada vez más complejos, que constituyen etapas para el desarrollo de los modelos computacionales del hueso trabecular. El capítulo finaliza con conclusiones referidas tanto a los aspectos técnicos de la implementación que no fueron no discutidos en los capítulos anteriores, como a los relacionados con las propiedades del hueso trabecular estimadas mediante ambos método de homogenización.

7.2. Selección del tipo de elemento

En el Cap. 4 se demostró las ventajas de emplear elementos hexaédricos sobre los tetraédricos en virtud de la representación geométrica. Además, se enunciaron las ventajas que los primeros poseen sobre los últimos desde un punto estrictamente numérico (Sec. 4.5.3). Sin embargo, los elementos hexaédricos pueden ser de primer o de segundo orden que, a su vez, pueden ser de integración completa, reducida o elementos con modos incompatibles. En los párrafos siguientes se analizará y justificará la elección de los elementos empleados en el resto del trabajo.

Los elementos de primer orden funcionan bien salvo cuando existen esfuerzos de flexión. En este último caso, la práctica recomendada es emplear elementos de segundo orden. Puesto que la flexión es un mecanismo importante en la deformación de una muestra de hueso trabecular (van Rietbergen et al., 1995), en principio, parece que la elección del orden de los elementos resulta simple. Puesto que los modelos en los cuales se emplean pasos distintos poseen geometrías diferentes, y que para una misma capacidad de cómputo siempre es posible usar mallas más densas con elementos de primer orden, la selección del orden de los elementos se ve afectada por el compromiso entre favorecer una mayor resolución geométrica o una mayor calidad de la solución.

En cuanto a la elección de elementos con integración completa o reducida, los últimos presentan la ventaja de un menor tiempo de cómputo, una característica deseable considerando el gran número de grados de libertad en los RVE. La precisión de la solución que se obtiene utilizando elementos de segundo orden con integración reducida es siempre superior a la que se obtiene con los elementos homólogos de integración completa (Simulia, 2010). Esto constituye un elemento más a favor de los primeros, pero determinar cuán buena es esta solución frente a los elementos de primer orden o cuál es la densidad de la malla a emplear con estos últimos para obtener resultados de idéntica precisión depende del problema.

La precisión alcanzada para elementos de primer orden con integración completa o reducida depende de la naturaleza del problema. Esto se debe a que los elementos de primer orden con integración reducida pueden presentar hourglassing² (Sun, 2006). En Abaqus, tales elementos tienen control de houglassing pero deben usarse con mallas finas y mantener la energía disipada en "*compensar*" este fenómeno en un valor bajo. Los elementos con integración completa, en cambio, no presentan hourglassing pero pueden bloquear³ la solución por corte.

Los elementos con modos incompatibles son elementos de primer orden formulados para tener un mejor desempeño ante la flexión respecto de los elementos estándar de primer orden. Sus ventajas son evidentes sólo cuando las mallas son regulares. Computacionalmente son más costosos que los de primer orden pero bastante más económicos que los de segundo orden. Por utilizar integración reducida no poseen hourglassing (Simulia, 2010). Sin embargo, en estos elementos pueden ocurrir solapamientos o huecos entre elementos adyacentes. Este comportamiento o incompatibilidad disminuye junto con el tamaño de los elementos debido a que estos se aproximan a un estado de deformación constante conforme la discretización se vuelve mas densa (Cook, 1995). No obstante, su comportamiento es difícil de evaluar *a priori*.

En función de la discusión anterior, las ventajas de los elementos de segundo orden con integración reducida (C3D20R) resultan evidentes frente a los elementos de integración completa. La selección entre los elementos de primer orden es más compleja. Sin embargo, descartando a los elementos con modos incompatibles, la selección se vuelca en favor de los elementos de integración reducida (C3D8R) puesto que no poseen bloqueo, tienen un menor tiempo de cómputo y resulta sencillo determinar si existe o no hourglassing ante flexión. Por motivos similares a los anteriores, en problemas de dos dimensiones, resulta conveniente también emplear elementos con integración reducida.

Debido a la influencia del tamaño de paso sobre la representación geométrica del hueso trabecular, la decisión acerca del orden de los elementos a emplear para idéntica capacidad de cómputo resulta de un compromiso entre la necesidad de una mejor representación geométrica o una mejor representación del campo de desplazamientos. Esto se discutirá considerando algunos aspectos morfológicos en las secciones siguientes.

 $^{^{-2}}$ Un modo de deformación que posee energía cero que, por lo tanto, no tiene sentido físico.

³El bloqueo por corte ocurre debido la imposibilidad de curvarse de estos elementos. El bloqueo volumétrico también es posible, pero sólo ocurre en materiales (casi) incompresibles que no son objeto de este trabajo.

7.3. Verificación de las herramientas computacionales 2D

Los procedimientos y las herramientas implementadas para el método de homogenización directo se aplicaron a dos casos particulares a saber: una muestra de material homogéneo lineal elástico e isótropo y, una barra de material bifásico. Las propiedades mecánicas de ambos casos se reportan en la Tabla 7.1. La Figura 7.1 muestra un esquema del segundo donde se aprecia que el volumen de la muestra está constituido por partes iguales de cada fase.

Propiedad	Homogéneo	Bifásico	
		Material 1	Material 2
Módulo de Young	$1000 {\rm ~Mpa}$	1000 Mpa	100 Mpa
Coeficiente de Poisson	$0,\!3$	$0,\!3$	$0,\!3$

Barra de material bifásico sometida a tracción longitudinal Discretización de la celda de material bifásico 2D b b c l₁ l₂ Celda elemental de material bifásico 1D

Tabla 7.1: Propiedades de los materiales empleados

Figura 7.1: Modelos bifásicos: (a) barra, (b) celda 2D, (c) celda 1D.

7.3.1. Métodos

El método de verificación empleado en este trabajo es el de comparación con soluciones analíticas. Para la barra de material bifásico (caso unidimensional), la solución analítica del módulo de elasticidad aparente en la dirección del apilamiento es igual a

$$\overline{E} = \frac{(l_1 + l_2) \ E_1 \ E_2}{l_1 \ E_2 + l_2 \ E_1}.$$
(7.1)

Los problemas de valor de contorno del caso homogéneo fueron resueltos empleando elementos triangulares de segundo orden, mientras que para el caso del material bifásico se emplearon elementos triangulares de primer orden. Ambos casos fueron resueltos tanto en tensión como en deformación plana usándose tracciones y desplazamientos en el contorno respectivamente. En todos los problemas se computó el tensor de elasticidad a partir del post-procesamiento de las deformaciones y de las tensiones en el centroide de cada elemento.

Si bien existirán discrepancias entre los valores computados mediante el método de homogenización directo con una u otra condición de contorno y la solución analítica, las propiedades deben encontrarse entre las cotas de Reuss y Voigt.

7.3.2. Resultados

Los resultados se muestran en términos de las matrices constitutivas, **E**, a partir de las cuales es posible determinar el valor de los módulos de elasticidad y coeficientes de Poisson.

Los resultados obtenidos para el material homogéneo fueron los siguientes:

- 1. En tensión plana y aplicando tracciones uniformes al contorno
 - post-procesando tensiones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1098, 901099 & 329, 670330 & 5, 659335 \ 10^{-21} \\ 329, 670330 & 1098, 901099 & -1, 957824 \ 10^{-20} \\ -5, 898327 \ 10^{-21} & -8, 890509 \ 10^{-21} & 384, 615385 \end{bmatrix} [MPa].$$

post-procesando deformaciones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1098, 901099 & 329, 670330 & 1, 653408 & 10^{-20} \\ 329, 670330 & 1098, 901099 & -8, 998878 & 10^{-20} \\ -1, 011357 & 10^{-20} & -8, 502093 & 10^{-21} & 384, 615385 \end{bmatrix} [MPa].$$

- 2. En deformación plana y aplicando desplazamientos lineales al contorno
 - post-procesando tensiones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1346, 153846 & 576, 923077 & -1, 755417 \ 10^{-27} \\ 576, 923077 & 1346, 153846 & -4, 673372 \ 10^{-27} \\ 4, 639967 \ 10^{-28} & 1, 809477 \ 10^{-28} & 384, 615385 \end{bmatrix} [MPa].$$

post-procesando deformaciones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1346, 153846 & 576, 923077 & 2, 948447 \ 10^{-28} \\ 576, 923077 & 1346, 153846 & 1, 762000 \ 10^{-27} \\ -1, 094308 \ 10^{-28} & 1, 807438 \ 10^{-28} & 384, 615385 \end{bmatrix} [MPa].$$

De un modo análogo al anterior se reportan los resultados obtenidos para el caso del material bifásico:

- 1. En tensión plana y aplicando tracciones uniformes al contorno
 - post-procesando tensiones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 199,800560 & 59,940068 & -1,008573 \ 10^{-11} \\ 59,940106 & 233,986529 & -3,937555 \ 10^{-6} \\ 4,582742 \ 10^{-7} & -1,917003 \ 10^{-7} & 69,930418 \end{bmatrix} [MPa]$$

• post-procesando deformaciones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 199,800541 & 59,940059 & -3,553312 \ 10^{-11} \\ 59,940103 & 233,986519 & -3,937502 \ 10^{-6} \\ 4,550695 \ 10^{-7} & -1,302868 \ 10^{-7} & 69,930425 \end{bmatrix} [MPa]$$

- 2. En deformación plana y aplicando desplazamientos lineales al contorno
 - post-procesando tensiones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 374, 431698 & 160, 470734 & -1, 136132\\ 160, 470718 & 673, 168817 & -0, 486920\\ -1, 136130 & -0, 486914 & 168, 923578 \end{bmatrix} [MPa]$$

post-procesando deformaciones

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 374, 431712 & 160, 470728 & -1, 136133\\ 160, 470735 & 673, 168764 & -0, 486917\\ -1, 136122 & -0, 486914 & 168, 923605 \end{bmatrix} [MPa]$$

La evaluación de las cotas Reuss y Voigt tiene sentido solamente para el caso del material bifásico. En tensión plana, las cotas de Reuss y Voigt son las siguientes

$$\mathbf{E}_{Reuss} = \begin{bmatrix} 199,800199800200 & 59,9400599400600 & 0\\ 59,9400599400600 & 199,800199800200 & 0\\ 0 & 0 & 69,9300699300699 \end{bmatrix} [MPa],$$
$$\mathbf{E}_{Voigt} = \begin{bmatrix} 604,395604395604 & 181,318681318681 & 0\\ 181,318681318681 & 604,395604395604 & 0\\ 0 & 0 & 211,538461538462 \end{bmatrix} [MPa].$$

En deformación plana las cotas son

$$\mathbf{E}_{Reuss} = \begin{bmatrix} 244,755244755245 & 104,895104895105 & 0\\ 104,895104895105 & 244,755244755245 & 0\\ 0 & 0 & 69,9300699300699 \end{bmatrix} [MPa],$$
$$\mathbf{E}_{Voigt} = \begin{bmatrix} 740,384615384615 & 317,307692307692 & 0\\ 317,307692307692 & 740,384615384615 & 0\\ 0 & 0 & 211,538461538462 \end{bmatrix} [MPa].$$

7.3.3. Discusión

Cuando se emplean tracciones y desplazamientos como condición de contorno se usan elementos de tensión y deformación plana respectivamente. Por este motivo, las matrices constitutivas \mathbf{E} computadas en uno y otro caso difieren, aún cuando se analiza un material homogéneo e isótropo.

Las componentes de las matrices halladas procesando tensiones o deformaciones para una misma condición de contorno son idénticas hasta la octava cifra significativa. Una concordancia superior se encontró al comparar las componentes simétricas entre si. Esto significa que, sin importar cuál es la condición de contorno, el tensor de elasticidad puede computarse empleando las tensiones o las deformaciones de los elementos.

Lo indicado en el párrafo anterior sólo implica que los resultados obtenidos postprocesando tensiones y deformaciones son consistentes, para verificar que los códigos estén libres de errores se verificaron los valores computados, los desplazamientos impuestos a los nodos de los vértices (desplazamientos impuestos al contorno), la ausencia de traslaciones (al usar tracciones como condición de contorno) y la ausencia de hourglassing.

Las matrices constitutivas de elasticidad y compliancia computadas para el caso del material homogéneo deben compararse con las expresiones determinadas analíticamente usando la primera de las expresiones (5.25) para los casos en tensión plana y, usando la primera de las expresiones (5.24) en aquellos en deformación plana. Los valores comparados componente a componente difieren a partir de la novena cifra significativa aún cuando la malla de elementos finitos es relativamente "gruesa". Los valores de las componentes cuyo valor numérico es cercano a cero pueden considerarse nulos a los fines prácticos, por cuanto están en un todo de acuerdo con los valores hallados analíticamente.

Para el caso del material bifásico, el módulo de elasticidad aparente determinado en forma analítica es igual a 181,8182 MPa mientras que los determinados en forma numérica⁴ usando el método directo fueron 184,4458 MPa en tensión plana y 336,1723 MPa en deformación plana.

Las diferencias entre los resultados obtenidos numéricamente considerando tensión o deformación plana fueron previamente discutidas en términos de las condiciones de contorno para el caso homogéneo. Los módulos de elasticidad determinados numéricamente se encuentran entre las cotas de Reuss y Voigt tanto en deformación como en tensión plana. Debido a que el material de la barra está sometido a un estado plano de tensiones, los valores determinados usando tracciones sobre el contorno y elementos de tensión plana presentan las menores diferencias respecto de la solución analítica.

 $^{^4}$ Una forma práctica de hallar el módulo elástico del material aparente es calcular la inversa del primer elemento de la matriz de compliancia.

7.4. Modelos idealizados de trabéculas óseas en 2D

El método de homogenización directo se aplicó a modelos idealizados de trabéculas óseas en dos dimensiones con el objeto de analizar la influencia de las condiciones de contorno, la geometría y el tamaño de las muestras sobre la matriz constitutiva aparente.

Las muestras están formadas por unidades repetidas o celdas. La celda del modelo poroso posee una geometría cuadrada con un hueco circular en el centro y está compuesta por 12300 elementos, mientras que la celda del modelo de trabécula en forma de rombo posee una fracción volumétrica igual a 31,66 % y está compuesta por 1472 elementos, Figura 7.2.



Figura 7.2: Muestra compuesta por 25 celdas y detalle de la celda elemental: (izq.) modelo poroso, (der.) modelo en rombo.

7.4.1. Métodos

A efectos de limitar la influencia de la malla sobre los resultados en los distintos tamaños de muestra, éstas se construyeron a partir de una celda individual previamente mallada. Las mallas se obtuvieron usando la herramienta de remallado adaptivo del software Abaqus imponiendo que el error uniforme de la densidad de energía fuese inferior al 5% (Simulia, 2010). El uso de esta herramienta limita el tipo de elementos a emplear. Para este trabajo se emplearon elementos triangulares de segundo orden tanto en deformación como en tensión plana.

Se empleó el método de homogenización directo aplicando desplazamientos uniformes al contorno. Las componentes de la matriz constitutiva aparente halladas para distintos tamaños de muestra fueron comparadas, para ello se construyeron modelos de 1, 2, 3, 4 y 5 celdas por lado. Debido al método de construcción, la fracción volumétrica de todas las muestras se mantuvo constante e idéntica a la de
la celda elemental que los compone.

En todos los casos, a efectos de emplear un programa de cálculo estándar y verificar que la condición de Hill (Ec. 5.27), el espacio entre las trabéculas, en adelante fase hueco, también fue mallado. Éste espacio se modeló como un material lineal, elástico, isótropo y compresible de módulo de Young despreciable frente al del tejido trabecular. Las propiedades mecánicas de ambas fases se reportan en la Tabla 7.2.

Propiedad	Tejido o hueso	Espacio hueco
Módulo de Young	$1000 { m Mpa}$	$10^{-5} {\rm Mpa}$
Coeficiente de Poisson	$0,\!3$	0

Tabla 7	7.2:	Propiedades	de	\log	materiales	empleados
---------	------	-------------	----	--------	------------	-----------

7.4.2. Resultados

En la Tabla 7.3 se resumen los resultados hallados para el modelo poroso en deformación plana, donde E_{ij} representa el valor de las componentes de la matriz constitutiva aparente. En la Tabla 7.4 se muestran los resultados para el modelo de trabécula en rombo. Dada la simetría de las matrices sólo se reportan los valores de la diagonal principal y por encima de esta.

Componente]	Número de celdas por lado							
[MPa]	1	2	3	4	5				
E_{11}	$120,\!433$	$115,\!325$	$113,\!658$	112,828	$112,\!336$				
E_{12}	$96,\!165$	$99,\!951$	$101,\!172$	$101,\!774$	102, 135				
E_{13}	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$				
E_{22}	$120,\!448$	$115,\!333$	$113,\!664$	$112,\!834$	$112,\!340$				
E_{23}	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$				
E_{33}	90,266	$90,\!072$	90,007	$89,\!973$	$89,\!956$				

Tabla 7.3: Componentes de la matriz constitutiva halladas mediante el método de homogenización directo, desplazamientos lineales en el contorno. Modelo poroso.

Componente]	Número de celdas por lado						
[MPa]	1	2	3	4	5			
E_{11}	194,491	$166,\!108$	$157,\!622$	$153,\!574$	$151,\!208$			
E_{12}	$43,\!108$	$24,\!484$	$19,\!591$	$17,\!397$	$16,\!163$			
E_{13}	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$			
E_{22}	$194,\!445$	$166,\!049$	$157,\!559$	$153,\!508$	$151,\!141$			
E_{23}	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$			
E_{33}	$68,\!870$	$22,\!414$	$13,\!126$	$9,\!694$	8,036			

Tabla 7.4: Componentes de la matriz constitutiva halladas mediante el método de homogenización directo, desplazamientos lineales en el contorno. Modelo en rombo.

La Figura 7.3 ilustra la variación de las componentes del tensor de elasticidad como función del número de celdas por lado para las componentes E_{11} , E_{22} y E_{33} de ambos modelos.



Figura 7.3: Componentes de la matriz constitutiva en función del número de celdas por lado, desplazamientos lineales en el contorno: modelo poroso (izq.), modelo en rombo (der.).

En las Tablas 7.5 y 7.6 se presentan los resultados hallados para ambos modelos considerando un estado de tensión plana, mientras que en la Figura 7.4 se grafican los resultados para las componentes E_{11} , E_{22} y E_{33} .

Componente	Número de celdas por lado							
[MPa]	1	2	3	4	5			
E_{11}	$49,\!921$	$64,\!502$	70,753	$79,\!931$	$85,\!341$			
E_{12}	$49,\!491$	$49,\!381$	$49,\!872$	$44,\!606$	41,745			
E_{13}	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$			
E_{22}	$49,\!926$	$64,\!503$	70,753	$79,\!931$	$85,\!341$			
E_{23}	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$	$0,\!000$			
E_{33}	$1,\!377$	$2,\!089$	$2,\!505$	2,781	$2,\!977$			

Tabla 7.5: Componentes de la matriz constitutiva halladas mediante el método de homogenización directo, tracciones uniformes en el contorno. Modelo poroso.

7.4.3. Discusión

Las componentes E_{13} y E_{23} son nulas en ambos casos, deformación y tensión plana, en ambos modelos. Estos resultados permiten inferir la existencia de simetrías que, a priori, se pueden intuir a partir de la geometría de los modelos idealizados evaluados. La simetría reportada en los tensores elásticos se debe al empleo de celdas repetitivas y a las direcciones empleadas para el cálculo de los casos de carga.

La condición de Hill fue satisfecha con diferencias inferiores al 5%. Además, se verificó que tanto los valores de las componentes simétricas como los de las componentes E_{11} y E_{22} fueran idénticos. Las mayores diferencias, quinta cifra significativa, se encontraron en el modelo poroso. Las discrepancias sólo desaparecieron cuando

Componente	Número de celdas por lado							
[MPa]	1	2	3	4	5			
E_{11}	$1,19 \ 10^{-4}$	$1,\!37 \; 10^{-4}$	$1,\!62\ 10^{-4}$	$1,88 \ 10^{-4}$	$2,16 \ 10^{-4}$			
E_{12}	$6,\!03\ 10^{-7}$	$7,\!53\ 10^{-7}$	$9,\!29 \ 10^{-7}$	$1,12 \ 10^{-6}$	$1,\!34\ 10^{-6}$			
E_{13}	$-4,88 \ 10^{-9}$	$-2,30\ 10^{-9}$	$-9,74\ 10^{-10}$	$-5,73 \ 10^{-10}$	$-4,59 \ 10^{-10}$			
E_{22}	$1,\!19\ 10^{-4}$	$1,\!37\;10^{-4}$	$1,\!62\ 10^{-4}$	$1,\!88\ 10^{-4}$	$2,\!16\ 10^{-4}$			
E_{23}	$4,\!88\ 10^{-9}$	$2,\!30\ 10^{-9}$	$9,72 \ 10^{-10}$	$5,71 \ 10^{-10}$	$4,\!68\ 10^{-10}$			
E_{33}	$4,70 \ 10^{-5}$	$5,19 \ 10^{-5}$	$6{,}03 \ 10^{-5}$	$6,\!97 \; 10^{-5}$	$7,98 \ 10^{-5}$			

Tabla 7.6: Componentes de la matriz constitutiva halladas mediante el método de homogenización directo, tracciones uniformes en el contorno. Modelo en rombo.



Figura 7.4: Componentes de la matriz constitutiva en función del número de celdas por lado, tracciones uniformes en el contorno: modelo poroso (izq.), modelo en rombo (der.).

se usaron mallas simétricas respecto de los dos ejes de simetría geométrica de la celda. Se concluyó que la asimetría inducida en la discretización durante el proceso de mallado adaptivo es la responsable principal de las diferencias observadas.

En deformación plana, las componentes de la matriz constitutiva de ambos modelos presentan una evolución suave conforme aumenta el número de celdas de las muestras analizadas. En el modelo poroso todas las componentes convergen hacia un valor menor "desde arriba". En el modelo en rombo, en cambio, la componente E_{11} converge "desde arriba" mientras que la componente E_{12} lo hace "desde abajo". Por su parte, la componente E_{33} permanece prácticamente constante. Resulta evidente que la tasa de convergencia es muy rápida y que se alcanza un plateau con muestras de 4 o 5 celdas por lado.

Hollister y Kikuchi (1992) analizaron el caso del modelo poroso con idéntica fracción volumétrica. Los autores obtuvieron tendencias similares a las reportadas en este trabajo salvo en el caso de la componente E_{12} .

En tensión plana, no se alcanza un plateau en ninguna de las muestras. Por otro lado, si bien las tendencias de cada componente son evidentes, los valores predichos para el modelo en rombo carecen de sentido. Esto se debe a que la celda elemental, y por lo tanto todas las muestras evaluadas, presentan fase hueco sobre el contorno, como consecuencia el trabajo de deformación de los elementos de la fase hueco no resulta despreciable frente al de los elementos de la fase hueso. Detalles de este efecto fueron discutidos en la Sec. 5.4.

A modo de resumen se puede indicar que las condiciones de contorno, tanto en tensión o deformación plana como empleando tracciones o desplazamientos sobre el contorno de la muestra, se obtienen respuestas aparentes diferentes. El tipo de condición de contorno impuesta por la formulación, esto es el tipo de elemento, fuerzan la utilización de tracciones (tensión plana) o desplazamientos (deformación plana) en el contorno para ser consistentes con la teoría del método de homogenización directo. En los casos analizados se observaron tendencias claras en la evolución de las componentes de las matrices constitutivas computadas y, para algunos modelos y condiciones de contorno, resulta al menos plausible determinar el valor al que convergen. Resulta evidente que con el método directo no se puede determinar apriori el tamaño de la muestra necesaria para alcanzar el plateau aún cuando se emplean celdas repetitivas (microestructuras periódicas). Probablemente el resultado más significativo es que, cuando los modelos poseen fase hueco sobre su contorno, las propiedades aparentes resultan fuertemente subestimadas. Por este motivo, en modelos de trabéculas óseas reales, que se estudian en la próxima sección, se deben usar desplazamientos lineales como condiciones de contorno para estimar el comportamiento elástico aparente.

7.5. Modelos de trabéculas 2D construidos a partir de imágenes de microTC

Se aplica el procedimiento de homogenización directa, considerando desplazamientos lineales en el contorno, a modelos bidimensionales (2D) de hueso trabecular construidos a partir de imágenes microtomográficas (microTC) con el objeto de observar la influencia del tamaño de la muestra sobre las propiedades mecánicas del material equivalente.

7.5.1. Métodos

Los modelos bidimensionales de trabéculas reales se obtuvieron a partir del procesamiento de imágenes obtenidas mediante microTC. La muestra, de aproximadamente $10 \times 9 \times 3$ mm, se tomó de una cabeza femoral de un adulto de 61 años (Perilli y Baruffaldi, 2003). La técnica de construcción de los modelos fue similar a la presentada en el Capítulo 4 pero, en este caso sólo se utilizó una malla de puntos en el plano de la imagen con el objeto de construir un modelo bidimensional.

A efectos de eliminar defectos provocados durante la preparación de la muestra sólo se aplicó el método de homogenización a la porción central de las imágenes. El tamaño de los píxeles y el espaciado tomográfico fue de 19,48 μ m. Se construyeron modelos cuadrados de 0,994 mm, 1,987 mm y 2,980 mm de lado por cada imagen,

ver Figura 7.5. Debido a que existe espacio hueco abierto sobre el perímetro de los modelos, se aplicó el método de homogenización directo utilizando únicamente desplazamientos lineales como condición de contorno.



Figura 7.5: Esquema de los tamaños de las muestras empleadas en una de las imágenes reconstruidas, izq. Detalle de la malla de elementos finitos empleada, der.

7.5.2. Resultados y discusión

Considerando los tamaños analizados y el sentido en el que se realizó la reconstrucción de las imágenes, prácticamente no existe conectividad entre las trabéculas ubicadas sobre lados opuestos de las muestras. Como consecuencia, las trabéculas se comportan como partículas rodeadas por un material compresible de muy bajo módulo de elasticidad e incapaz de tomar carga. Por este motivo no resultó posible estimar del módulo de elasticidad mediante los métodos implementados.

