



ANÁLISIS BIOMECÁNICO CON ELEMENTOS DE CONTORNO. APLICACIONES EN COLUMNA VERTEBRAL Y REMODELACIÓN ÓSEA

Félix Manuel Nieto Ruiz
Yomar González
Miguel Cerrolaza Rivas

**ANÁLISIS BIOMECÁNICO CON ELEMENTOS
DE CONTORNO.
APLICACIONES EN COLUMNA VERTEBRAL Y REMODELACIÓN ÓSEA**

Autores:

Félix Manuel Nieto Ruiz
Yomar González
Miguel Cerrolaza Rivas

ANÁLISIS BIOMECÁNICO CON ELEMENTOS
DE CONTORNO.
APLICACIONES EN COLUMNA VERTEBRAL Y REMODELACIÓN ÓSEA

Autores:

Félix Manuel Nieto Ruiz

Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela. Venezuela

Yomar González

Facultad de Ingeniería Industrial, Universidad de Guayaquil. Ecuador
Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela. Venezuela

Miguel Cerrolaza Rivas

Universidad Politécnica de Cataluña. España
Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela. Venezuela



Primera edición: diciembre 2018

© Ediciones Grupo Compás 2018

ISBN: 978-9942-33-091-8

Diseño de portada y diagramación:

Grupo Compás

Este texto ha sido sometido a un proceso de evaluación por pares externos con base en la normativa del editorial.

Arbitraje realizado por el Centro de Desarrollo Científico y Humanístico de la UCV, a través de su departamento de publicaciones.

Quedan rigurosamente prohibidas, bajo las sanciones en las leyes, la producción o almacenamiento total o parcial de la presente publicación, incluyendo el diseño de la portada, así como la transmisión de la misma por cualquiera de sus medios, tanto si es electrónico, como químico, mecánico, óptico, de grabación o bien de fotocopia, sin la autorización de los titulares del copyright.

Cita.

González, Y, Nieto, F, Cerrolaza, M, (2018) ANÁLISIS BIOMECÁNICO CON ELEMENTOS DE CONTORNO. APLICACIONES EN COLUMNA VERTEBRAL Y REMODELACIÓN ÓSEA, Editorial Grupo Compás, Guayaquil Ecuador, 182 pag

CAPÍTULO 1.....	6
INTRODUCCIÓN Y ESTADO DEL ARTE.....	6
1.1 Antecedentes y estado del arte.....	6
1.2 Organización de este libro.....	8
CAPÍTULO 2. BIOMECÁNICA DE LA COLUMNA Y DISCOS VERTEBRALES	10
2.1 Introducción	10
2.2 Biomecánica de la columna vertebral.....	10
2.2.1 Extensión, inclinación y rotación del raquis lumbar.....	16
2.2.2 Modelos biomecánicos para la columna vertebral	22
2.2.2.1 Un modelo bidimensional	25
2.2.2.2 Modelo tridimensional de Schultz	31
2.2.2.3 Modelo tridimensional de Bogduk.....	34
2.2.3 Morfología vertebral	36
2.3 El disco intervertebral	38
2.4 Nutrición del disco intervertebral	40
2.5 Enfermedades y patologías del disco intervertebral	41
CAPÍTULO 3. EL MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO EN ELASTICIDAD Y POROELASTICIDAD.....	43
3.1 Introducción	43
3.2 Elasticidad lineal	44
3.2.1 Relaciones de equilibrio.....	44
3.2.2 Ecuación integral: identidad de Somigliana.....	49
3.2.3 Identidad de Somigliana para puntos en el contorno.....	50
3.2.4 Discretización	54
3.2.5 Implementación numérica	57
3.2.5.1 Integrales no singulares.....	57
3.2.5.2 Integrales singulares	58
3.3 Regiones infinitas.....	59
3.4 Poroelasticidad axisimétrica.....	60
3.4.1 Formulación	60

3.5 Funciones de forma globales y soluciones particulares	64
3.6 Ejemplo numérico: consolidación de esfera saturada.....	68
CAPÍTULO 4. FORMULACIÓN INTEGRAL DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN- CONVECCIÓN-REACCIÓN	71
4.1 Introducción	71
4.2 Ecuación de difusión-convección-reacción.....	72
4.3 Formulación integral.....	73
4.3.1 Solución fundamental.....	74
4.4 Formulación integral para puntos en el contorno	84
4.5 Discretización de la frontera	89
4.5.1 Elementos constantes	91
4.5.2 Elementos lineales.....	93
4.5.3 Elementos de orden superior	99
4.6 Integración numérica	103
4.6.1 Integración no singular.....	103
4.6.2 Integración singular	108
4.7 Integración analítica de las soluciones fundamentales u^* y q^*	111
4.8 Método de Reciprocidad Dual	116
4.9 Funciones de forma globales	118
4.9.1 Funciones de forma en coordenadas cartesianas	118
4.9.2 Funciones de forma para el caso axisimétrico	120
4.10 Implementación numérica	123
4.11 Integración en el tiempo.....	127
4.12 Modelos con simetría axial	128
4.13 Múltiples regiones	131
4.14 Ejemplos numéricos	133
4.14.1 Flujo de calor sobre placa en L	133
4.14.2 Convección-difusión entre dos esferas	134
4.14.3 Transferencia de calor con convección en un tubo.....	136
4.14.4 Conducción de calor transiente	138

CAPÍTULO 5. MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO	141
5.1 Introducción	141
5.2 Difusión de nutrientes usando el Método de Elementos Finitos	141
5.3 Modelo de nutrición del disco intervertebral con el MEC	145
5.4 Resultados numéricos y discusión.....	150
Disco sano.....	150
5.5 Disco con fractura de la placa cartilaginosa	155
5.6 Efecto de las cargas dinámicas	157
CAPÍTULO 6. OTRAS APLICACIONES DEL MEC	164
6.1 Introducción	164
6.2 Remodelado óseo externo	164
6.2.1 Formulación y algoritmos.....	165
6.2.2 <i>Representación con superficies β-spline</i>	168
6.3 Consolidación ósea.....	173
6.3.1 Formulación y modelo axisimétrico.....	174
6.3.2 Resultados numéricos.....	175
6.4 Piezoelectricidad en la curación de fracturas.....	177
6.4.1 Formulación y ecuaciones básicas	178
6.4.2 Resultados numéricos.....	179
CAPÍTULO 7. REFERENCIAS	182

A white clipboard icon is centered at the top of the page. It consists of a white rectangular clip at the top, with a white line extending downwards to form a large rectangular frame with rounded corners.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN Y

ESTADO DEL ARTE

CAPÍTULO 1.

INTRODUCCIÓN Y ESTADO DEL ARTE

1.1 Antecedentes y estado del arte

Un tema que reviste especial importancia y alto impacto en la sociedad es la demanda creciente de implantes (prótesis). Cualquier reducción en los costos asociados que se consiga mejorando el desempeño de los implantes, será bienvenida y será muy beneficiosa para el conjunto de la sociedad. Por tanto, el alargamiento de la vida útil de los implantes y la mejor comprensión del funcionamiento de tejidos biológicos son factores decisivos en la calidad de vida de pacientes, ya que a mayor duración del implante menor será la necesidad de reemplazarlo. Especialmente en el caso de gente de avanzada edad, éste resulta un tópico muy sensible.

En consecuencia, el refinamiento y mejora de técnicas computacionales y experimentales de análisis y diseño de implantes contribuirá a comprender mejor el comportamiento de los mismos, así como la interacción implante-hueso. Este último factor es clave en el desempeño de implantes. Durante las últimas tres décadas se ha realizado mucha investigación, tanto básica como aplicada, para modelar y simular mejor esta interacción. Sin embargo, todavía no se tiene un conocimiento pleno y detallado de muchos mecanismos y procesos que ocurren en la interacción hueso-implante. Los niveles de esfuerzos y deformaciones causados por cargas fisiológicas (y patológicas) dentro del cuerpo humano están todavía lejos de ser ubicados en un escenario realista. Es decir, la comunidad científica internacional todavía no dispone de los modelos tridimensionales y herramientas computacionales que puedan describir exhaustivamente el comportamiento en la interface entre el implante y el tejido óseo.

Algo similar ocurre cuando se analiza la respuesta de tejidos biológicos frente a la absorción de nutrientes y/o sustancias necesarias para su correcto desempeño. Diversas técnicas numéricas son empleadas para modelar este tipo de fenómenos que involucran especialistas en áreas como la Ingeniería, Biología, Química, Física entre otras. Dichas técnicas se caracterizan por encontrar soluciones al problema en estudio las cuales permiten realizar predicciones sobre el mismo.

El área de la mecanobiología computacional, aplicada al estudio de tejido biológico ha implementado simulaciones principalmente en análisis por elementos finitos (MEF) y elementos de contorno (MEC). Uno de los procesos biológicos de interés es el estudio del transporte de masa, entrega de medicamentos, nutrientes, entre otros, en zonas específicas del cuerpo y su posible aplicación a problemas de comportamiento celular.

En particular, la entrega de nutrientes dentro de los discos intervertebrales, es un tema de importancia ya que esta estructura contribuye al normal desempeño de la columna vertebral, la cual sirve de soporte al cuerpo. El disco está dividido por varios tipos de tejidos, en los cuales las células presentes requieren ciertos nutrientes para su normal funcionamiento, cualquier anomalía (hernias o nodos de Schmorl, entre otras patologías) puede causar muerte celular lo cual compromete la función del disco que es servir de soporte a las vértebras para evitar el contacto entre ellas.

Una vez ocurre la fractura ósea, se activa un proceso natural para repararla, de forma que la curación de la fractura está asociada a la generación de tejidos intermedios hasta su osificación. El Método de los Elementos de Contorno (MEC) ha sido también utilizado para simular estos procesos demostrando su habilidad y potencial.

Es así como el desarrollo de la mecanobiología computacional se ha incrementado, encontrándose simulaciones en entornos del MEF y del MEC. Muchos trabajos pueden ser citados, en áreas como fracturas y simulación ósea (Muller-Karger, 2002; Doblaré *et al.*, 2004; González, 2007; Gámez, 2008; González & Cerrolaza, 2008; González *et al.*, 2009) influencia del calor en los tejidos (Lu *et al.*, 1998), remodelado óseo (Zeman, 2005; Annicchiarico *et al.*,

2007; Martínez, 2004; Martínez *et al.*, 2006; Martínez y Cerrolaza, 2006; Carrero, 2014), crecimiento óseo (Garzón *et al.*, 2012; Wessel *et al.*, 2004) y problemas de transporte de masa (Soukane *et al.*, 2009; Ferguson *et al.*, 2007).

Muchos problemas de ingeniería y de ciencias aplicadas son usualmente no lineales y dependientes del tiempo, con lo cual se requieren formulaciones robustas. En el MEC, estas técnicas ya están disponibles y se conocen como el Método de Reciprocidad Dual (Patridge *et al.*, 1992). En el área de poroelasticidad lineal han sido ya utilizadas con éxito (Park y Banerjee, 2007), mientras que en análisis de difusión-convección-reacción, los trabajos de Ferragut *et al.* (2007) han modelado con éxito estos problemas. El MEC también muestra muchas ventajas siendo una de ellas su gran precisión en la solución en puntos internos y sobre el contorno cuando se analizan ecuaciones acopladas en problemas de múltiples dominios (Dargush y Banerjee, 1991; Beer *et al.*, 2008).

Los problemas de consolidación de fracturas han sido también estudiados previamente utilizando biomecánica computacional. La mayoría de los modelos computacionales están basados en métodos de dominio como el MEF, analizando los niveles de tensiones y deformaciones que aparecen en diferentes tejidos humanos. A su vez estos niveles estimulan la diferenciación celular y la osificación del tejido, consolidando la fractura. Los autores de este libro han propuesto modelos del MEC poroelásticos y axisimétricos para modelar el callo óseo, donde además se incluyó la presión intersticial de poros (véase el Capítulo 6). Los resultados fueron excelentes, cuando se compararon con análisis previos por el MEF realizados por otros autores como Claes y Heigele (1999) y Lacroix y Prendergast (2002).

1.2 Organización de este libro

Este texto está orientado a investigadores en el área de la biomecánica computacional, así como a cursos de pre y postgrado en biomecánica.

En el Capítulo 1 se hace una breve exposición de la importancia de comprender mejor los procesos en tejidos biológicos, los cuales son factores clave para poder descifrar el comportamiento de las interfaces hueso-implantes.

El Capítulo 2 se concentra en la biomecánica de la columna vertebral y de los discos intervertebrales, haciendo hincapié en modelos biomecánicos para analizar la columna y en la importancia del modelado de la difusión de nutrientes dentro del disco.

Por su parte el Capítulo 3 se ocupa de presentar la formulación del Método de Elementos de Contorno (MEC) para problemas elásticos y poroelásticos, discutiendo aspectos importantes como la discretización del contorno y la obtención de soluciones fundamentales.

El Capítulo 4 discute la formulación básica por métodos integrales para problemas de difusión. Se analizan modelos con simetría axial y se presentan algunos ejemplos numéricos de difusión, conducción y convección de calor.

En el Capítulo 5 se propone un modelo axisimétrico de difusión de nutrientes en discos intervertebrales con elementos de contorno. Se discuten asimismo los resultados en discos sanos y discos con alteraciones patológicas.

El Capítulo 6 contiene otras aplicaciones del MEC en problemas de biomecánica computacional que analizan problemas de remodelado óseo, consolidación ósea y efectos de la piezoelectricidad en la curación de fracturas.

Finalmente, esta obra contiene una extensa y completa lista de más de 110 referencias bibliográficas, las cuales serán de gran ayuda para el lector curioso e interesado en profundizar en los conceptos y el estado del arte del análisis biomecánico con elementos de contorno.

CAPÍTULO 2
BIOMECÁNICA DE
LA COLUMNA
Y DISCOS VERTEBRALES

CAPÍTULO 2. BIOMECÁNICA DE LA COLUMNA Y DISCOS VERTEBRALES

2.1 Introducción

En este capítulo se describirá la biomecánica de la columna vertebral, como parte esencial del esqueleto que brinda soporte y ayuda a distribuir las cargas propias del cuerpo. La columna está dividida en varias secciones y éstas a su vez en vértebras las cuales están separadas por estructuras denominadas discos intervertebrales (DIV), que evitan el contacto directo entre vértebras. Los discos intervertebrales son estructuras avasculares por lo que las células que conforman los diferentes tejidos están inmersas en ambientes pobres en oxígeno. Los mecanismos para la entrega de nutrientes a las células dentro del disco comprenden un equilibrio entre el manejo de las cargas mecánicas y la dinámica del fluido dentro del disco, es decir, por la expulsión del fluido fuera del disco por acción de la carga y el reingreso del mismo en ausencia de carga. El desbalance de este delicado equilibrio puede causar degeneración del disco.

2.2 Biomecánica de la columna vertebral

La columna vertebral es la responsable de mantener erguido el dorso tanto al estar de pie o sentado, soportando el peso de la cabeza, el cuello y el tronco, y es responsable de transmitir la carga a las extremidades inferiores. Además sirve como sostén y transmitir cargas y protege la medula espinal, ofreciendo una vía de paso para los nervios. En el caso de un adulto, la columna está constituida por 26 huesos: 24 vértebras, el sacro y el cóccix. La columna puede ser dividida en regiones desde el cráneo la zona cervical, torácica, lumbar, sacra y el cóccix, como muestra la Figura 2.2.1.

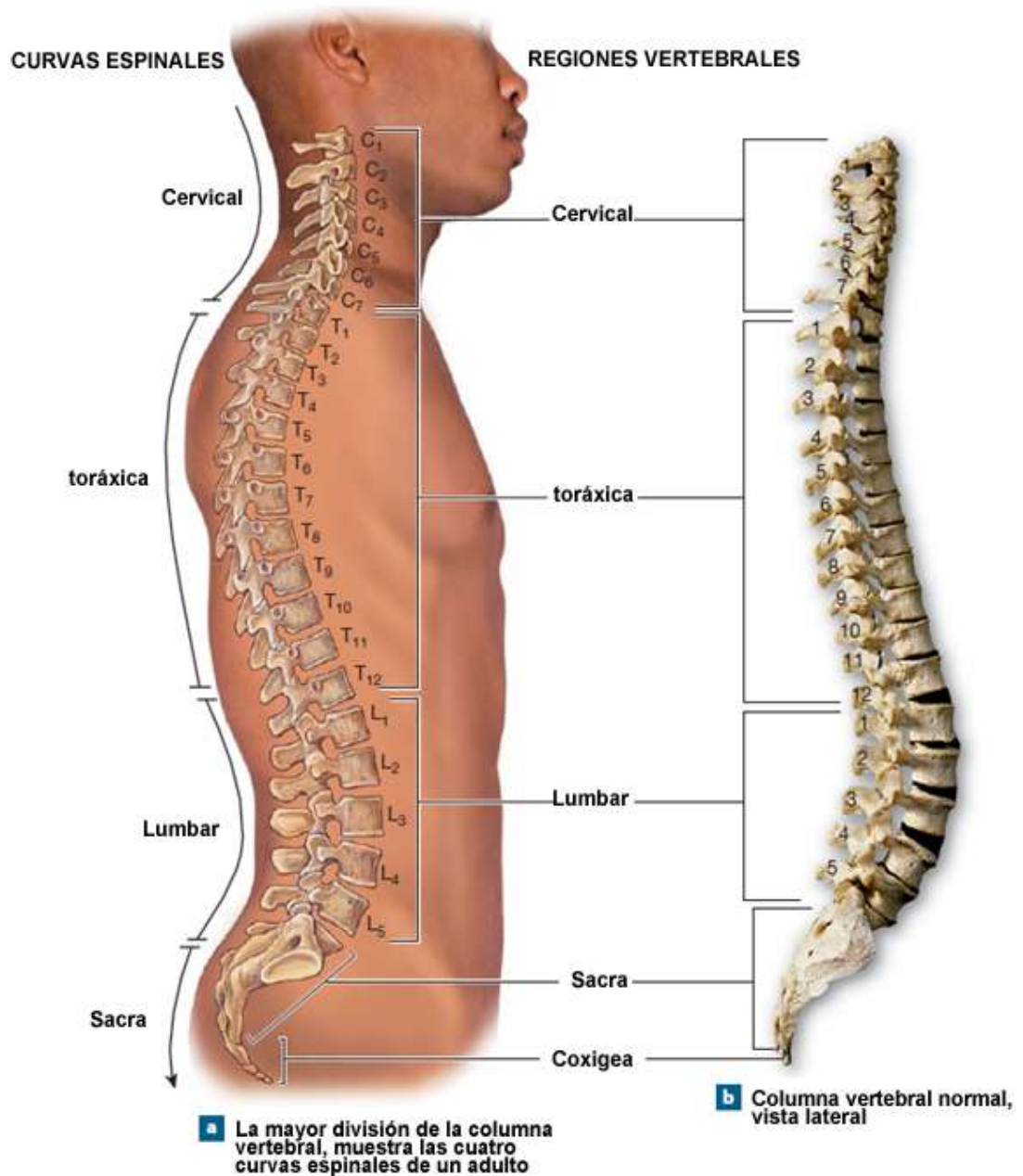


Figura 2.2.1. Columna vertebral: a) regiones y b) vista lateral de una columna real (Martini *et al.*, 2009).

Las vértebras de cada región presentan especificaciones anatómicas que marcan diferencias funcionales entre ellas (Rachwan *et al.*, 2008). Desde un punto de vista biomecánico, la columna vertebral representa al eje del cuerpo

que debe conciliar dos imperativos mecánicos contradictorios: la rigidez y la flexibilidad. Para lograr esto, se conforma de múltiples vértebras superpuestas, unidas unas a otras por complejos sistemas de ligamentos y musculares (Figura 2.2.2).

Considerada en conjunto, la columna vertebral es rectilínea vista de frente o de espaldas, mientras que en el plano sagital presenta cuatro curvas, orientadas de abajo hacia arriba (véase la Fig. 2.2.3):

La curva sacra, fija debida a la fusión de las vértebras sacras. Esta curva es de concavidad anterior;

La lordosis lumbar, de concavidad posterior;

La cifosis dorsal, de convexidad superior;

La lordosis cervical, de concavidad posterior

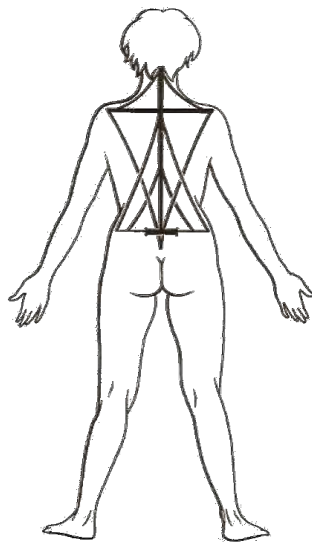


Figura 2.2.2. Eje raquídeo y sistema de principal de ligamentos y músculos
(Kapandji, 2001)

Una unidad vertebral funcional UVF de la columna vertebral está dada por dos vértebras tipo (que varían de acuerdo a su localización y a la magnitud de las cargas que debe soportar) y el disco intervertebral.

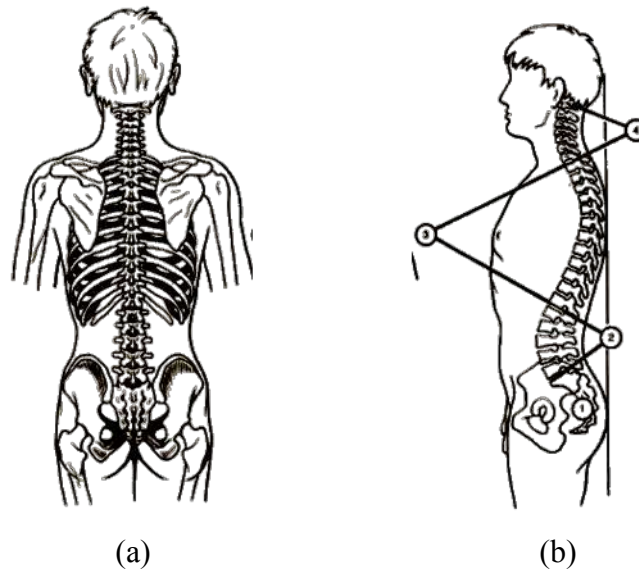


Figura 2.2.3. Sistema esquelético. (a) vista posterior. (b) vista sagital (Kapandji, 2001)

La existencia de curvas raquídeas aumenta la resistencia del raquis a las fuerzas de compresión axial. La resistencia de una columna con curvas es proporcional al cuadrado del número de curvas más uno. La importancia de las curvas raquídeas se puede medir mediante el *índice raquídeo de Delmas* (Figura 2.2.4). Este índice sólo puede medirse en un modelo biomecánico anatómico; consiste en la relación existente entre la longitud alcanzada por el raquis desde la meseta de la primera vértebra sacra hasta el atlas y la altura entre la meseta superior de S1 y el atlas.

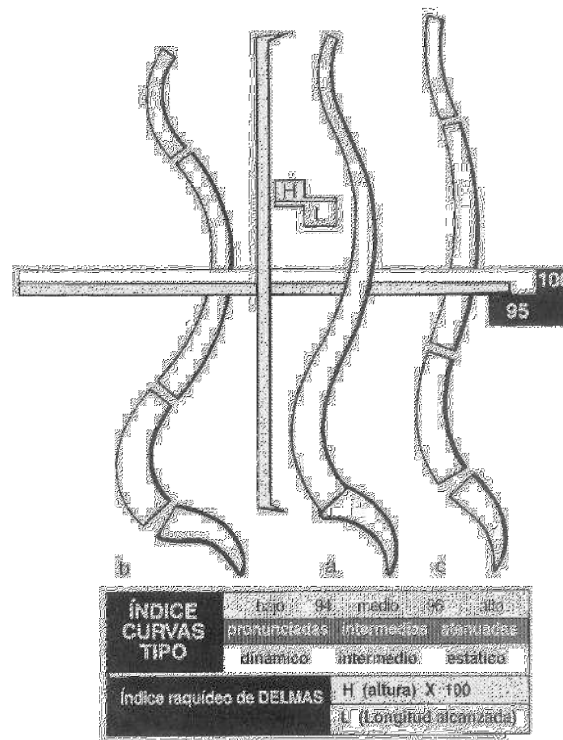


Figura 2.2.4. Índice raquídeo de Delmas (Kapandji, 2001).

El cuerpo intervertebral tiene la estructura de un hueso corto, semejante a un cascarón con una cortical de hueso denso que rodea el hueso esponjoso. En el corte coronal del cuerpo vertebral se distinguen a cada lado espesas corticales, arriba y abajo se distingue la cara vertebral cubierta por una capa cartilaginosa, y en el centro del cuerpo vertebral, trabéculas de hueso esponjoso que se reparten siguiendo las líneas de fuerza. Estas líneas son verticales y unen la cara superior y la inferior, u horizontales que unen las dos corticales laterales, o también oblicuas que unen la cara inferior a las corticales laterales, como ilustra la Figura 2.2.5

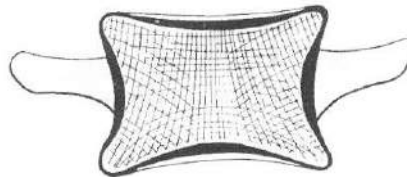


Figura 2.2.5. Corte coronal de vértebra con esquematización de trabéculas.

Con un corte sagital aparecen de nuevo dichas trabéculas verticales (véase la Fig. 2.2.6.A), pero hay además dos sistemas de fibras oblicuas dispuestas en forma de abanico. Por una parte, un abanico que parte de la cara superior, para extenderse a través de los dos pedículos hacia la apófisis articular superior de cada lado y a la apófisis espinosa (Fig. 2.2.6.B). Por otra parte, un abanico que parte de la cara inferior para repartirse a través de los pedículos hacia las apófisis articulares inferiores y a la apófisis espinosa (Fig. 2.2.6.C). El entrecruzamiento de estos tres sistemas trabeculares establece puntos de fuerte resistencia, pero también un punto de menor resistencia, en particular un triángulo de base anterior en el que solo existen trabéculas verticales (Fig. 2.2.6.D).

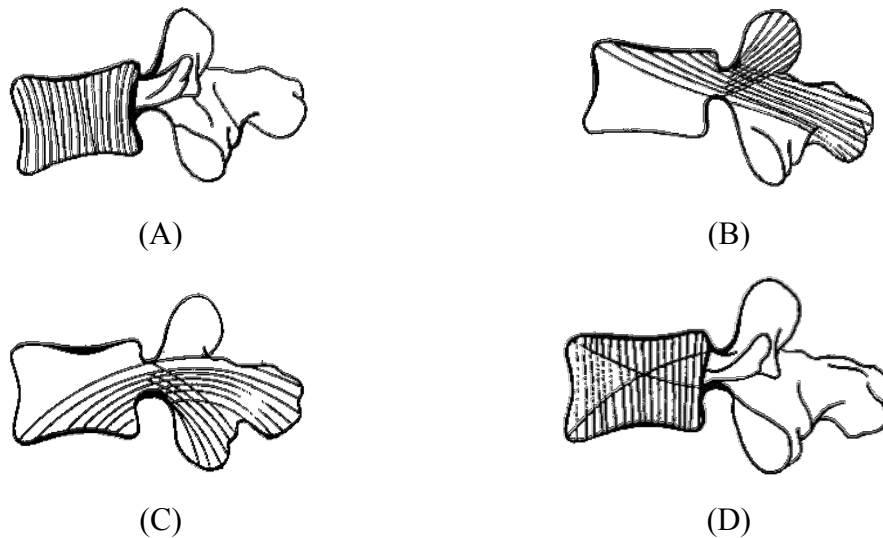


Figura 2.2.6. Corte sagital de vértebras con esquematización de trabéculas.

Si se considera la estructura trabecular de los cuerpos vertebrales y de los arcos posteriores, cabe asimilar cada vértebra a una palanca de primer grado (Figura 2.2.7), en la que la articulación interapofisiaria (1) desempeña el papel de punto de apoyo. Este sistema de palanca permite amortiguar las fuerzas de compresión axial sobre la columna vertebral: amortiguamiento directo y pasivo a nivel del disco intervertebral (2), amortiguamiento indirecto y activo de los músculos de los canales vertebrales (3), esto a través de palancas formadas por los arcos posteriores.

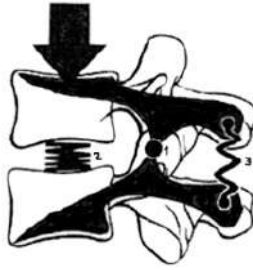


Figura 2.2.7. Representación de unidad vertebral como palanca de primer grado.

(1) articulación interapofisiaria; (2) disco intervertebral; (3) canales vertebrales

La otra estructura importante de la unidad funcional es el disco intervertebral, el cual consta de dos partes. Una parte central, el *nucleus pulposus*, formado por una gelatina transparente que contiene 88% de agua y la sustancia fundamental con base en mucopolisacáridos. Una parte periférica, el *annulus fibrosus* o anillo fibroso, constituida por una sucesión de capas concéntricas, cuya oblicuidad va avanzando de la periferia hacia el centro. Debido a esta conformación y si se toma el núcleo pulposo como esta esfera intercalada entre dos planos, la conformación del anillo fibroso absorbe energía y ayuda a disminuir la magnitud del vector de carga sobre la siguiente vértebra.

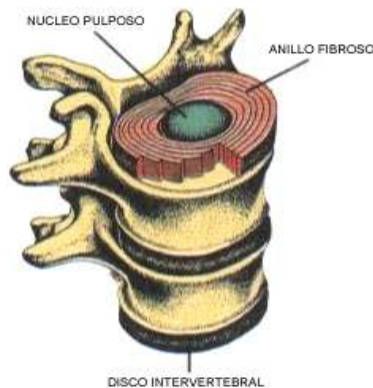


Figura 2.2.8. Disco intervertebral

2.2.1 Extensión, inclinación y rotación del raquis lumbar

Durante el movimiento de flexión (Fig. 2.2.9.A) el cuerpo de la vértebra suprayacente se inclina y se desliza ligeramente hacia delante en sentido de la

flecha, lo que disminuye el grosor del disco en su parte anterior y lo aumenta en su parte posterior. De este modo el disco intervertebral toma forma de cuña de base posterior y el núcleo pulposo se ve desplazado hacia atrás.

Durante el movimiento de extensión (Fig. 2.2.9.B), el cuerpo de la vértebra suprayacente se inclina hacia atrás y retrocede en el sentido de la flecha. Al mismo tiempo, el disco intervertebral se hace más delgado en su parte posterior y se ensancha en su parte anterior, tornándose cuneiforme de base anterior. El núcleo pulposo se desplaza hacia delante. Durante el movimiento de inflexión lateral (Fig. 2.2.9.C), el cuerpo de la vértebra suprayacente se inclina hacia el lado de la concavidad de la inflexión y más grueso en el lado de la convexidad. El núcleo pulposo se desplaza ligeramente hacia el lado de la convexidad (Fig. 2.2.9.D).

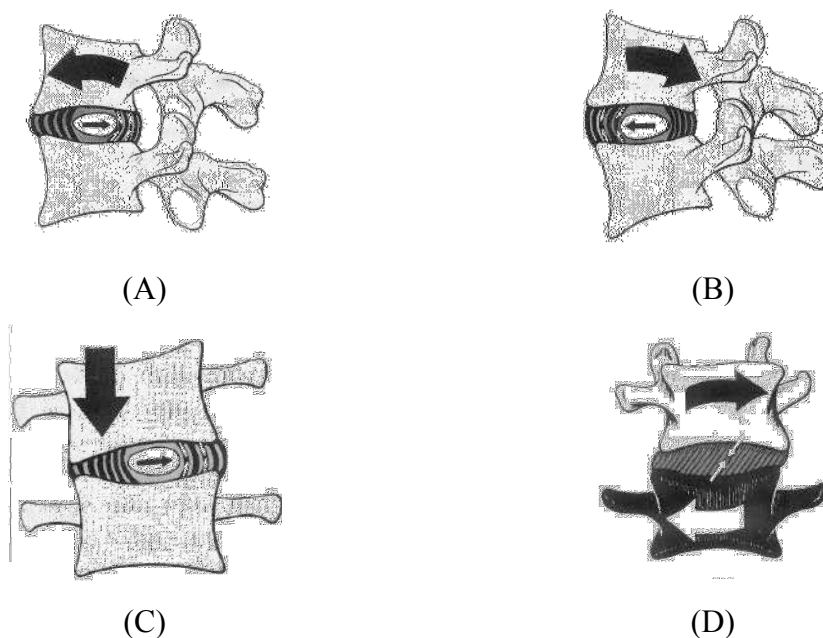


Figura 2.2.9. Esquema de movimientos intervertebrales.

Las amplitudes de flexoextensión del raquis lumbar varían según los individuos y según la edad. Por lo tanto, todas las cifras propuestas son casos particulares o promedios. No obstante, se puede suponer (Fig. 2.2.10) que la

extensión que se acompaña de una hiperlordosis lumbar tiene una amplitud de 30°, mientras que la flexión que se acompaña de un enderezamiento de la lordosis lumbar tiene una amplitud de 40°.

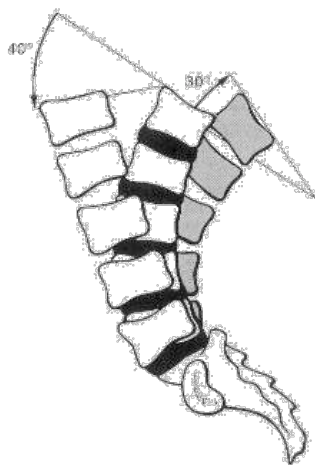


Figura 2.2.10. Amplitudes de extensión y flexión lumbar (Kapandji, 2001).