El espaciado intertrabecular de la muestra es de hasta 2,22 mm. Considerando los resultados de Harrigan et al. (1988) se necesitarían modelos de más de 11 mm por lado para que la hipótesis de medio continuo se satisfaga. Un modelo de ese tamaño incluirá regiones donde el espesor y el arreglo trabecular difieren significativamente. Además, el tamaño del modelo requerido es mayor que el tamaño de la muestra tomografiada.

Pese a la falta de conectividad detectada en modelos bidimensionales resulta evidente que el tejido trabecular forma una estructura interconectada en tres dimensiones. Por esta razón, el empleo de modelos tridimensionales para el estudio de la respuesta mecánica del hueso trabecular resulta mandatorio.

7.6. Verificación de las herramientas computacionales 3D

Siguiendo un protocolo similar al empleado para la verificación de los códigos y cómputos en dos dimensiones, los procedimientos y las herramientas implementadas se aplicaron a una muestra de material homogéneo lineal elástico e isótropo, a un modelo de material bifásico y a un material perforado con un arreglo rectangular, ver Figura 7.6.



Figura 7.6: Detalles de las mallas de elementos finitos de los modelos tridimensionales empleados para la verificación de las herramientas computacionales. De izquierda a derecha: prisma de material homogéneo, material bifásico y material perforado.

7.6.1. Métodos

A efectos de generalidad, para la solución del modelo de material homogéneo se empleó un modelo prismático de $2 \times 3 \times 4$ elementos hexaédricos. Si los programas no poseen errores lógicos ni de programación, los tensores de elasticidad obtenidos con ambos métodos de homogenización deben ser idénticos a los del material homogéneo dado por la ecuación (5.22) considerando un módulo de elasticidad E= 1000 MPa y un coeficiente de Poisson $\mu = 0, 3$.

El modelo de material bifásico se empleó para comparar el módulo de elasticidad aparente, computado a partir de los resultados obtenidos mediante el método de homogenización directo, con el determinado analíticamente en la dirección del apilamiento. Para ello se usó un modelo cúbico construido con 1000 elementos hexaédricos. Las propiedades asignadas a ambos materiales fueron las empleadas para el caso bifásico bidimensional, Tabla 7.1

El modelo del material perforado fue seleccionado para que el modelo discretizado tenga exactamente la misma geometría que el modelo idealizado, de esta forma se excluye del análisis al error en la representación de la geometría. Los resultados hallados mediante el método de homogenización asintótica fueron contrastados con los determinados utilizando el código PREMAT (Guedes y Kikuchi, 1989). Las propiedades mecánicas asignadas fueron idénticas a las asignadas a las fases hueso y espacio hueco en los modelos bidimensionales de trabéculas idealizadas reportadas en la Tabla 7.2. Los modelos fueron discretizados usando elementos hexaédricos de ocho nodos (lineales o de primer orden) con integración reducida. El tensor de elasticidad aparente se computó post-procesando las deformaciones en el centroide de los elementos.

7.6.2. Resultados

Material homogéneo

Los tensores de elasticidad C_{ij} determinados mediante los métodos de homogenización directo (usando desplazamientos lineales como condición de contorno) y asintótico son

$$C_{ij}^{Dd} = \begin{bmatrix} 1346, 1538 & 576, 9231 & 576, 9231 & 2, 6 \cdot 10^{-30} & 1, 8 \cdot 10^{-30} & -7, 4 \cdot 10^{-30} \\ 576, 9231 & 1346, 1538 & 576, 9231 & 2, 6 \cdot 10^{-31} & 8, 3 \cdot 10^{-30} & -3, 5 \cdot 10^{-30} \\ 576, 9231 & 576, 9231 & 1346, 1538 & 2, 6 \cdot 10^{-31} & 4, 7 \cdot 10^{-30} & -3, 3 \cdot 10^{-30} \\ 2, 6 \cdot 10^{-31} & -5, 2 \cdot 10^{31} & 1, 9 \cdot 10^{-31} & 384, 6 \cdot 154 & 7, 9 \cdot 10^{-31} & 2, 1 \cdot 10^{-30} \\ -3, 8 \cdot 10^{-31} & 9, 8 \cdot 10^{-31} & -4, 2 \cdot 10^{-30} & 1, 5 \cdot 10^{-30} & 384, 6 \cdot 154 & -2, 6 \cdot 10^{-31} \\ 4, 7 \cdot 10^{-30} & 3, 3 \cdot 10^{-31} & 2, 1 \cdot 10^{-30} & 3, 1 \cdot 10^{-30} & 1, 6 \cdot 10^{-30} & 384, 6 \cdot 154 \end{bmatrix},$$

$$C_{ij}^{A} = \begin{bmatrix} 1346, 1538 & 576, 9231 & 576, 9231 & -1, 3\ 10^{-29} & 2, 9\ 10^{-29} & -3, 4\ 10^{-29} \\ 576, 9231 & 1346, 1538 & 576, 9231 & -4, 7\ 10^{-30} & 2, 1\ 10^{-29} & 8, 4\ 10^{-30} \\ 576, 9231 & 576, 9231 & 1346, 1538 & -4, 2\ 10^{-30} & 1, 3\ 10^{-29} & 1, 7\ 10^{-29} \\ 1, 0\ 10^{-29} & 1, 1\ 10^{-29} & -6, 3\ 10^{-30} & 384, 6154 & -8, 4\ 10^{-30} & 3, 1\ 10^{-30} \\ -6, 3\ 10^{-30} & 1, 1\ 10^{-29} & 2, 5\ 10^{-29} & -3, 1\ 10^{-30} & 384, 6154 & -1, 3\ 10^{-29} \\ -2, 3\ 10^{-29} & -1, 1\ 10^{-30} & -2, 5\ 10^{-29} & 1, 7\ 10^{-29} & -4, 2\ 10^{-30} & 384, 6154 \end{bmatrix},$$

respectivamente. Donde las componentes de los tensores se expresan en MPa, unidad que se utilizará en el resto de la sección.

El tensor de elasticidad C_{ij} del material homogéneo computado analíticamente mediante la expresión (5.22) es

	1346, 1538	576,9231	576,9231	0	0	0]	
	576,9231	1346, 1538	576,9231	0	0	0	
CAnalit	576,9231	576,9231	1346, 1538	0	0	0	
$C_{ij} \equiv$	0	0	0	384,6154	0	0	
	0	0	0	0	384,6154	0	
	0	0	0	0	0	384,6154	

Material bifásico

Para el material bifásico se determinó el módulo de elasticidad aparente en la dirección del apilamiento mediante la expresión (7.1). El valor determinado de este modo fue $\overline{E} = 181,818$ MPa.

Los tensores de elasticidad aparente C_{ij} computados mediante los métodos de homogenización directo son:

1. aplicando tracciones uniformes al contorno

$$C_{ij}^{Dt} = \begin{bmatrix} 277,1517 & 110,3299 & 104,8951 & 1,110^{-17} & 3,410^{-15} & 2,710^{-14} \\ 110,3299 & 277,1517 & 104,8951 & 0,0000 & 5,810^{-14} & -1,410^{-14} \\ 104,8951 & 104,8951 & 244,7552 & -7,110^{-18} & -3,710^{-14} & -3,610^{-14} \\ -1,310^{-18} & -4,410^{-19} & -1,210^{-18} & 83,8007 & 5,610^{-14} & 2,910^{-14} \\ -9,810^{-18} & 3,510^{-16} & -4,610^{-17} & -3,210^{-17} & 69,9301 & -4,010^{-14} \\ -4,010^{-15} & 2,410^{-17} & -3,410^{-17} & -1,110^{-17} & -2,910^{-14} & 69,9301 \end{bmatrix}$$

2. aplicando desplazamientos lineales al contorno

$$C_{ij}^{Dd} = \begin{bmatrix} 686, 8655 & 263, 7886 & 192, 4299 & 4, 9 \, 10^{-15} & -2, 0 \, 10^{-16} & -1, 8 \, 10^{-14} \\ 263, 7886 & 686, 8655 & 192, 4299 & 3, 1 \, 10^{-15} & 2, 4 \, 10^{-16} & -3, 4 \, 10^{-16} \\ 192, 4299 & 192, 4299 & 449, 0030 & 6, 9 \, 10^{-15} & -2, 1 \, 10^{-16} & 1, 0 \, 10^{-15} \\ 4, 4 \, 10^{-17} & 2, 6 \, 10^{-17} & -4, 3 \, 10^{-17} & 211, 5385 & -9, 6 \, 10^{-16} & -1, 3 \, 10^{-16} \\ -2, 8 \, 10^{-16} & 7, 8 \, 10^{-17} & 8, 5 \, 10^{-17} & 8, 8 \, 10^{-14} & 177, 0882 & 7, 1 \, 10^{-18} \\ 9, 1 \, 10^{-15} & 6, 9 \, 10^{-14} & -1, 7 \, 10^{-14} & 8, 1 \, 10^{-14} & 1, 1 \, 10^{-17} & 177, 0882 \end{bmatrix}.$$

A partir de los tensores de elasticidad computados se determinó el módulo de elasticidad aparente. Los valores hallados fueron 187,9630 y 371,1003 MPa considerando tracciones uniformes y desplazamientos lineales como condición de contorno respectivamente.

Modelo de material perforado

El procedimiento de homogenización asintótica descrito en el Cap. 6 fue aplicado a un modelo de material perforado. El tensor de elasticidad determinado es

	233, 3918	23,9344	77,1981	$1,210^{-11}$	$-2,410^{-14}$	$8,110^{-12}$	1
	23,9344	233, 3918	77,1981	$2,710^{-12}$	$-3,710^{-14}$	$7,310^{-12}$	
C^A _	77, 1978	77, 1978	412,8328	$3,410^{-12}$	$-1,410^{-13}$	$6,110^{-12}$	
$C_{ij} \equiv$	$-1,510^{-12}$	$1,010^{-11}$	$1,710^{-15}$	5,6844	$2,610^{-15}$	$-4,810^{-12}$	·
	$1,110^{-14}$	$-7,810^{-15}$	$-2,410^{-12}$	$1,710^{-12}$	83,2387	$-1,810^{-13}$	ĺ
	$-5,910^{-13}$	$1,610^{-12}$	$-1,110^{-12}$	$7,510^{-12}$	$1,310^{-16}$	83,2387	

Una geometría idéntica fue resuelta usando el programa PREMAT. El tensor de elasticidad determinado mediante es

$$C_{ij}^{PREMAT} = \begin{bmatrix} 234,8923 & 24,6633 & 77,8667 & 0,9\,10^{-16} & -0,6\,10^{-16} & 0,6\,10^{-13} \\ & 234,892 & 77,8667 & -0,8\,10^{-16} & 0,2\,10^{-17} & 0,4\,10^{-13} \\ & 413,722 & 0,4\,10^{-15} & -0,3\,10^{-16} & 0,3\,10^{-13} \\ & & 83,5567 & -0,7\,10^{-15} & -0,1\,10^{-15} \\ & & & 83,5567 & 0,1\,10^{-15} \\ & & & 5,94867 \end{bmatrix}$$

En la expresión anterior se hace explícito que el tensor es simétrico. Por este motivo, la salida del programa PREMAT sólo reporta las componentes en la diagonal principal y por sobre esta.

7.6.3. Discusión

Para el caso del material homogéneo, los tensores de elasticidad determinados mediante los métodos de homogenización difieren en la décimo sexta cifra significativa respecto del tensor de referencia computado analíticamente.

En el caso del material bifásico se obtuvieron diferencias entre las predicciones del método directo considerando tracciones uniformes o desplazamientos lineales como condición de contorno. El módulo de elasticidad computado considerando tracciones uniformes en el contorno difiere en un 3,38 % del valor computado analíticamente. Esta diferencia se atribuye a la aproximación del modelo mediante elementos finitos y puede ser reducida empleando un número mayor de elementos, esto es, refinando la malla. Usando desplazamientos lineales como condición de contorno se obtiene un módulo de elasticidad 2,04 veces mayor al determinado analíticamente.

Aunque en un caso general no puede determinarse a priori cuál será la diferencia entre los resultados obtenidos usando tracciones o desplazamientos como condición de contorno, los valores determinados deben encontrarse entre las cotas superior e inferior de Voigt y Reuss. Estos últimos valores son 550 y 181,818 MPa respectivamente. En este sentido, la cota inferior de Reuss coincide con el valor determinado analíticamente mientras que los valores determinados usando tracciones y desplazamientos como condición de contorno se encuentran entre las cotas.

El procedimiento de homogenización asintótica se evaluó mediante la comparación con los resultados de un reconocido programa, PREMAT. La diferencia entre los tensores de elasticidad⁵ determinados en términos del mayor valor singular o norma es de tan solo 0,413 %⁶. Sin embargo, es necesario observar que: el programa PREMAT usa elementos lineales de 8 nodos con integración completa mientras que en el procedimiento desarrollado se emplean elementos de integración reducida, por cuanto las estimaciones del primero tienden a ser más rígidas y; si bien se usaron mallas densas, no se efectuó un estudio de convergencia. En la siguiente sección se efectuará un análisis de convergencia de los resultados sobre modelos de geometrías óseas reales.

Los procedimientos desarrollados permiten calcular el tensor de elasticidad completo, de hecho la simetría de los tensores fue usada con propósitos de verificación. En el método directo se obtuvieron diferencias insignificantes entre las componentes simétricas, típicamente a partir de la novena cifra significativa, mientras que con el método asintótico se obtuvieron diferencias a partir de la quinta cifra significativa.

 $^{^5\}mathrm{Rigurosamente}$ la notación de Voigt permite representar al tensor de elasticidad como una matriz y no un tensor.

⁶Las componentes C_{44}^0 y C_{66}^0 computadas mediante el procedimiento de homogenización asintótica y PREMAT están permutadas debido a que ε_{31}^0 y ε_{12}^0 , empleadas para el cómputo del tensor de localización **M**, están permutadas también. Esto no altera los resultados ni las conclusiones de este trabajo.

Si bien la precisión alcanzada es suficiente a los efectos prácticos, es necesario identificar la naturaleza o fuente principal de esta diferencia que, en teoría, no debería existir.

No hay una única causa de estas diferencias en precisión pero existe una que puede considerarse como raíz. Las menores diferencias entre los pares de componentes simétricos se obtuvieron en C_{12} - C_{21} . De la observación de la Fig. 7.6 se concluye que el menor error se encuentra en el sentido del caso de carga $\varepsilon_{ij}^{0^{12}}$, donde la única condición de contorno en términos de los desplazamientos se aplica sólo a una fase y no existen desplazamientos de los nodos en las direcciones perpendiculares al plano x-y. De este modo, las distorsiones de los elementos no son significativas incluso en regiones donde existe un cambio de fase. En los demás casos de carga al corte se producen distorsiones en los elementos. Las deformaciones y/o tensiones empleadas para computar los tensores de localización se calculan a partir de tales desplazamientos provocando las discrepancias observadas. De este modo, la geometría del modelo bajo estudio influye en la precisión de los resultados.

Se espera que en el estudio del hueso trabecular, donde existe fase tejido y hueco en el contorno, se obtengan discrepancias en todas las componentes simétricas. Cuando se emplean condiciones de contorno periódicas, los elementos se distorsionan más que cuando se emplean desplazamientos lineales como condición de contorno en presencia de múltiples fases sobre las superficies de las muestras.

Los resultados obtenidos permitieron verificar los códigos y cómputos realizados con las herramientas computacionales implementadas. Los casos presentados constituyen elementos de prueba que permiten confiar en las predicciones de las herramientas computacionales implementadas.

7.7. Validación de los modelos

Mediante la verificación determinamos si el modelo computacional representa adecuadamente al modelo matemático usado para describir el modelo conceptual del problema bajo estudio. Sin embargo, en ningún momento se indicó si modelo conceptual representa adecuadamente el proceso físico de la realidad de interés. Para esta evaluación se utiliza el proceso de validación (Schwer, 2007).

El proceso de validación consiste en evaluar la capacidad predictiva de los modelos matemáticos y conceptuales mediante la comparación de los resultados de las predicciones de un modelo computacional con los de uno o varios experimentos de validación.

Con este propósito, en este trabajo se emplearon ensayos uniaxiales en probetas de PMMA agujereadas y la técnica de *correlación de imágenes digital en dos dimensiones* (DIC 2D)⁷.

⁷Actividades realizadas por el alumno Lucas Collabella en el marco de su trabajo final de Ingeniería Electromecánica (UNMdP).

7.7.1. Métodos

Procedimiento experimental

Se confeccionaron probetas de tracción no estándar en acrílico colado comercial de 2,4 mm de espesor. Una región de la longitud calibrada de las probetas fue perforada con agujeros de diámetro $\phi = 6,37$ mm separados por una distancia igual a 10,67 mm, ver Figura 7.7.



Figura 7.7: Detalle de la geometría de las probetas empleadas y región de interés.

Las probetas agujereadas fueron sometidas a ensayos de tracción uniaxial en una máquina de ensayos universal Instron 4467, Figura 7.8, a una velocidad de 1 mm/minuto. La carga se registró empleando una celda de 30 KN y la deformación se midió empleando la técnica de correlación de imágenes digital en dos dimensiones, DIC 2D (Pan et al., 2009).



Figura 7.8: Máquina de ensayos universal Instron 4467.

La técnica DIC 2D es un método óptico no interferométrico empleado en mecánica de sólidos para medir los desplazamientos y, a partir de ellos, la deformación superficial. Es un método de campo completo que, a diferencia de los métodos puntuales como el de medición mediante extensómetros de resistencia variable o *strain* gauges, provee del campo completo de desplazamientos y deformaciones de una superficie mediante la comparación de la superficie en dos estados, el de referencia (típicamente sin carga) y el deformado. A efectos de efectuar la medición mediante DIC 2D, la superficie de las probetas fue salpicada con gotas en forma de puntos oscuros usando pintura en aerosol. Una vez calibrado el sistema se tomaron fotografías de la región de interés (cuadro rojo en Fig. 7.7) usando una cámara Canon EOS Rebel XSI, en la configuración de referencia y durante la carga. Los desplazamientos de los puntos se computaron usando una grilla virtual, más pequeña que la región de interés, para obtener el campo de deformación total. A partir del campo de desplazamientos se computó el estado de deformaciones aparente en la dirección del eje axial de la probeta como promedio de las deformaciones superficiales en la región de interés (Colabella, 2011). Con esta información y el registro de carga se construyó un diagrama de carga en función del desplazamiento a partir del cual se determinó el módulo de elasticidad del material aparente. En ensayos preliminares, usando probetas estándar y extensómetros de clip, se determinó que el error en la determinación del campo desplazamientos mediante DIC 2D es inferior al 4 %.

Procedimiento computacional

La geometría de una celda fue reconstruida simulando la adquisición de un microtomógrafo. Para ello se implementó un programa en MatLab que genera imágenes en blanco y negro en formato .tif y se construyó el modelo empleando el procedimiento descrito en el Cap. 4. La fracción volumétrica del material de la matriz en la celda es 0,720 mientras que la del modelo reconstruido con 132651 elementos fue 0,697. En la Figura 7.9 se muestra una de las imágenes empleadas en la reconstrucción y el modelo de elementos finitos de la celda.



Figura 7.9: Detalles una de las imágenes empleada en las reconstrucciónes y perspectiva del modelo resultante.

Los métodos de homogenización directo y asintótico fueron aplicados al modelo de la celda reconstruida y, a partir del tensor de elasticidad computado, se determinó el módulo de elasticidad aparente. Las propiedades elásticas asignadas al modelo se determinaron experimentalmente mediante ensayos de tracción en probetas estándar de PMMA y se presentan en la Tabla 7.7.

Propiedad	Matriz	Hueco
Módulo de Young	2404,6 MPa	10^{-5} MPa
Coeficiente de Poisson	$0,\!25$	0

Tabla 7.7: Propiedades de los materiales empleados

7.7.2. Resultados

Para el análisis experimental se emplearon tres probetas perforadas, una de las curvas de carga construidas se muestra en la Figura 7.10. Usando un ajuste lineal de la porción central de la curva se determinó que el módulo de elasticidad aparente del compuesto PMMA-perforaciones en cada una de las probetas. El valor promedio resultó igual a 1208,89 MPa y el promedio de las desviaciones estándar igual a 16,2 MPa.



Figura 7.10: Curva de carga y ajuste lineal de una de las probetas.

El módulo de elasticidad determinado mediante el método de homogenización directo, usando desplazamientos lineales como condición de contorno, fue igual a 1253,25 MPA. Usando tracciones uniformes, el valor hallado fue de 457,76 MPa. Mientras que con el método asintótico se obtuvo 1176,05 MPa.

7.7.3. Discusión y conclusiones

Se determinó el módulo de elasticidad aparente de una placa perforada de PMMA en forma experimental y mediante métodos de homogenización con propósitos de validación.

Los valores del módulo de elasticidad hallados experimentalmente están acotados por los determinados mediante el método directo. Cuando se emplean desplazamientos lineales como condición de contorno el módulo de elasticidad estimado resulta un 3,7 % mayor que el valor hallado experimentalmente. En cambio, cuando se emplean tracciones uniformes, el módulo de elasticidad resulta subestimado en un 62 %. Esta última discrepancia merece un comentario adicional. Si bien las probetas fueron sometidas a un ensayo uniaxial, estado que en principio parece asemejarse más al caso en que las condiciones de contorno son tracciones uniformes en lugar de desplazamientos lineales, numéricamente se sólo ensayó una celda. Por estos motivos la formación de cinturas o estricción, no está limitada por el material adyacente como en la probeta verdadera. De este modo, el material tiene un comportamiento notablemente menos rígido que la realidad. Este efecto podría compensarse empleando más celdas unitarias en el modelo computacional, tal como se realizó durante el análisis de modelos idealizados de trabéculas en dos dimensiones en la Sec. 7.4.

El módulo de elasticidad hallado mediante el método de homogenización asintótico también se encuentra entre las cotas impuestas por los resultados del método directo, y difieren en menos del 3 % del valor hallado experimentalmente.

En función del análisis precedente se concluye que los modelos matemáticos y conceptuales son adecuados para representar la realidad de interés.

7.8. Modelos de trabéculas 3D construidos a partir de imágenes de microTC

En esta sección se determina el tensor de elasticidad de muestras de hueso trabecular mediante los procedimientos descritos en los Cap. 5 y 6. Se analiza el efecto del método de construcción de los modelos de elementos finitos (Cap.4) sobre los resultados obtenidos. Además, se estudia la influencia de la discretización, en particular el orden y el tamaño de los elementos, sobre las propiedades elásticas aparentes de las muestras analizadas. Los resultados obtenidos mediante los métodos de homogenización directo y asintótico son comparados y analizados.

7.8.1. Métodos

Para la construcción de los modelos tridimensionales de la microestructura del hueso trabecular se emplearon los estudios microtomográficos de las *Muestras 1 y 2* descritos en el Cap. 4, donde también se detalló el procedimiento de construcción de los modelos de elementos finitos. Los modelos usados fueron aquellos con el menor error de discretización geométrico (ED), es decir, aquellos en los cuales la diferencia entre la fracción volumétrica ósea (FV) fue menor respecto del valor de referencia (FVR).

La calidad de la solución de los problemas de valor de contorno obtenida con elementos de primer y segundo orden afecta las estimaciones de los tensores de elasticidad. Se estudió este efecto en los modelos de la *Muestra 1* utilizando el método de homogenización directo. Esta muestra fue seleccionada dado su menor tamaño, por cuando su estudio resulta computacionalmente más económico que el de la *Muestra 2*; y por su baja relación *espesor trabecular/tamaño de los elementos* que la hace más sensible al tipo de elemento. El resto de los casos de estudio fue analizado empleando elementos hexaédricos lineales. Se comparan los resultados obtenidos en las dos muestras mediante ambos métodos de homogenización; se analiza el efecto del tamaño de paso, y por lo tanto de la discretización, sobre las propiedades aparentes halladas. Las comparaciones se efectúan en términos la norma del tensor de elasticidad aparente.

7.8.2. Resultados

Las fracciones volumétricas de referencia (FVR) computadas para las *Muestras* 1 y 2 fueron 0,177 y 0,506 respectivamente. En las Tablas 4.1 y 4.2 (Cap. 4) se resumieron los datos de los modelos de elementos finitos. Sólo por conveniencia, en las Tablas 7.8 y 7.9 se transcriben los datos de los modelos. Para cada modelo se indica: el tipo de elemento y la fase priorizada durante la asignación de propiedades mecánicas a los elementos, el número de nodos usando elementos lineales, el número de elementos de la fase hueso, el total de elementos, la fracción de volumen óseo o de fase hueso (FV), el error de discretización geométrico (ED) y el índice IG.

Paso	Tipo Elem.	Nro.	Nro. Eler	n. Nro. Total	\mathbf{FV}	\mathbf{ED}	IG
	y Fase	\mathbf{Nodos}	Hueso	Elementos		[%]	[%]
06	Hexaedros/hueso	46225	7767	42336	$0,\!1835$	3,26	15,12
05	Hexaedros/hueso	81120	13757	75429	$0,\!1824$	$2,\!69$	$10,\!56$
04	Hexaedros/hueso	155648	26687	146853	$0,\!1817$	$2,\!34$	7,48
03	Hexaedros/hueso	369800	63992	354025	$0,\!1807$	$1,\!82$	5,25

Tabla 7.8: Resumen de los datos de los Modelos de la Muestra 1.

Paso Tipo Elem.		Nro.	Nro. Eler	n.Nro. Total	\mathbf{FV}	\mathbf{ED}	IG
	y Fase	\mathbf{Nodos}	Hueso	Elementos		[%]	[%]
18	Hexaedros/hueco	74088	32969	68921	$0,\!4784$	-5,73	-14,60
15	Hexaedros/hueco	132651	60228	125000	$0,\!4818$	$-4,\!96$	$-12,\!09$
11	Hexaedros/hueco	328509	153347	314432	$0,\!4877$	-3,70	-8,85
09	${\rm Hexaedros}/{\rm hueco}$	592704	280570	571787	$0,\!4907$	$-3,\!07$	-7,13

Tabla 7.9: Resumen de los datos de los Modelos de la Muestra 2.

En la Tabla 7.10 se reportan las componentes del tensor de elasticidad aparente C_{ij}^0 de la *Muestra 1* en notación de Voigt. Los tensores C_{ij}^0 fueron computados usando el método de homogenización directo considerando desplazamientos lineales en la frontera. Los problemas de valor de contorno fueron resueltos empleando elementos de primer (8 nodos) y segundo orden (20 nodos). Puesto que el tensor de elasticidad es simétrico sólo se reportan las componentes de la diagonal principal y por encima de esta. En la última línea se reporta el valor del IG correspondiente a cada modelo.

En la Figura 7.11 se ilustran los resultados reportados en la Tabla 7.10. Puesto que las componentes de los tensores de elasticidad hallados en modelos construidos tanto con elementos de primer como segundo orden pueden ajustarse mediante líneas

		Hexaedro	100 s 8 nodo	s [MPa]	Hexa	edros 20	nodos [N	MPa]
$\operatorname{Comp.}/\operatorname{Paso}$	3	4	5	6	3	4	5	6
C11	$56,\!291$	$48,\!590$	$40,\!191$	$34,\!058$	$23,\!791$	$17,\!632$	$12,\!557$	$7,\!964$
C12	$10,\!944$	8,630	$6,\!392$	4,757	$2,\!629$	$2,\!047$	$0,\!970$	$0,\!964$
C13	17,763	$14,\!497$	$10,\!582$	$7,\!955$	$5,\!084$	$3,\!643$	$1,\!955$	$1,\!601$
C14	$1,\!130$	$1,\!210$	0,795	0,583	$0,\!412$	$0,\!039$	$0,\!021$	-0,023
C15	$3,\!368$	$2,\!665$	$1,\!648$	1,176	$1,\!177$	0,773	$0,\!290$	$0,\!190$
C16	$6,\!989$	$6,\!304$	$5,\!303$	4,030	$4,\!417$	$3,\!236$	$2,\!294$	$1,\!982$
C22	$27,\!696$	$24,\!130$	$20,\!246$	$17,\!692$	$4,\!670$	$3,\!301$	$1,\!506$	$1,\!011$
C23	$16,\!058$	$13,\!318$	$10,\!332$	7,742	$2,\!683$	1,743	$0,\!836$	$0,\!647$
C24	-0,170	$0,\!122$	$0,\!115$	$0,\!204$	-0,412	-0,348	-0,247	-0,156
C25	8,453	$7,\!343$	$5,\!926$	4,742	$1,\!873$	$1,\!331$	$0,\!676$	$0,\!458$
C26	$0,\!410$	$0,\!515$	$0,\!388$	0,291	$0,\!227$	$0,\!205$	-0,007	$0,\!023$
C33	77,721	$67,\!330$	$53,\!048$	$41,\!487$	$24,\!871$	$18,\!606$	$10,\!155$	$7,\!825$
C34	2,739	$2,\!576$	$2,\!078$	$1,\!619$	0,717	$0,\!350$	-0,038	-0,043
C35	$19,\!243$	$16,\!099$	$11,\!991$	8,440	$4,\!648$	$3,\!492$	$1,\!597$	$1,\!331$
C36	5,846	$5,\!390$	$4,\!671$	4,142	$3,\!057$	$2,\!061$	$1,\!175$	$0,\!995$
C44	$11,\!529$	9,758	8,004	$6,\!570$	3,120	$2,\!032$	$1,\!074$	$0,\!634$
C45	$1,\!843$	1,705	$1,\!295$	1,098	$0,\!379$	$0,\!199$	-0,041	$0,\!031$
C46	$6,\!423$	$5,\!376$	$4,\!065$	3,097	$2,\!489$	$1,\!690$	$0,\!928$	$0,\!514$
C55	$18,\!070$	15,789	$12,\!976$	10,720	$3,\!658$	2,744	$1,\!436$	$1,\!029$
C56	$2,\!959$	$2,\!610$	$1,\!985$	$1,\!673$	$1,\!105$	$0,\!814$	$0,\!304$	$0,\!297$
C66	$25,\!135$	$21,\!561$	$17,\!494$	$13,\!843$	9,777	6,773	$4,\!385$	2,783
IG	5,25	7,48	$10,\!56$	$15,\!12$	5,25	7,48	$10,\!56$	$15,\!12$

Tabla 7.10: Evolución de las componentes del tensor de elasticidad con el tamaño de paso considerando elementos de 8 y 20 nodos. Método de homogenización directo, Muestra 1.

de tendencia, éstas últimas fueron graficadas también.

Las deformaciones a nivel microestructural o del tejido, ε_{ij}^1 , fueron analizadas en el modelo de la *Muestra 1* construido con un paso igual a 3 y considerando elementos de primer orden. Se analizó la distribución de deformaciones del caso de carga cuya componente de deformación aparente no nula es ε_{11}^0 , Figura 7.12.

A excepción del caso ε_{11}^1 , todas las distribuciones de deformaciones presentan un único pico en cero. Esto es consistente con las deformaciones aparentes impuestas como condición de contorno. En ε_{11}^1 se observó la existencia de dos picos uno ubicado en cero (-1,41 10⁻⁷) y otro en 3,06 10⁻³ ligeramente mayor al valor medio 3,0 10⁻³ que fuese usado como deformación aparente impuesta. La existencia del doble pico fue investigada analizando la distribución de deformaciones en cada una de las fases, Figura 7.13. Se determinó que el mayor de los picos, prácticamente coincidente con el valor de deformación aparente impuesta, se encuentra en la fase hueco mientras que



Figura 7.11: Evolución de las componentes del tensor de elasticidad aparente C_{ij}^0 en función del tamaño de paso, *Muestra 1*: Modelos construidos con exaedros de 8 nodos (izq.), modelos construidos con hexaedros de 20 nodos (der.).

el cercano al cero se debe principalmente a las deformaciones en el tejido trabecular.

Esta última observación resulta interesante ya que implica que la mayor parte del tejido no se deforma uniformemente. En este sentido, debe notarse que muchos de los elementos del la fase tejido o hueso presentan deformaciones menores que el valor medio y una cantidad significativa de ellos posee deformaciones negativas. La distribución de la fase hueco, en cambio, está prácticamente centrada en $3,010^{-3}$.

El estándar de facto para el análisis de convergencia de modelos de elementos



Figura 7.12: Distribución de deformaciones en los elementos (de primer orden) de la *Muestra 1*, caso de carga ε_{11}^0 : (a) ε_{11}^1 , (b) ε_{22}^1 , (c) ε_{33}^1 , (d) ε_{12}^1 , (e) ε_{23}^1 y (f) ε_{31}^1 .



Figura 7.13: Distribución de deformaciones en los elementos (de primer orden) de la *Muestra 1*, componente ε_{11}^1 : (a) fase hueco, (b) fase hueso.

finitos está basado en el estudio de la evolución de la solución, en este caso los valores de las componentes del tensor de elasticidad aparente, con el número de nodos, el de elementos o el tamaño de los últimos. A los efectos prácticos, resulta conveniente utilizar el tamaño de los elementos ya que permite una comparación dimensional directa con parámetros morfológicos del hueso, por ejemplo, el espesor trabecular. Puesto que los modelos de la *Muestra 1* fueron construidos usando pasos de 3, 4, 5, y 6 píxeles de 19,5 μ m, y los de la *Muestra 2* usando pasos de 9, 11, 15 y 18 píxeles de 6,62 μ m, los tamaños de (las aristas de) los elementos empleados fueron 59, 78, 98 y 117 μ m en los modelos de la primer muestra y 60, 73, 99 y 119 μ m en los de la segunda.

En las Tablas 7.11 y 7.12 se reportan las componentes del tensor de elasticidad aparente C_{ij}^0 de las *Muestras 1* y 2 computadas mediante ambos métodos de homogenización. Se presentan los resultados hallados empleando elementos de primer orden y distinto tamaño de elemento. La simetría del tensor de elasticidad se verificó comparando los valores hallados para cada una de las componentes simétricas encontrándose diferencias a partir de la sexta cifra significativa en los resultados obtenidos mediante el método de homogenización directo y, en la cuarta cifra significativa en los del método asintótico.

Las Figuras 7.14 y 7.15 y las Tablas 7.11 y 7.12 presentan la evolución de las componentes del tensor de elasticidad aparente C_{ij}^0 en las *Muestras 1 y 2* respectivamente usando los dos métodos de homogenización. Los valores de las componentes se muestran en función del paso, donde además se grafican las líneas de tendencia de cada componente.

Las ordenadas al origen de las líneas de tendencia de las Figs. 7.11, 7.14 y 7.15 constituyen una estimación del valor de las componentes del tensor de elasticidad aparente para un elemento de tamaño nulo. Así, se estimaron los tensores de elasticidad aparente de ambas muestras utilizando los dos métodos de homogenización.



Figura 7.14: Evolución de las componentes del tensor de elasticidad aparente en función del tamaño del elemento, *Muestra 1*: (a) tres primeras componentes de la diagonal principal; (b) últimas tres componentes de la diagonal principal; (c) componentes fuera de la diagonal principal. Los marcadores llenos muestran los resultados hallados con el método de homogenización directo mientras que los marcadores de perfil cerrado representan los resultados hallados mediante el método de homogenización asintótico.



Figura 7.15: Evolución de las componentes del tensor de elasticidad aparente en función del tamaño del elemento, *Muestra 2*: (a) tres primeras componentes de la diagonal principal; (b) últimas tres componentes de la diagonal principal; (c) componentes fuera de la diagonal principal. Los marcadores llenos muestran los resultados hallados con el método de homogenización directo mientras que los marcadores de perfil cerrado representan los resultados hallados mediante el método de homogenización asintótico.

		Méte	odo Direc	to [MPa]	Método Asintótico [MPa]			
Componente	$59 \ \mu m$	$78~\mu{ m m}$	$98 \mu { m m}$	$117 \ \mu m$	$59~\mu{ m m}$	$78 \ \mu { m m}$	$98 \ \mu m$	$117 \ \mu m$
C11	$56,\!291$	$48,\!590$	40,191	$34,\!058$	23,791	17,632	$12,\!557$	7,964
C12	$10,\!944$	8,630	$6,\!392$	4,757	$2,\!629$	$2,\!047$	$0,\!970$	$0,\!964$
C13	17,763	$14,\!497$	$10,\!582$	$7,\!955$	$5,\!084$	$3,\!643$	$1,\!955$	$1,\!601$
C14	$1,\!130$	$1,\!210$	0,795	$0,\!583$	$0,\!412$	$0,\!039$	$0,\!021$	-0,023
C15	$3,\!368$	$2,\!665$	$1,\!648$	$1,\!176$	$1,\!177$	0,773	$0,\!290$	$0,\!190$
C16	$6,\!989$	$6,\!304$	$5,\!303$	$4,\!030$	$4,\!417$	$3,\!236$	$2,\!294$	$1,\!982$
C22	$27,\!696$	$24,\!130$	$20,\!246$	$17,\!692$	$4,\!670$	$3,\!301$	$1,\!506$	$1,\!011$
C23	$16,\!058$	$13,\!318$	$10,\!332$	7,742	$2,\!683$	1,743	$0,\!836$	$0,\!647$
C24	-0,170	$0,\!122$	$0,\!115$	$0,\!204$	-0,412	-0,348	-0,247	-0,156
C25	8,453	$7,\!343$	$5,\!926$	4,742	$1,\!873$	$1,\!331$	$0,\!676$	$0,\!458$
C26	$0,\!410$	$0,\!515$	$0,\!388$	$0,\!291$	$0,\!227$	$0,\!205$	-0,007	$0,\!023$
C33	77,721	$67,\!330$	$53,\!048$	$41,\!487$	$24,\!871$	$18,\!606$	$10,\!155$	$7,\!825$
C34	$2,\!739$	$2,\!576$	$2,\!078$	$1,\!619$	0,717	$0,\!350$	-0,038	-0,043
C35	$19,\!243$	$16,\!099$	$11,\!991$	8,440	$4,\!648$	$3,\!492$	$1,\!597$	$1,\!331$
C36	5,846	5,390	$4,\!671$	$4,\!142$	$3,\!057$	$2,\!061$	$1,\!175$	$0,\!995$
C44	$11,\!529$	9,758	8,004	$6,\!570$	3,120	$2,\!032$	$1,\!074$	$0,\!634$
C45	$1,\!843$	1,705	$1,\!295$	$1,\!098$	$0,\!379$	$0,\!199$	-0,041	$0,\!031$
C46	$6,\!423$	5,376	$4,\!065$	$3,\!097$	$2,\!489$	$1,\!690$	$0,\!928$	$0,\!514$
C55	$18,\!070$	15,789	$12,\!976$	10,720	$3,\!658$	2,744	$1,\!436$	$1,\!029$
C56	$2,\!959$	$2,\!610$	$1,\!985$	$1,\!673$	$1,\!105$	$0,\!814$	$0,\!304$	$0,\!297$
C66	$25,\!135$	$21,\!561$	$17,\!494$	$13,\!843$	9,777	6,773	$4,\!385$	2,783

Tabla 7.11: Componentes del tensor C_{ij}^0 computadas con ambos métodos de homogenización para distintos tamaños de elemento, *Muestra 1*.

Para la Muestra 1, usando el método de homogenización directo, se obtuvieron

$$C_{ij_{Directo}}^{0} = \begin{bmatrix} 78,58 & 17,04 & 27,70 & 1,85 & 5,63 & 10,10 \\ 37,69 & 24,43 & -0,43 & 12,26 & 0,62 \\ 114,84 & 3,99 & 30,37 & 7,64 \\ 16,45 & 2,68 & 9,82 \\ 25,58 & 4,32 \\ 36,58 \end{bmatrix} [MPa], y \quad (7.2)$$

$$C_{ij_{Directo}}^{0} = \begin{bmatrix} 70,81 & 15,66 & 25,20 & 1,64 & 4,58 & 8,83 \\ 34,45 & 22,58 & -0,33 & 10,57 & 0,64 \\ 102,44 & 3,81 & 26,33 & 6,81 \\ 13,78 & 2,26 & 8,57 \\ 22,37 & 3,40 \\ 31,47 \end{bmatrix} [MPa], \quad (7.3)$$

		Mét	todo Direc	Método Asintótico [MPa]			
Componente	$60 \ \mu m$	$73~\mu{ m m}$	$99 \mu { m m}$	119 μm	$73~\mu{ m m}$	$99 \mu { m m}$	119 μm
C11	346,203	347,790	347,908	$351,\!753$	291,933	289,222	$292,\!858$
C12	115,743	$115,\!354$	$114,\!218$	$113,\!658$	$96,\!651$	$95,\!583$	$95,\!606$
C13	$120,\!812$	$120,\!695$	$119,\!087$	$119,\!187$	$98,\!007$	$96,\!192$	$96,\!631$
C14	$35,\!595$	$34,\!850$	$33,\!554$	$32,\!934$	$32,\!207$	$31,\!147$	30,722
C15	-1,290	$-1,\!673$	-2,065	-2,231	-0,900	-1,148	-1,110
C16	-5,840	-5,468	-4,831	-3,881	$-3,\!993$	-3,201	-2,065
C22	$328,\!472$	$328,\!957$	$332,\!132$	$335,\!762$	$277,\!421$	$278,\!988$	280,715
C23	$117,\!058$	$116,\!867$	$116,\!433$	$116,\!050$	$97,\!497$	$97,\!365$	$96,\!280$
C24	28,857	$28,\!261$	$27,\!544$	$27,\!278$	$25,\!458$	$24,\!662$	$24,\!559$
C25	-2,154	-3,710	-5393	$-5,\!935$	-4,008	-5,960	$-5,\!352$
C26	-0,600	$-0,\!638$	-0,446	-0,138	-0,162	$0,\!158$	$0,\!594$
C33	$356,\!287$	$357,\!382$	$359,\!221$	$361,\!973$	$299,\!029$	$299,\!230$	$298,\!395$
C34	9,144	8,828	8,308	$7,\!849$	6,743	$6,\!266$	$6,\!057$
C35	-2,719	-4,123	-6,270	-6,276	$-3,\!544$	$-5,\!357$	-4,794
C36	-8,320	-7,795	-6,986	$-6,\!632$	-5,944	-5,101	-4,097
C44	$116,\!163$	$116,\!231$	$116,\!100$	$116,\!540$	$99,\!059$	$98,\!236$	$98,\!009$
C45	-2,674	$-2,\!607$	-2,562	-2,239	-2,192	$-1,\!954$	$-1,\!606$
C46	-2,465	-2,774	$-3,\!228$	-3,227	-2,056	-2,503	-2,277
C55	$114,\!354$	$114,\!656$	$115,\!050$	$115,\!867$	$97,\!346$	$96,\!996$	$96,\!555$
C56	$13,\!058$	$12,\!855$	$12,\!614$	$12,\!391$	$12,\!446$	$12,\!326$	$11,\!853$
C66	$119,\!097$	$119,\!347$	$118,\!967$	$119,\!733$	$100,\!029$	$98,\!966$	$99,\!237$

7.8. Modelos 3D reconstruidos a partir de imágenes de microTC 119

Tabla 7.12: Componentes del tensor C_{ij}^0 computadas con ambos métodos de homogenización para distintos tamaños de elemento, *Muestra 2*.

empleando elementos lineales y cuadráticos respectivamente. Con el método de homogenización asintótico se obtuvo

$$C_{ij_{Asint}}^{0} = \begin{bmatrix} 39,14 & 4,80 & 8,53 & 0,71 & 2,16 & 6,70 \\ 8,37 & 4,63 & -0,68 & 3,29 & 0,48 \\ & 42,18 & 1,45 & 8,10 & 5,01 \\ & 5,50 & 0,72 & 4,41 \\ & & 6,35 & 1,95 \\ & & & 16,44 \end{bmatrix} [MPa].$$
(7.4)

Usando únicamente elementos lineales, para la Muestra 2 se obtuvo

$$C_{ij_{Directo}}^{0} = \begin{bmatrix} 341,65 & 117,92 & 122,79 & 38,18 & -0,46 & -7,79 \\ 320,47 & 118,08 & 30,28 & 1,17 & -1,15 \\ 350,65 & 10,41 & 0,57 & -9,93 \\ 115,84 & -1,66 & -1,77 \\ 112,88 & 13,68 \\ 118,68 \end{bmatrix} [MPa], \quad (7.5)$$

$$C_{ij_{Asint}}^{0} = \begin{bmatrix} 290,04 & 98,25 & 100,03 & 34,51 & -0,59 & -7,07 \\ 272,20 & 99,48 & 26,83 & -2,06 & -1,37 \\ 300,10 & 7,79 & -1,60 & -8,88 \\ 100,68 & -3,12 & -1,76 \\ 98,60 & 13,41 \\ 101,19 \end{bmatrix} [MPa]. \quad (7.6)$$

7.8.3. Discusión

De la observación de las pendientes de las líneas de tendencia en la *Muestra 1*, Fig. 7.11, se determinó que el tamaño de los elementos puede influir significativamente en el valor de las componentes del tensor de elasticidad computadas cuando la fracción volumétrica ósea es baja. Esta observación difiere de la de van Rietbergen et al. (1995) quienes concluyeron que, para el cómputo del módulo de elasticidad aparente de la muestra, el tamaño de los elementos no es tan importante si el modelo resulta representativo de la fracción volumétrica ósea, FV.

Una FV baja puede ser una consecuencia de la relación entre tamaño del espacio intertrabecular y el tamaño de la muestra, de la existencia de trabéculas muy delgadas o una combinación de ambas condiciones. La aserción de van Rietbergen et al. resulta válida para la muestra utilizada en su trabjao puesto que la FV es casi el doble que la de la *Muestra 1*. Por este motivo, un pequeño cambio en el tamaño de los elementos no provoca un cambio significativo en la FV. La *Muestra 2*, cuya FV es aproximadamente una vez y media mayor que el valor reportado por van Rietbergen et al. resulta aún menos sensible, ver Fig. 7.15.

En virtud de los resultados hallados, se puede concluir que el tamaño de los elementos puede influir significativamente en el valor de las componentes del tensor de elasticidad cuando la fracción volumétrica ósea es baja. Por lo tanto, al seleccionar el tamaño de los elementos a emplear se debe considerar, entre otras variables, la fracción volumétrica de la región anatómica bajo análisis.

En la Fig. 7.11 se muestra que los valores de las componentes del tensor de elasticidad se ajustan linealmente con el paso independientemente del orden de los elementos, y del error en la representación geométrica de los modelos. Usando este ajuste lineal se determinó el valor de las componentes del tensor de elasticidad cuando el paso es nulo. Los tensores aparentes hallados de este modo muestran discrepancias entre las predicciones efectuadas considerando los modelos discretizados con elementos de primer y segundo orden. La diferencia en términos de la norma es de aproximadamente 10 %.

Los modelos fueron resueltos empleando idéntica geometría y el mismo método de homogenización, por cuanto las diferencias encontradas sólo pueden deberse a los tipos de elementos utilizados y a las características de estos frente a las solicitaciones y la geometría evaluada. En este sentido, van Rietbergen et al. (1995) observó la existencia de flexión en las trabéculas que componen una muestra de hueso trabecular bajo cargas axiales. Esto fue verificado en la *Muestra 1* usando elementos de primer orden para un caso de carga axial al observarse elementos comprimidos ante una solicitación de tracción sobre el material aparente, Fig. 7.13.

Puesto que el tamaño de píxel del estudio microtomográfico de la *Muestra 1* es relativamente grande en comparación con el espesor trabecular, en aquellos modelos en los cuales se emplearon pasos superiores a cuatro, muchas de las trabéculas fueron discretizadas con un único elemento en el espesor. Los elementos de segundo orden, por su naturaleza, resultaron más adecuados para la solución de tales casos. Sin embargo, los modelos en los cuales el tamaño de los elementos es del orden o superior al de las trabéculas no deberían considerarse para estimar las propiedades mecánicas. Pese a ello los valores hallados de cada componente del tensor de elasticidad usando pasos iguales a 5 y 6 pudieron ser ajustados mediante una interpolación lineal. Los motivos de este comportamiento se justifican en la falta de conectividad y la unión de elementos mediante una arista o nodo que contribuye la disminución de la rigidez aparente del modelo.

Los resultados obtenidos con elementos de segundo orden difieren en un 10 % de los obtenidos con elementos de primer orden una vez acotados los errores asociados a la representación geométrica. Sin embargo, los modelos computacionales son casi 4 veces más costosos. Por este motivo, el empleo de un paso pequeño y elementos lineales resulta en un uso más adecuado de las capacidades de cómputo disponibles. En virtud de los resultados obtenidos, el resto de los modelos fueron resueltos empleando elementos de primer orden.

Las componentes del tensor de elasticidad C_{ij}^0 computadas mediante el método directo poseen valores más elevados que las computadas mediante el método asintótico. La diferencia entre los tensores hallados con ambos métodos fue evaluada también utilizando el mayor valor singular de C_{ij}^0 como norma .

Las normas de los tensores de elasticidad computados utilizando el método directo en los modelos de la *Muestra 1* se encuentran en el rango comprendido entre 52,3 y 99,67 MPa. Estos valores extremos se hallaron en los modelos con el tamaño de elemento más grande y más chico respectivamente. Las normas de los tensores de elasticidad computados con el método asintótico se encuentran entre 10,23 y 32,01 MPa para idénticos tamaños de elemento. Por otro lado, las normas de los tensores C_{ij}^0 para tamaño de elemento nulo, computadas con los métodos de homogenización directo y asintótico, presentan discrepancias de 63,74 %.

En la Muestra 2 las normas de los tensores C_{ij}^0 computados mediante el método directo se encuentran entre 583,91 y 586,38 MPa; mientras que las de los tensores hallados con el método asintótico están en el rango que va desde los 486,54 a los 488,21 MPa. Los tensores de elasticidad determinados para tamaño de elemento nulo entre ambos métodos de homogenización difieren en un 15,32 %.

La menor sensibilidad de los resultados ante variaciones en el tamaño de los elementos; junto a las características de los desplazamientos de la muestra representativa (RVE), asociada a las condiciones de contorno periódicas implementadas, hacen que el método de homogenización asintótico posea características superiores para la estimación del comportamiento mecánico del hueso trabecular respecto del método directo.

En este trabajo se propone utilizar al índice IG para evaluar la calidad de la representación geométrica de los modelos cuantitativamente, ver Cap. 4. Este indicador puede emplearse, junto a otras variables, para seleccionar el tamaño de los elementos de los modelos de forma tal que se minimicen los errores de discretización y de representación geométrica hasta valores que permitan resolver los modelos resultantes con la capacidad de cómputo disponible. En el presente estudio se determinó que un valor de IG inferior al 10 % resultó adecuado para ambas muestras.

7.9. Resumen

Se verificaron las herramientas computacionales implementadas mediante un procedimiento sistemático utilizando modelos de complejidad creciente.

En problemas en dos dimensiones (2D), los códigos fueron verificados al recuperar la matriz constitutiva de un material homogéneo, lineal e isótropo cuya forma es conocida. Se corroboró que los resultados obtenidos post-procesando tensiones o deformaciones, es decir, computando el tensor de localización de tensiones o de deformaciones, sean idénticos tanto en tensión como en deformación plana.

Se aplicaron los procedimientos para estimar el módulo de elasticidad aparente de una muestra 2D análoga a una barra de material bifásico, y se compararon los con soluciones analíticas. Además, se verificó que los resultados determinados en estados de tensión y deformación plana se encuentren entre las cotas de Reuss y Voigt con resultados satisfactorios.