Los trabajos de Albrook (1957) (Fig 2.2.11.A) permiten conocer la amplitud individual de flexo-extensión en cada nivel (columna derecha) y la amplitud total y acumulada de la flexo-extensión (columna de la izquierda) la cual es de 83° y bastante próxima a los 70° citados anteriormente. Por otra parte, la amplitud máxima de flexo-extensión se sitúa entre L4 y L5: 24°, y a continuación, por orden de amplitud decreciente, vienen las interlíneas L3-L4 y L5-S, todas ellas de 18° y, casi de la misma amplitud, las interlíneas L2-L3 de 12° y L1-L2 de 11°. De este modo, el raquis lumbar inferior es, para estos autores, mucho más móvil en el plano de la flexo-extensión que el raquis lumbar superior.

Como cabía esperarse, las amplitudes de la flexo-extensión son bien distintas según la edad (Fig. 2.2.11.B). Este cuadro, según Tanz (1953), permite constatar que la movilidad del raquis lumbar decrece con la edad, siendo máxima entre los dos y los trece años. La movilidad máxima se sitúa en la parte baja del segmento lumbar, sobre todo en el espacio L4-L5.

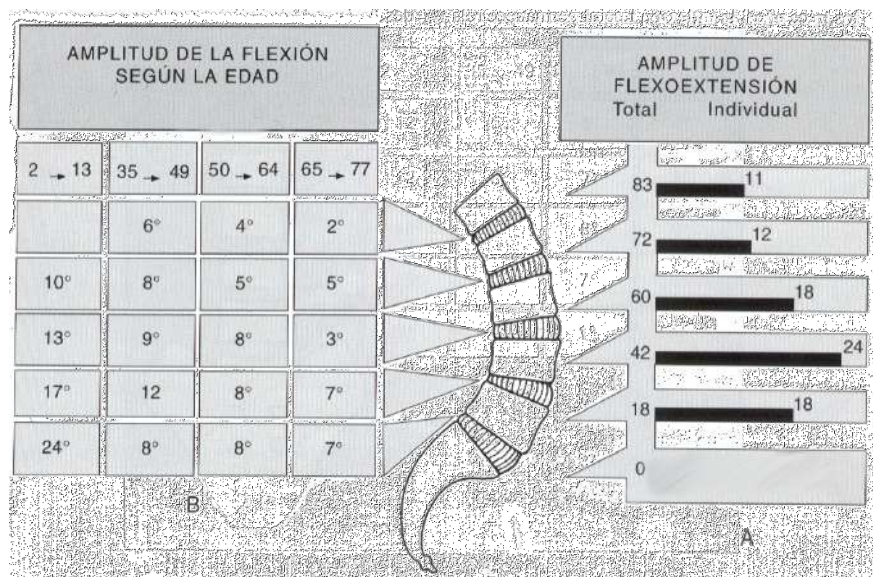


Figura 2.2.11. A) amplitudes en flexo-extensión; B) amplitudes de la flexión según la edad (Albrook, 1957).

Similar al caso de flexo-extensión, la amplitud de la extensión lateral, también denominada inclinación, varía según la edad y según los individuos. Sin embargo, se puede afirmar que en término medio, la inclinación es de 20° a 30° a cada lado, como ilustra la Figura 2.2.12.

Las amplitudes de la inclinación (Fig. 2.2.13), disminuyen considerablemente con la edad, son máximas de los dos a los trece años, alcanzando los 62° a un lado y otro de la posición media; entre los 35 y los 49 años, la amplitud sólo es de 31° a cada lado; descende a 29° entre los 50 y los 64 años y a 22° entre los 65 y 77 años.

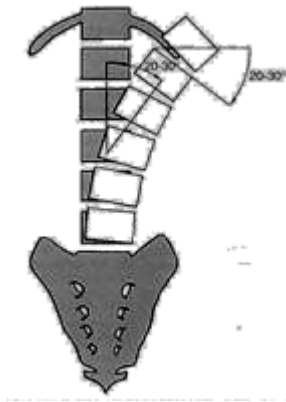


Figura 2.2.12. Amplitud de la inflexión lateral (Kapandji, 2001).

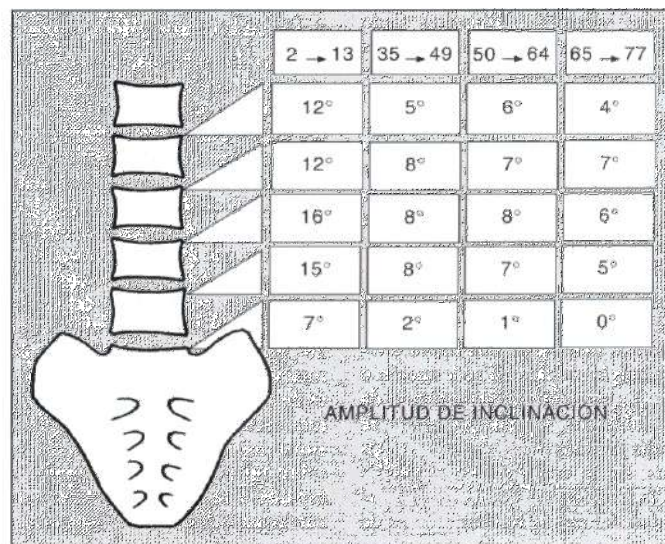


Figura 2.2.13. Valores de la amplitud de inclinación según la edad (Kapandji, 2001).

La amplitud de rotación segmentaria y total en el raquis lumbar y en el raquis dorsal ha sido durante mucho tiempo una gran incógnita. De hecho, es muy difícil inmovilizar la pelvis y apreciar la rotación en el extremo dorsal del raquis, ya que la cintura escapular es muy móvil sobre el torác. En los trabajos de Gregersen y Lucas (1967) pueden encontrarse cifras fiables. Estos autores decidieron implantar agujas metálicas bajo anestesia local en cada una de las apófisis espinosas del raquis dorsal y lumbar para medir su desplazamiento angular mediante sensores electrónicos altamente sensibles.

La curva mostrada en la Figura 2.2.14 presenta la rotación de los discos intervertebrales (gráfico izquierdo) y las rotaciones de las vértebras desde la D₁-S₁ (<1°). Como se puede constatar los discos D₇-D₈ presentan una rotación casi nula, mientras la rotación es máxima en las vértebras D₇-D₈ (2.4°), disminuyendo esta rotación asintóticamente hacia la D₁ (0.6°) y la S₁ (0.3°). Por lo tanto el raquis lumbar presenta una rotación dos veces menor del raquis dorsal en su punto de menor rotación, como se ilustra en la Figura 2.2.14.

Por su parte, la Figura 2.2.15 muestra la rotación de la columna en posiciones de sedestación y bipedestación. La posición de sedestación produce menores rotaciones puesto que hay una mayor inmovilización de la cadera.

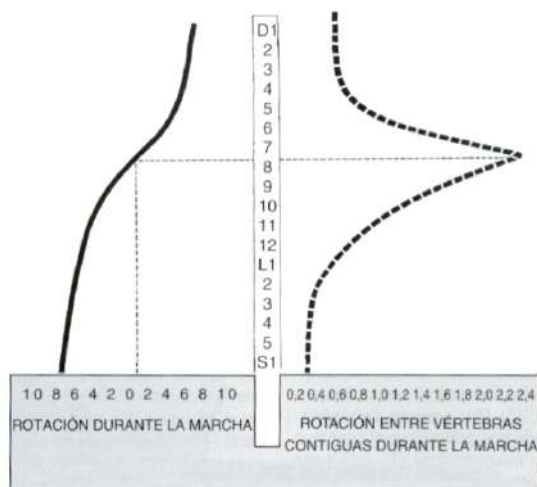


Figura 2.2.14. Valores de rotación del disco durante la marcha (Kapandji, 2001).

El raquis lumbar aislado presenta una rotación máxima total de 10° lo que significa 5° de cada lado, o sea, 1° por cada segmento. El raquis dorsal presenta una rotación total mucho mayor 85°- 10° = 75° es decir 37° por cada lado, 3°-4° mínimo por lado y por segmento. La curva de bipedestación presenta 4 puntos de inflexión, mientras que la de sedestación presenta uno sólo, justo en la articulación dorso lumbar. Estos puntos de inflexión indican cambios acentuados en la curva de dependencia de las rotaciones dorso-lumbares. Las rotaciones en estado de sedestación son ligeramente menores que en el caso de bipedestación pero su dependencia funcional es idéntica (ver Fig. 2.2.15). Para

cada segmento, hay que tener ciertas consideraciones especiales, aparte de los generales ya enumerados.

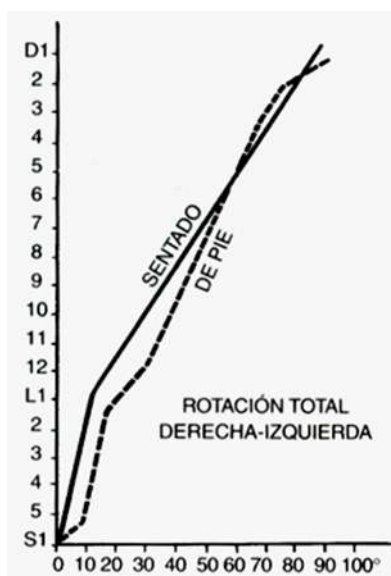


Figura 2.2.15. Rotación total máxima derecha-izquierda (Kapandji, 1981).

2.2.2 Modelos biomecánicos para la columna vertebral

Un modelo biomecánico es un simulador de algún aspecto del comportamiento del aparato locomotor, realizándose la simulación en condiciones controladas. Existen varios modelos pero ninguno de ellos reproduce perfectamente la realidad (Rachwan et al., 2008). Dichos modelos se utilizan cuando es inviable la realización de otros tipos de estudios o cuando los costos resultan ser muy elevados.

Los tres tipos de modelos biomecánicos más utilizados son los modelos animales, los modelos físicos y los modelos analíticos. La principal ventaja de los modelos animales son su disponibilidad y la uniformidad de tamaños y características físicas. En cambio, las diferencias anatómicas y funciones entre los animales utilizados y los humanos, hacen difícil la extrapolación de los resultados obtenidos.

Entre los modelos físicos existen dos tipos: los sintéticos y los cadavéricos. Los modelos físicos sintéticos intentan simular el comportamiento del raquis,

empleando materiales con características físicas aproximadas a las vértebras y de los tejidos blandos que las interconectan. Un ejemplo típico de dichos modelos son los maniqués utilizados en los estudios de colisiones de automóviles. Las principales ventajas de dichos modelos son su disponibilidad y una alta reproducibilidad. Sin embargo, los modelos sintéticos actuales poseen un comportamiento que aún dista mucho del comportamiento real del raquis humano. Otra desventaja es su deficiencia de detalles anatómicos.

Los especímenes cadavéricos presentan como ventaja principal el ser una fiel reproducción de la anatomía del raquis y de las propiedades físicas de sus componentes, pero proporcionan una información muy limitada, su costo es elevado y existen problemas de disponibilidad, en particular, cuando se requiere disponer de una muestra estadísticamente homogénea.

Los modelos biomecánicos analíticos consisten en un conjunto de ecuaciones que representan el comportamiento de ciertos aspectos del raquis, considerando las propiedades físicas de sus elementos obtenidas por medios experimentales. En teoría, pueden simular completamente el funcionamiento del raquis *in-vivo*, aunque sus resultados deben ser interpretados con prudencia. El principal problema reside en su validación. Sin embargo, una vez validados experimental y clínicamente, con su implementación en computadores, pueden convertirse en herramientas potentes de estudio, prevención y tratamiento de patologías del raquis.

Por estas razones, los modelos biomecánicos para simulación en la columna han sido extensamente utilizados, de manera de estimar las cargas y diseñar dispositivos de corrección de lesiones en columna. Se pueden mencionar, entre otros, los trabajos de Rojas (2003), Rachwan (2007) y Caffiero (2007), realizados dentro del Instituto Nacional de Bioingeniería de la Universidad Central de Venezuela.

Hay múltiples evidencias de que las cargas mecánicas que soporta el raquis están directamente relacionadas con la etiología de diversas patologías. Por tanto, parece necesario establecer los valores que alcanzan dichas cargas al realizar un ejercicio determinado. Los modelos biomecánicos desarrollados

hasta la fecha se centran en la columna lumbar por ser la zona más solicitada mecánicamente.

Cuando un individuo realiza determinada tarea, sobre el raquis actúa un conjunto de cargas que genéricamente pueden clasificarse en externas e internas. Las cargas externas incluyen las debidas propiamente a la tarea (como el levantamiento de pesos o desplazamiento de los mismos) y las debidas a los pesos propios de los segmentos corporales. Las cargas internas son todas aquellas que se desarrollan para mantener el raquis en equilibrio. En este grupo se encuentran las fuerzas musculares, las de los ligamentos, la debida a la presión abdominal y las de reacción entre los elementos del raquis. En la mayoría de los modelos se considera que las unidades vertebrales funcionales (UVF) son capaces de soportar únicamente fuerzas de compresión, pero no momentos. Esto es válido para giros pequeños o medios.

En general, los momentos de reacción debido a fuerzas externas que actúan sobre la UVF quedan equilibrados mediante momentos internos que se reparten de la siguiente forma (McGill y Norman, 1986).

$$M_r = \sum_m M_m + \sum_I M_I + M_d \quad (2.2.1)$$

donde M_r es el momento de reacción sobre el segmento considerado, M_m es el momento activo generado por los músculos, y los momentos pasivos M_I y M_d son debidos a los ligamentos y al disco respectivamente. El momento debido a los ligamentos es función de la pretensión de cada uno, de su alargamiento y del brazo de palanca con el que actúan. Aunque todavía no se ha estudiado experimentalmente la contribución de cada ligamento a la resistencia del momento externo a lo largo de todo el rango de movimiento, existen modelos analíticos que predicen que su función principal es limitar la flexión, pero solo en los límites del movimiento, aportando poco para valores moderados del giro. En el caso de levantamiento de pesos, esta aportación es significativamente mayor cuando la tarea se realiza con un menor grado de lordosis lumbar (Potvin *et al.*, 1991).

El momento soportado por el disco es función de la rotación de sus extremos. Para el disco L5/S1, Anderson *et al.* (1985) dedujeron la siguiente relación

$$M_d = 0.01e^{1.634}e^{21.026R} \quad (2.2.2)$$

donde M_d se mide en Nm y la rotación relativa R entre L5 y S1 en radianes. Por ejemplo, para un giro de flexión de 10° , el momento debido al disco es de sólo de 2 Nm. En cualquier caso, la aportación de los músculos al momento total es muy superior a los momentos pasivos.

Cuando las tareas se realizan a velocidades suficientemente bajas para que las cargas inerciales sean despreciables, es suficiente utilizar modelos estáticos para la estimación de cargas a nivel intervertebral. Dichos modelos pueden ser bidimensionales o tridimensionales, en función de la complejidad que se desee para el análisis.

2.2.2.1 Un modelo bidimensional

El modelo más sencillo que se puede plantear supone que las cargas externas (peso del cuerpo por encima de un determinado nivel vertebral y un peso sostenido en la manos), que generan un momento externo y una fuerza de compresión intervertebral, se equilibran por una única fuerza extensora, debida a los músculos paravertebrales, que actúa con un determinado brazo de palanca, generalmente considerado de 5 cm, y que todas las fuerzas están contenidas en el plano sagital, como muestra la Figura 2.2.16.