A partir del estudio de modelos idealizados de hueso trabecular en 2D se determinó que con el método directo, cuando la geometría no es cerrada en su contorno, es decir la fase hueco está sobre el perímetro, las componentes de la matriz constitutiva resultan fuertemente subestimadas. Se concluyó que en modelos reales de la geometría trabecular sólo debe emplearse el método directo considerando desplazamientos en el contorno. Por otro lado se observó que las mallas de elementos finitos no estructuradas provocan una leve asimetría de la matriz constitutiva.

En modelos bidimensionales de hueso trabecular reconstruido a partir de imágenes microtomográficas se detectó una falta de conectividad que hizo evidente la necesidad de evaluar modelos de geometrías reales en tres dimensiones.

En función de los resultados anteriores, los procedimientos desarrollados fueron implementados para resolver dominios tridimensionales y verificados siguiendo un protocolo similar al empleado en modelos en dos dimensiones. Los métodos de homogenización directo y asintótico fueron verificados mediante la comparación con el tensor de elasticidad de un material homogéneo, lineal e isótropo. La solución analítica del caso de una barra de material bifásico fue empleada para verificar los resultados obtenidos con el método de homogenización directo, mientras que para el método de homogenización asintótico se usó una de las geometrías predefinidas del programa PREMAT.

Se determinó el tensor de elasticidad aparente de muestras de hueso trabecular mediante el método de homogenización directa empleando elementos de primer y segundo orden. Se determinó que cuando la fracción volumétrica de tejido es baja, el tamaño de los elementos tiene una fuerte influencia sobre la calidad de la representación geométrica. Aún cuando esto no ocurre, las componentes del tensor de elasticidad responden en forma lineal con la disminución del paso independientemente del orden de los elementos empleados en la discretización.

Se efectuó una regresión lineal de las componentes de los tensores de elasticidad computados mediante el método directo hacia un tamaño de paso nulo. Sobre la base de la valoración de las diferencias obtenidas en la norma de los tensores de elasticidad , la necesidad de obtener una adecuada representación microestructural y el costo computacional se concluyó que los elementos de primer orden son los más adecuados para realizar estudios sistemáticos del comportamiento del hueso trabecular.

Se compararon los tensores de elasticidad aparentes de muestras de hueso trabecular computados mediante los métodos de homogenización directo (en desplazamientos) y asintótico. Las mayores diferencias entre ambos métodos se observaron en el modelo con la menor fracción volumétrica. Este mismo modelo presentó una dependencia mayor con el tamaño del elemento.

El método de homogenización asintótica predice un comportamiento menos rígido que el método de homogenización directo en un todo de acuerdo con sus cotas energéticas.

Se observó que las componentes del tensor de elasticidad aparente computadas mediante el método de homogenización asintótico también varían en forma lineal con el tamaño de elemento pero, en todos los casos la pendiente es menor.

Los resultados obtenidos con el método asintótico son menos sensibles al tamaño de los elementos. Esto resultó particularmente evidente en los modelos de la muestra con mayor FV. Se estima que la calidad de la representación geométrica y una mayor la relación entre el *espesor trabecular/tamaño de los elementos* respecto de la otra muestra analizada favorecieron este resultado. Sin embargo, no se observó una correlación definitiva.

Las estimaciones del tensor de elasticidad halladas empleando el método de homogenización directo son más sensibles al tamaño de la muestra y al paso que las estimaciones del método asintótico.

En el método de homogenización asintótico representa un procedimiento robusto para estimar el tensor de elasticidad aparente de una muestra de hueso, y está acotado por los valores hallados mediante el método directo.

Las diferencias en el módulo de elasticidad computado mediante ambos méto-

dos de homogenización y el valor determinado experimentalmente son aceptables y permitieron validar los modelos empleados.

La diferencia principal entre los resultados de los casos de carga resultos usando las condiciones de contorno requeridas por los métodos de homogenización directa en desplazamientos y asintótica resulta evidente en los casos no axiales. En estos casos, con el método directo (en desplazamientos) se obtienen modelos deformados en los que las caras de las muestras permanecen planas, satisfaciendo la condición de periodicidad de desplazamientos también impuesta por el método asintótico, pero donde la distribución de tensiones en los contornos opuestos no satisface la condición de periodicidad del campo tensión aún con microestructuras periódicas como la analizada experimentalmente.

En función de la discusión anterior, se selecciona al método de homogenización asintótico para el estudio del comportamiento mecánico del hueso trabecular.

Se propone la utilización del IG, definido como la diferencia porcentual entre los números de elementos de la fase hueso que resultan de priorizar la detección de hueso (o tejido) y la fase hueco durante el proceso de discretización, como un indicador de la calidad de la representación geométrica del modelo. Para las muestras evaluadas, se determinó que un valor de IG del 10 % garantiza una adecuada representación geométrica de los modelos, ver 4. A efectos de generalizar el uso de este parámetro, es necesario aplicar la técnica a muestras de otras regiones anatómicas para verificar este resultado.

CAPÍTULO 8 Determinación del módulo de elasticidad del tejido trabecular

En el Capítulo 2 se presentaron algunos métodos para determinar el módulo de elasticidad del tejido y hueso trabecular, uno de tales métodos consiste en de ensayos de indentación.

Con el objeto de comprender las hipótesis y limitaciones de los métodos de indentación, en este capítulo se introduce su clasificación y se presenta su relación con las características jerárquicas del hueso en forma sucinta. La bibliografía especializada es revisada y analizada críticamente. Como resultado, se selecciona el método para la determinación del módulo de elasticidad del tejido trabecular en la escala correspondiente, se proponen protocolos para el almacenamiento y ensayo de muestras de tejido óseo trabecular. Finalmente, los procedimientos desarrollados se aplican a muestras de tejido trabecular bovino.

8.1. Introducción

En la práctica de la ingeniería se utilizan correlaciones entre la dureza y el módulo de elasticidad de un material, ASM Handbook (2000). Estas correlaciones empíricas han demostrado ser muy útiles para el estudio de materiales metálicos y la evaluación de la integridad de equipos construidos con estos materiales. No resulta extraño entonces, que se hayan elaborado correlaciones entre la dureza del material óseo y el módulo de elasticidad (Currey y Brear, 1990; Evans et al., 1990). Estas correlaciones, normalmente asociadas al hueso cortical, se emplean junto a otras en función de la densidad o la fracción volumétrica para asignar las propiedades a modelos de elementos finitos de piezas óseas completas (Cisilino et al., 2008) y poseen, al menos en potencia, la posibilidad de aplicarse al hueso trabecular.

Los ensayos de indentación se emplean para medir la dureza de un material. La dureza se define como la resistencia de un material a ser penetrado por otro cuerpo. Esta magnitud se mide empleando ensayos de indentación que consisten en presionar un indentador con una geometría específica sobre la superficie del material bajo estudio preparada adecuadamente. La fuerza empleada se denomina carga de prueba o simplemente carga.

Los ensayos de indentación se clasifican tradicionalmente en función de la geometría, el tamaño del indentador, y la carga empleada, aunque existen otras clasificaciones. Las geometrías más comunes son las denominadas Brinell, Rockwell, Vickers y Knoop. En función del tamaño del indentador se distinguen la macroindentación, microindentación y nanoindentación. La clasificación en función de las cargas adopta nombres similares a la anterior, la diferencia fundamental entre cada ensayo reside en el rango de carga empleado (An y Draughn, 2000; ASM Handbook, 2000). Así los ensayos de macroindentación emplean cargas superiores a 1 Kg fuerza, en lo que sigue se omitirá tal aclaración. El valor mínimo depende del tipo de indentador y puede ser del orden de centenas de Kg. En los ensayos de microindentación se usan cargas de entre 1 gr y 1 Kg¹. En nanoindentación la carga a emplear depende fuertemente de las características del material a ensayar, de hecho muchas veces se requieren de ensayos en los cuales se prescribe el valor máximo de la penetración en lugar de la carga que puede ser muy baja, hasta 0,1 mN (aprox. 1 10^{-5} Kg).

8.2. Relación con la estructura jerárquica ósea

126

Los ensayos de indentación permiten evaluar distintas escalas de la estructura ósea considerando el tamaño de las probetas, los indentadores y la carga aplicada. Sin embargo, existen consideraciones prácticas referidas a la evaluación del hueso trabecular que relegan a los ensayos de macroindentación frente a los de micro y nanoindentación e incluso, los ensayos convencionales de compresión. En efecto, cuando se puede contar con una muestra de hueso trabecular suficientemente grande los métodos convencionales de compresión, pese a no estar exentos de dificultades, presentan ventajas frente a los ensayos de macroindentación. Una discusión breve de las dificultades encontradas al ensayar hueso trabecular (e interpretar datos experimentales hallados en la literatura) puede encontrarse en Currey (2006).

Debe notarse que el objetivo de esta etapa del trabajo es determinar el módulo de elasticidad aparente del tejido y no del hueso trabecular. Por lo tanto la escala del ensayo a realizar debe permitir el análisis del material en el rango del espesor de una trabécula, esto es menos de $200\mu m$, por cuanto los ensayos de macroindentación y los convencionales no serán discutidos.

A efectos de ilustrar los tamaños en juego, el tamaño de una osteona es del alrededor de 200 a 300 μ m, y cada lamela en el hueso tiene de 3 a 7 μ m de ancho. Las microindentaciones están en el rango de los 20 a 150 μ m en longitud, mientras que en nanoindentación éstas pueden ser del orden de 1 μ m.

8.3. Revisión de la bibliografía

Se presenta una revisión de la literatura especializada. Esta revisión no pretende ser exhaustiva y se centra en los métodos empleados para la determinación del módulo de elasticidad del tejido, los procedimientos y protocolos empleados a tales efectos. Algunos resultados se presentan en forma cualitativa y otros en forma

¹Según las normas ASTM las cargas van desde 0,01 a 1 Kg mientras que varios códigos europeos indican de 0,2 a 0,3 Kg. La diferencia reside en que cuando se emplean cargas inferiores a los 200 gr a metales, generalmente, los valores de dureza muestran alguna dependencia con la carga,ASM Handbook (2000).

cuantitativa a efectos de comparación. Los resultados de esta revisión se analizan críticamente y se determina el tipo de ensayo, la escala y el indentador a emplear. Además se plantean cuestiones que merecen un estudio posterior, algunas de las cuales son activamente investigadas en la actualidad.

8.3.1. Indentación del tejido óseo

Existen dos tipos de microindentadores que, considerando el número de publicaciones en las cuales se los ha usado, prevalecen sobre los demás. Estos son los indentadores Vickers, de origen inglés y, Knoop, de origen americano, Figura 8.1. Ambos indentadores se emplean para el estudio de muestras óseas pero, dado que buena parte de los primeros estudios de dureza en huesos se realizó en Europa, la literatura reporta principalmente resultados en los que se emplea el indentador Vickers. La dureza reportada es el cociente de un valor de carga conocido sobre el área verdadera de la de la impronta al retirar la carga o el área proyectada para los indentadores Vickers y Knoop respectivamente. En ambos casos, el área se computa a partir de mediciones de las o la diagonal mayor de la impronta.



Figura 8.1: Esquema de dos microindentadores y sus improntas: (a) Vickers, (b) Knoop.

El interés en la evaluación del hueso mediante indentación data de 1952 cuando Carlström (1954) realizó microindentaciones con una punta Vickers sobre la sección transversal de un fémur humano con diferencias en mineralización de hasta un 10 %. Determinó que el valor medio de la dureza en tres regiones aumentaba conforme aumentaba la mineralización. Además, reportó que en las regiones menos mineralizadas existía una mayor recuperación elástica del material y cuestionó la capacidad del ensayo para proveer certezas sobre la medición de dureza en hueso. Posteriormente Weaver (1966) reportó resultados similares en cuanto al grado de mineralización e hizo notar la influencia del procedimiento de almacenamiento de las muestras sobre los valores de dureza. Para ello, midió la dureza Vickers de probetas de hueso cortical almacenadas mediante distintos métodos: congelado a -20°C, secado a 60°C durante 12 hs, infiltrado en polimetilmetacrilato (PMMA), fijado en una solución al 10 % de formol y, almacenado a 4°C en solución fisiológica. Luego realizó ensayos de microindentación y comparó los resultados con los obtenidos en las probetas de hueso fresco. Determinó que el congelado rápido de las muestras a -20°C no altera la dureza mientras que, con los demás procedimientos, obtuvo diferencias de hasta el 50 %. Desafortunadamente, Weaver no reporta el tiempo que las muestras estuvieron almacenadas a -20°C. Más tarde Evans et al. (1990) analizó esta variable utilizando protocolos idénticos y determinó que no existen cambios significativos en la dureza al cabo de dos ni tres meses posteriores al ensayo de las muestras frescas. Sin embargo, Evans et al. reportó que incluir en PMMA provoca un aumento de la dureza del orden del 4%. Los autores analizaron también el efecto del período de carga constante concluyendo que con tiempos superiores a 10 s no hay cambios apreciables en la dureza aunque los resultados graficados muestran diferencias del orden del 52% entre los valores determinados con un tiempo de 10 y 45 segundos. Para la evaluación de los efectos de la recuperación elástica los autores midieron las improntas al retirar la carga y hasta 300 segundos después. Si bien los valores de dureza se modifican, el rango de variación está entre los -5 y +3.2% respecto de la primera medición efectuada. Al cabo de 300 s la dureza sólo es un 1,6 % mayor. En función de los resultados, Evans et al. continuó el análisis de muestras óseas empleando un indentador Vickers con una carga de 50 gr y un período de mantenimiento de 10 s.

El interés en los ensayos de dureza como método para la evaluación de otras propiedades mecánicas fue sentado por Evans (1969) quien reportó una relación entre el módulo de elasticidad y la dureza. Puesto que en este trabajo se utilizaron sólo 10 probetas, Currey y Brear (1990) utilizaron un protocolo similar y propusieron una correlación lineal entre el módulo de elasticidad (E) y la dureza para tejidos mineralizados cuyo módulo E se encuentra entre los 5 y los 30 GPa. Evans et al. (1990) señalaron, citando a estudios anteriores, que las propiedades del hueso son una consecuencia de la interacción entre la fase mineral y el colágeno. Básicamente, los autores expresan que el hueso se comporta como un compuesto y por lo tanto, si bien existen correlaciones con el contenido de la fase mineral (como indicó Carlström de forma cualitativa), no es el único factor que influye sobre las propiedades mecánicas sino que la orientación y arreglo microestructural de las fases debe se considerado. Con esto en mente analizaron un compuesto de polietileno reforzado con hidroxiapatita "análogo al hueso", según los autores. Los resultados experimentales permitieron justificar la primera aserción ya que la dureza del análogo resultó siempre menor que la del hueso real pese a tener idéntica fracción volumétrica de carga mineral. Más aún, la relación entre el módulo y la dureza no fue la misma para ambos materiales.

La discusión precedente deja dudas acerca del tiempo de mantenimiento de carga, y el efecto del secado de la probeta durante el ensayo y el valor de la carga empleada. Por otro lado, en muchos casos se desconoce el valor de la carga usada por los autores. Esto último puede deberse a que es una práctica común considerar que la dureza no se modifica con la carga usada y, en consecuencia no se reporta. Estos problemas ya fueron presentados por Van de Voort (ASM Handbook, 2000; Vander Voort, 2002). En este sentido, si bien existen pautas sugeridas y normas acerca de la forma en la cual se deben reportar los valores de dureza, resulta más bien frecuente encontrar publicaciones en las cuales se adopta una convención particular o en desuso, ASM Handbook (2000). A efectos de interpretación normalmente basta con reportar el cabezal empleado, valor de dureza computada y la carga utilizada.

Estos planteos motivaron que Johnson y Rapoff (2007) estudiarán la variación de la dureza en muestras de metacarpo bovino frescas con: la carga, el tiempo de carga constante, el tiempo de secado, el tiempo entre el retiro de la carga y la medición de las diagonales (Vickers) y, la distancia entre el centro de la indentación y un borde, otra indentación o poros². Determinaron que la dureza varía con la carga y con la distancia a otras indentaciones o poros pero no con las demás variables, salvo la carga. Los autores sugirieron un valor de carga mínimo de 100 gr ya que con valores de carga mayores obtuvieron mediciones de dureza constantes. Además no encontraron apilamientos en los bordes de las improntas.

Los ensayos convencionales de indentación tienen un límite inferior de unas cuantas decenas o centenas de micrómetros, mientras que mediante nanoindentación es posible evaluar el tejido óseo en el rango del micrómetro (Rho y Pharr, 2000). Dado que muchos componentes estructurales del hueso tienen dimensiones de tan solo unos micrones o menos, se puede utilizar la nanoindentación para investigar las propiedades de las lamelas dentro de las osteonas, del hueso intersticial y trabecular, Rho et al. (1997).

Los ensayos de nanoindentación tienen la característica de ser instrumentados, es decir registran los desplazamientos del indentador (profundidades) y la carga durante la ejecución del ensayo. Esto se debe a que las diminutas improntas hacen imposible determinar su tamaño mediante los métodos tradicionales. Por este motivo, en los ensayos de indentación instrumentada el área de contacto entre el indentador y la probeta se estima conociendo la profundidad de la penetración y la geometría del indentador (Oliver y Pharr, 1992). Puesto que se considera que la descarga del material es elástica, los ensayos de nanoindentación permiten determinar además de la dureza el módulo de elasticidad del material bajo análisis sin correlación alguna, Rho y Pharr (1999).

La capacidad de determinar el módulo de elasticidad de los ensayos de nanoindentación fue trasladada a equipos de microindentación. Por este motivo, para identificar el tipo de ensayo resulta conveniente diferenciar entre los "*ensayos instrumentados*" y los "*ensayos convencionales*" de microindentación.

La mayoría de los estudios reportados emplean el método de la compliancia para determinar el valor del módulo de elasticidad (Oliver y Pharr, 1992), aunque existen otros métodos. Oliver y Pharr (1992) analiza críticamente varios métodos y Fisher-Cripps los compara desde un punto de vista práctico (Fischer-Cripps, 2009).

²Considando poro a cualquier cavidad vascular.

La aplicación de los métodos de indentación instrumentada ha motivado cierto debate acerca de su aplicación a materiales biológicos principalmente, debido a que la teoría descansa sobre la suposición de que el material es elástico, isotrópico y homogéneo (Rho y Pharr, 1999; Ebenstein y Pruitt, 2006). Se ha reportado que el hueso presenta características viscoelásticas (An y Draughn, 2000) por cuanto un diagrama de carga y desplazamiento puede presentar una nariz. Como se dijo más arriba, la hipótesis necesaria para la obtención del módulo de elasticidad a partir de los ensayos de indentación es que la descarga es elástica, por lo tanto resulta menester reducir el efecto de la nariz. Con este propósito se ha sugerido la introducción de un segmento de carga constante similar al usado en el análisis polímeros, Briscoe et al. (1998). Rho y Pharr (1999) sugieren emplear ciclos de carga y descarga junto a un período de mantenimiento de carga constante para limitar este efecto. De todos modos, la influencia de estos efectos con el tipo de hueso y la región anatómica aún no ha sido claramente descrita.

Al igual que con los métodos convencionales de microindentación, buena parte de los estudios de indentación instrumentada se concentraron en la evaluación y análisis del tejido cortical (Rho y Pharr, 2000; Hengsberger et al., 2002). En general, los resultados se ven afectados por la condición del hueso, esto es seco, hidratado, o bajo condiciones fisiológicas simuladas. Si bien la tendencia muestra que se obtienen valores del módulo y durezas más elevados cuando la probeta está seca, resulta difícil cuantificar cuánto debido a la variabilidad de las piezas óseas y especies analizadas. Hengsberger et al. (2002) observó diferencias en la dureza y el módulo de elasticidad incluso entre lamelas de una misma osteona.

Rho et al. (1997) cuestionaron el amplio rango de valores del módulo de elasticidad del hueso y tejido trabecular reportado en la literatura. En particular cuestionaron la validez de algunos resultados en función de las dificultades experimentales asociadas a los métodos empleados por otros autores (Rho y Pharr, 2000) y especularon con la posibilidad de que las propiedades de los componentes microestructurales, tanto del hueso cortical como del trabecular, no sean los mismos en la escala macroscópica. Los autores, usaron la técnica de nanoindentación para determinar las propiedades del tejido trabecular y cortical en huesos humanos. El procedimiento para la preparación de las muestras fue similar al reportado por Weaver (1966) con algunas salvedades, a saber: 1) las muestras fueron deshidratadas en baños de al-(2) cohol, 2) las muestras fueron incluidas en una resina epoxi y 3) en las etapas finales del pulido se empleó alúmina de 0,3 y 0,05 μ m. En el de ensavo se empleó una velocidad de carga de 750 μ m/s, un período de mantenimiento de carga máxima de 10 s a una profundidad de 1000 nm, una descarga al 15~% de la carga pico a una velocidad igual a la mitad de la de carga, un tiempo de mantenimiento de carga de 100 s usado para calibrar el desplazamiento térmico y corregir los datos, seguido por el retiro de la carga. Los datos fueron procesados siguiendo los procedimientos de Oliver y Pharr (1992), los módulos y la dureza determinados fueron 22,5 GPa y 614 MPa para las osteonas tibiales (cortical) y; 13,4 GPa y 468 MPa para el tejido vertebral (trabecular). Rho et al. (1997) enfatizan que las mediciones de dureza del hueso trabecular se realizaron en dirección transversal mientras que las del cortical se realizaron en la dirección longitudinal, de todos modos la comparación directa no es posible puesto que se emplearon huesos diferentes. Roy et al. (1996) utilizó un procedimiento similar y reportó diferencias en el módulo de elasticidad del hueso trabecular en distintas direcciones en una vértebra humana. Uno de los resultados más interesantes de este trabajo fue que las trabéculas orientadas en el sentido cranio-caudal eran tan rígidas como el hueso cortical.

Diversos autores han sugerido el empleo de sofisticados sistemas de irrigación (Rho y Pharr, 2000) y, el uso de puntas especiales para ensayar probetas sumergidas (Hysitron, 2001; Ebenstein y Pruitt, 2006) con el objeto de mantener el hueso hidratado. Otros autores enfatizan la importancia de seleccionar el fluido adecuado a efectos de evitar una reducción significativa de la dureza o módulo debido a la descalcificación (Hengsberger et al., 2002; Ebenstein y Pruitt, 2006).

El protocolo de ensayo y sus variables también fue analizado. Zhang et al. (2008), analizaron el efecto de las variaciones en la carga máxima, la velocidad de carga/descarga y el tiempo de mantenimiento de carga máxima sobre las propiedades determinadas mediante nano y microindentación. Para ello usaron funciones de carga trapezoidales³. Determinaron que en nanoindentación el módulo de elasticidad disminuye al aumentar la carga máxima y el tiempo de mantenimiento de esta, sin embargo la dureza resultó insensible. En cuanto a la velocidad de carga/descarga, observaron que el módulo de elasticidad no cambia significativamente mientras que, debido al solapamiento de las bandas de dispersión, no se pudo inferir alguna tendencia en la dureza. En microindentación, determinaron que ni el módulo ni la dureza se modifican con tiempos de mantenimiento de carga máxima menores a 5 s pero observaron una leve disminución de los valores medios cuando el tiempo fue de 15 s pese a que todos los valores están contenidos dentro de la desviación estándar de los ensayos. No se modificó el módulo con el aumento de carga pero, la dureza disminuyó. Sin embargo, al aumentar la velocidad de carga, la dureza no se modificó mientras que el módulo disminuyó.

Mediante análisis de elementos finitos, Zhang et al. trataron de entender algunos aspectos de la mecánica de la indentación en hueso. Concluyeron que la naturaleza anisotrópica del hueso y/o de su plasticidad tiene un efecto significativo sobre el comportamiento de descarga durante nano-indentación. El resultado más significativo de este trabajo probablemente sea que los módulos de elasticidad determinados mediante nanoindentación son un 43 % más elevados que los determinados mediante microindentación.

En cuanto a la preparación de las muestras, los protocolos empleados en muestras ensayadas mediante microindentación instrumentadas no se diferencian demasiado de los de indentación convencional. En general, todos los autores enfatizan la importancia de la planitud de las muestras y la baja rugosidad superficial, sobre todo cuando se emplean cargas pequeñas. Es más bien usual encontrar reportes en los cuales durante la última etapa de pulido se emplee alúmina de 0,05 μ m o aún un tamaño menor (Rho et al., 1997; Rho y Pharr, 1999, 2000; Hengsberger et al., 2002).

³Carga en función del tiempo.

Además de las referencias citadas existen revisiones en las cuales se condensan las mejores prácticas conocidas para la indentación instrumentada de tejidos Ebenstein y Pruitt (2006) del tejido óseo (Zysset, 2009; An y Draughn, 2000) y otras exclusivamente focalizadas en los procedimientos de indentación en general (Pharr, 1998; Oliver y Pharr, 2004; Zysset, 2009). Estos artículos proveen información general acerca de la preparación y acondicionamiento de probetas, muchas veces, citando los trabajos de los autores pioneros en microindentación convencional.

El empleo de técnicas instrumentadas en hueso trabecular ha enfrentado a los investigadores con el problema de hallar un soporte adecuado para las trabéculas. La inclusión y el infiltrado en resina, en particular PMMA o epoxi, han probado ser indispensables para evitar la deformación de las trabéculas durante el ensayo. Si bien algunos autores han indicado que no existen diferencias significativas en la dureza del hueso usando PMMA (Evans et al., 1990; Zysset, 2009), otros han reportado que la dureza aumenta notablemente (Weaver, 1966; Dall'Ara et al., 2007). Es probable que estas discrepancias se deban a que algunos autores emplean los términos embebido o inclusión como sinónimo de infiltrado. En el proceso de infiltrado se permite que la resina llene todas las cavidades y microcavidades de un tejido incluyendo a los tejidos blandos, mientras que en una inclusión o embebido solamente se llenan las cavidades grandes, como el espacio intertrabecular. El cambio en la dureza reportada se encuentra entre -4^4 y 48% respecto de la del hueso fresco.