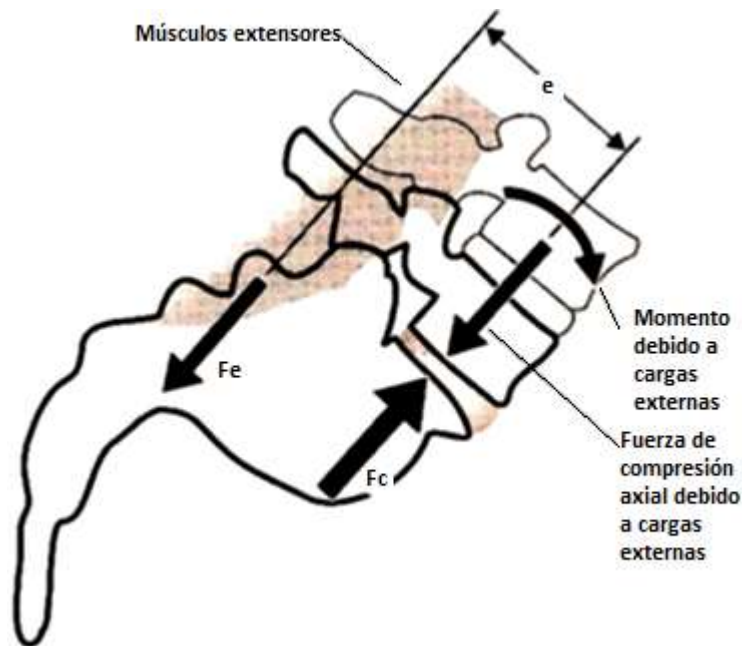


Figura 2.2.16. Modelo simplificado de las cargas que actúan a nivel lumbar

Las condiciones de equilibrio estático exigen que la suma de fuerzas y la suma de momentos sean cero. Bajo estas condiciones, la relación entre las cargas externas e internas es la dada por las ecuaciones siguientes

$$F_c = F_e + F_{Ext} \quad (2.2.3)$$

$$F_e = \frac{M_{Ext}}{e} \quad (2.2.4)$$

Los momentos flectores M_{Ext} , creados por el peso del cuerpo (cuyo eje de gravedad está situado por delante del disco) y por un peso externo suspendido en las manos, son equilibrados por una fuerza muscular extensora F_e que se traduce en un aumento considerable de la fuerza de compresión de reacción intervertebral F_c . Este modelo simplificado ha sido ampliamente utilizado para la estimación de cargas lumbares en tareas industriales de levantamiento de pesos o en posiciones de flexión del tronco (NIOSH, 1981). Dicho modelo ha

sido completado al incluir el efecto de la presión abdominal en el soporte de las cargas externas y el cálculo de las fuerzas cortantes, que deben ser soportadas principalmente por el disco y las carillas articulares (Chaffin, 1984). Supongamos que un individuo está soportando un peso externo P en una posición en flexión como la mostrada en la Figura 2.2.17

Las fuerzas en el plano sagital, que estabilizan el tronco frente a cargas externas son:

- La fuerza extensora F_e debida conjuntamente a los músculos y ligamentos paravertebrales,
- La fuerza que la presión abdominal ejerce sobre la superficie interna F_a , que actúa por delante del raquis tendiendo a extender el tronco y
- Las fuerzas de reacción intervertebrales de compresión F_c y de cortante o de cizalladura S en el nivel estudiado.

Las cargas externas a contrarrestar son:

- El peso W del segmento corporal situado por encima del nivel vertebral considerado
- El peso externo P sostenido en las manos.

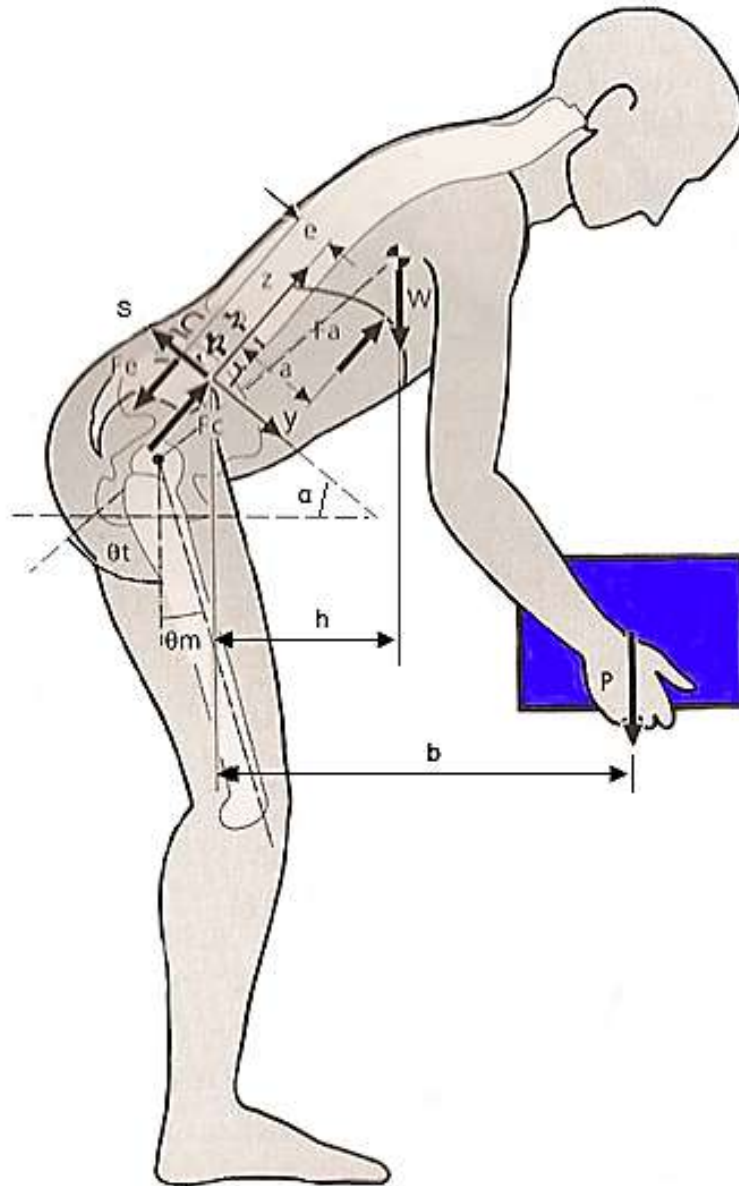


Figura 2.2.17. Modelo plano simplificado para la estimación de las cargas lumbares al sostener un peso.

La presión abdominal puede calcularse en función de los ángulos que forman el tronco θ_t y el muslo θ_m con la vertical y el momento que está actuando a nivel de la articulación de la cadera de acuerdo a la expresión

$$P_a = 10^{-4}[43 - 0.36(\theta_t - \theta_m)]. M_H^{1.8} \quad (2.2.5)$$

donde los ángulos se miden en grados y el momento M_H en la cadera en Nm. Este momento se calcula como el producto del peso del cuerpo por encima de la cadera y el peso externo, por las distancias de su línea de acción a la articulación de la cadera. La fuerza realizada por la presión abdominal se obtiene, por tanto, multiplicando la presión por el área sobre la que actúa. El modelo fue particularizado para el nivel L5-S1, y se supone que la fuerza extensora resultante y la fuerza debida a la presión abdominal actúan perpendicularmente al plano definido por el disco intervertebral.

Las incógnitas del análisis son la fuerza (medida en Newtons [N]) realizada por los extensores para estabilizar el tronco al soportar una carga externa en flexión F_e y las fuerzas de reacción de compresión F_c y cizalladura S que actúan a nivel L5-S1. Los datos de partida son las fuerzas externas (peso externo a soportar P y peso del cuerpo W por encima de L5-S1) y los brazos de palanca con las que éstas actúan respecto al segmento vertebral (distancia en horizontal de los centros de gravedad de los pesos externo y del tronco, al centro del disco h y b respectivamente). También se considerará conocida la fuerza debida a la presión abdominal F_a , el brazo de palanca a con el que ésta actúa, y el brazo de palanca de los músculos extensores e . La primera condición de equilibrio estático exige que la suma total de fuerzas que actúan en el nivel estudiado sea cero

$$\sum F = 0 \quad (2.2.6)$$

Esta igualdad deberá cumplirse tanto en la dirección Y como en la dirección Z . Las fuerzas que actúan en la dirección Y son la fuerza de cizalladura S que actúa a nivel de L5-S1 y las componentes de los pesos externos en dicha dirección

$$\sum F_y = 0 \quad (2.2.7)$$

$$W \cdot \sin \alpha + P \sin \alpha - S = 0 \quad (2.2.8)$$

$$S = W \cdot \sin \alpha + P \cdot \sin \alpha \quad (2.2.9)$$

siendo α el ángulo que forma la cara superior del sacro con la horizontal. Las fuerzas que actúan en la dirección Z son, en un sentido, las realizadas por los extensores y la componente de los pesos en dicha dirección, y en sentido opuesto la fuerza debida a la presión abdominal y la fuerza de reacción de compresión intervertebral.

$$\sum F_z = 0 \quad (2.2.10)$$

$$F_c + F_a - F_e - W \cdot \cos \alpha - P \cdot \cos \alpha = 0 \quad (2.2.11)$$

$$F_c = W \cdot \cos \alpha + P \cdot \cos \alpha + F_e - F_a = 0 \quad (2.2.12)$$

De la ecuación anterior el único término que falta por conocer, para determinar la carga de compresión a la que está sometido el segmento vertebral, es el correspondiente a la fuerza que realizan los músculos extensores para contrarrestar la flexión del tronco. Dicho valor se obtiene mediante la segunda condición de equilibrio estático que exige que la suma de momentos respecto del centro del disco intervertebral L5-S1 sea cero.

$$\sum M = 0 \quad (2.2.13)$$

$$F_e \cdot e + F_a \cdot a - W \cdot b - Ph = 0 \quad (2.2.14)$$

$$F_e = \frac{W \cdot b + P \cdot h - F_a \cdot a}{e} \quad (2.2.15)$$

Por medio de las ecuaciones anteriores, se pueden conocer las cargas de compresión y cizalladura a las que está sometido el disco L5-S1 bajo las hipótesis de movimiento plano y considerando, únicamente como las fuerzas internas activas, las de los músculos extensores y la de la presión abdominal.

El modelo anterior, aunque es de una gran simplicidad, puede utilizarse para tener una aproximación cuantitativa de las cargas que actúan a nivel lumbar y para evaluar la variación de dichas cargas al modificar la posición o las cargas externas soportadas. Consideremos como ejemplo un hombre de 800 N de peso corporal sosteniendo un peso externo de 200N, en una posición en la que los valores de los ángulos del tronco y del muslo son $\theta_t=70^\circ$ y $\theta_m=30^\circ$.

De acuerdo a tablas antropométricas, es posible calcular los datos necesarios para el análisis. El peso del tronco es aproximadamente el 55% del peso total del individuo, y por tanto $W=440\text{N}$. Se considera el brazo de palanca de los músculos extensores de 5 cm y el de la fuerza realizada por la presión abdominal de 8,5 cm. El peso externo tiene en esa posición un brazo de palanca de 30 cm. El valor de la presión abdominal se estima, según se ha visto con anterioridad, en 3200Pa. Suponiendo que dicha presión actúa sobre un área de 400 cm^2 , la fuerza debida a la presión tendrá un valor de $F_a=128\text{ N}$.

2.2.2.2 Modelo tridimensional de Schultz

Este modelo, además de ofrecer información sobre la fuerza que está realizando cada uno de los músculos considerados, permite el estudio de un mayor número de tareas. Por ejemplo, su uso no está restringido a tareas simétricas contenidas en el plano sagital. El modelo presentado en la Figura 2.2.18 (Schultz *et al.*, 1982) que considera a nivel de L3 diez músculos. En este caso, las fuerzas internas son a) las fuerzas de reacción intervertebrales de

compresión F_c y de cizalladura anteroposterior S_{ap} y lateral S_l y b) las realizadas por los músculos considerados, que incluyen los extensores (e_d y E_j), los rectos del abdomen (R_d y R_i), los oblicuos menor y mayor del abdomen (I_d e I_i , X_d y X_i) y el dorsal ancho (D_d y D_i).

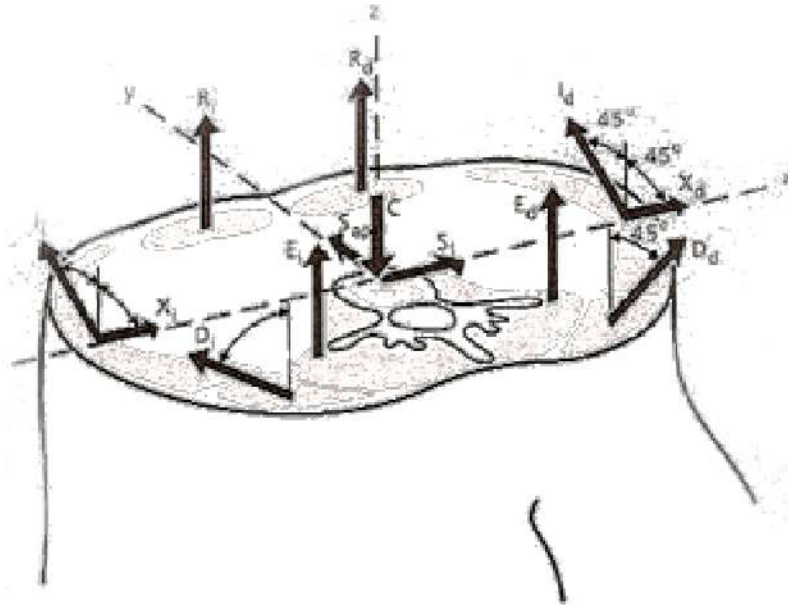


Figura 2.2.18. Modelo 3D de los músculos que actúan a nivel de L3 (Schultz *et al*, 1982)

En este tipo de problemas estáticos tridimensionales, son seis las ecuaciones que deben cumplirse para considerar el equilibrio. Las ecuaciones de equilibrio de fuerzas desarrolladas por los músculos con respecto al centro del disco intervertebral de la L3 son

$$\sum F_x = S_l + (D_d - D_i) \cdot \sin \gamma = 0 \quad (2.2.16)$$

$$\sum F_y = S_{ap} + (I_d + I_i) \cdot \sin \beta - (X_d + X_i) \cdot \sin \delta = 0 \quad (2.2.17)$$

$$\begin{aligned} \Sigma F_z = (E_d + E_i) + (R_d + R_i) + (D_d + D_i) \cdot \cos \gamma + (X_d + X_i) \cdot \cos \beta + (I_d + I_i) \cdot \cos \delta - F_c = 0 \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

Mientras que las ecuaciones de equilibrio de momentos son

$$\begin{aligned} \Sigma M_x = (R_i + R_d) \cdot y_r + [(X_i + X_d) \cos \gamma + (I_i + I_d) \cdot \cos \gamma] \cdot y_{xi} - (E_i + E_d) \cdot y_e - (D_i + D_d) \cdot \cos \gamma \cdot y_d = 0 \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

$$\begin{aligned} \Sigma M_y = (R_i - R_r) \cdot x_r + [(X_i - X_d) \cos \beta + (I_i - I_d) \cos \delta] \cdot X_{xi} + (E_i - E_d) \cdot x_e + (D_i - D_d) \cos \gamma \cdot x_d = 0 \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

En las ecuaciones anteriores, F_x , F_y , F_z , M_x , M_y y M_z son las fuerzas y los momentos externos que el tronco está soportando (flexo-extensión, flexión lateral y rotación axial respectivamente). Las magnitudes “x” e “y” son las distancias de cada uno de los músculos a los ejes Y y X respectivamente.

Las fuerzas se consideran aplicadas en el centroide de la sección de cada uno de los músculos. Este modelo puede utilizarse para predecir las fuerzas y momentos máximos que puede realizar el tronco. Para ello, basta con considerar el valor de la fuerza máxima por unidad de superficie que puede realizar un músculo.

Para conseguir un momento puro de extensión, los músculos incluidos en este modelo que pueden contribuir son los extensores y los dorsales anchos. La fuerza máxima que realizan dichos músculos puede calcularse multiplicando dicho valor de tensión máxima por la superficie de cada uno de los músculos. La aportación de cada uno de los músculos al momento extensor global vendrá dado por el producto de la fuerza máxima que puede realizar por su brazo de palanca respecto al centro del disco, como se recoge en la Tabla 2.2.1. El área de los músculos se obtiene multiplicando la relación correspondiente por la profundidad y ancho del tronco a dicho nivel. La distancia del centro del

músculo al cuerpo vertebral se obtiene, en la dirección AP, multiplicando el valor correspondiente por la profundidad del tronco y el de la dirección ML, por el ancho del tronco. Se supone el cuerpo vertebral situado a 2/3 de la profundidad del tronco.

Tabla 2.2.1. Orientación de los músculos en el modelo a nivel de L3 (Schultz *et al.*, 1982)

Módulo	Línea de acción	Relación de área	Localización antero-posterior	Localización lateral
Rectos del abdomen		0,0060	0,540	0,121
Oblicuos del abdomen • menor • mayor	Inclinado 45° respecto al plano sagital	0,0168 0,0148	0,189 0,189	0,453 0,453
Extensores	Longitudinal	0,0390	0,220	0,179
Dorsal ancho	Inclinados 45° respecto al plano sagital	0,0037	0,276	0,211

Las fuerzas musculares se consideran aplicadas en el centroide de la sección de cada músculo. En la Tabla 2.2.2 se muestran algunos valores de las cargas consideradas en la columna lumbar, obtenidas de este modelo.

Tabla 2.2.2. Cargas en la columna lumbar (Schultz *et al.*, 1982)

Posición	Compresión (N)
Parado	440
Brazos cerrados, cargando 8 kg	650
Brazos abiertos	460
Brazos abiertos, cargando 8 kg	1170
Tronco flexado 30°, brazos abiertos	1400
Sentado	380

2.2.2.3 Modelo tridimensional de Bogduk

Este modelo considera la disposición tridimensional de los músculos en vez de particularizar el problema a una única sección, como se hacía en el modelo anterior. Dicho modelo incorpora 49 fascículos de los extensores y de los multifluidos (fascículos medios del transverso espinoso), y consiste en la caracterización geométrica de las inserciones de cada uno de los fascículos, sus longitudes, el área de las secciones transversales y el brazo de palanca con el

actúan respecto de los centros de los discos de cada uno de los segmentos lumbares. En la Figura 2.2.19 se muestran las inserciones de los músculos sobre la vértebra L2. A partir de dicho modelo, es posible calcular el momento de extensión máximo que puede realizar dicho conjunto de músculos y la carga de compresión y cortante intervertebral (Bogduk *et al.*, 1995).