Se ha demostrado que el secado aumenta la dureza entre un 15 y un 40 % (Weaver, 1966; Dall'Ara et al., 2007; Zysset, 2009; An y Draughn, 2000). Sin embargo, en algunos artículos resulta imposible identificar si el secado se realizó a una temperatura mayor a la ambiente o no. Rho y Pharr (1999) analizaron el problema del secado-deshidratado utilizando nanoindentación instrumentada, para ello utilizaron probetas de una muestra de fémur bovino, una secada en aire y otra conservada en agua desionizada durante el ensayo. Se desconoce el tiempo y la forma en la que se preservó la muestra que se ensayó sumergida y el grado de desmineralización al cual pudo estar sometida, esto es, si el hueso fresco tendría los mismos valores de dureza y módulo. Los autores encontraron que la dureza de las muestras secas aumenta entre un 10 y un 15 % respecto de las re-hidratadas. Las probetas no fueron fijadas ni incluidas, pero la dureza resulta bastante mayor que lo reportado por Dall'Ara et al. de 5 a 8 % en microindentación convencional.

Lo indicado anteriormente sirve para señalar una diferencia fundamental entre los ensayos de indentación tradicionales y los instrumentados. En los ensayos convencionales, la dureza se determina conociendo la carga y midiendo la impronta o impresión residual mientras que en los ensayos instrumentados la dureza se determina considerando la carga máxima y una estimación del área de contacto en el instante en que comienza la descarga. Por lo tanto, cuando existe recuperación elástica, ambos métodos ofrecerán valores distintos.

Las puntas de los indentadores se hacen de materiales muy rígidos y duros ta-

⁴Datos de Evans et al. (1990). Pese a que la intuición indicaría que la muestra incluida debe tener una dureza más elevada, no se encontró ninguna rectificación de los valores reportados ni se obtuvo respuesta de los autores.
les como el diamante y el zafiro de forma tal que la compliancia de la muestra sea mayor que la de la punta. Prácticamente en toda la bibliografía de indentación instrumentada aplicada a huesos se reporta el empleo de puntas Berkovich. Esta punta piramidal de tres caras, con un ángulo incluido total de 142,3°, fue diseñada para tener la misma relación de profundidad respecto del área que la punta Vickers de cuatro caras, Figura 8.2. Existen trabajos también en los cuales se empleó la punta de esquina de cubo para medir la tenacidad del material óseo (Mullins et al., 2007). Figura 8.2. Esto es posible debido a que ninguna punta realmente termina en un vértice agudo sino que poseen un radio de curvatura, y éste radio es menor en la punta esquina de cubo. Pese a que las puntas conoesféricas se usan para el ensayo de materiales blandos, ya que minimizan la deformación plástica y la concentración de tensiones, salvo en casos de estudios mediante elementos finitos el empleo de puntas conoesféricas en huesos es prácticamente inexistente, probablemente debido a la dificultad de su fabricación. Distinto es el caso de la punta Vickers, la cual suele emplearse para indentaciones con altas cargas, en particular cuando los resultados se desean comparar con los de microindentación convencional, Hysitron (2001). Esta punta no se ha empleado tanto en ensavos instrumentados debido a que resulta difícil que los cuatro planos converjan en un punto, haciéndola inadecuada cuando las indentaciones son poco profundas. Pese a que existen indentadores Knoop, no se han encontrado trabajos en los que se reporte su empleo en nanoindentación instrumentada. La punta plana, que tiene la ventaja de tener un área de contacto constante con la profundidad (y una solución analítica) provoca una alta concentración de tensiones y tampoco ha sido popular para el estudio de tejidos óseos.



Figura 8.2: Detalles de la geometría de las puntas.

Además de elegir la geometría de la punta, las dimensiones de la misma son importantes. Por ejemplo, si el objetivo es medir las propiedades del tejido en un tejido blando se requerirán puntas de gran diámetro de modo que el tamaño del área de contacto sea mayor que el de una célula individual o fibra (Ebenstein y Pruitt, 2006). Por otro lado, cuando se desea medir las características microestructurales del hueso o la dentina, se emplea la punta Berkovich para maximizar la resolución espacial y permitir la medición de las propiedades mecánicas en ubicaciones precisas dentro de muestras mineralizadas.

8.3.2. Resumen: determinación del tipo de ensayo, escala e indentador

Del análisis de la bibliografía y en función del tamaño trabecular se determinó que los ensayos instrumentados constituyen la herramienta adecuada para la determinación del módulo de elasticidad del tejido trabecular. Estos métodos se desarrollaron bajo la premisa de que el material bajo estudio es homogéneo, característica que es ajena al tejido trabecular. Con los indentadores Vickers, Berkovich y cónicos sólo es posible obtener un módulo de elasticidad del material homogéneo e isótropo aparente, como promedio de la región afectada por la indentación donde se favorecen las características en la dirección de indentación. Pese a ello ha sido posible determinar diferencias en las propiedades elásticas de las trabéculas que crecen en direcciones ortogonales dentro de de una misma pieza ósea.

Debido a la naturaleza heterogénea del tejido recién se ha empezado a comprender su comportamiento mecánico. Algunos autores sugieren que la dependencia de la dureza y el módulo con la carga se debe, al menos en parte, al desarrollo de la zona plástica en la región de contacto. No se han efectuado estudios que permitan establecer con certeza cuán grande y profunda es la zona plástica desarrollada en el hueso trabecular mediante nano o microindentación, por cuanto normalmente todas las recomendaciones efectuadas respecto de la separación entre indentaciones están basadas en estudios realizados sobre otros materiales. Se han reportado estudios similares en hueso cortical pero, las recomendaciones efectuadas son de dudoso valor para el hueso trabecular. Es probable que una recomendación de este tipo deba incluir el tipo de punta, una relación entre el área o profundidad máxima y el espesor trabecular junto a una clara identificación de los procedimientos de conservación, acondicionamiento y ensavo. Más aún, debido a los procedimientos de preparación de las muestras, los espesores ensayados de las trabéculas son menores a los que se determinan mediante técnicas ópticas o microradiográficas antes del lijado y pulido. Por este motivo, parece adecuado sugerir que las indentaciones se realicen en intersecciones de trabéculas donde el espesor es mayor.

La identificación de la escala que debe analizarse en el hueso trabecular está relacionada con el tamaño de la zona plástica. Los ensayos de nanoindentación se emplean para efectuar estudios dentro de las lamelas de una única osteona en hueso cortical ya que el ensayo está más cerca de "*promediar*" lo que ocurre a nivel de la nanoestructura o menor que de hacerlo en un nivel superior (ver Sec. 2.1, en el Cap. 2). De este modo, y en ausencia del estudio indicado en el párrafo anterior, parece que la escala adecuada para nuestros propósitos es la submicroestructural mediante microindentación instrumentada⁵.

Puesto que los valores de las cargas empleadas en los ensayos de microindentación son más grandes que los de nanoindentación, las indentaciones resultan más profundas minimizando el efecto de la no convergencia a un punto de las caras del indentador Vickers. El empleo de este indentador permite una comparación casi

⁵Entiéndase promedio a nivel submicroestructural, aparente a nivel microestructural en las escalas indicadas en el Cap. 2.

directa con los resultados de la bibliografía en microindentación instrumentada y convencional por cuanto se adopta para el resto del trabajo.

Del análisis de la bibliografía se determinó que los protocolos de conservación y ensayo pueden alterar los resultados de microindentación. Sin embargo, la influencia de algunas variables tales como la conservación de muestras a temperaturas mayores a -20°C durante períodos cortos y la inclusión o infiltrado en resina sobre las propiedades del hueso no son concluyentes. Si bien no resultan fáciles de cuantificar, los efectos de las variaciones en la carga máxima, la velocidad de carga y el tiempo de mantenimiento carga sobre el módulo de elasticidad del tejido muestran tendencias claras y consistentes en los artículos revisados. Es probable que alguna diferencia entre el arreglo de las fases, la cantidad de ellas o ambas entre las especies y piezas óseas reportadas afecte las mediciones por cuanto, en la actualidad no es posible determinar cuantitativamente y *a priori* cuán sensible es el módulo de elasticidad a los cambios de tales variables.

8.4. Indentación instrumentada

Existen numerosos métodos para el ensayo de piezas con el objeto de obtener la dureza y el módulo de elasticidad de un material mediante ensayos de indentación instrumentados. En este trabajo se utiliza el método de Oliver y Pharr (1992) por ser el más difundido y ampliamente aceptado. A continuación se presentan en forma sucinta los aspectos teóricos fundamentales del método.

8.4.1. Hipótesis, convenciones y relaciones fundamentales

El método consiste en hacer una indentación con una punta previamente seleccionada mientras se registra la carga y el desplazamiento durante un ciclo completo de carga y descarga. La impronta se forma debido a la naturaleza elástica y plástica de material bajo estudio, mientras que la descarga se supone únicamente elástica (Oliver y Pharr, 1992). En la Figura 8.3 se muestra un esquema de los datos obtenidos mediante el ensayo, donde P representa a la carga, h al desplazamiento relativo a la superficie inicial sin deformación y, S = dP/dh es la rigidez de contacto que, como se observa en la figura es igual a la pendiente inicial de la curva de descarga.

Puesto que con indentadores piramidales y cónicos el área de contacto no permanece constante a medida que se retira la carga, las gráficas de la descarga en función del desplazamiento resultan curvas y pueden aproximarse por la ecuación

$$P = B(h - h_f)^m,$$
 (8.1)

donde B y m son constantes determinadas mediante el ajuste de la curva de descarga y; h_f , también determinado mediante ajuste, es la profundidad de la impresión remanente una vez retirada la carga.

La rigidez de de contacto S se obtiene derivando la expresión (8.1) respecto de h y sustituyendo para una profundidad igual al valor máximo h_{max} , es decir



Figura 8.3: Esquemas del diagrama de carga en función del desplazamiento (izq.) y, de la función de carga (der.) en un ensayo instrumentado.

$$S = \frac{dP}{dh}|_{h=h_{max}} = mB(h_{max} - h_f)^{m-1}.$$
 (8.2)

La profundidad de contacto se estima a partir de los datos de carga en función de desplazamiento. La suposición principal es que la periferia de contacto se "hunde" o desplaza en el sentido de la indentación y que este desplazamiento puede describirse mediante los modelos de indentación de un semi-espacio elástico plano con un indentador de geometría simple. De este modo, el hundimiento h_s está dado por

$$h_s = \varepsilon \frac{P_{max}}{S},\tag{8.3}$$

donde ε es una constante que depende de la geometría del indentador. A modo de ejemplo, un indentador cónico posee $\varepsilon = 0, 72$, un paraboloide de revolución $\varepsilon = 0, 75$ y un indentador plano posee $\varepsilon = 1$. Por lo tanto la profundidad de contacto, h_c se obtiene como

$$h_c = h_{max} - \varepsilon \frac{P_{max}}{S}.$$
(8.4)

Idealmente el área proyectada del indentador puede estimarse conociendo la geometría de este y la profundidad de la penetración. En la práctica se usa una "función de área", es decir, una relación que permite determinar el área proyectada del indentador, A, conociendo la profundidad de contacto h_c . Los parámetros geométricos se ilustran en la Figura 8.4.



Figura 8.4: Esquema del proceso de descarga y parámetros de la geometría durante y después del contacto.

La dureza, H, y el módulo de elasticidad reducido, E_r , pueden estimarse mediante las expresiones

$$H = \frac{P_{max}}{A},\tag{8.5}$$

у

$$E_r = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{A}} \frac{S}{\beta}.$$
(8.6)

La ecuación (8.6) es válida para cualquier indentador axisimétrico y, pese a haber sido deducida para contacto elástico, da buenas predicciones en problemas de contacto elastoplástico. La constante β depende de la geometría del indentador y se emplea para considerar las desviaciones de la rigidez provocadas por la falta de simetría axial de los indentadores piramidales.

Puesto que el módulo de elasticidad reducido considera la deformación tanto de la probeta como del indentador, el módulo de elasticidad del material ensayado se obtiene mediante la expresión

$$E = (1 - \nu^2) \left(\frac{1}{E_r} - \frac{1 - \nu_i^2}{E_i}\right)^{-1},$$
(8.7)

donde E y ν son los módulos de elasticidad o de Young y el coeficiente de Poisson del material de la probeta ensayada mientras que E_i y ν_i representan las magnitudes homólogas del indentador. En indentadores de diamante, estos valores son 1141 GPa y 0,07 respectivamente. De este modo, es necesario conocer de antemano el valor del coeficiente de Poisson del material a ensayar.

8.4.2. Determinación de la función de área y la compliancia

La función de área, también conocida como función de forma del indentador, debe calibrarse mediante mediciones independientes de modo tal que se consideren las desviaciones de la geometría ideal de los indentadores. Dicho de otro modo, como el indentador no es ideal ni perfecto, no termina en punta sino que tiene un pequeño radio y existen defectos de fabricación o daño debido al uso que hacen que el área proyectada del indentador para una dada profundidad difiera de su valor teórico. Al mismo tiempo, la compliancia del equipo influye sobre los resultados de las mediciones del módulo de elasticidad y de la dureza ya que afecta directamente a los desplazamientos registrados.

El sistema completo se modela como dos resortes en serie por lo tanto, la compliancia medida total C, la inversa de la rigidez medida, es la suma de la compliancia del marco de carga (C_f) y la compliancia de contacto $C_c = 1/S$. Esta última puede determinarse a partir de la expresión (8.6), por lo tanto

$$C = C_f + \frac{1}{2E_r\beta}\sqrt{\frac{\pi}{A}},\tag{8.8}$$

Por lo tanto, suponiendo que la compliancia del marco de carga es constante para todo valor de carga, un gráfico de C en función de $A^{-1/2}$ es lineal. La ordenada al origen representa el valor de C_f .

Para usar la expresión anterior es necesario conocer el valor de A, y esta es una función del la profundidad de contacto. Usualmente, la función de área se obtiene a partir del ajuste de una curva de área en función de h_c como

$$A_{(h_c)} = C_0 h_c^2 + C_1 h_c^1 + C_2 h_c^{1/2} + C_3 h_c^{1/4} + C_4 h_c^{1/8} + C_5 h_c^{1/16}, \qquad (8.9)$$

donde los C_i valores representan a las constantes de ajuste.

De la observación de las expresiones (8.8) y (8.9) resulta evidente que C_f y $A_{(h_c)}$ están vinculadas puesto que la precisión de la estimación del área depende de la medición de la profundidad de contacto que a su vez está relacionada con los desplazamientos de la muestra y el marco de carga. Para obtener estas cantidades simultáneamente, Oliver y Pharr (1992) propusieron un método iterativo.

Otro método propuesto por Hysitron, Inc. (Hysitron, 2001) consiste en realizar una serie de indentaciones a distintas profundidades sobre un material de módulo conocido para luego computar el módulo reducido analíticamente a partir de la ec. (8.7). El el área se computa despejando A de la ec. (8.6) y se la grafica en función de la profundidad de contacto. Finalmente se ajusta la curva mediante la ec. (8.9).

Para computar la compliancia del cuadro de carga C_f resulta conveniente escribir la expresión (8.8) en función de la carga. Para ello se despeja el valor de la carga Pde la ec. (8.5) y, sustituyendo en (8.8) se tiene

$$C = C_f + \frac{1}{2E_r\beta}\sqrt{\frac{H\pi}{P_{max}}}.$$
(8.10)

Suponiendo que el módulo reducido y la dureza son constantes en el material de calibración, típicamente cuarzo fundido, en un gráfico de C en función de $1/\sqrt{Pmax}$ se obtiene una línea recta cuya ordenada al origen es la compliancia del cuadro de carga o aparato.

8.4.3. Observaciones generales

Cuando las profundidades de la indentación son pequeñas, el área de contacto también lo es, de este modo la compliancia de contacto, término de la derecha en la ec. (8.8), es el dominante en la compliancia total. Por otro lado, a profundidades bajas, el área difiere más de su valor teórico (punta redondeada en lugar de aguda). En materiales duros, y con indentaciones profundas, el término dominante es la compliancia del marco. Además, en estos casos, debido a que la forma del indentador puede controlarse en forma muy precisa, la expresión teórica del área como función de la profundidad de contacto no resulta tan afectada por la incertidumbre de la función de área en la punta.

En material óseo y usando cargas del orden del Newton las profundidades y áreas son grandes por cuanto para determinar la función de área pueden usarse las expresiones de los indentadores ideales. Para un indentador Vickers ideal, esta es

$$A = 4h_c^2 \tan^2\theta \qquad \text{siendo} \qquad \theta = 68^\circ. \tag{8.11}$$

Puesto que el módulo reducido del hueso es relativamente bajo, la compliancia de contacto es el factor dominante de la compliancia total en equipos con una C_f baja, salvo a comienzos del ensayo donde las indentaciones son poco profundas.

Se dijo que el parámetro geométrico β depende del tipo de indentador. Los valores más empleados en la literatura especializada para indentadores Berkovich y Vickers son $\beta = 1,034$ y $\beta = 1,012$ respectivamente. En realidad, en la mayoría de los autores está de acuerdo en que el valor de β es igual a uno cuando el indentador es cilíndrico y plano pero no para las demás geometrías. El amplio rango de valores reportado para los demás indentadores hace que sólo sea posible indicar que β debe ser ligeramente mayor a uno, sin embargo a los fines prácticos normalmente se toma igual a la unidad.

Usando el concepto de "forma del indentador efectiva" y las ecuaciones de Sheddon Oliver y Pharr (2004) demostraron que el parámetro geométrico ε toma valores entre 0,74 y 0,79 cuando el parámetro de ajuste m toma valores entre 1,2 y 1,6. De este modo justificaron el valor 0,75 empleado en la práctica cuando se emplan puntas Berkovich.

Una de las suposiciones del método es la de "hundimiento" elástico, por cuanto el procedimiento descrito implica la inexistencia de "apilamientos" en la periferia de la impronta como ocurre en algunos materiales. Cuando hay apilamientos, el área de contacto resulta mayor que la predicha por el método haciendo que tanto la dureza como el módulo resulten sobreestimadas. La limitación principal es la hipótesis de deformación elástica que hace que no puedan modelarse adecuadamente los apilamientos. Bolshakov (1996) sugirió que la relación entre la profundidad final de la indentación y la profundidad máxima, h_f/h_{max} puede usarse para identificar la posibilidad de existencia de apilamientos en un dado material. Esta relación puede tomar valores entre cero y uno. El límite inferior corresponde a un comportamiento únicamente elástico mientras que el límite superior corresponde a un comportamiento plástico rígido. Numéricamente determinó que la severidad del apilamiento depende del esta relación y del endurecimiento del material. En particular, el apilamiento es grande cuando el parámetro de Bolshakov h_f/h_{max} es cercano a uno y hay poco endurecimiento. Bolshakov notó que cuando $h_f/h_{max} < 0.7$ el apilamiento resulta despreciable sin importar si el material presenta o no endurecimiento.

8.5. Protocolos y procedimientos

A partir de la revisión bibliográfica fue posible identificar aspectos comunes, sugerencias y prácticas recomendadas asociadas a la conservación preparación, acondicionamiento y ensayo de las muestras de tejido trabecular. Éstas no fueron presentadas en forma detallada en la Sección 8.3 a efectos de facilitar su lectura pero fueron condensadas en los párrafos siguientes.

8.5.1. Protocolo de conservación

En función de los resultados de investigaciones previas, las muestras de huesos deberían congelarse a -20°C en recipientes plásticos cerrados, Weaver (1966). Antes de su ensayo las muestras deberían descongelarse en una solución salina a temperatura ambiente. El tiempo de descongelado depende del tamaño de la muestra. Sin embargo, si los ensayos pueden realizarse dentro de 1 o 2 días después de adquirida la muestra fresca, puede mantenerse en un congelador a -4°C o menos (Knets, 1999; An y Draughn, 2000). La evaporación del contenido de agua debe evitarse durante los períodos en los cuales el hueso no se mantenga refrigerado.

8.5.2. Procedimiento de preparación de las muestras

La única coincidencia en todos los procedimientos para el ensayo del tejido trabecular mediante técnicas de indentación instrumentada es el uso de un soporte (PMMA o epoxi). Esto impide el ensayo del tejido trabecular fresco sin embargo, resulta interesante evaluar la influencia de algunas variables tales como la fijación y el deshidratado sobre los resultados de microindentación. Por este motivo se presenta a continuación un protocolo que fuera usado exitosamente por Ballarre et al. (2011) para la caracterización del hueso "*nuevo*" que crece alrededor de implantes metálicos en estudios in-vivo. El procedimiento consiste en el infiltrado de las muestras fijadas y deshidratadas en metacrilato de metilo (PMMA). El procedimiento para el preparado del PMMA, el fijado y deshidratado de las muestras y, su infiltrado se describe a continuación.

Lavado del metacrilato de metilo

Se utiliza metacrilato de metilo de uso dental, un líquido acrílico termocurable que posee un inhibidor de reacción disuelto que debe ser retirado. Para ello se vierten 260 ml de metacrilato en un erlenmeyer. Luego, se vierten en una ampolla de decantación cerrada y se prepara una solución de NaOH (hidróxido de sodio) con 45 gr de soluto por cada litro de agua destilada. Sólo 250 ml de la solución se agregan a la ampolla y se deja decantar (normalmente más de un minuto). La solución acuosa toma un color oscuro debido a la presencia del inhibidor y puede retirarse abriendo la ampolla. Se repite el proceso de lavado hasta agotar el litro de solución de NaOH. Posteriormente se realizan cuatro lavados similares, esta vez hasta agotar un litro de agua destilada. Finalmente se filtra el metacrilato con un papel de filtro en un embudo lleno de CaCl₂ (cloruro de calcio) anhidro con el objeto de retener el agua remanente. El envase en el cual se colectó el metacrilato debe guardarse en una heladera.

Agregado del iniciador

Se agrega el 1 gr de peróxido benzoico por cada 100 ml de metacrilato y se calienta la mezcla a baño María sin alcanzar los 80°C. La mezcla luego debe enfriarse hasta 40°C en un baño con hielo. Este proceso debe repetirse cinco veces. Se notará que la mezcla se vuelve viscosa y adquiere una consistencia similar a la miel. La mezcla debe enfriarse rápidamente en agua helada con el objeto de evitar la reacción de polimerización. Por último, la mezcla se almacena en una heladera hasta su utilización.

Fijado, deshidratado y acondicionamiento de las muestras

Las muestras se fijan en formol al 10% al menos durante un día. Posteriormente se deshidratan durante un día en una solución acuosa al 75 % en volumen de etanol, otro en una al 80 % y un día en etanol al 100 %. Posteriormente las muestras se mantienen durante un día en una solución compuesta por 50 % en volumen de etanol (puro o 100 %) y metacrilato sin lavar y otro día en metacrilato puro.

Infiltrado

Las muestras se colocan en recipientes de vidrio y se llenan con metacrilato lavado y con el iniciador. Los recipientes cerrados se mantienen durante al menos cuatro días en una estufa a 32° C. Se debe verificar diariamente la contracción del polímero, de ser necesario agregar más metacrilato para mantener la muestra completamente "su-mergida". Las probetas pueden retirarse para su corte y posterior ensayo rompiendo el recipiente de vidrio.

8.5.3. Procedimiento de microindentación

El procedimiento comienza con las probetas preparadas que deben asegurarse mediante los dispositivos previstos a la bandeja de ensayo del microindentador. Puede ser necesario montar la probeta sobre un soporte metálico antes de asegurarlas a la bandeja de ensayos. Si es así, se ha reportado que el uso de una muy delgada capa de cianoacrilato no altera los resultados (Fischer-Cripps, 2009).

La punta o indentador debe colocarse en el transductor y éste en el equipo antes de asegurar la muestra. Una vez aseguradas la o las muestras, se deben tarar los instrumentos y realizar las calibraciones sugeridas por el fabricante. Es una buena práctica permitir que el equipo alcance una temperatura estable antes de comenzar con los ensayos.

Posteriormente se inician los programas y se indican los límites de seguridad⁶. De ser necesario, se efectúa la calibración del sistema óptico, de la función de área y compliancia del equipo.

A continuación se realizan las calibraciones para ajustar la fuerza y los valores de la función de carga. Normalmente esto se realiza haciendo una indentación virtual en aire, es decir sin contacto.

⁶Por ej. la altura que evita que la punta colisione con las muestras durante su desplazamiento.

Se crea una función de carga trapezoidal, ver nota al pie 3. Los valores sugeridos son: una velocidad de carga de 0,2 N/s, un tiempo de mantenimiento de 45 s a una carga máxima de 1,5 N y, una velocidad de descarga de 0,1N/s. Estos parámetros fueron seleccionados a partir de los valores reportados en la bibliografía y considerando las características del equipo disponible en el INTEMA, Triboindenter 900 Hysitron Inc, Hysitron (2001). Las ganancias y el control de realimentación se ajustan en función de los parámetros de la función de carga de acuerdo a las especificaciones del fabricante del equipo.

Las regiones a ensayar se seleccionan utilizando el sistema óptico del equipo y, una vez definidas se inicia la adquisición.

8.6. Determinación del módulo de elasticidad del tejido trabecular de una cabeza femoral bovina

Los procedimientos indicados precedentemente fueron aplicados a probetas construidas a partir de una muestra proveniente de una cabeza femoral bovina. Puesto que la influencia de las resinas de soporte y la fijación con formol sobre los resultados del módulo de elasticidad del tejido resulta difícil de cuantificar a partir de la bibliografía estas variables fueron analizadas explícitamente. Sin embargo, debido a problemas técnicos y de disponibilidad del equipo, los resultados no pudieron compararse con resultados sobre muestras de hueso fresco.

8.6.1. Materiales y métodos

Seccionado de las probetas

Debido a que los estudios microtomográficos empleados en capítulos anteriores provenían de muestras tomadas de cabezas femorales, en este estudio se extrajo una muestra de una cabeza femoral bovina. La muestra fue recibida inmediatamente después de su desposte, Figura 8.5, y se almacenó durante un día a -10° C.

La muestra fue seccionada manualmente utilizando una sierra convencional de 42 dientes, Figura 8.6. Se efectuaron cinco cortes, los cuatro indicados en la Fig. 8.6 y uno perpendicular a la dirección de avance de ellos con el objeto de extraer una porción de hueso oblonga.