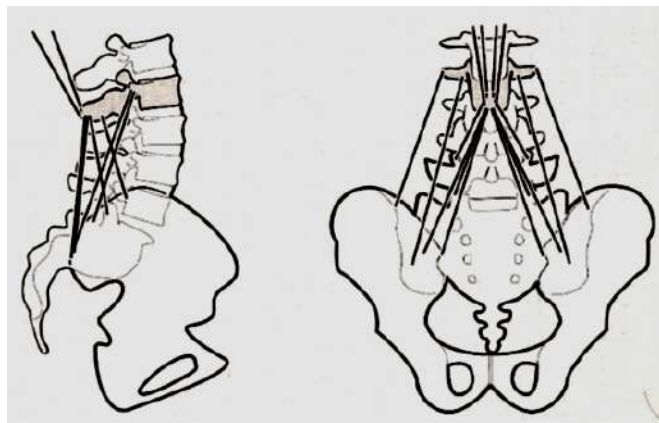


Figura 2.2.19. Modelo tridimensional de los músculos a nivel de L2 (Bogduk *et al.*, 1992)

El cálculo de los momentos máximos que se pueden desarrollar es sencillo mediante las ecuaciones de equilibrio pues, matemáticamente se tienen 6 ecuaciones y 6 incógnitas (3 fuerzas intervertebrales y los 3 momentos) y además la validación puede hacerse mediante el registro *in-vivo* de dichos momentos. Sin embargo, el cálculo de las fuerzas musculares que se desarrollan al realizar determinada tarea es mucho más complejo, presentando principalmente dos problemas. Por una parte la dificultad de la validación y por otro lado, la indeterminación matemática de las soluciones. Puesto que no es posible la medida directa de las fuerzas internas *in-vivo*, para la validación es necesario acudir a técnicas indirectas como son la medida de la presión intradiscal y el registro de la actividad bioeléctrica para la validación de los modelos. La solución del problema matemático se obtiene empleando técnicas de optimización.

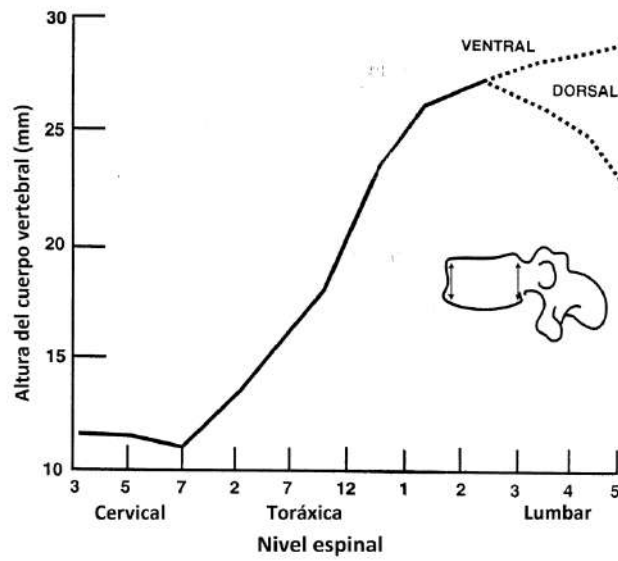
2.2.3 Morfología vertebral

Las dimensiones de las vértebras varían en función de muchos factores. La Tabla 2.2.3 muestra los resultados obtenidos tras un estudio de las mediciones de los cuerpos vertebrales de diferentes pacientes Hospital Universitario de Caracas (Caprilli, 2002).

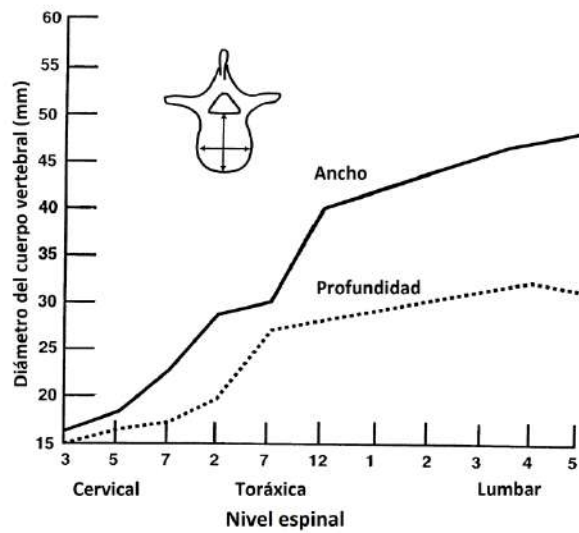
Tabla 2.2.3. Dimensiones vertebrales (mm) (Caprilli, 2002).

	Altura anterior	Altura posterior	Cortical		Esponjosa	
			Diámetro transverso	Diámetro antero posterior	Diámetro transverso	Diámetro antero posterior
L1	20-24	24-25	41	30	26	17
L2	23-26	25-26	47	28-30	31	16-18
L3	25-26	22-25	40-45	30-35	30	19-20
L4	25-27	22-25	45-50	30-32	35-36	20-22
L5	25-27	20-24	40-45	29-30	30	18
T1	12-18	12-18	28	20	-	-
T2	13-20	13-22	28	20-24	-	-
T3	16-23	16-25	28	22-26	-	-
T7	16	16	30	25	-	-
T10-T12	20-26	20-24	36-38	26	-	-

A continuación, se muestran en la Figura 2.2.20.a las dimensiones vertebrales desde el segmento cervical hasta el lumbar, lo que deja ver una bifurcación en la ordenada (altura del cuerpo vertebral lumbar en mm), mientras que la Figura 2.2.20.b muestra los diámetros antero posterior y transversal medidos entre cortical y cortical.



(A)



(B)

Figura 2.2.20. (A) alturas vertebrais por nível. (B) diâmetro anteroposterior e diâmetro transversal. (Caprilli, 2002).

2.3 El disco intervertebral

Entre cada dos cuerpos vertebrales adyacentes existe una articulación de tipo anfiartrosis que une las dos caras vertebrales, dicha estructura se denomina disco intervertebral. Esta estructura es muy activa y actúa como un amortiguador hidráulico, pretensado y cerrado, de las tensiones y cargas axiales que actúan sobre la columna y que permite cierta cantidad de movimiento entre las vértebras (extensión, flexión, rotación, inclinación y combinaciones (Miralles & Puig, 1998; Martini *et al.*, 2009).

El disco intervertebral se compone de dos zonas, una central denominada núcleo pulposo y otra periférica, denominada anillo fibroso, que están separadas de las vértebras por dos placas o platillos de cartílago hialino (Fig. 2.3.1) que mecánicamente ayudan a soportar las cargas de compresión que actúan sobre la columna (Van-Cochran, 1988). El núcleo pulposo es de aspecto gelatinoso, elástico, blando e incompresible, integrado en gran medida por agua, alrededor del 75%, contiene fibras elásticas y reticulares dispersas en su interior. El anillo fibroso es una capa dura formada por cartílago fibroso, lo que le da rigidez al disco.

Los discos contribuyen en forma considerable en la talla de una persona, ocupan una cuarta parte de la longitud total de la columna que por el paso de los años, disminuye la cantidad de fluido en el núcleo pulposo lo cual explica en gran medida el descenso de estatura característico en personas de avanzada edad.

El disco intervertebral adulto es avascular, la evidencia experimental señala que es una estructura con alto índice metabólico. La nutrición del disco es por un sistema de difusión proporcionado por un intercambio de nutrientes con los vasos sanguíneos vertebrales a través del platillo o placa cartilaginosa y la zona externa del anillo fibroso (Bibby *et al.*, 2005; Ferragut *et al.*, 2007; Mokhbi-Soukane *et al.*, 2007; Mokhbi-Soukane *et al.*, 2009), como se muestra en la Figura 2.3.2.

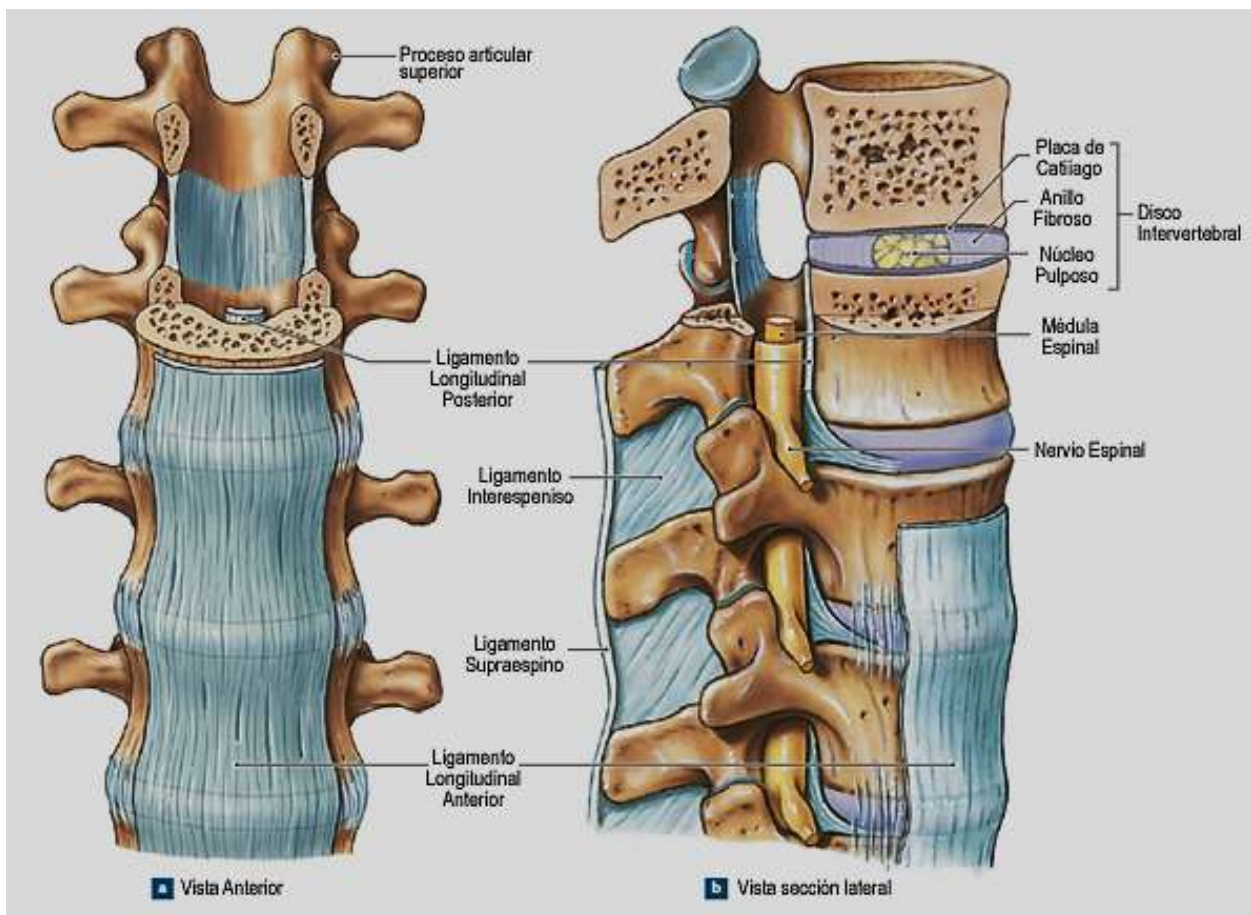


Figura 2.3.1. Sección de la región lumbar de la columna vertebral (Martini *et al.*, 2009).

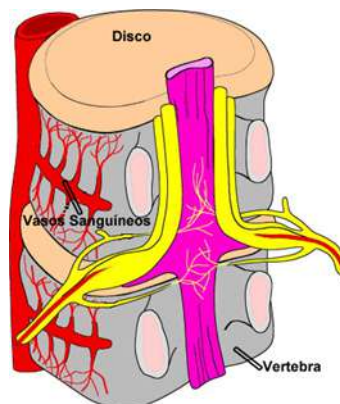


Figura 2.3.2. Sistema vascular que rodea el disco intervertebral (Shankar *et al.*, 2009).

2.4 Nutrición del disco intervertebral

Como se mencionó arriba, el disco intervertebral es la mayor estructura avascular en el cuerpo humano. La razón de esto es porque no tiene suministro directo de sangre como la mayoría de otros tejidos del cuerpo. Los nutrientes para el disco se conducen dentro de pequeños lechos capilares que se encuentran en el hueso subcondral, justo por encima de las placas o platillos de cartílago. Esta red vascular subcondral es de suma importancia para las células del núcleo pulposo del disco y para del anillo interno, mientras que el anillo externo cuenta con un suministro de sangre proveniente de los tejidos que rodean la columna (ver Fig. 2.3.2). Por su naturaleza avascular este sistema de difusión es muy eficiente ya que los nutrientes no tienen que difundirse muy lejos para llegar a las células del disco. Este 'método de difusión' es cómo las células del disco obtienen el oxígeno, nutrientes, glucosa, y aminoácidos que son necesarios para la función normal del disco y su reparación, como se muestra en la Fig. 2.4.1

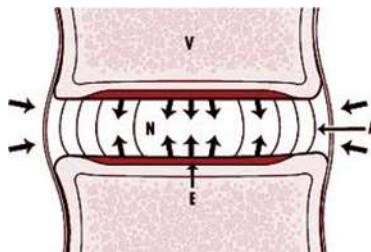


Figura 2.4.1. Esquema que refleja la dinámica de la entrega de fluidos al disco intervertebral. V- vértebra, N-núcleo pulposo, A-anillo exterior, E- platillo o placa de cartílago (Sally & Jill, 2011).

Durante un ciclo diurno, los discos tienen la capacidad para expandirse y comprimirse en el transcurso de un día. Al comenzar el día los discos se comprimen y se deshidratan debido a la gravedad y la actividad física que implican cargas axiales. De hecho, un disco sano se reducirá hasta un 20%, lo que a su vez disminuye la altura total del individuo de unos 15 mm a 25 mm. Durante la etapa de sueño se descomprime la columna vertebral, los discos se llenan de agua y nutrientes, para regresar de nuevo a su estado totalmente hidratado. Este movimiento de fluidos simula una marea dentro y fuera del disco que contribuye con el movimiento de nutrientes en el centro avascular del disco.

2.5 Enfermedades y patologías del disco intervertebral

Cuando un disco intervertebral recibe una presión superior a sus límites normales, puede sufrir una alteración temporal o permanente. La compresión del núcleo pulposo puede empujar el anillo fibroso, forzando un canal entre la placa de cartílago y el anillo, este tipo de problemas se denomina disco deslizante, como ilustra la Figura 2.5.1. Los lugares sobre la columna donde son más comunes son en el área cervical entre la quinta y sexta vértebra (C_5-C_6), en la región lumbar (L_4-L_5) y en la interface entre las regiones sacra y lumbar.

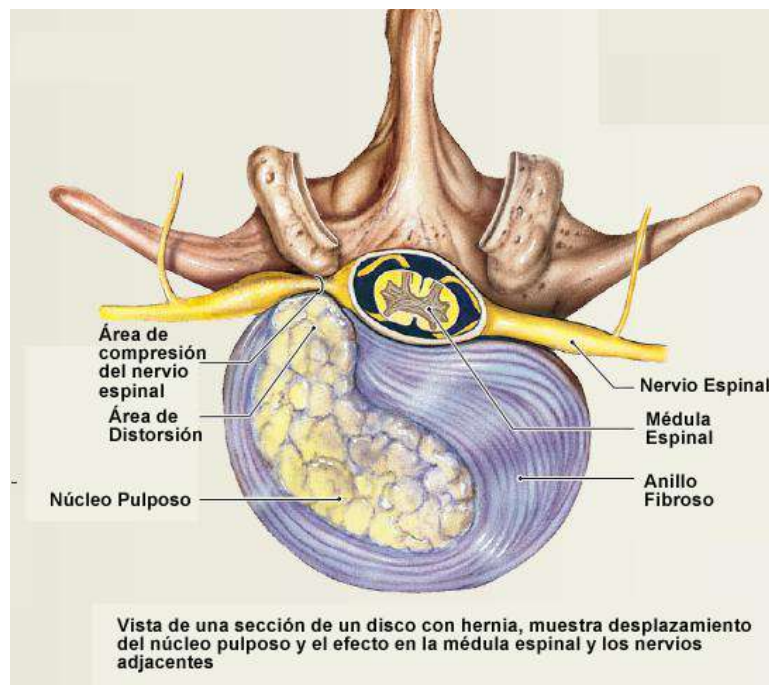


Figura 2.5.1. Disco deslizante (Martini *et al.*, 2009)

Otro problema que ocurre por exceso de compresión es la fractura de la placa de cartílago. Al igual que en el caso del disco deslizante, el efecto de la compresión obliga al núcleo pulposo a salir por el área de fractura, afectando el cuerpo vertebral, produciendo necrosis en tejido cercano y generando unas alteraciones conocidas como nodos de Schmorl (Fig. 2.5.2). Estas alteraciones comprometen la funcionalidad del disco y por lo tanto de la columna vertebral disminuyendo la movilidad del individuo. Para los casos que el disco está

severamente dañado y dependiendo a la edad del paciente, los procedimientos indicados son artrodesis y artroplastias con prótesis (Firpo, 2010).