La porción extraída fue seccionada con una máquina de corte lento construida para tales propósitos, Figura 8.7. Durante el corte se proveyó de irrigación suficiente para evitar la necrosis del tejido por aumento de temperatura. El corte fue efectuado utilizando una hoja de corte diamantado de 4" de diámetro y 0,012" de espesor (Diamond Wafering Blade 15HC, Buehler) a 150 RPM.

Se obtuvo un prisma de $20 \times 24 \times 23$ mm que fue posteriormente seccionado para obtener tres muestras M1, M2 y M3 cuyo eje longitudinal se orientó en la dirección ventral-dorsal, lateral-medial y cranio-caudal respectivamente.

Preparación de las probetas

Las muestras M1, M2 y M3 se seccionaron para obtener tres prismas de 5×5 mm



Figura 8.5: Detalle de la muestra recibida.



Figura 8.6: Identificación y detalle de dos de los cortes realizados.



Figura 8.7: Detalle de uno de los cortes efectuados.

de sección transversal que fueron preparados utilizando tres métodos a saber: fijado con formol (F), fijado con formol y deshidratado con alcohol (FC) y muestras frescas (V), Figura 8.8.

El último juego de muestras fue almacenado a -10 °C (en lugar de los -20 °C recomendados) sin embargo, debido a que los ensayos se vieron demorados por problemas técnicos, tales muestras no fueron analizadas ya que la degradación enzimática no se arresta suficientemente a esa temperatura, alterando las propiedades mecánicas.

Tres muestras de cada dirección se mantuvieron en formol durante dos semanas mientras que otras tres se mantuvieron en formol 10 días. Las últimas fueron sometidas a un proceso de deshidratado en soluciones de agua-etanol. A modo de ejemplo, se muestran tres de ellas en la Figura 8.9.

Las seis muestras se colocaron en recipientes de vidrio donde fueron incluidas en metacrilato de metilo (Prothoplast, Subiton Labs.), Figura 8.10. Las muestras se mantuvieron en un horno eléctrico a 32°C durante 4 días.

Los recipientes vítreos fueron retirados y se realizaron cortes de las muestras incluidas con una hoja diamantada a baja velocidad. Para los ensayos de indentación instrumentada se utilizaron lajas de 4 mm de espesor a partir de las cuales se prepararon las probetas para indentación. Para ello una de las caras de cada laja fue desbastada con papel abrasivo con tamaños de granos cada vez más finos (desde 600 hasta 2000) y finalmente pulidas con alúmina de 0,3 y 0,05 μ m en un paño de pulir (Metcloth, Buehler). Las probetas fueron lavadas en agua destilada entre cada pulido con el objeto de remover partículas adheridas.

Ensayos mecánicos de (micro) indentación instrumentada Los ensayos de indentación instrumentada se realizaron 52 días después del inicio del





Figura 8.9: Deshidratado de muestras (etanol 100 %).

fijado en formol debido a problemas que afectaron la disponibilidad del equipo empleado, TriboIndenter 900 equipado con un MultiRange NanoProbe^{\mathbb{R}} (Hysitron). Todos los ensayos fueron realizados a una temperatura de 23°C empleando un indentador Vickers. Las muestras fueron montadas sobre pletinas metálicas utilizando una delgada capa de cianoacrilato y luego fueron aseguradas con un dispositivo



Figura 8.10: Probetas incluidas antes de ser colocadas en un horno a 32° C.

adecuado a la bandeja de ensayos del equipo.

Se utilizó una función de carga trapezoidal con una velocidad de carga de 0,2 N/s, un tiempo de mantenimiento de 45 s a una carga máxima de 1,5 N y, una velocidad de descarga de 0,1 N/s. A efectos de minimizar la influencia de la resina de soporte, las indentaciones fueron efectuadas en las intersecciones de las trabéculas.

La dureza y el módulo de elasticidad fueron computados post-procesando los datos adquiridos durante el ciclo de carga descrito. Para ello se empleó el método de Oliver y Pharr (1992) en el que se ajusta la curva de descarga mediante la ec. (8.1). En este estudio el ajuste se efectuó empleando porciones de la curva de descarga entre el 20-95 %, 25-90 %, 40-90 % y 100 % de la carga máxima P_{max} utilizando el método de ajuste por mínimos cuadrados. La rigidez de contacto S se determinó mediante la ec. (8.2) mientras que la profundidad de contacto fue estimada usando la ec. (8.4) considerando un valor de $\varepsilon = 0,75$. La dureza y el módulo reducido se computaron mediante las relaciones (8.5) y (8.6). Finalmente el módulo de elasticidad del tejido trabecular se determinó usando la ec. (8.7)

$$E = (1 - \nu^2) \left(\frac{1}{E_r} - \frac{1 - \nu_i^2}{E_i}\right)^{-1}$$
(8.7)

8.6.2. Resultados

En cada probeta se realizaron entre 8 y 9 indentaciones sobre el tejido trabecular. Las curvas de carga en función del desplazamiento que presentaron problemas de contacto, fracturas u otros eventos que alteran la suavidad de las curvas fueron desechadas. En ningún caso se observaron efectos de adhesión entre la punta ni la formación de una nariz en la curva de descarga pero, se detectó creep. La velocidad de creep promedio fue de de 31,13 nm/s mientras que la profundidad máxima promedio fue de 14153,66 nm. El valor de la profundidad máxima (promedio) alcanzado en las muestras únicamente fijadas fue un 2 % mayor que el hallado en las muestras fijadas y deshidratadas, en cambio, la velocidad de creep fue un 1% menor. En la Figura 8.11 se muestran una curva de carga en función del desplazamiento y una impronta típicas.



Figura 8.11: (a) Curva de Carga en función del desplazamiento, (b) detalle de una impronta.

En la Tabla 8.1 se muestran los parámetros de ajuste B, h_f y m determinados mediante mínimos cuadrados utilizando distintos rangos de la curva de descarga en la probeta fijada ensayada en la dirección cranio-caudal (M3 F). Esta probeta fue seleccionada puesto que posee el mayor número de indentaciones válidas.

Muestra	Rango	${oldsymbol E}_r$	Parámetro de ajuste			
	de carga	[GPa]	(valor medio y desviación estándar)			
	[%- %]		В	h_f	m	
M3F	100	9,7189	0,18020	$9377,\!30536$	1,93520	
		$(1,\!436)$	(0, 1479)	(402,7405)	(0,0966)	
	40-90	9,7231	$0,\!17656$	$9376,\!51637$	$1,\!93828$	
		$(1,\!440)$	(0, 1482)	$(402,\!2213)$	(0,0972)	
	15 - 100	9,7331	$0,\!17415$	$9374,\!81866$	$1,\!93894$	
		$(1,\!433)$	(0, 1439)	$(401,\!4926)$	(0,0958)	
	15-95	9,7118	$0,\!17833$	$9374,\!81865$	$1,\!93626$	
		$(1,\!435)$	(0, 1478)	$(401,\!4926)$	(0,0962)	
	20 - 100	9,7361	$0,\!17368$	$9374,\!81866$	$1,\!93953$	
		$(1,\!433)$	(0, 1441)	$(401,\!4926)$	(0,0961)	
	20-95	9,7142	$0,\!18327$	9377, 49995	$1,\!93579$	
		$(1,\!436)$	(0, 1589)	$(405,\!1381)$	(0,0989)	

Tabla 8.1: Parámetros de ajuste hallados considerando distintos rangos de descarga.

Nótese que el valor de m es cercano a 2 por cuanto ε resulta cercano a 0,72 en lugar del valor convencional (0,75). Sin embargo, para los ensayos realizados, la diferencia en el módulo de elasticidad computado sería del orden del 0,7% por cuanto los ensayos se realizaron empleando el valor de ε convencional reportado en la literatura.

En la Tabla 8.2 se reporta el módulo reducido de los ensayos realizados en cada una de las direcciones y con ambos métodos de preparación. El módulo reducido se reporta como valor medio junto a su desviación estándar y los valores mínimo y máximo del módulo para cada dirección. Para este análisis se emplearon los valores del ajuste mediante tres parámetros obtenido a partir del análisis del 100 % de la curva de descarga y considerando ν_{hueso} igual a 0,3. En la Figura 8.12 se muestran los valores promedio del módulo de elasticidad y los valores mínimos y máximos correspondientes a cada dirección y muestra

Tipo de		E_r				
Preparación	Dirección	Val. Medio	Desv. Est.	Mín.	Máx.	
Fijado	1	8,068	$1,\!499$	6,049	$10,\!133$	
	2	$8,\!151$	$1,\!282$	$6,\!075$	9,718	
	3	9,719	$1,\!436$	$7,\!070$	$11,\!404$	
Fijado y	1	$9,\!437$	$1,\!486$	$6,\!697$	$11,\!392$	
deshidratado	2	$9,\!930$	$2,\!454$	6,733	$13,\!904$	
	3	$10,\!233$	$0,\!994$	8,663	11,722	

Tabla 8.2: Módulo reducido E_r en función de la dirección y el tipo de preparación de las probetas.



Figura 8.12: Módulos de elasticidad reducidos en las tres direcciones consideradas: 1 ventral-dorsal, 2 lateral-medial y 3 cranio-caudal. Las barras indican valores máximos y mínimos.

Se determinó el parámetro de Bolshakov (h_f/h_{max}) para cada una de las indentaciones realizadas. Se observó que en la muestra fijada y ensayada en la dirección 1 (ventral-dorsal), dos de los valores más altos del módulo reducido, E_r , corresponden a valores a valores de Bolshakov mayores que 0,7 por cuanto es posible que el E_r resulte sobreestimado. Omitiendo tales ensayos el valor medio del E_r en esa dirección resulta igual 7,038 GPa con una desviación estándar de 0,883 GPa. Algo similar ocurrió en la dirección cranio-caudal, el E_r y su correspondiente desviación estándar fueron 9,285 GPa y 0,154 GPa.

La tasa de parámetros de Bolshakov mayores que 0,7 en muestras fijadas y deshidratadas fue notablemente más elevada que en aquellas que solamente fueron fijadas. En particular en la dirección 1 (ventral-dorsal) 5 de 9 indentaciones válidas poseen un Bolshakov mayor a 0,7. Omitiendo estos resultados, el valor medio del E_r y su correspondiente desviación estándar son 8,220 GPa y 0,156 GPa. En la dirección dos (lateral-medial), los cinco ensayos realizados tienen un Bolshakov muy cercano a 0,7, dos de ellos en 0,699 y dos superan 0,7. Omitiendo estos dos últimos valores, el módulo reducido y su desviación estándar son 8,762 GPa y 1,802 GPa. En las demás muestras analizadas el parámetro de Bolshakov siempre fue menor a 0,7. Pese a esto, en dos de las muestras fijadas y deshidratadas un Bolshakov mayor a 0,7 no se correspondió con los valores más altos del E_r .

En la Tabla 8.3 se reporta la variación del módulo de elasticidad del tejido de las muestras fijadas en formol ensayadas en la dirección anterior-posterior (M3F) considerando valores del coeficiente de Poisson del hueso crecientes.

Tipo de	Coeficiente de	Módulo de elasticidad E
Preparación y dirección	Poisson	[GPa]
Fijado en dirección	0,2	9,412
Anterior-Posterior	$0,\!3$	$8,\!922$
	0,4	$8,\!235$

Tabla 8.3: Módulo de elasticidad del tejido en función del coeficiente de Poisson.

Los módulos de elasticidad E y las durezas H computadas para cada una de las muestras se reportan en la Tabla 8.4. Los valores del módulo de elasticidad se determinaron considerando $\nu_{hueso}=0,3$ y empleando el 100 % de las curvas de descarga.

Tipo de	Módulo de Elasticidad y Dureza (V.Medio y D. Est.)			
Preparación	Dirección	$E [{ m GPa}]$	H [GPa]	
Fijado	1	$7,\!395\ (1,\!384)$	$0,3690 \ (0,018)$	
	2	$7,\!471\ (1,\!183)$	$0,3884\ (0,035)$	
	3	$8,\!921\ (1,\!328)$	$0,\!4181\ (0,\!036)$	
Fijado y	1	$8,\!661\ (1,\!374)$	$0,3821 \ (0,029)$	
deshidratado	2	$9,\!120\ (2,\!274)$	$0,3835 \ (0,058)$	
	3	$9,\!397\ (0,\!920)$	$0,4595 \ (0,026)$	

Tabla 8.4: Módulos de elasticidad y dureza de las probetas analizadas.

8.6.3. Discusión

Las probetas fijadas y deshidratadas resultaron más rígidas y duras que aquellas que únicamente fueron fijadas. El módulo de elasticidad en la dirección ventral-dorsal de la muestra fijada y deshidratada es un 14.6~% más alto que el de las muestra fijada ensavada en la misma dirección, en la dirección lateral-medial la diferencia es del 18,07% y de tan sólo un 5 % en la dirección cranio-caudal. La dureza de las muestras fijadas y deshidratadas de las probetas ensayadas en la dirección ventral-dorsal y cranio-caudal es un 3.43 y 9.01% mayor al de las probetas fijadas, sin embargo en la dirección lateral-medial la dureza es un 1,26 % menor. Nótese, que estos últimos valores están afectados por la mayor dispersión de los resultados computados en la dirección lateral-medial de la muestra fijada y deshidratada (Tabla 8.4). En promedio el módulo de elasticidad de las muestras fijadas y deshidratadas es un 12,5% mayor que el de las muestras únicamente fijadas, mientras que la dureza es un 4% mayor. Los resultados en términos de la dureza son comparables con los que se deducen de los datos de Weaver (1966) (6,79%) para hueso cortical.

Los módulos de elasticidad determinados en las direcciones ventral-dorsal y lateral-medial son similares en las muestras fijadas (F) y en aquellas fijadas y deshidratadas (FC), los rangos de dispersión se solapan. El módulo de elasticidad computado en la dirección 3 o cranio-caudal es mayor que para las otras dos. Esto permite suponer que a nivel macroscópico el hueso presentará características de isotropía transversal debido al comportamiento de la fase tejido. En promedio, la mayor diferencia entre los valores medios reportados para cada dirección es inferior al 12,5 %, puesto que además las bandas de dispersión se solapan resulta adecuado usar el valor promedio de los módulos de elasticidad hallados para cada dirección como E del tejido. Estos son 7,93 y 9,06 GPa para las muestras fijadas (F) y fijadas y deshidratadas (FC) respectivamente.

Para la determinación del módulo de elasticidad se consideró que el coeficiente de Poisson del tejido es igual a 0.3. La influencia de esta variable sobre los valores obtenidos en los ensayos efectuados en la dirección cranio-caudal sobre la probeta fijada fue analizada. El módulo se incrementa en un 5,21 % respecto del valor reportado cuando ν_{hueso} es igual a 0,2 y disminuye un 8,33 % cuando se considera igual a 0,4. Estas diferencias son menores a la dispersión de los resultados por cuanto se considera que el valor adoptado es adecuado para el análisis. Rho et al. (1997) reportó diferencias similares para identicos valores del coeficiente de Poisson⁷.

Los valores reportados dependen también del módulo reducido determinado mediante indentación que, a su vez, depende del rango de carga empleado en el ajuste de la curva de descarga. Se determinó la influencia del rango de la descarga empleado sobre el módulo reducido y sobre los parámetros de ajuste. Los valores promedio de los parámetros B, h_f y m fueron 0,17770, 9375,96 y 1,93733 mientras que sus respectivas desviaciones estándar son 0,0034, 1,18 y 0,0017 GPa. El valor del módulo reducido promedio fue de 9,72285 GPa y su desviación estándar de tan solo

⁷Nótese que rigurosamente la variación del ν debería considerarse también para determinar la constante geométrica β , Oliver y Pharr (2004).

0,0091 GPa. Pese a la escasa diferencia, el ajuste respecto de la curva de descarga experimental se degrada cuando se usan porciones pequeñas de la descarga. En particular cuando se empleó el rango de descarga que va desde los 40 al 90 % de P_{max} se observaron porciones de curva no ajustadas. En general las diferencias se vuelven evidentes en el talón de la descarga. A los efectos prácticos, resulta más conveniente contar con valores iniciales de B, h_f y m que preocuparse por el rango de la descarga seleccionado, al menos para las muestras evaluadas. Los valores de h_f que permitieron una rápida convergencia fueron aproximadamente 100 nm menores que los hallados experimentalmente.

Resulta interesante observar que los parámetros $B ext{ y } m$ difieren notablemente de los valores reportados por Oliver y Pharr (1992;2004) para distintos materiales. Oliver y Pharr obtuvieron valores de m entre 1,2 y 1,6 por cuanto consideran que, en nanoindentación instrumentada, la geometría del indentador Berkovich se parece más a un paraboloide de revolución (m=1,5) que a un cono (m=2). En este estudio, se realizaron microindentaciones instrumentadas empleando una punta Vickers sobre tejido trabecular obteniéndose valores más cercanos a m=2, sin embargo no se analizaron las variables que afectan este resultado.

Uno de los errores más importantes que se producen al determinar el módulo de elasticidad de un material mediante técnicas de indentación instrumentada está asociado al apilamiento del material alrededor del indentador. Cuando se produce el apilamiento el módulo resulta sobrestimado. Bolshakov propuso el uso de la relación h_f/h_{max} para el análisis de la influencia del apilamiento. En su estudio concluyó que cuando esta relación o parámetro es menor que 0,7 prácticamente no hay apilamiento sin importar cuál sea el comportamiento del material analizado por cuanto los valores estimados mediante el procedimiento de Oliver y Pharr clásico poseen un error bajo. Cuando el parámetro es mayor a 0,7 la precisión de la estimación depende fuertemente del comportamiento del material, en particular su endurecimiento o no. Si bien este parámetro fue concebido para el estudio de materiales homogéneos, por cuanto se desconoce la influencia de las características heterogéneas del tejido trabecular sobre éste y, no se sabe si el tejido preparado mediante alguno de los métodos descritos endurece o no, en este estudio se determinó el parámetro de Bolshakov para cada uno de los ensayos realizados.

Los módulos determinados considerando aquellos ensayos en los cuales el parámetro de Bolshakov es mayor a 0,7 son, en general, los de mayor valor. Esta observación parece estar de acuerdo con las observaciones de Oliver y Pharr (2004) y Pharr (1998) pero, los módulos más altos no siempre fueron aquellos en los cuales h_f/h_{max} resultó superior a 0,7. En particular, el número de ensayos en los cuales h_f/h_{max} mayor a 0,7 en probetas de muestras fijadas y deshidratadas permite inferir que omitir estos resultados favorecería alguna característica del compuesto (tejido y PMMA) por sobre otra. La evaluación del material preparado de esta forma merece ser investigada pero excede el alcance de este trabajo.

Si se excluyen del análisis aquellos ensayos en los cuales la relación h_f/h_{max} mayor a 0,7 tanto los módulos reducidos como los de elasticidad de la muestra fijada y ensayada en la dirección cranio-caudal como los de la muestra fijada y deshidratada serían menores pero los rangos seguirían solapándose por cuando las tendencias reportadas previamente no se modifican.

8.6.4. Conclusiones

Se efectuaron ensayos de microindentación instrumentada de una muestra de tejido óseo trabecular proveniente de una cabeza femoral bovina con el objeto de estudiar la influencia del infiltrado en resina (PMMA) y la fijación con formol sobre las propiedades mecánicas determinadas en tres direcciones ortogonales. Debido a la disponibilidad del equipo de indentación, no fue posible realizar un análisis comparativo entre las propiedades halladas en probetas preparadas con esos métodos y tejido fresco.

No se observaron efectos de adhesión entre la punta y las probetas, ni la formación de una nariz en la curva de descarga con el procedimiento empleado. Si bien no se observaron fisuras a moderados aumentos $(100\times)$, algunas curvas de carga presentaron "defectos" que hacen suponer la existencia de problemas de contacto o fracturas. Tales curvas fueron excluidas del análisis para la determinación del módulo de elasticidad del tejido.

Se determinó que las probetas fijadas y deshidratadas poseen un módulo de elasticidad un 12,5% mayor que aquellas que fueron solamente fijadas. Las diferencias en el módulo entre las muestras preparadas con uno u otro procedimiento son menores en la dirección cranio-caudal. La dureza mostró una tendencia similar pero, resultó sólo un 4% mayor en las muestras fijadas y deshidratadas.

Los módulos de elasticidad determinados permiten inferir una especie de isotropía transversal debida al tejido a nivel macroscópico. Esto es particularmente evidente en las probetas fijadas. Las probetas fijadas y deshidratadas permanecieron en formol durante menos tiempo y las diferencias entre los módulos determinados en cada dirección no son tan acentuadas. De todos modos, es necesario indicar que las direcciones anatómicas empleadas en los ensayos no necesariamente coinciden con las direcciones principales de anisotropía de la estructura trabecular.

Las bandas de dispersión de los ensayos en las tres direcciones consideradas para un mismo tipo de preparación se solapan, por cuanto el error en considerar un módulo de elasticidad isotrópico igual al promedio de las tres direcciones es del 11 % en las muestras fijadas e inferior al 4 % en muestras fijadas y deshidratadas.

Se analizó la sensibilidad del módulo de elasticidad con el coeficiente de Poisson del tejido (ν_{tejido}) en una de las probetas. Se determinó que, para valores ν_{tejido} entre 0,2 y 0,4, el módulo de elasticidad varía entre +5,21 % y -8,33 % respecto del valor medio ($\nu_{tejido} = 0,3$). Se concluye que éste valor es adecuado para estimar el módulo de elasticidad del tejido con un error acotado e inferior a la dispersión de las mediciones efectuadas.

En las muestras analizadas, y para los rangos de descarga considerados, no se encontró una diferencia significativa entre los módulos determinados ajustando la curva de descarga, aún cuando se observaron algunas diferencias en el talón de descarga. Los valores del parámetro de ajuste m determinados fueron cercanos a 2, por cuanto la geometría del indentador Vickers se asemeja más a un cono que a un paraboloide de revolución como ocurre con el indentador Berkovich.

Pese a que generalmente en los ensayos cuyo parámetro de Bolshakov (h_f/h_{max}) fue mayor a 0,7 se obtuvieron módulos de elasticidad elevados, por cuanto se presume la existencia de apilamientos, existieron excepciones. Se desconoce el origen de tales discrepancias pero, se espera que un entendimiento de los características heterogéneas del tejido trabecular y un análisis exhaustivo de la evolución de las curvas de carga pueda brindar mayores detalles acerca de este fenómeno y determinar la validez o no del parámetro de Bolshakov en la indentación instrumentada del hueso.

Por otro lado, en las muestras fijadas y deshidratadas se obtuvieron valores del parámetro de Bolshakov elevados. Debido a lo indicado en el párrafo anterior, sería aventurado excluir de las mediciones aquellas cuya relación h_f/h_{max} sea mayor que 0,7. Al hacerlo se pueden favorecer resultados que no reflejan todos los comportamientos que el tejido puede tener aunque también es cierto que su análisis provoca la sobreestimación de los módulos. La exclusión de los ensayos indicados provoca que los módulos reducidos de las muestras preparadas mediante ambos procedimientos sean menores pero no afectan las conclusiones generales del trabajo.

La evaluación de los temas indicados en los dos últimos párrafos merece ser estudiada y analizada pero excede el alcance de este trabajo.

8.7. Conclusiones

Se realizó una revisión bibliográfica de los procedimientos de indentación de huesos con el objeto de determinar el módulo de elasticidad del tejido óseo. A partir de un análisis crítico de la información se determinó que los ensayos instrumentados de indentación en la escala submicroestructural son adecuados para hallar el módulo de elasticidad del tejido óseo trabecular.

Además se seleccionó al indentador Vickers, usualmente conocido en metalografía como microindentador Vickers, para esta tarea y se presentó una descripción breve de la teoría de indentación instrumentada. También se redactaron protocolos y procedimientos de conservación, preparación y ensayo de las muestras de tejido trabecular.

A partir de la revisión bibliográfica y considerando el método de indentación seleccionado, se identificaron aspectos de difícil evaluación por cuanto se diseñó un experimento para evaluar tales aspectos a saber: influencia de la resina y del fijado sobre las propiedades del tejido. Otros aspectos relacionados al método, o más bien al procedimiento de procesamiento de los datos de los ensayos instrumentados, fueron analizados también. Se prestó particular atención a los estándares *de facto* del rango de ajuste de la curva de descarga (usualmente 95-20 %), que no resulta válido para algunos polímeros, y el ν del tejido.

Se observó una mayor dureza y rigidez de las muestras fijadas y deshidratadas respecto de las muestras únicamente fijadas. Se detectaron algunas diferencias entre

los módulos de elasticidad en las tres direcciones ortogonales evaluadas. Sin embargo, resulta adecuado emplear un módulo de elasticidad isotrópico igual al promedio en las tres direcciones para caracterizar la respuesta mecánica del tejido trabecular. En cuanto al coeficiente de Poisson, se determinó que un valor igual a 0,3 resulta adecuado para el estudio.

En función de los resultados obtenidos, y en ausencia de resultados sobre hueso fresco, en el resto del trabajo se utilizará un módulo de elasticidad del tejido trabecular bovino igual a 7,93 GPa, es decir el valor promedio hallado en las muestras fijadas.

Es posible que el tejido trabecular presente apilamientos, pese a lo indicado por algunos autores. Esto fue analizado a partir de la relación reportada por Bolshakov y merecería un estudio detallado ya que la determinación de las propiedades del tejido es fundamental para los propósitos de este trabajo.

Por otro lado, en función de los valores determinados para el parámetro m, se determinó que el indentador Vickers se asemeja más a un cono que a un paraboloide de revolución a diferencia del indentador Berkovich.

En cuanto al método, el rango de la descarga empleado tiene poca influencia sobre el módulo de elasticidad determinado si se asegura que la mayor porción de curva empleada para el ajuste de la curva de descarga incluye a la porción superior de la curva experimental.