Figura 2.5.2. Fractura de la placa de cartílago que conlleva a la aparición de un nodo de Schmorl (Rich *et al.*, 2005).

Por otro lado, un proceso de interés es el comportamiento de células óseas, cuyo proceso de difusión de partículas (solute) es similar al fenómeno de difusión celular (González *et al.*, 2009; Gómez *et al.*, 2005; Martínez *et al.*, 2006). En estos procesos, la difusión celular en tejidos como el hueso es modelada matemáticamente por ecuaciones de difusión-convección-reacción mediante consideraciones sobre cada término de la ecuación (términos difusivos, convectivo y reactivo) para representar diferentes procesos celulares como migración, proliferación y diferenciación propias de células mesenquimales, osteocitos, osteoblastos y fibroblastos, entre otras.

**CAPÍTULO 3
EL MÉTODO DE
ELEMENTOS
DE CONTORNO EN
ELASTICIDAD Y
POROELASTICIDAD**

CAPÍTULO 3. EL MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO EN ELASTICIDAD Y POROELASTICIDAD

3.1 Introducción

El Método de los Elementos de Contorno (MEC) es un método numérico basado en la formulación integral de problemas del medio continuo. Se trata de una técnica numérica que se ha implementado para la resolución de problemas presentes en diversas áreas, debido a sus características que hacen que sea una poderosa herramienta de análisis. La formulación integral en el caso de elasticidad o difusión pretende resolver el valor de las incógnitas de desplazamiento o concentración y las componentes del vector de tensión (tracción) o flujo sobre el contorno del medio en estudio. Se puede aplicar a diversas áreas como la ingeniería, la biología, física y áreas multidisciplinarias como la bioingeniería entre otras.

Este método posee características que lo convierten en una herramienta ideal y muy ventajosa para muchos estudios. En primer lugar, las variables del sistema se refieren únicamente al contorno del cuerpo en estudio, con lo cual el número de incógnitas es mucho menor que las que aparecen al aplicarse métodos de dominio, facilitando igualmente el proceso de discretización ya que es solo el contorno y no todo el dominio lo que debe dividirse en elementos.

Contribuciones importantes a la implementación del método fueron dadas por Lachat & Watson (1976), quienes introducen el concepto de sub-regiones para el manejo de problemas de gran escala y describen algoritmos para el cálculo de integrales singulares débiles que aparecen en las ecuaciones integrales del contorno. Primero Telles (1987) y luego Guiggiani & Casalini (1987) y Cerrolaza & Alarcón (1989) presentaron diferentes algoritmos para la evaluación precisa de las integrales del Valor Principal de Cauchy resultantes de la singularidad fuerte en la solución fundamental.

Desde principios de los años 80 se comenzaron a realizar actividades de investigación en el Método de Elementos de Contorno (Cheng & Cheng 2005) y se realizaron los primeros aportes en problemas de mecánica estructural que consideraban la no linealidad geométrica y del material. El rango de aplicaciones luego se extendió a otros campos de la física como la electrodinámica y la mecánica de fluidos.

Sin embargo, la solución de problemas con términos de dominio y/o dependientes del tiempo exige la obtención de soluciones fundamentales para estos problemas, debido a su complejidad se han propuesto métodos o técnicas para evitar el cálculo de una nueva solución fundamental asociada además de la solución estacionaria que se presentará más adelante. Entre estos se encuentra el método de reciprocidad dual MRD (Partridge & Brebbia, 1990; Partridge et al., 1992; Brebbia & Domínguez, 1992). El MRD es una técnica numérica que se caracteriza por su fácil aplicación, tanto para problemas con condiciones de contorno convectivas, dependientes del tiempo, el manejo de los términos convectivos y reactivos en la ecuación diferencial, que muestra su buen desempeño comparándolo con la solución analítica y numérica, obtenida por el MEF.

En las siguientes secciones se describe la formulación general del MEC, describiendo aplicaciones particulares a problemas de elasticidad y poroelasticidad.

3.2 Elasticidad lineal

3.2.1 Relaciones de equilibrio

Para la formulación general del problema, considérese un problema interior, es decir un medio finito, elástico, homogéneo e isótropo Ω , limitado por una frontera finita S , incluido en un dominio infinito Ω^* con frontera infinita S^* y que presenta las mismas características elásticas, homogéneas e isotrópicas de Ω , tal como se muestra en la Figura 3.2.1. El contorno S está a su vez dividido en dos subfronteras, la primera se denomina S_u o frontera cinemática, en donde

se conocen los campos de desplazamientos y la segunda se denomina S_t o frontera estática, en donde se conocen los campos de las tensiones.

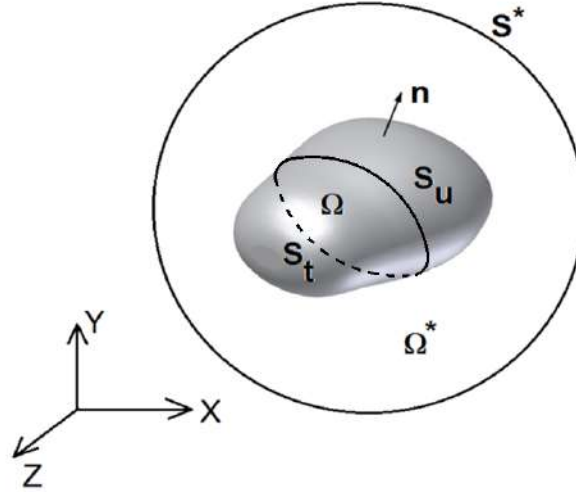


Figura 3.2.1. Dominio infinito, elástico, isótropo y homogéneo.

Para que el sistema representado en la Figura 3.2.1 esté en equilibrio con las fuerzas de masa, se tienen que generar los campos de deformaciones ε_{ij} y los campos de tensiones σ_{ij} , así como campos de desplazamientos u_i y de tensiones T_i en la frontera. La relación de equilibrio estático de fuerzas y momentos para un cuerpo, establece que

$$\sigma_{ij,j} + b_i = 0 \quad (3.2.1)$$

donde σ_{ij} son las componentes del vector de tensiones y b_i son las fuerzas sobre el cuerpo. La coma en el subíndice indica la derivada parcial en la dirección cartesiana correspondiente, es decir $\sigma_{ij,j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$. Sabiendo que el tensor de tensiones es simétrico

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (3.2.2)$$

La relación entre el vector de tensiones y las fuerzas superficiales (tracciones) es

$$T_i = \sigma_{ij}n_j \quad (3.2.3)$$

donde n_j representa las coordenadas del vector normal exterior a la superficie. En el caso de pequeñas deformaciones del cuerpo al aplicar fuerzas, dichas deformaciones se pueden representar por el vector de deformaciones de Cauchy

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (3.2.4)$$

Para un material elástico lineal isotrópico, la ley de Hooke relaciona las tensiones y las deformaciones mediante la siguiente expresión

$$\sigma_{ij} = 2G\varepsilon_{ij} + \frac{2G\nu}{1-2\nu}\varepsilon_{kk}\delta_{ij} \quad (3.2.5)$$

o, de manera inversa:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2G}\left(\sigma_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu}\sigma_{kk}\delta_{ij}\right) \quad (3.2.6)$$

donde ν es el modulo de Poisson y G es el módulo de corte, el cual está relacionado con el módulo de Young E por

$$G = \frac{E}{2(\nu + 1)} \quad (3.2.7)$$

Al sustituir la ecuación (3.2.4) en la expresión (3.2.5), se obtiene una expresión para las tensiones en términos de los gradientes de los desplazamientos. Luego al sustituir este resultado en la ecuación de equilibrio (3.2.1), se llega a una ecuación diferencial de segundo orden para las componentes del vector desplazamiento, conocida como la ecuación de Navier, que puede ser escrita como

$$Gu_{j,kk} + \frac{G}{1-2\nu}u_{k,kj} + b_j = 0 \quad (3.2.8)$$

Si las condiciones de contorno están expresadas en términos de los desplazamientos y de las tracciones, la ecuación (3.2.8) es la más conveniente para resolver, ya que al obtener los desplazamientos con las expresiones (3.2.4) y (3.2.5) se pueden obtener las deformaciones y las tensiones respectivamente. Sustituyendo las expresiones (3.2.4) y (3.2.5) en la ecuación (3.2.1) se obtiene

$$\frac{2G\nu}{1-2\nu}u_{k,k}n_i + G(u_{i,j} + u_{j,i})n_j = p_i \quad (3.2.9)$$

Ahora nos centraremos en la resolución de la ecuación (3.2.8) siguiendo la metodología de elementos de contorno. Para ello se considera la ecuación (3.2.1) con condiciones de contorno

$$\begin{aligned} u_i &= \bar{u}_i \text{ sobre } S_u \\ T_i &= \sigma_{ij}n_j = \bar{T}_i \text{ sobre } S_t \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

La forma débil de la ecuación diferencial (3.2.1) en términos de los desplazamientos se puede escribir como

$$\int_{\Omega} (\sigma_{ij,j} + b_j) u_j^* d\Omega = \int_{S_t} (T_i - \bar{T}_i) u_i^* dS - \int_{S_u} (u_i - \bar{u}_i) T_i^* dS \quad (3.2.11)$$

donde u_j^* y $T_i^* = \sigma_{ij}^* n_j$ corresponden con las funciones de peso asociadas, también conocidas como soluciones fundamentales. Al integrar el lado izquierdo de la ecuación (3.2.11) y considerando el principio de reciprocidad, que expresa

$$\int_{\Omega} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^* d\Omega = \int_{\Omega} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij}^* d\Omega \quad (3.2.12)$$

se tiene

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sigma_{ij,j}^* u_i d\Omega + \int_{\Omega} b_i u_i^* d\Omega \\ = - \int_{S_t} \bar{T}_i u_i^* dS - \int_{S_u} T_i u_i dS + \int_{S_u} \bar{u}_i T_i^* d\Gamma \\ + \int_{S_t} u_i T_i^* d\Gamma \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

Sabiendo que σ_{ij}^* satisface la ecuación de equilibrio, se tiene

$$\sigma_{ij,j}^* + b_i^* = 0 \quad (3.2.14)$$

donde

$$b_i^* = \Delta^k e_i \quad (3.2.15)$$

es decir que la carga b_i^* corresponde a una carga positiva en cada una de las direcciones cartesianas, donde Δ^k es la función delta de Dirac en el punto k .

3.2.2 Ecuación integral: identidad de Somigliana

La ecuación (3.2.13) puede ser escrita para cada una de las componentes del desplazamiento para un punto $\vec{x}_k$

$$u_l(\vec{x}_k) = u_l^k = \int_S u_{li}^* T_i dS - \int_S T_{li}^* u_i dS + \int_\Omega u_{li}^* b_i d\Omega \quad (3.2.16)$$

ya que

$$\begin{aligned} \int_\Omega \sigma_{ij,j}^* u_i d\Omega &= - \int_\Omega b_i u_i^* d\Omega = - \int_\Omega \Delta^k u_i e_i d\Omega = u_i^k e_i \\ u_i^* &= u_{li}^* e_l ; \quad T_i^* = T_{li}^* e_l \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

La ecuación (3.2.16) es conocida como la identidad de Somigliana (Brebbia & Domínguez 1992). La función de peso u_i^* satisface la ecuación de Navier (3.2.9) y por la definición de solución fundamental, u_i^* es la solución fundamental para elasticidad.

La solución fundamental para el problema de deformación plana en un medio elástico es conocida como la solución de Kelvin (Beer, 2001)

$$\begin{aligned}
u_{ij}^* &= \frac{1}{8\pi(1-\nu)G} \left((3-4\nu)\delta_{ij} \ln\left(\frac{1}{r}\right) + r_{,i}r_{,j} \right) \\
T_{ij}^* &= -\frac{1}{4\pi(1-\nu)G r} \left(\left((1-2\nu)\delta_{ij} + 2r_{,i}r_{,j} \right) \frac{\partial r}{\partial n} \right. \\
&\quad \left. - (1-2\nu)(r_{,i}n_j - r_{,j}n_i) \right)
\end{aligned} \tag{3.2.18}$$

y en el caso tridimensional

$$\begin{aligned}
u_{ij}^* &= \frac{1}{16\pi(1-\nu)G r} \left((3-4\nu)\delta_{ij} + r_{,i}r_{,j} \right) \\
T_{ij}^* &= -\frac{1}{8\pi(1-\nu)r^2} \left(\left((1-2\nu)\delta_{ij} + 3r_{,i}r_{,j} \right) \frac{\partial r}{\partial n} \right. \\
&\quad \left. - (1-2\nu)(r_{,i}n_j - r_{,j}n_i) \right)
\end{aligned} \tag{3.2.19}$$

donde n_i coordenada i del vector normal exterior, $r = r(\vec{x}_k, \vec{x})$ es la distancia entre el punto $\vec{x}_k$ y el punto $\vec{x}$, y $r_{,i}$ es la derivada de r en la dirección i .

3.2.3 Identidad de Somigliana para puntos en el contorno.

La gran ventaja del MEC estriba en el hecho de discretizar solamente el contorno S del problema, por lo tanto es muy importante obtener una expresión alternativa a la ecuación (3.2.16) referida exclusivamente a puntos $\vec{x}_k$ pertenecientes al contorno S (Brebbia *et al.*, 1984; Kane, 1994). El punto $\vec{x}_k$ debe entonces ser llevado al contorno, mediante un sencillo procedimiento que se describe a continuación, mostrado en la Figura 3.2.2

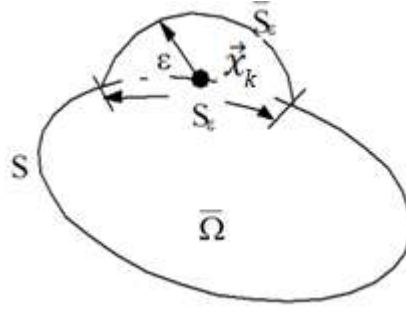


Figura 3.2.2. Procedimiento para llevar el punto $\vec{x}_k$ al contorno

Para facilitar el seguimiento de esta deducción, se incorporará en las ecuaciones la diferenciación entre los puntos de colocación (ahora denotado por $\vec{x}_k$) y el punto de integración (ahora denotado por $\vec{x}$). Tomando el límite de la expresión (3.2.16), se obtiene

$$u_i(\vec{x}_k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon+\bar{S}_\epsilon} (u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})t_j(\vec{x}) - t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})u_j(\vec{x})) dS(\vec{x}) \quad (3.2.20)$$

$$+ \int_{\bar{\Omega}} u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})b_j(\vec{x})d\bar{\Omega}(\vec{x})$$

puede demostrarse (Hartmann, 1983) que en general y para una superficie cualquiera, se cumplirá

$$\int_{S-S_\epsilon} u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})t_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) = 0 \quad (3.2.21)$$

Manipulando la expresión (3.2.20) se puede escribir que

$$\begin{aligned}
u_i(\vec{x}_k) &= \int_S u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) t_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) + \int_{\Omega} u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) b_j(\vec{x}) d\Omega(\vec{x}) \\
&\quad - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon+\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x})
\end{aligned} \tag{3.2.22}$$

Ahora, la tercera integral de la ecuación (3.2.22), puede transformarse en

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon+\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\
= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\
+ \int_{\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x})
\end{aligned} \tag{3.2.23}$$

donde la integración sobre $\bar{S}_\epsilon$ puede ser modificada sumando y restando el término $\int_{\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}_k) dS(\vec{x})$ de manera que

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon+\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\
= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\
+ \int_{\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) (u_j(\vec{x}) - u_j(\vec{x}_k)) dS(\vec{x}) \\
+ \int_{\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}_k) dS(\vec{x})
\end{aligned} \tag{3.2.24}$$

Tomando en cuenta la continuidad de la función de desplazamientos $u_j(\vec{x}_k)$ la segunda integral del lado derecho de la expresión (3.2.24) se anula, por lo tanto

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon+\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\
= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{S-S_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\
+ u_j(\vec{x}_k) \int_{\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) dS(\vec{x})
\end{aligned} \tag{3.2.25}$$

La integral $\int_{S-S_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x})$ debe ser considerada en el sentido de Valor Principal de Cauchy (Zabreyko et. al, 1975) y su existencia se demuestra si $u_j(\vec{x})$ satisface la condición de Hölder en el punto $\vec{x}_k$ (Kellog, 1953) de tal forma que

$$|u_j(\vec{x}) - u_j(\vec{x}_k)| \leq B r^\alpha(\vec{x}_k, \vec{x}) \tag{3.2.26}$$

donde B y α son constantes reales y positivas y $r(\vec{x}_k, \vec{x})$ es la distancia entre los puntos $\vec{x}_k$ y $\vec{x}$. En consecuencia, la expresión (3.2.20) se transforma en

$$\begin{aligned}
u_i(\vec{x}_k) + u_j(\vec{x}_k) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\bar{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) dS(\vec{x}) \\
= \int_S u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) t_j(\vec{x}) - t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\
+ \int_\Omega u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x}) b_j(\vec{x}) d\Omega(\vec{x})
\end{aligned} \tag{3.2.27}$$

Introduciendo el operador Delta de Kronecker δ_{ij} definido como

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3.2.28)$$

la ecuación (3.2.27), se transforma en

$$\begin{aligned} C_{ij}(\vec{x}_k)u_i(\vec{x}_k) &= \int_S u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})t_j(\vec{x}) - t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})u_j(\vec{x}) dS(\vec{x}) \\ &+ \int_{\Omega} u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})b_j(\vec{x})d\Omega(\vec{x}) \end{aligned} \quad (3.2.29)$$

en donde el coeficiente $C_{ij}(\vec{x}_k)$ es función de la geometría del contorno y queda definido como

$$C_{ij}(\vec{x}_k) = \delta_{ij} + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\tilde{S}_\epsilon} t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})dS(\vec{x}) \quad (3.2.30)$$

Para la evaluación de expresión (3.2.30) se dispone de fórmulas adecuadas en la literatura técnica (Hartmann, 1983; Ricardella, 1973) en contornos 3D y 2D, existiendo la alternativa de evaluarla mediante consideraciones de cuerpo rígido (Cruse, 1969).

3.2.4 Discretización

La ecuación (3.2.29) puede escribirse de forma compacta, omitiendo los índices y considerando ausencia de fuerzas de masa ($b_j = 0$), de la siguiente manera

$$\mathbf{c}^k \mathbf{u}^k = \int_S \mathbf{u}^* \mathbf{T} dS - \int_S \mathbf{T}^* \mathbf{u} dS \quad (3.2.31)$$

donde los vectores de desplazamientos y tracciones son

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \text{ en 2D y } \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \text{ en 3D} \\ \mathbf{T} &= \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \end{pmatrix}, \text{ en 2D y } \mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix} \text{ en 3D} \end{aligned} \quad (3.2.32)$$

Además, el término libre $\mathbf{c}^k = C_{ij}(\vec{x}_k)$ es una matriz al igual que $\mathbf{u}^*$ y $\mathbf{T}^*$, que para el caso bidimensional son

$$\mathbf{c}^k = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}, \mathbf{u}^* = \begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{12}^* \\ u_{21}^* & u_{22}^* \end{pmatrix}, \mathbf{T}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{12}^* \\ T_{21}^* & T_{22}^* \end{pmatrix} \quad (3.2.33)$$

y para tres dimensiones se tiene

$$\begin{aligned} \mathbf{c} &= \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix}, \mathbf{u}^* = \begin{pmatrix} u_{11}^* & u_{12}^* & u_{13}^* \\ u_{21}^* & u_{22}^* & u_{23}^* \\ u_{31}^* & u_{32}^* & u_{33}^* \end{pmatrix}, \mathbf{T}^* = \\ &\begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{12}^* & T_{13}^* \\ T_{21}^* & T_{22}^* & T_{23}^* \\ T_{31}^* & T_{32}^* & T_{33}^* \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.34)$$

Al discretizar la ecuación (3.2.31) en un número N de elementos sobre la frontera del dominio Ω , los valores de u y T sobre cada elemento son interpolados mediante las funciones de forma N_l , donde $N_l(\xi)$ depende de una

variable en el caso de dominios bidimensionales y $N_l(\xi, \eta)$ depende de dos variables para dominios tridimensionales. Por tanto, la interpolación puede escribirse como

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{N} \mathbf{u}^n \\ \mathbf{T} &= \mathbf{N} \mathbf{T}^n \end{aligned} \quad (3.2.35)$$

en la cual $\mathbf{u}^n$ y $\mathbf{T}^n$ representan los valores nodales de los desplazamientos y las tracciones y el vector fila $\mathbf{N}$ guarda las funciones de interpolación N_l

$$\mathbf{N} = [N_1 \quad N_2 \quad \dots \quad N_l] \quad (3.2.36)$$

Sustituyendo las interpolaciones dadas en la ecuación (3.2.35) sobre la versión discretizada de la expresión (3.2.31) se tiene

$$\mathbf{c}^k \mathbf{u}^k = \sum_{j=1}^N \mathbf{T}^n \int_{S_j} \mathbf{u}^* \mathbf{N} \, dS - \mathbf{u}^n \int_{S_j} \mathbf{T}^* \mathbf{N} \, dS \quad (3.2.37)$$

donde la suma corresponde a los N elementos de la discretización de la frontera. Ahora, se definen los siguientes términos

$$\begin{aligned} h_{kj}^i &= \int_{S_j} N_k \mathbf{T}^* \, dS, \text{ con } i = 1, \dots, l \\ g_{kj}^i &= \int_{S_j} N_k \mathbf{u}^* \, dS, \text{ con } i = 1, \dots, l \end{aligned} \quad (3.2.38)$$

que van a formar las matrices $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ de la formulación matricial del método de elementos de contorno. Es importante señalar que en el caso de elasticidad

los elementos h_{kj}^i y g_{kj}^i son matrices 2×2 ó 3×3 , dependiendo de la dimensión del problema, cuya expresión matricial es

$$\mathbf{H}u - \mathbf{G}T = 0 \quad (3.2.39)$$

donde al obtener las matrices $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ y aplicar las condiciones de borde (ecuación 3.2.10), se obtiene el sistema de ecuaciones de la forma

$$\mathbf{A}x = \mathbf{b} \quad (3.2.40)$$

La matriz $\mathbf{A}$ contiene los coeficientes del sistema, el vector $\mathbf{b}$ contiene las acciones externas sobre el sistema y el vector x colecciona todas las incógnitas del sistema.

3.2.5 Implementación numérica

Como se puede observar en las soluciones fundamentales, existe una singularidad cuando $r \rightarrow 0$ que es equivalente a decir $\vec{x}_k \rightarrow \vec{x}$, razón por la cual es necesario estudiar dos casos: cuando $\vec{x}_k \neq \vec{x}$ y cuando $\vec{x}_k = \vec{x}$.

3.2.5.1 Integrales no singulares

Es necesario realizar la transformación de coordenadas cartesianas del elemento Γ_j al elemento homogéneo correspondiente y luego integrar mediante cuadraturas. Las integrales de la ecuación (3.2.38) quedarán entonces como

$$\begin{aligned}
h_{kj}^i &= \int_{S_j} N_i \mathbf{T}^* dS = \int_{S_e} N_i \mathbf{T}^* |\bar{\mathbf{J}}| d\xi \text{ en 2-D} \\
g_{kj}^i &= \int_{S_j} N_i \mathbf{u}^* dS = \int_{S_e} N_i \mathbf{u}^* |\bar{\mathbf{J}}| d\xi \text{ en 2-D} \\
h_{kj}^i &= \int_{S_j} N_i \mathbf{T}^* dS = \int_{S_e} N_i \mathbf{T}^* |\bar{\mathbf{J}}| d\xi d\eta \text{ en 3-D} \\
g_{kj}^i &= \int_{S_j} N_i \mathbf{u}^* dS = \int_{S_e} N_i \mathbf{u}^* |\bar{\mathbf{J}}| d\xi d\eta \text{ en 3-D}
\end{aligned} \tag{3.2.41}$$

donde S_e es el intervalo $[-1,1]$ o el triángulo $[0,1] \times [0,\xi]$ o el cuadrado $[-1,1] \times [-1,1]$ dependiendo del tipo de discretización y de la dimensión del problema (Brebbia y Domínguez, 1992).

3.2.5.2 Integrales singulares

Para el caso de la integración de los elementos de la matriz $\mathbf{G}$ se recomienda el uso de cuadraturas como la de Gauss-Laguerre, ya que estas funciones pueden integrar una singularidad débil. Sin embargo, para la integración de los elementos de $\mathbf{H}$ (H_{ii}) se emplea, en el caso de elasticidad, la técnica numérica de movimiento de cuerpo rígido (Beer, 2001), que consiste en desplazar el dominio en cada eje coordenado asumiendo ausencia de fuerzas y que combinada con la técnica de inflación térmica se usan para análisis poroelástico, que consiste en una deformación causada por una temperatura (presión) unitaria en ausencia de fuerzas.

3.3 Regiones infinitas

Algunos problemas de aplicación a través del método de los Elementos de Contorno pueden requerir el modelado como problemas exteriores, en lugar de los clásicos problemas interiores. En los problemas interiores el material queda confinado por el contorno, mientras que en los problemas exteriores el material del medio tiende hacia el infinito, tal como se indica en la Figura 3.2.3.

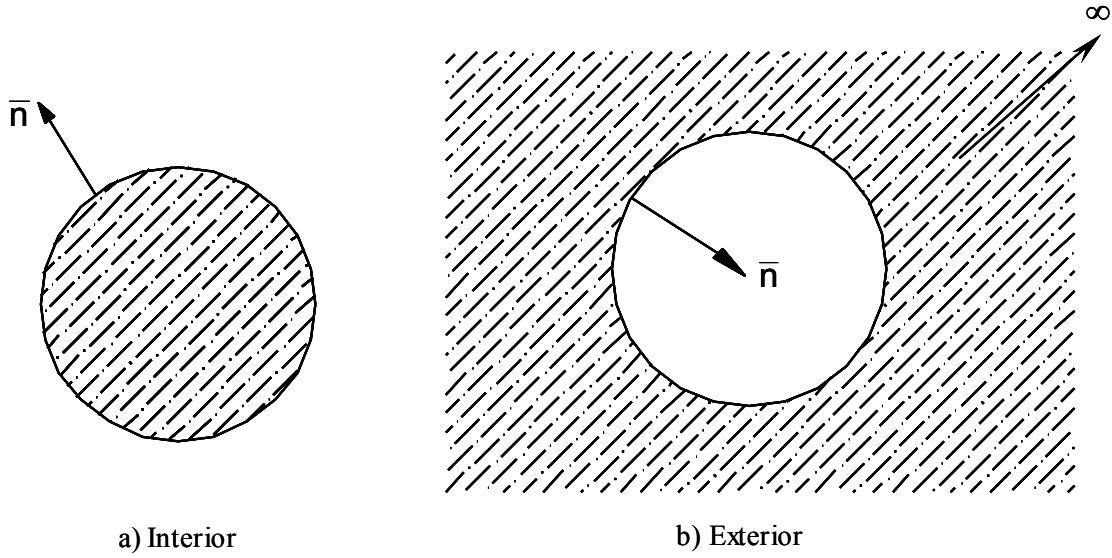


Figura 3.2.3. a) Problema interior. b) Problema exterior.

La Identidad de Somigliana para el problema en cuestión se expresa como

$$\begin{aligned}
 c_{ij}(\vec{x}_k)u_i(\vec{x}_k) &= \int_S u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})t_j(\vec{x}) - t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})u_j(\vec{x})dS(\vec{x}) \\
 &+ \int_{\bar{S}} u_{ij}^*(\vec{x}_k, \bar{x})t_j(\bar{x}) - t_{ij}^*(\vec{x}_k, \bar{x})u_j(\bar{x})d\bar{S}(\bar{x})
 \end{aligned} \tag{3.2.42}$$

La expresión (3.2.42) es válida para problemas externos si se cumple que el límite cuando $r \rightarrow \infty$ del orden de la singularidad de las funciones se anula, es decir

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} \int_{\bar{S}} O(u_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})) O(t_j(\vec{x})) - O(t_{ij}^*(\vec{x}_k, \vec{x})) O(u_j(\vec{x})) d\bar{S}(\vec{x}) = 0 \quad (3.2.43)$$

Para identificar los términos de la expresión (3.2.43) véase la Figura 3.2.4

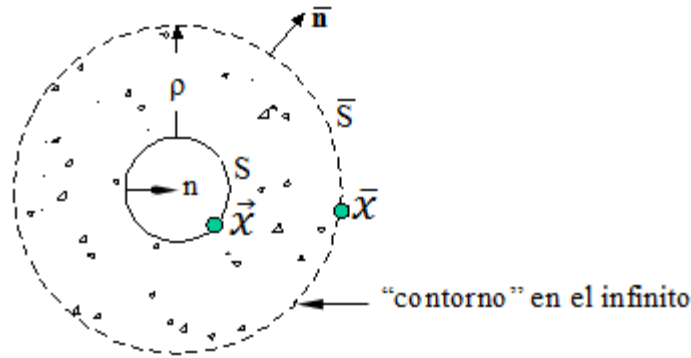


Figura 3.2.4. Región infinita

Con base a las funciones presentadas anteriormente como las soluciones fundamentales y tomando en cuenta el principio de Saint Venant, se puede demostrar la validez de (3.2.43). En consecuencia, se pueden aplicar las mismas expresiones tanto para problemas interiores como exteriores (Brebbia *et al.*, 1984).

3.4 Poroelasticidad axisimétrica

3.4.1 Formulación

Para un cuerpo poroelástico en ausencia de efectos inerciales y luego de aplicar el principio de conservación del momento, la ley de Darcy y al descomponer la tensión total en tensión efectiva del sólido y en la presión de

poro del fluido, se llega a las conocidas ecuaciones de poroelasticidad lineal (Becker, 1992; Banerjee, 1994; Banerjee & Butterfield, 1979)

$$\begin{aligned}(\mu + \lambda)u_{j,ji} + \mu u_{i,jj} - \beta P_{,i} + f_i &= 0 \\ kP_{,jj} - \alpha \dot{P} - \beta \dot{u}_{j,j} + \psi &= 0\end{aligned}\tag{3.3.1}$$

donde u_i representa los desplazamientos en cada eje coordenado, P es el campo escalar de presiones, λ y μ son las constantes de Lamé, k es la permeabilidad efectiva, β es el *drained bulk modulus*, f_i son las fuerzas volumétricas y ψ fuente o sumidero de fluido.

La solución de las expresiones en (3.3.1), asumiendo $f_i = 0$ y $\psi = 0$, puede ser representada como una suma ($u_i = u_i^c + u_i^p$, $P = P^c + P^p$) de funciones complementarias u_i^c para los desplazamientos y P^c la presión de poros, que satisfacen la ecuación diferencial

$$\begin{aligned}(\mu + \lambda)u_{j,ji}^c + \mu u_{i,jj}^c - \beta P_{,i}^c &= 0 \\ kP_{,jj}^c &= 0\end{aligned}\tag{3.3.2}$$

y soluciones particulares u_i^p (desplazamientos), P^p (presión de poros) que satisfacen la ecuación diferencial

$$\begin{aligned}(\mu + \lambda)u_{j,ji}^p + \mu u_{i,jj}^p - \beta P_{,i}^p &= 0 \\ kP_{,jj}^p - \alpha \dot{P} - \beta \dot{u}_{j,j} &= 0\end{aligned}\tag{3.3.3}$$

Una observación importante es que la expresión (3.3.1) es la ecuación para análisis poroelástico estacionario (Park & Banerjee, 2002). Siguiendo la metodología descrita en la sección anterior, se puede obtener la ecuación integral de contorno asociada a la expresión (3.3.3)

$$\begin{aligned} \left\{ \alpha_{ij}(\vec{x}) u_i^c \right\} + \int_S \left(\begin{bmatrix} H_{ij} & H_{iP} \\ 0 & H_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i^c \\ P^c \end{Bmatrix} \right. \\ \left. - \begin{bmatrix} G_{ij} & G_{iP} \\ 0 & G_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} t_i^c \\ q^c \end{Bmatrix} \right) dS = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

donde $\alpha_{ij}(\vec{x})$ y $\alpha_P(\vec{x})$ son parámetros que dependen de la geometría, t_i^c son las tracciones, q^c en este caso corresponde al flujo de fluido y H_{ij} , H_{iP} , H_{PP} , G_{ij} , G_{iP} y G_{PP} son las soluciones fundamentales asociadas al problema poroelástico estacionario (Brebbia & Dominguez, 1992; Becker, 1992).