Caso de estudio: determinación de las propiedades aparentes de una muestra de hueso trabecular

En este capítulo se aplican los procedimientos y protocolos desarrollados, implementados, y descritos en los capítulos anteriores a una muestra de hueso trabecular proveniente de una cabeza femoral bovina.

9.1. Materiales y métodos

Se obtuvo una muestra de una cabeza femoral bovina de un mercado local inmediatamente después de su desposte. La muestra fue seccionada hasta tener un prisma de $20 \times 24 \times 23$ mm. El prisma fue seccionado usando una máquina de corte lento y se confeccionaron dos juegos de probetas. Un juego fue empleado para determinar el módulo de elasticidad del tejido trabecular mediante ensayos de indentación instrumentada siguiendo los procedimientos descritos en el Cap. 8, mientras que otro fue enviado al instituto de instrumentación agropecuaria Embrapa, en São Carlos (Brasil) para ser escaneado en un microtomógrafo SkySkan 1072 (SkyScan Inc., Bélgica).

Las imágenes en formato .bmp fueron postprocesadas para construir modelos de elementos finitos de la muestra siguiendo los procedimientos descritos en el Cap. 4. Para la construcción de los modelos se emplearon 695 imágenes con un tamaño de píxel de 5,96 μ m. En la Figura 9.1 se muestra un detalle de la muestra enviada y una de las imágenes microtomográficas empleadas para construir los modelos.

Se construyeron modelos de elementos finitos usando un paso igual a 8 y 10 píxeles, es decir, elementos de 47,68 y 59,60 μ m respectivamente. Para cada paso, se construyeron modelos en los cuales se favoreció la detección de una u otra fase durante la asignación de propiedades a los elementos. Se halló el valor de la fracción volumétrica de tejido (FV) en cada modelo, las FV fueron comparadas con el valor de referencia (FVR) a efectos de computar el error de discretización geométrico (ED). El parámetro IG fue computado empleando el número de elementos de la fase tejido (o hueso) en los modelos con idéntico tamaño de paso. Las dimensiones de los modelos resultantes fueron 4,11×4,11×4,11 mm. En la Figura 9.2 se muestra la geometría de los modelos discretizados.

Los tensores de elasticidad aparentes fueron computados usando el método de homogenización asintótica. Los problemas de valor de contorno se resolvieron em-



Figura 9.1: Muestra escaneada y detalle de una imagen microtomográfica.



Figura 9.2: Modelos de elementos finitos de la muestra reconstruida usando: (a) paso igual a 8, (b) paso igual a 10.

pleando las propiedades de la Tabla 9.1, donde se reporta el valor del módulo de elasticidad del tejido hallado mediante ensayos de indentación instrumentada.

Propiedad	Tejido o hueso	Espacio hueco		
Módulo de Young	7930 MPa	10^{-5} MPa		
Coeficiente de Poisson	$0,\!3$	0		

Tabla 9.1: Propiedades de los materiales empleados

9.2. Resultados

Se computó el valor de la fracción volumétrica de tejido óseo de referencia (FVR) de la porción de las imágenes empleada para la construcción de los modelos de elementos finitos a partir de las imágenes binarizadas. El valor resultante fue igual a 0,391. En la Tabla 9.2 se resumen los datos de los modelos construidos usando elementos hexaédricos lineales.

Paso	Tipo Elem.	Nro.	Nro. Eler	n. Nro. Total	\mathbf{FV}	\mathbf{ED}	IG
	y Fase	\mathbf{Nodos}	Hueso	Elementos		[%]	[%]
10	${\rm Hexaedros}/{\rm hueco}$	343000	120652	328509	$0,\!3673$	-6,47	
	Hexaedros/hueso	343000	136929	328509	$0,\!4168$	$6,\!19$	$11,\!89$
08	${\rm Hexaedros}/{\rm hueco}$	658503	236366	636056	$0,\!3716$	$-5,\!23$	
	${\rm Hexaedros}/{\rm hueso}$	658503	261356	636056	$0,\!4109$	$4,\!84$	$9,\!56$

Tabla 9.2: Resumen de los datos de los modelos de elementos finitos construidos.

Puesto que el ED resulta menor cuando se favorece la detección de la fase tejido (hueso), sólo esos modelos fueron empleados para computar el tensor de elasticidad aparente mediante el método de homogenización asintótica. Para la resolución de los problemas de valor de contorno se usaron elementos lineales de integración reducida.

El tensor de elasticidad aparente C^0_{ijkl} calculado en el modelo construido con un paso igual a 8 se reporta en notación de Voigt

$$C^0_{ij_{Paso=8}} = \begin{bmatrix} 967,478 & 354,595 & 348,196 & -66,096 & -2,285 & -130,779 \\ 355,091 & 919,102 & 354,273 & -70,088 & -26,291 & 1,831 \\ 349,652 & 354,227 & 1159,087 & -9,337 & -8,471 & -138,242 \\ -65,855 & -70,119 & -9,418 & 307,857 & -45,653 & -8,897 \\ -2,635 & -26,362 & -8,711 & -45,711 & 359,552 & -19,940 \\ -132,427 & 1,882 & -138,242 & -8,998 & -20,211 & 366,410 \end{bmatrix} [MPa],$$

el tensor hallado para el modelo con paso igual a 10 es

$$C^{0}_{ij_{Paso=10}} = \begin{bmatrix} 881,832 & 324,054 & 312,445 & -58,865 & -2,091 & -123,102 \\ 324,591 & 842,001 & 322,494 & -61,981 & -21,784 & 4,353 \\ 313,704 & 322,427 & 1064,205 & -6,517 & -4,931 & -127,809 \\ -58,656 & -62,021 & -6,586 & 277,849 & -42,267 & -8,134 \\ -2,150 & -21,854 & -5,103 & -42,299 & 329,804 & -16,558 \\ -124,819 & 4,445 & -127,809 & -8,234 & -16,792 & 332,754 \end{bmatrix} [MPa].$$

En la Figura 9.3 se grafican los valores hallados para las componentes de la diagonal principal y sobre esta. El bajo ED e IG de los modelos de elementos finitos reconstruidos, junto a los resultados reportados en el Cap. 7, permiten emplear un ajuste lineal y computar el tensor de elasticidad de un elemento de tamaño nulo



Figura 9.3: Componentes del tensor de elasticidad aparente en función del tamaño del elemento: (a) tres primeras componentes de la diagonal principal; (b) últimas tres componentes de la diagonal principal; (c) componentes fuera de la diagonal principal.

$$C^0_{ij_{Paso=0}} = \begin{bmatrix} 1484, 115 & 540, 096 & 556, 464 & -107, 642 & -3, 466 & -182, 937 \\ 540, 096 & 1390, 589 & 545, 338 & -116, 135 & -50, 206 & -9, 350 \\ 556, 464 & 545, 338 & 1743, 030 & -23, 358 & -25, 636 & -203, 888 \\ -107, 642 & -116, 135 & -23, 359 & 484, 737 & -67, 061 & -13, 537 \\ -3, 466 & -50, 206 & -25, 636 & -67, 061 & 542, 126 & -37, 914 \\ -182, 937 & -9, 350 & -203, 888 & -13, 537 & -37, 914 & 567, 598 \end{bmatrix} [MPa].$$

9.3. Discusión y conclusiones

En este capítulo se presentó la aplicación de los procedimientos y protocolos estudiados e implementados en capítulos precedentes de este trabajo a la solución de un caso de de estudio. De este modo, se determinó el tensor de elasticidad del material homogéneo aparente C_{ijkl}^0 de una muestra de hueso trabecular bovino. Para ello se construyeron modelos de elementos finitos a partir de imágenes microtomográficas (Cap. 4), se determinaron las propiedades mecánicas del tejido mediante ensayos de indentación instrumentada (Cap. 8) y se aplicó el método de homogenización asintótica (Cap. 6 y 7).

En este trabajo se presentaron métodos para la determinación de las propiedades mecánicas aparentes de muestras de hueso trabecular. Estos métodos están basados en principios físicos y matemáticos rigurosos tales como la mecánica de medios continuos y los métodos de homogenización en el contexto de los materiales lineales y elásticos. Tales métodos, presentan la ventaja de aprovechar las características heterogéneas y jerárquicas del hueso trabecular.

El hueso trabecular se modeló como un material heterogéneo compuesto por dos fases, la fase tejido trabecular, responsable de soportar cargas, y el espacio hueco intertrabecular. La evidencia experimental permitió considerar a la fase tejido como un material lineal, elástico e isotrópico en el rango fisiológico. A los efectos prácticos, la fase espacio intertrabecular fue modelada también como un material lineal, elástico e isotrópico compresible de muy bajo módulo de elasticidad.

Se efectuó una revisión bibliográfica de los métodos de homogenización adecuados para el estudio mecánico del hueso trabecular. Considerando el empleo de reconstrucciones de geometrías óseas a partir de imágenes médicas, se seleccionó a los métodos de homogenización directo y asintótico como los más adecuados para estos propósitos.

Puesto que en este trabajo se empleó la teoría de medios continuos, y dada la naturaleza heterogénea (y variable con la posición en el seno de una pieza ósea) del hueso trabecular, se debilitó el concepto de elemento de volumen representativo (RVE) convencional. De este modo, las muestras de hueso trabecular aptas para ser evaluadas mediante los procedimientos descritos son aquellas en las cuales la teoría de medios continuos es válida. En ese sentido, quizás resulta más adecuado referirse a las porciones de hueso trabecular como muestras en lugar de elementos de volumen representativo.

Se desarrolló e implemento un procedimiento novedoso para la construcción de modelos de elementos finitos discretizados usando elementos hexaédricos a partir de imágenes microtomográficas. Se detectaron las principales fuentes de error en la representación de la geometría trabecular: los errores de segmentación y de discretización. El error de discretización fue significativamente reducido mediante un algoritmo de asignación de propiedades a los elementos finitos que identifica cuál es la fase dominante en el dominio del elemento. Este algoritmo puede ajustarse para priorizar la detección de una u otra fase.

Se determinó que el estándar de facto para caracterizar los errores de discretización geométrica, la fracción volumétrica de tejido, es inadecuado para estos propósitos debido a su poca sensibilidad a las alteraciones en el tamaño de los elementos. Por este motivo, se propuso un nuevo índice, IG, para cuantificar la calidad de la representación geométrica. Se obtuvieron buenos resultados cuando el IG fue inferior a 10.

Se adaptaron los procedimientos existentes para el ensayo de muestras de tejido óseo en la escala nano a la escala micrométrica usando ensayos de indentación instrumentada. Estos ensayos se utilizaron con el objeto de determinar el módulo de elasticidad del tejido trabecular. A tales efectos se desarrollaron procedimientos y protocolos para la conservación, preparación y ensayo de probetas de tejido trabecular.

Los procedimientos de homogenización desarrollados e implementados fueron verificados y validados experimentalmente siguiendo los lineamientos de ASME. Posteriormente, los procedimientos de homogenización se aplicaron a muestras de hueso trabecular y se analizaron comparativamente. Del análisis de los resultados obtenidos se determinó que:

- 1. Cuando la geometría no es cerrada en su contorno, entiéndase fase hueco sobre el perímetro, las propiedades aparentes de la muestra resultan fuertemente subestimadas cuando se usa el método de homogenización directo considerando tracciones uniformes. Por lo tanto, para el estudio de la geometría trabecular sólo debe emplearse el método directo considerando desplazamientos lineales en el contorno.
- 2. Las mallas de elementos finitos no estructuradas provocan una asimetría de la matriz constitutiva o del tensor de constantes elásticas aparente. Esto no representa un problema cuando se utiliza el método desarrollado para la construcción de los modelos de elementos finitos, ya que las mallas generadas son estructuradas.
- 3. El empleo de modelos en tres dimensiones es mandatorio para el estudio del comportamiento mecánico del hueso trabecular.
- 4. Cuando la fracción volumétrica de tejido es baja, el tamaño de los elementos debe ser debidamente considerado para obtener una representación microestructural adecuada. Del mismo modo, el tamaño de los píxeles empleados durante la adquisición de las imágenes de la geometría trabecular debe ser bastante menor que el espesor trabecular. En este trabajo, se observó que cuando la fracción volumétrica de tejido es del orden de 0,177 y el espesor trabecular de aproximadamente 100 μ m, un tamaño de píxel de 20 μ m resulta inadecuado.
- 5. Se concluyó que el esfuerzo computacional asociado al empleo de elementos de segundo orden es excesivo cuando se tiene una adecuada representación geométrica (error de discretización e IG bajos). Un uso más adecuado de las capacidades de cómputo disponibles es usar un paso más pequeño y tener una mejor representación de la geometría trabecular.

- 6. Aún cuando la representación de la geometría trabecular no sea demasiado buena, las componentes de los tensores de elasticidad computados mediante los métodos de homogenización directo y asintótico pueden ajustarse linealmente para obtener el tensor de elasticidad aparente considerando un elemento de tamaño nulo.
- 7. El método de homogenización asintótica predice un comportamiento aparente de la muestra de hueso trabecular que está acotado por las predicciones del método directo. Esto está de acuerdo con sus cotas energéticas. Además el método de homogenización asintótica es menos sensible a los cambios en el tamaño de los elementos. La condición de periodicidad de los campos deformación y tensión impuesta en el método asintótico evita que existan solapamientos de las muestras en el seno del hueso completo, como ocurre con el método directo en tracciones, y que se satisfaga la condición de periodicidad del campo de tensiones en caras opuestas de la muestra, situación ajena al método de homogenización directo en desplazamientos. Por estos motivos se concluyó que el método de homogenización asintótica resulta más adecuado para el estudio de comportamiento mecánico del hueso trabecular.

Durante el desarrollo de este trabajo se han detectado posibles direcciones para el trabajo futuro, algunas de ellas están estrechamente vinculadas al proyecto que dio origen a este trabajo, otras están relacionadas con *temas abiertos* acerca de la caracterización mecánica del tejido y hueso trabecular, mientras que algunas de ellas surgen como consecuencia de los resultados hallados en este trabajo.

Este trabajo se encuadra dentro del proyecto "desarrollo de una herramienta computacional para el análisis biomecánico predictivo del comportamiento óseo que incluya el proceso de adaptación del tejido óseo". En ese sentido, los procedimientos desarrollados proveen de un marco para el estudio de distintas teorías de remodelado óseo a escala microscópica. Parte de este enfoque fue presentado en el Segundo Taller de Órganos Artificiales, Biomateriales e Ingeniería de Tejidos, este trabajo se adjunta en el Apéndice G. Se espera que este enfoque brinde un marco para el estudio y el entendimiento del proceso de adaptación. La incorporación de teorías de remodelado interno permitirá no sólo un entendimiento mayor de los procesos de remodelado sino que, en un marco multiescala, proveerá de una poderosa herramienta para el diseño de prótesis, implantes y fijaciones.

Por otro lado, los resultados de este trabajo pueden usarse para evaluar y diseñar los *scaffolds* comúnmente usados en ingeniería de tejidos. En este sentido, la incorporación de métodos de optimización permitiría obtener *scaffolds* con propiedades específicas, e incluso, analizar su evolución y degradación en el tiempo.

Los algoritmos desarrollados para la construcción de los modelos de elementos finitos pueden ser mejorados. En su estado actual, las propiedades de un elemento se asignan por comparación de la fase dominante en seis tetraedros que componen un elemento hexaédrico patrón. Se seleccionó uno de los posibles arreglos de tetraedros en forma arbitraria. Por esto, la aplicación del algoritmo puede resultar en una ligera asimetría geométrica aún cuando se emplean muestras simétricas. Estos errores en la representación geométrica son trasladados a la etapa de cómputo.

Los ensayos de indentación instrumentada fueron realizados empleando un indentador Vickers. Este indentador resultó adecuado debido a la profundidad alcanzada durante el ensayo pero, la dificultad de obtener una punta aguda lo hace inadecuado para el estudio del hueso a baja carga y a escala del nanómetro. Es ésta la escala métrica en la que deben analizarse las propiedades del tejido nuevo o que surge de la adaptación ósea. Por este motivo, resulta necesario el estudio de las propiedades del hueso empleando técnicas de nano-indentación instrumentada, o utilizando alguna técnica que permita la determinación de las propiedades mecánicas en esta escala, resulta necesario.

En este trabajo se determinó que los rangos de los módulos de elasticidad hallados en trabéculas ensayadas en tres direcciones de una misma región anatómica se solapan, lo que justifica la hipótesis de isotropía del tejido trabecular. Sin embargo, en las muestras ensayadas se obtuvieron valores medios distintos. Estos resultados merecen un tratamiento detallado y podrían brindar nuevos datos acerca de cuál es el arreglo de las fases que componen el tejido en una muestra de hueso trabecular. Esta información es de fundamental importancia ya que brindaría información adicional acerca de la anisotropía trabecular. Esta información podría emplearse en conjunto con modelos multiescala y de optimización para comprender cuál es la función de costo real que provoca que el hueso se adapte en la forma que lo hace. En la actualidad, no existe consenso sobre este tema.

La influencia del infiltrado en resina y de los efectos de la deshidratación sobre el módulo de elasticidad del tejido trabecular aún no es clara. Este tópico merecería un estudio comparativo con muestras de tejido frescas.

El comportamiento ante indentaciones del hueso trabecular merece ser estudiado. En este trabajo se determinó que algunas muestras de tejido trabecular pueden presentar apilamientos. No está claro si esto fue una consecuencia del procedimiento de preparación de las probetas. La existencia de apilamientos fue analizada a partir de la relación reportada por Bolshakov y merecería un estudio detallado ya que la determinación de las propiedades del tejido es fundamental para los propósitos de este trabajo.

En cuanto a las técnicas de indentación, en este trabajo se determinó que el indentador Vickers se comporta más como un cono que como un paraboloide de revolución, por este motivo el parámetro ε debe ser ligeramente menor que el valor estándar 0,75. Esta diferencia debería ser considerada al efectuar comparaciones entre los resultados de micro-indentación instrumentada usando puntas Vickers y de nano-indentación y micro-indentación usando puntas Berkovich, típicamente consideradas como un paraboloide de revolución. El estudio de problemas de contacto considerando las características heterogéneas del hueso (e incluso otro material heterogéneo), en particular el análisis de la zona plástica, constituye otra interesante línea de trabajo que permitiría extender o refutar algunas de las hipótesis usadas en la práctica.

Finalmente, se enfatiza que los métodos desarrollados e implementados en este

trabajo no están restringidos al estudio de las propiedades mecánicas de huesos, sino que resultan de aplicación general para materiales compuestos. En su estado actual podrían emplearse para analizar la iniciación del daño microscópico en compuestos reforzados. Además, estos métodos podrían extenderse para considerar otras propiedades tales como las de difusión, piezoeléctricas, acústicas y térmicas.

Lista de Apéndices

Los apéndices de este trabajo se encuentran en el CD adjunto y se enumeran a continuación:

- Apéndice A: Programa BMPtoTIF.m. Convierte imágenes desde el formato .bmp a .tif.
- Apéndice B: Programa BONES_BUILDER_2010_7.m. Lee una serie de imágenes tomográficas en formato .tif y genera un archivo en formato ASCII con las coordenadas de una nube de puntos que forman parte de la estructura osea comprendida en la ventana de trabajo.
- Apéndice C: Programas ESCRIBEINI_2010_5v2.m, MESH_GENERATOR_2010_5.m y ESCRIBEINI_Hexa2010_6v3.m. Los programas ESCRIBEINI_Fecha_versión escriben un archivo .inp (malla huérfana) capaz de ser leído (importado a) ABAQUS ya con las propiedades de las fases asignadas a los elementos. Para ello emplean la salida del código MeshSuite (Calvo, 2005) y del MESH_GENERATOR__versión#, que a su vez emplean las salidas de BONES_BUILDER_fecha_versión.
- Apéndice D: Ecuaciones para la imposición de condiciones periódicas a una muestra (caras, aristas y esquinas) usando el método de los elementos finitos.
- Apéndice E: Programas Volumen3DHex_2010_06.m, MatrizM3D_2010_5.m, MatrizC3D_2010_5.m. Estos programas deben ejecutarse en secuencia. El primero computa el volumen de los elementos de la red de elementos finitos, el segundo computa los tensores de localización y el tercero el tensor de elasticidad que es reportado en notación de Voigt.
- Apéndice F: Programa ApareadoV6.m Asigna las restricciones a los nodos de la superficie de un modelo de elementos finitos para obtener condiciones periódicas en seis casos de carga (modelos en 3D).
- Apéndice G: Hacia el desarrollo de un marco para el estudio multiescala del proceso de remodelado óseo: micromecánica. Trabajo presentado en el segundo Taller de Órganos Artificiales, Biomateriales e Ingeniería de Tejidos, OBI 2011.
Bibliografía

- Abaqus 6.9. Abaqus software. Finite Element, 2009. Dassault Systèmes Simulia Corp. (Cited on pages 42, 45, 85 and 90.)
- An Y.H. y Draughn R. Mechanical Testing of Bone and the Bone-Implant Interface. CRC Press LLC, 2000. (Cited on pages 10, 11, 12, 14, 126, 130, 132 and 140.)
- Anglin C., Tolhurst P., Wyss U.P., y Pichora D.R. Glenoid cancellous bone strength and modulus. *Journal of Biomechanics*, 32(10):1091–1097, 1999. (Cited on page 10.)
- Argenta M.A., Buriol T.M., y Hecke M.B. Metodología para a obtenção de parâmetros físicos e geométricos do oss trabecular en função de imagens de micro tomografia. In Proceedings of the IX Congreso Argentino de Mecánica Computacional, II Congreso Sudamericano de Mecánica Computacional y XXXI Congreso Ibero-Latinoamericano de Métodos Computacionales en la Ingeniería MECOM de Bicentenario, XXIX Mecánica Computacional, 6363-6381. Asociación Argentina de Mecánica Computacional AMCA -, 2010. (Cited on page 43.)
- Ascenzi M.G., Benvenuti A., y Ascenzi A. Single osteon micromechanical testing. In Mechanical Testing of Bone and the Bone-Implant Interface. CRC Press LLC, 2000. (Cited on page 5.)
- ASM Handbook. Mechanical Testing and Evaluation, v.8. American Society for Metals, 2000. (Cited on pages 125, 126 and 129.)
- Ballarre J., Seltzer R., Mendoza E., Orellano J., Mai Y., García C., y Ceré S. Morphologic and nanomechanical characterization of bone tissue growth around bioactive sol-gel coatings containing wollastonite particles applied on stainless steel implants. *Materials Science and Engineering C*, 31(3):545–552, 2011. (Cited on page 140.)
- Bendsoe M.P. y Kikuchi N. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 71(2):197-224, 1988. (Cited on pages 22 and 36.)
- Bensoussan A., Lions J.L., y Papanicolaou G. Asymtotic Analysis for Periodic Structures. North-Holland, 1978. (Cited on pages 27 and 36.)
- Berger H., Kari S., Gabbert U., Rodrigez-Ramos R., Ginovart R., Otero J.A., y Bravo-Castillero J. An analytical and numerical approach for calculating effective material coefficients of piezoelectric fiber composites. *International Journal of Solids and Structures*, 42:5692–5714, 2005. (Cited on pages 80 and 87.)

- Böhm H.J. A short introduction to basic aspects of continuum micromechanics. 2010. ILSB Report/ILSB Arbeitsbericht 206. (Cited on pages 15, 24, 28, 30, 32, 34 and 36.)
- Bolshakov A. Finite Element Studies of Mechanical Property Testing by Nanoindentation Methods., Rice University, 1996. (Cited on page 139.)
- Bonucci E. Basic composition and structure of bone. In *Mechanical Testing of Bone* and the Bone-Implant Interface. CRC Press LLC, 2000. (Cited on pages 7 and 8.)
- Briscoe B., Fiori L., y Pelillo E. Nano-indentation of polymeric surfaces. Journal of Physics D: Applied Physics, 31(19):2395-2405, 1998. (Cited on page 130.)
- Buroni F.C., Commisso P.E., Cisilino A.P., y Sammartino M. Determinación de las constantes elásticas anisótropas del tejido óseo utilizando tomografías computadas. aplicación a la construcción de modelos de elementos finitos. In Proceedings of the ENIEF 2004, Mecánica Computacional, XXIII Mecánica Computacional, 3009-3032. Asociación Argentina de Mecánica Computacional - AMCA -, 2004. (Cited on page 44.)
- Buryachenko V. Micromechanics of Heterogeneous Materials. Springer, 2007. (Cited on pages 15, 22, 29, 32 and 36.)
- Calvo N.A. Generación de Mallas Tridimensionales por Métodos Duales., Universidad Nacional del Litoral, 2005. (Cited on pages 44, 45 and 167.)
- Carlström D. Micro-hardness measurements on single harvesian systems in bone. Cellular and Molecular Life Sciences, 10(4):171–172, 1954. (Cited on pages 127 and 128.)
- Carter D.R., Fyhrie D.P., y Whalen R.T. Trabecular bone density and loading history: Regulation of connective tissue biology by mechanical energy. *Journal of Biomechanics*, 20(8):785-789,789-794, 1987. (Cited on page 1.)
- Chapetti M.D. Mecánica de Materiales, Teorías de Elasticidad, Plasticidad y Mecánica de Fractura. Ediciones Al Margen, 2005. (Cited on pages 15 and 19.)
- Ching-Chang K., Kohn D.H., y Hollister S.J. Effective anisotropic elastic constants of bimaterial interphases: Comparison between experimental and analytical techniques. Journal of Materials Science, 7(2):109–117, 1996. (Cited on page 2.)
- Cisilino A., D'amico D., Buroni F., Commisso P., Sammartino M., y Capiel C. Construcción de modelos computacionales para el análisis de esfuerzos mecánicos de piezas óseas utilizando imágenes de tc: aplicación a la articulación gleno-humeral. *Revista argentina de radiología*, 72(4):443–448, 2008. (Cited on page 125.)
- Colabella L. Caracterización mecánica de paneles tipo honeycomb construidos con un material compuesto. Proyecto Final de Grado: Ingeniería Mecánica, 2011.

Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata (sin publicar). (Cited on page 108.)

- Collofelo J.S. Introduction to software verification and validation. Module, Carnegie Mellon University, 1988. (Cited on page 89.)
- Cook R.D. Finite Element Modeling for Stress Analysis. John Wiley and Sons, Inc., 1995. (Cited on page 91.)
- Cowin S.C. The relationship between the elasticity tensor and the fabric tensor. Mechanics of Materials, 4(2):137-147, 1985. (Cited on page 4.)
- Cowin S.C. Wolff's law of trabecular architecture at remodeling equilibrium. *Journal* of *Biomechanical Engineering*, 108(1):83–88, 1986. (Cited on page 1.)
- Cowin S.C. Bone poroelasticity. *Journal of Biomechanics*, 32(3):217–238, 1999. (Cited on page 9.)
- Cowin S.C. Bone Mechanics Handbook, Second Ed. CRC Press LLC, 2001. (Cited on pages 3, 5 and 12.)
- Cowin S.C. y Doty S.B. Tissue Mechanics. Springer, 2007. (Cited on page 5.)
- Cowin S.C. y Hegedus D.H. Bone remodeling i: Teory of adaptive elasticity. *Journal* of *Elasticity*, 6(3):313–326, 1976. (Cited on page 4.)
- Cowin S.C., Sadegh A.M., y Luo G.M. Correction formulae for the misalignment of axes in the measurement of orthotropic elastic constants. *Journal of Biomecha*nics, 24(7):637-641, 1991. (Cited on page 4.)
- Currey J. y Brear K. Hardness, youngs's modulus and yield stress in mammalian mineralized tissues. Journal of Materials Science: Materials in Medicine, 1(1):14– 20, 1990. (Cited on pages 12, 125 and 128.)
- Currey J.D. Bones, Structure and Mechanics, Second Ed. Princeton University Press, 2006. (Cited on pages 5, 9, 12 and 126.)
- da Silveira O.A.A. y Fonseca J.S.O. Simultaneous design of structural topology and control for vibration reduction using piezoelectric material. In Proceedings of the IX Congreso Argentino de Mecánica Computacional, II Congreso Sudamericano de Mecánica Computacional y XXXI Congreso Ibero-Latinoamericano de Métodos Computacionales en la Ingeniería - MECOM de Bicentenario, XXIX Mecánica Computacional, 8375-8389. Asociación Argentina de Mecánica Computacional -AMCA -, 2010. (Cited on page 22.)
- Dall'Ara E., Ohman C., Baleani M., y Viceconti M. The effect of tissue condition and applied load vickers hardness of human trabecular bone. *Journal of Biomechanics*, 40(14):3267–3270, 2007. (Cited on page 132.)

- D'amico D.S.E. Diseño de un implante de articulación gleno-humeral. Proyecto Final de Grado: Ingeniería Mecánica, 2005. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata. (Cited on page 11.)
- Dorr L.D., Luckett M., y Conaty P. Total hip arthroplasties in patients younger than 45 years, a nine- to ten-year follow-up study. *Clinical Orthopaedics and Related Research*, 260:215-219, 1990. (Cited on page 1.)
- Ebenstein D. y Pruitt L.A. Nanoindentation of biological materials. Nanotoday, 1(3):26-33, 2006. (Cited on pages 130, 131, 132 and 133.)
- Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society A*, 241:376–396, 1957. (Cited on pages 30 and 38.)
- Eshelby J.D. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. Proceedings of the Royal Society A, 252(1271):561-569, 1959. (Cited on page 38.)
- Evans F. The mechanical properties of bone. Artificial Limbs, 13(1):37–48, 1969. (Cited on page 128.)
- Evans G., Behiri J., Currey J., y Bonfield W. Microhardness and young's modulus in cortical bone exhibiting a wide range of mineral volume fractions, and in a bone analogue. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 1(1):38–43, 1990. (Cited on pages 12, 125, 128 and 132.)
- Fischer-Cripps A. The ibis handbook of nanoindentation. Manual, Fischer-Cripps Laboratories Pty Ltd, 2009. (Cited on pages 129 and 141.)
- Frost H.M. Vital biomechanics: Proposed general concepts for skeletal adaptations to mechanical usage. *Calcified Tissue International*, 42(3):145–156, 1988. (Cited on page 1.)
- Fyhrie D.P., Fazzalari N.L., Goulet R., y Goldstein S.A. Direct calculation of the surface-to-volume ratio for human cancellous bone. *Journal of Biomechanics*, 26(8):955–967, 1993. (Cited on page 4.)
- Fyhrie D.P. y Kimura J.H. Cancellous bone biomechanics. Journal of Biomechanics, 32:1139–1148, 1999. (Cited on page 8.)
- García Aznar J.M. Modelos de Remodelación Ósea: Análisis Numérico y Aplicaciones al Diseño de fijaciones de Fracturas del Fémur Proximal., Centro Politécnico Superior de la Universidad de Zaragoza, 1999. (Cited on pages 1, 3 and 11.)
- Goldstein S.A., Goulet R., y McCubbrey D. Measurement and significance of threedimensional architecture to the mechanical integrity of trabecular bone. *Calcified Tissue*, 53 (Supplement 1):S127–S133, 1993. (Cited on page 4.)

- Gonzalez R.C. y Woods R.E. Digital Image Processing (Second Edition). Prentice-Hall, Inc., 2002. (Cited on pages 42 and 43.)
- Gonzalez R.C., Woods R.E., y Eddins S.L. *Digital Image Processing Using MatLab*. Prentice-Hall, Inc., 2003. (Cited on page 42.)
- Gonzáles Martínez C.D. Dos Modelos Micromecánicos de Deformación con Daño en Materiales Compuestos., Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos; Universidad Politécnica de Madrid, 2000. (Cited on page 29.)
- Google. Picasa 3. http://picasa.google.com/, 2010. Google Inc. (Cited on page 50.)
- Goulet R.W., Goldstein S.A., Ciarelli M.J., Kuhn J.L., Brown M.B., y Feldkamp L.A. The relationship between the structural and orthogonal compressive properties of trabecular bone. *Journal of Biomechanics*, 27(4):375–377,379–389, 1994. (Cited on page 4.)
- Guedes J.M., Jayachandran K.P., y Rodriguez H.C. Stochastic optimization of electromechanical coupling in ferroelectric materials. In Proceedings of the IX Congreso Argentino de Mecánica Computacional, II Congreso Sudamericano de Mecánica Computacional y XXXI Congreso Ibero-Latinoamericano de Métodos Computacionales en la Ingeniería - MECOM de Bicentenario, XXIX Mecánica Computacional, 8253–8262. Asociación Argentina de Mecánica Computacional -AMCA -, 2010. (Cited on page 22.)
- Guedes J.M. y Kikuchi N. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanicas and Engineering*, 83(2):143–198, 1989. (Cited on page 102.)
- Hara T., Tanck E., Homminga J., y Huiskes R. The influence of microcomputed tomography threshold variations on the assessment of structural and mechanical trabecular bone properties. *Bone*, 31(1):107–109, 2002. (Cited on page 46.)
- Harrigan T.P., Jasty M., Mann R.W., y Harris W.H. Limitations of the continuum assumption in cancellous bone. *Journal of Biomechanics*, 21(4):269-275, 1988. (Cited on pages 9, 26, 37 and 101.)
- Hart R.T. Bone modeling and remodeling: Theories and computation. In Bone Mechanics Handbook. CRC Press, 2001. (Cited on page 1.)
- Hashin Z. Analysis of composite materials: A survey. Journal of Applied Mechanics, 50(3):481–505, 1983. (Cited on pages 24, 34 and 35.)
- Hazanov S. y Amieur M. On overall properties of elastic heterogeneous bodies smaller than the representative volume. Int. J. Engng. Sci., 33(9):1289–1301, 1995. (Cited on page 27.)

- Hazanov S. y Huet C. Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. J. Mech. Phys. Solids, 42(12):1995-2011, 1994. (Cited on pages 25 and 27.)
- Hengsberger S., Kulik A., y Zysset P. Nanoindentation discrimitates the elastic properties of individual human bone lamellae under dry and physiological conditions. *Bone*, 30(1):2395-2405, 2002. (Cited on pages 130 and 131.)
- Hollister S.J. Porous scaffold design for tissue engineering. *Nature Materials*, 4:518–524, 2005. (Cited on page 2.)
- Hollister S.J., Brennan J.M., y Kikuchi N. A homogenization sampling procedure for calculating trabecular bone effective stiffness and tissue level stress. *Journal* of Biomechanics, 27(4):125–146, 1994. (Cited on page 5.)
- Hollister S.J., Fyhrie D.P., Jepsen K.J., y Goldstein S.A. Application of homogenization theory to the study of trabecular bone mechanics. *Journal of Biomechanics*, 24(9):825–839, 1991. (Cited on page 4.)
- Hollister S.J. y Kikuchi N. A comparison of homogenization and standard mechanics analyses for periodic porous composites. *Computational Mechanics*, 10(2):73–95, 1992. (Cited on pages 5, 25, 35, 70, 78, 87 and 99.)
- Hollister S.J. y Kikuchi N. Homogenization theory and digital imaging: A basis for studying the mechanics and design principles of bone tissue. *Journal of Biotech*nology and Bioengineering, 43(7):586–596, 1994. (Cited on pages 3, 9 and 43.)
- Hollister S.J., Lin C.Y., Saito E., Schek R.D., Taboas J.M., Williams J.M., Partee B., Flanagan C.L., Diggs A., Wilke E.N., Van Lenthe G.H., Müller R., Wirtz T., Das S., Feinberg S.E., y Krebsbach P. Engineering craniofacial scaffolds. Orthodontics and Craniofacial Research, 8(3):162–173, 2005. (Cited on page 2.)
- Homminga J., Huiskes R., van Rietbergen B., Rüegsegger P., y Weinans H. Introducción and evaluation of a gray-value voxel conversion technique. *Journal of Biomechanics*, 34(4):513–517, 2001. (Cited on pages 46 and 47.)
- Hou F.J., Lang S.M., Hoshaw S.J., Reimann D.A., y Fyhrie D.P. Human vertebral body apparent and hard tissue stiffnes. *Journal of Biomechanics*, 31(11):1009– 1015, 1998. (Cited on page 5.)
- Huiskes R. y Chao E.Y.S. A survey of finite element analysis in orthopedic biomechanics: The first decade. *Journal of Biomechanics*, 16(6):385–409, 1983. (Cited on page 3.)
- Huiskes R. y Hollister S.J. From structure to process, from organ to cell: Recent developments of fe-analysis in orthopaedic biomechanics. *Journal of Biomechanical Engineering*, 115(4B):520–527, 1993. (Cited on page 4.)

- Hysitron. Triboindenter user's manual. Manual, Hysitron Inc., 2001. (Cited on pages 131, 133, 138 and 142.)
- Ibarra Pino A.A. y Cisilino A.P. Determination of effective elastic coefficients using the standard mechanics approach: Application to trabecular bone tissue. In Proceedings of the 11th Pan-American Congress of Applied Mechanics - PACAM XI -, Foz do Iguaçu, PR, Brazil, AAM-ABCM-SBMAC. EESC-USP for the American Academy of Mechanics, Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering and the Brazilian Society for Applied and computational Mathematics, 2010. Recurso Electrónico. (Cited on page 39.)
- Ibarra Pino A.A., Cisilino A.P., Alves J.M., da Silva A.M.H., y Guarniero R. Estudio del comportamiento mecánico de hueso trabecular mediante homogenización directa. In *Proceedings of the XXII Congresso Brasileiro de Engenharia Biomédica* CBEB 2010, 318–321. Sociedade Brasileira de Engenharia Biomédica SBEB -, 2010. (Cited on page 43.)
- Idiart M.I. Macroscopic Behavior and Field Statistics in Viscoplastic Composites., Ecole Polytechnique, Francia, 2006. (Cited on page 32.)
- Johnson W. y Rapoff A. Microindentation in bone: Hardness variation with five independent variables. Journal of Materials Science: Materials in Medicine, 18(4):591-597, 2007. (Cited on page 129.)
- Kabel J., van Rietbergen B., Odgaard A., y Huiskes R. Constitutive relationships of fabric, density, and elastic properties in cancellous bone architecture. *Bone*, 25(4):481–486, 1999. (Cited on page 4.)
- Kanit T. Notion de Volume Elemantaire Representatif pour les Matériaux Hétéroènes: Approche Statistique et Numérique., Ecole des Mines de Paris, 2003. (Cited on page 25.)
- 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. (Cited on pages 25, 26 and 74.)
- Kanouté P., Bosso D.P., Chaboche J.L., y Schreffer B.A. Multiscale mehods for composites: A review. Acrh. Comput. Methods Eng, 16(1):31-75, 2009. (Cited on pages 15, 33 and 72.)
- Keaveny T.M., Morgan E.F., Niebur G.L., y Yeh O.C. Biomechanics of trabecular bone. Annu. Rev. Biomed. Eng., 3:307–335, 2001. (Cited on pages 2, 7, 8, 10 and 11.)
- Knets I. General principles of bone tissue testing. Acta of Bioengineering and Biomechanics, 1(2):55-66, 1999. (Cited on page 140.)

- Kouznetsova V.G. Computational Homogenization for the Multi-Scale Analysisi of Multi-Phase Materials. , Technische Universiteit Eindhoven, 2002. (Cited on pages 23, 25, 37 and 78.)
- Kutz M. Standard Handbook of Biomedical Engineering and Design. McGraw-Hill, 2002. (Cited on pages 7, 10 and 11.)
- Levenston M.E. y Carter D.R. An energy dissipation-based model for damage stimulated bone adaptation. *Journal of Biomechanics*, 31(7):579–586, 1998. (Cited on page 1.)
- Liu D., Weiner S., y Wagner H.D. Anisotropic mechanical properties of lamellar bone using miniature cantilever bending specimens. *Journal of Biomechanics*, 32(7):125-146, 1999. (Cited on page 5.)
- Luciano R. y Sacco E. Variational methods for the homogenization of periodic heterogeneous media. *Europeann Journal of Mechanics A/Solid*, 17(4):599-617, 1998. (Cited on page 62.)
- Luo G., Cowin S.C., Sadegh A.M., y Arramon Y.P. Implementation of strain rate as a bone remodeling stimulus. *Journal of Biomechanical Engineering*, 117(3):329– 338, 1995. (Cited on page 4.)
- Malvern L.E. Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium. Prentice-Hall, Inc., 1969. (Cited on pages 15 and 19.)
- Mase G.T. y Mase G.E. Continuum Mechanics for Engineers. CRC Press LLC, 1999. (Cited on page 15.)
- MatLab. The Language of Theonical Computing Users's Manual. MathWorks Inc., 2004. (Cited on pages 43 and 71.)
- Mehrabadi M.M., Cowin S.C., y Jaric J. Six-dimensional orthogonal tensor representation of the rotation about an axis in three dimensions. *Int. J. Solids Structures*, 32(3/4):439-449, 1994. (Cited on page 22.)
- Morgan E.F., Bayraktar H.H., y Keaveny T.M. Trabecular bone modulus-density relationships depend on anatomic site. *Journal of Biomechanics*, 36(7):897–904, 2003. (Cited on page 10.)
- Mullender M.G., Huiskes R., y Weinans H. A physiological approach to the simulation of bone remodeling as a self-organizational control process. Journal of Biomechanics, 27(11):1389–1394, 1994. (Cited on page 1.)
- Mullins L., Bruzzi M., y McHugh P. Measurement of the microstructural fracture toughness of cortical bone using indentation fracture. *Journal of Biomechanics*, 40(14):3285–3288, 2007. (Cited on page 133.)

- NEMA. Ps 3.1, digital imaging and communications in medicine (dicom), part 1: Introduction and overview. Standard of the National Electrical Manufacturers Association, 2004. (Cited on page 44.)
- Nemat-Nasser S. y Hori M. Micromechanics: Overall properties of heterogeneous materials, Second Ed. Elsevier, 1999. (Cited on pages 15, 24, 28, 29, 36, 62 and 64.)
- Oliver W. y Pharr G. An improved technique for dtermining hardness and elastic modulus using load displacement sensing indentation experiments. *Journal of Materials Research*, 7(6):1564–1583, 1992. (Cited on pages 129, 130, 135, 138, 146 and 151.)
- Oliver W. y Pharr G. Measurement of mechanical properties by ultra-low load indentation. *Journal of Materials Research*, 19(1):3–20, 2004. (Cited on pages 132, 139, 150 and 151.)
- Otegui J.L. *Mecánica de Materiales Estructurales*. JEM Diseño Editorial, 2004. (Cited on pages 15 and 19.)
- Pan B., Qian K., Xie H., y Asundi A. Two-dimensional digital image correlation for in-plane displacement and strain measurement: a review. *Measurement Science* and *Technology*, 20(6):1–17, 2009. (Cited on page 107.)
- Paris F. Teoría de la Elasticidad. Grupo de Elasticidad y Resistencia de Materiales, 1998. (Cited on pages 19 and 21.)
- Perilli E. y Baruffaldi F. Proposal for shared collections of x-ray microct datasets of bone specimens. In *ICCB 03, Zaragoza, España*, 1, 235–236. Ed. M. Doblaré, M. Cerrolaza y H. Rodriguez, 2003. (Cited on pages 47, 50 and 100.)
- Perilli E., Baruffaldi F., Visentin M., Bordini B., Traina F., Cappello A., y Viceconti M. MicroCT examination of human bone specimens: effects of polymethylmethacrilate embedding on structural parameters. *Journal of Microscopy*, 225(2):192– 200, 2007. (Cited on page 43.)
- Pharr G.M. Measurement of mechanical properties by ultra-low load indentation. *Materials Science and Engineering A*, 253(1):151–159, 1998. (Cited on pages 132 and 151.)
- Pierard O. Micromechanics of Inclusion-Reinforced Composites in Elasto-Plasticity and Elasto-Viscoplasticity: Modeling and Computation. , Faculté des Sciences Appliquées, Université Catholique de Louvain, 2006. (Cited on page 27.)
- Prat Pastor J. Biomecánica de la Fractura Ósea y Técnicas de Reparación. Instituto de Biomecánica de Valencia, 1999. (Cited on pages 7 and 9.)

- Qingsheng Y., Limin T., y Haoran C. Self-consistent finite element method: A new method of predicting effective properties of inclusion media. *Finite Elements in Analysis and Design*, 17(4):247–257, 1994. (Cited on page 34.)
- Rho J., Tsui T., y Pharr G. Elastic properties of human cortical and trabecular lamellar bone measured by nanoindentation. *Biomaterials*, 18(20):1325–1330, 1997. (Cited on pages 129, 130, 131 and 150.)
- Rho J.Y., Kuhn-Spearing L., y Zioupos P. Mechanical properties and the hierarchical structure of bone. *Medical Engineering and Physics*, 20(2):92–102, 1998. (Cited on pages 7 and 8.)
- Rho J.Y. y Pharr G.M. Effects of drying on the mechanical properties of bovine femur measured by nanoindentation. *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, 10(8):485–488, 1999. (Cited on pages 129, 130, 131 and 132.)
- Rho J.Y. y Pharr G.M. Nanoindentation testing of bone. In Mechanical Testing of Bone and the Bone-Implant Interface. CRC Press LLC, 2000. (Cited on pages 5, 129, 130 and 131.)
- Rho J.Y., Zioupos P., Currey J.D., y Pharr G.M. Variations in the individual thick lamellar properties within osteons by nanoindentation. *Bone*, 25(3):295–300, 1999. (Cited on page 9.)
- Rincón Rincón E., Ros Felip A., Claramunt Alonso R., y Arranz Merino F. Caracterización mecánica del material Óseo. Separata revista tecnologí@ y desarrollo, vol. ii, Escuela Politécnica Superior, Universidad Alfonso X el Sabio, 2004. (Cited on page 7.)
- Roy M., Rho J., Tsui T., y Pharr G. Variation of young's modulus and hardness in human lumbar vertebrae measured by nanoindentation. Advances in Bioengineering, 33:385–386, 1996. (Cited on page 131.)
- Russ J.C. The Image Processing Handbook (Fourth Edition). CRC Press, 2002. (Cited on page 41.)
- Sadegh A.M., Luo G.M., y Cowin S.C. Bone ingrowth: An application of the boundary element method tho bone remodeling at the implant interface. *Journal of Biomechanics*, 26(2):167–182, 1993. (Cited on page 4.)
- Sanchez-Palencia E. Homogenization in mechanics. a survey of solved and open problems. Seminario de matemática, Universidad Politécniva de Torino, 1986. (Cited on pages 27, 29 and 36.)
- Sasov A. y Dyck D.V. Desktop x-ray microscopy and microtomography. Journal of Microscopy, 191(2):151-158, 1998. (Cited on page 40.)

- Schwer L.E. Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. An overview of the PTC 60/V&V 10: guide for verification and validation in computational solid mechanics, 23(4):245-252, 2007. (Cited on pages 90 and 106.)
- Segurado Escudero J. Micromecánica Computacional de Materiales Compuestos Reforzados con Partículas., Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos; Universidad Politécnica de Madrid, 2004. (Cited on pages 28, 31 and 34.)
- Silva A.M.H., Alves J.M., da Silva O.L., Junior N.F.S., Gazziro M., Pereyra J.C., Lasso P.R.O., Vaz C.M.P., Pereira C.A.M., Leiva T.P., y Guarniero R. Análise microestrutural Óssea trabecular utilizando microtomografia tridimensional. In *Proceedings of the XVII Congreso Argentino de Bioingeniería, SABI 09.* Sociedad Argentina de Bioingeniería - SABI -, 2009. Rosario, Santa Fe, Argentina. (Cited on page 50.)
- Simulia. Abaque Documentation 6.9. Dassault Systèmes Simulia Corp., 2010. (Cited on pages 58, 85, 91 and 96.)
- SkyScan. Adaptive thresholding trabecular bone. Software Tutorial video.avi, 2010a. SkyScan Inc. (Cited on page 46.)
- SkyScan. X-ray microtomography, x-ray nanotomography, non destructive testing, small animal imaging, 2d/3d analysis. Catálogo Comercial, 2010b. Y catálogos de productos particulares: SkyScan 1172, 1173 y 1174. (Cited on page 40.)
- Stein E., de Borst R., y Hughes T.J.R. Encyclopedia of Computational Mechanics,
 2. John Wiley and Sons, Ltd., 2004. (Cited on pages 28 and 74.)
- Stock S.R. MicroComputed Tomography Tomography: methodology and applications. CRC Press, Taylor&Francis Group, 2009. (Cited on pages 41 and 42.)
- Sun E.Q. Shear locking and houglassing in msc nastran, abaqus, and ansys. Tech. rep., MSC Software, 2006. (Cited on page 91.)
- Suquet P.M. Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. In E. Sanchez-Palencia y A. Zaoui, , *Lecture Notes in Physics*), 272, 193–278. Springer-Verlag, 1987. (Cited on pages 27, 62 and 79.)
- 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, 2003. (Cited on pages 25, 27 and 37.)
- Terada K., Miura T., y Kikuchi N. Digital image-based modeling applied to the homogenization analysis of composite materials. *Computational Mechanics*, 20:331– 346, 1997. (Cited on page 43.)

- Ting T.C.T. Anisotropic Elasticity, Theory and Applications. Oxford University Press, 1996. (Cited on pages 21 and 22.)
- Torquato S. Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties. Springer, 2002. (Cited on pages 9, 15, 24, 29 and 32.)
- Turner C.H. Yield behavior of bovine cancellous bone. Journal of Biomechanical Engineering, 111(3):256-260, 1989. (Cited on page 11.)
- Turner C.H. y Burr D.B. Experimental techniques for bone mechanics. In Bone Mechanics Handbook. CRC Press, 2001. (Cited on page 3.)
- van Rietbergen B., Odgaard A., Kabel J., y Huiskes R. Direct mechanic assessment of elastic symmetries and properties of trabecular bone architecture. *Journal of Biomechanics*, 29(12):1653–1657, 1996. (Cited on pages 4 and 5.)
- van Rietbergen B., Weinans H., Huiskes R., y Odgaard A. A new method to determine trabecular bone elastic properties and loading using micromechanical finiteelement models. *Journal of Biomechanics*, 28(1):69-81, 1995. (Cited on pages 2, 5, 46, 90, 120 and 121.)
- Vander Voort G. Buehlers guide to materials preparation. Reporte técnico, Buehler, 2002. (Cited on page 129.)
- Weaver J. The microscopic hardness of bone. The Journal of Bone and Joint Surgery, 48(2):273-288, 1966. (Cited on pages 127, 128, 130, 132, 140 and 150.)
- Willis J.R. Mechanics of composites. Lecture notes: Ecole polytechnique, fr., University of Cambridge, 2002. (Cited on pages 24 and 28.)
- Wolff J. Das Gesetz der Transformation der Knochen. August Hirschwald, Berlin, 1892. Traducido por Paul Maquet y Ronald Furlong como "The Law of Bone Remodelling", para Springer en 1986. (Cited on pages 1 and 3.)
- Yang G., Kabel J., van Rietbergen B., Odgaard A., Huiskes R., y Cowin S.C. The anisotropic hooke's law for cancellous bone an wood. *Journal of Elasticity*, 53(2):125-146, 1996. (Cited on page 5.)
- Zhang J., Niebur G., y Ovaert T. Mechanical property determination of bone through nano- and micro-indentation testing and finite element simulation. *Journal* of Biomechanics, 41(2):267-275, 2008. (Cited on page 131.)
- Zohdi T.I. y Wriggers P. Introduction to Computational Micromechanics. Springer-Verlag, 2005. (Cited on pages 25, 26, 28, 33, 34, 61, 73 and 74.)
- Zysset P.K. A review of morphology-elasticity relationships in human trabecular bone: Theories and experiments. *Journal of Biomechanics*, 36(10):1469–1485, 2003. (Cited on page 4.)

Zysset P.K. Indentation of bone tissue: a short review. Osteoporosis International, 20(6):1049-1055, 2009. (Cited on page 132.)