Como la solución de la ecuación (3.3.1) está dada como una suma ($u_i^c = u_i - u_i^p$, $P^c = P - P^p$), la expresión (3.3.4) se puede escribir en forma matricial como

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} H_{ij} & H_{iP} \\ 0 & H_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ P \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} G_{ij} & G_{iP} \\ 0 & G_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} t_i \\ q \end{Bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} H_{ij} & H_{iP} \\ 0 & H_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i^p \\ P^p \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} G_{ij} & G_{iP} \\ 0 & G_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} t_i^p \\ q^p \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

Las funciones de forma globales y las soluciones particulares para los desplazamientos, tracción, presión y flujo se expresan como (Park & Banerjee, 2007)

$$\begin{aligned} \{P\} &= [F]\{\beta\} \\ \{u_i^p\} &= [U_i]\{\beta\} \\ \{t_i^p\} &= [T_i]\{\beta\} \\ \{P^p\} &= [P_k P_P] \begin{Bmatrix} \dot{\beta}_k \\ \dot{\beta}_P \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

$$\{Q^p\} = [Q_k Q_P] \begin{Bmatrix} \dot{\beta}_k \\ \dot{\beta}_P \end{Bmatrix}$$

y

$$\begin{Bmatrix} \dot{u}_k \\ \dot{P} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{kj} & 0 \\ 0 & C_P \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{\beta}_j \\ \dot{\beta}_P \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{Bmatrix} \dot{\beta}_j \\ \dot{\beta}_P \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{jk}^{-1} & 0 \\ 0 & C_P^{-1} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{u}_k \\ \dot{P} \end{Bmatrix} \quad (3.3.7)$$

Ahora, al sustituir las expresiones (3.3.6) y (3.3.7) en la ecuación (3.3.5) se obtiene

$$\begin{bmatrix} H_{ij} & M_{iP} \\ 0 & H_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ P \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} G_{ij} & 0 \\ 0 & G_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} t_i \\ q \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ M_{Pj} & M_{PP} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{u}_k \\ \dot{P} \end{Bmatrix} \quad (3.3.8)$$

donde

$$\begin{aligned} [M_{ip}] &= ([H_{ij}][\hat{U}_j] - [G_{ij}][\hat{T}_j])[F^{-1}] \\ [M_{Pj} \quad M_{PP}] &= ([H_{PP}][\hat{P}_k \quad \hat{P}_P] \\ &\quad - [G_{PP}][\hat{Q}_k \quad \hat{Q}_P]) \begin{bmatrix} C_{ki}^{-1} & 0 \\ 0 & C_P^{-1} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

Una observación importante es que para la implementación de esta formulación sólo son necesarias las soluciones fundamentales clásicas para elasticidad y potencial. Un código para simulaciones de medios elásticos isotropos bidimensionales desarrollado por Beer (2001) y en régimen, modificado por González & Cerrolaza (2008) y González et al. (2009) para resolver problemas poroelásticos axisimétricos y estacionarios, fue empleado para implementar la formulación antes descrita y así considerar la variable temporal.

3.5 Funciones de forma globales y soluciones particulares

Las soluciones particulares en caso poroelástico se pueden obtener a partir de la ecuación diferencial elástica (solución particular u^p, P^p) presentadas en la ecuación (3.3.1). Al realizar las siguientes aproximaciones, se puede obtener un conjunto de soluciones particulares y de funciones de forma global para el problema poroelástico

$$\begin{aligned}
 p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} f(\vec{x}, \vec{x}_n) \beta(\vec{x}_n) \\
 \dot{u}_i(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} C_{ik}(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_k(\vec{x}_n) \\
 \dot{p}(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} C_p(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}(\vec{x}_n) \\
 u_i^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} U_i(\vec{x}, \vec{x}_n) \beta(\vec{x}_n) \\
 \sigma_{ij}^p(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} S_{ij}(\vec{x}, \vec{x}_n) \beta(\vec{x}_n) \\
 t_i^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} T_i(\vec{x}, \vec{x}_n) \beta(\vec{x}_n) \\
 p^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} P_k(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_k(\vec{x}_n) + P_p(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_p(\vec{x}_n) \\
 q^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} Q_k(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_k(\vec{x}_n) + Q_p(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_p(\vec{x}_n)
 \end{aligned} \tag{3.3.10}$$

donde las siguientes funciones de forma global deben ser consideradas

$$\begin{aligned}
C_p(\vec{x}, \vec{x}_n) &= C_1 A - C_2 r \\
C_{ik}(\vec{x}, \vec{x}_n) &= \delta_{ik} (D_1 A - D_2 r)^2 \\
f &= K_1 A - K_2 r
\end{aligned} \tag{3.3.11}$$

siendo r la distancia entre $\vec{x}$ y $\vec{x}_n$, A es una constante a seleccionar, mayor que el diámetro del dominio y los coeficientes D_i , K_i y C_i , $i = 1, 2$, se pueden calcular al encontrar los demás núcleos restantes por sustitución (véase Park & Banerjee, 2007).

En problemas de simetría axial, las expresiones (3D) anteriores para el caso tridimensional general deben integrarse sobre el anillo (θ), obteniendo así las funciones de forma globales axisimétricas

$$\begin{aligned}
p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} f'(\vec{x}, \vec{x}_n) d\theta \beta(\vec{x}_n) \\
\dot{u}_\alpha(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} C'_{\alpha k}(\vec{x}, \vec{x}_n) d\theta \dot{\beta}_k(\vec{x}_n) \\
\dot{p}(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} C_P'(\vec{x}, \vec{x}_n) d\dot{\theta} \beta(\vec{x}_n) \\
u_\alpha^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} U'_\alpha(\vec{x}, \vec{x}_n) d\theta \beta(\vec{x}_n) \\
&\dots
\end{aligned} \tag{3.3.12}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} S'_{ij}(\vec{x}, \vec{x}_n) d\theta \beta(\vec{x}_n) \\
t_{\alpha}^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} T'_{\alpha}(\vec{x}, \vec{x}_n) d\theta \beta(\vec{x}_n) \\
p^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} P'_k(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_k(\vec{x}_n) + P'_p(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_p(\vec{x}_n) \\
q^p(\vec{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} Q'_k(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_k(\vec{x}_n) + Q'_p(\vec{x}, \vec{x}_n) \dot{\beta}_p(\vec{x}_n)
\end{aligned} \tag{3.3.12}$$

donde u_{α}^p y t_{α}^p son definidas en el caso axisimétrico como

$$\{\mathbf{u}_{\alpha}^p\} = \{\mathbf{u}_r^p \quad \mathbf{u}_z^p\} \text{ y } \{\mathbf{t}_{\alpha}^p\} = \{\mathbf{t}_r^p \quad \mathbf{t}_z^p\} \tag{3.3.13}$$

En el trabajo de González & Nieto, (2012) muestran expresiones generales para las soluciones particulares y las funciones de forma global en poroelasticidad, siguiendo la metodología de Bai & Lu, (2004) para el caso de potencial. Algunas de estas expresiones son:

$$\begin{aligned}
f &= \sum_{v=m_1}^{m_2} \frac{\alpha r^{v+2}}{k(v+2)(v+3)} \\
P_p &= \alpha \sum_{v=m_1}^{m_2} r^v \\
&\quad - \frac{v}{v+3} r^{v-2} \xi_n^2 \sin^2(\theta - \theta_n) - \frac{r^v}{v+3} \frac{\xi_n}{R} \cos(\theta - \theta_n) \\
C_{ij} &= \delta_{ij} \sum_{v=m_1}^{m_2} \frac{\beta r^{v+2} (r(\cos(\theta - \theta_n) + \sin(\theta - \theta_n)) + (z - z_n))}{k(v+5)(v+2)}
\end{aligned} \tag{3.3.14}$$

$$\begin{aligned}
P_r &= \sum_{v=m_1}^{m_2} \beta r^v r (\cos(\theta - \theta_n) + \sin(\theta - \theta_n)) \\
&+ \frac{\beta}{k(v+2)(v+5)} (-r^{v-1} R \xi_n (v+3) \cos^2(\theta - \theta_n) \\
&\quad + r^{v+1} \sin(\theta - \theta_n) \\
&- r^{v-3} R^2 \xi_n^2 (3 + 4v + v^2) (\sin^2(\theta - \theta_n) \cos(\theta - \theta_n) \\
&\quad + \sin^3(\theta - \theta_n)) \\
&+ r^{v+1} \cos(\theta - \theta_n) - 3r^{v-1} R \xi_n (v+3) \sin(\theta - \theta_n) \cos(\theta - \theta_n) \\
&\quad + 2R \xi_n r^{v-1} (v+3) \sin^2(\theta - \theta_n)) \\
P_z &= \sum_{v=m_1}^{m_2} \beta r^v (z - z_n) + \frac{\beta(z - z_n)}{k(v+5)} (r^{v-4} R^2 \xi_n^2 v (\cos^2(\theta - \theta_n) - 1) \\
&\quad - r^{v-2} R \xi_n \cos(\theta - \theta_n))
\end{aligned} \tag{3.3.14}$$

donde

$$\begin{aligned}
m &= \frac{2\sqrt{R\xi_n}}{L} \\
L &= \sqrt{(R + \xi_n^2)^2 + (z - z_n)^2} \\
n_r &= \frac{\partial r}{\partial n}, n_z = \frac{\partial r}{\partial z} \text{ y } Q_p = \frac{\partial P_p}{\partial n}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{x} &= (R \cos(\alpha), R \sin(\alpha), z)^T = (R, 0, z)^T \\
\vec{x}_n &= (\xi_n \cos(\theta - \theta_n), \xi_n \sin(\theta - \theta_n), z)^T
\end{aligned}$$

Tomando la integral del promedio que aparece en las ecuaciones (3.3.14) **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se obtienen las ecuaciones generales para las soluciones particulares y de forma global que dependen de m_1 y m_2 .

3.6 Ejemplo numérico: consolidación de esfera saturada

Se muestra un problema de consolidación en una esfera sólida saturada, sujeta a carga uniforme, como indica la Figura 3.3.1

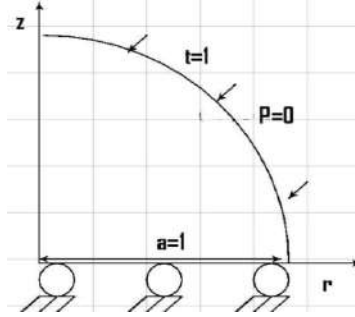


Figura 3.3.1. Sección axisimétrica de la esfera

Las propiedades del material son $k = k/\gamma_w = 1.0$, $E = 1.0$, $\nu = 0$, $\nu_u = 0.5$ y $B = 1$. Se emplearon 17 elementos lineales en la discretización de la frontera y 13 nodos internos dentro del dominio. La solución analítica para la presión de poro y el desplazamiento es

$$\begin{aligned}
 U_p(0, T) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-8\mu + 2(4\mu - s_n) \cos \sqrt{s_n}}{s_n - 12\mu_c + 16\mu_c^2} e^{-s_n T} \\
 U_R(1, T) &= 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{3 - 4\mu}{s_n - 12\mu_c + 16\mu_c^2} e^{-s_n T}
 \end{aligned} \tag{3.3.15}$$

y se obtiene tomando las cantidades adimensionales

$$T = \frac{c_v t}{a^2}, U_p = \frac{u_p}{p}, R = \frac{r}{a}, \mu_c = \frac{\mu}{\lambda + 2\mu}, \lambda_c = \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \tag{3.3.16}$$

donde a es el radio de la esfera, c_v es el coeficiente de consolidación, U_p es la presión de poro, P es la carga aplicada, t el tiempo y r la distancia al centro y $-s_n$ son las raíces de $(s + 4\mu) \sinh \sqrt{s} - 4\mu \sqrt{s} \cosh \sqrt{s}$ (ver Park & Banerjee, 2007).

Los resultados obtenidos usando el conjunto de funciones de forma y soluciones particulares para los pares $(m_1 = 0, m_2 = 1)$ y $(m_1 = 0$ y $m_2 = 2)$ (González & Nieto, 2012) se presentan en la Figura 3.2.2, los cuales se comparan con la solución analítica del problema.

La implementación de método de Reciprocidad Dual en el Método de Elementos de Contorno, representa una solución al problema de calcular soluciones fundamentales para cada problema particular. Sin embargo, este atractivo tiene sus complicaciones propias, las cuales radican en la selección de funciones de forma global, soluciones particulares y el cómputo de matrices inversas.

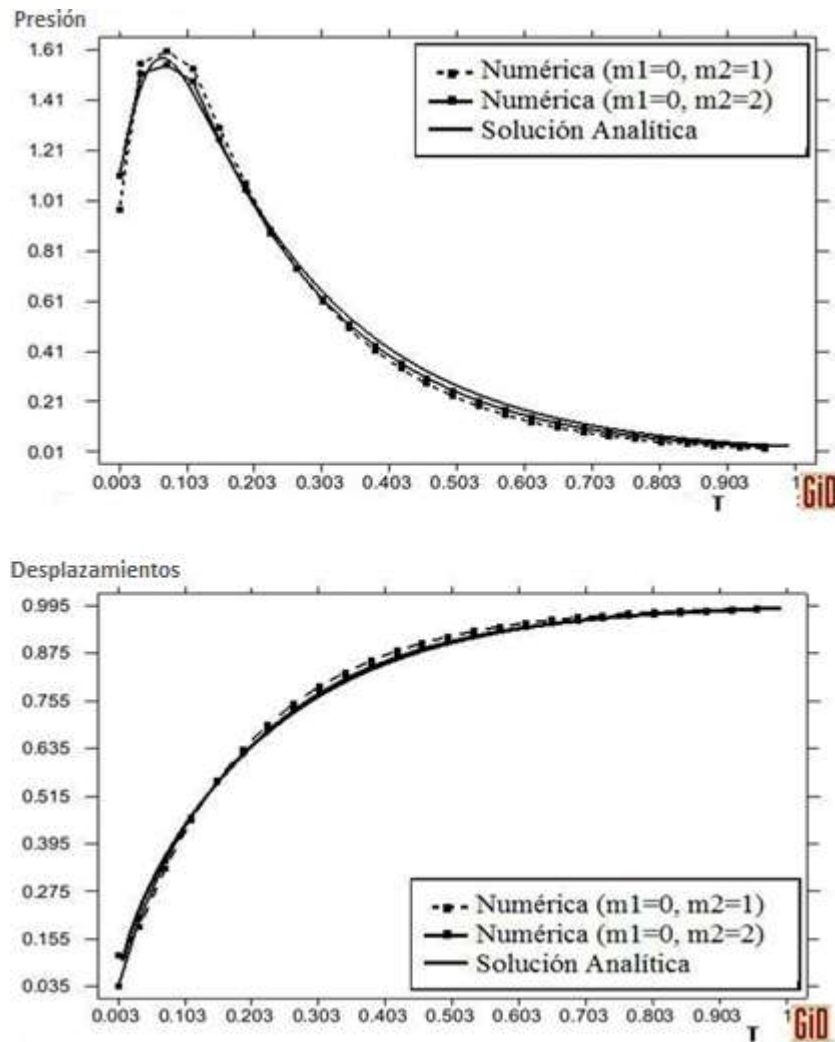
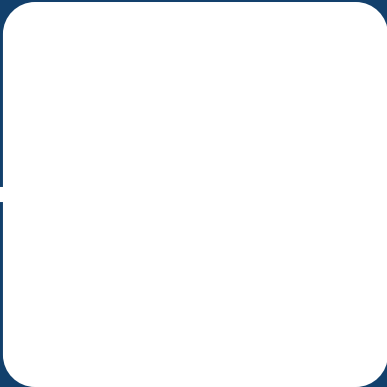


Figura 3.3.2. Arriba: evolución de la presión en el centro de la esfera. Abajo: desplazamientos en el punto $r=0$ y $z=1$.

Para la selección de las funciones de forma global y soluciones particulares la literatura especializada (Bai & Lu, 2004; Partridge *et al.*, 1992; Park & Banerjee, 2002; Park & Banerjee, 2007) muestra que los polinomios en la variable r (distancia entre los puntos de colocación y fuente) son excelentes funciones de aproximación. En el caso de las matrices inversas, la capacidad de cálculo de las computadoras modernas brinda una manera eficiente de sortear dicho obstáculo.



CAPÍTULO 4

FORMULACIÓN INTEGRAL DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN- CONVECCIÓN- REACCIÓN

CAPÍTULO 4. FORMULACIÓN INTEGRAL DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN-CONVECCIÓN-REACCIÓN

4.1 Introducción

Algunos fenómenos como la dispersión de partículas, transferencia de calor, concentración de químicos, crecimiento de poblaciones, y algunos más, que son propios de diversas áreas y en particular de la ingeniería, pueden ser modelados con la ecuación de difusión-convección-reacción.

El Método de Elementos de Contorno provee formulaciones para resolver problemas dependientes del tiempo en el sentido de ecuaciones integrales referidas sólo a la frontera del dominio de estudio. Entre estas formulaciones se destaca el método de reciprocidad dual (MRD, *Partridge et al.*, 1992) el cual ha sido implementado anteriormente para poroelasticidad lineal (Park & Banerjee, 2007) y análisis difusivo-convectivo-reactivo (Ferragut *et al.*, 2007). Las ventajas de los métodos integrales incluyen la alta precisión de las soluciones tanto en la frontera del dominio como dentro del mismo y el buen desempeño para obtener la solución de problemas acoplados (multifísica) en múltiples regiones (Partridge *et al.*, 1992; Banerjee, 1994; Beer, 2001).

La formulación presentada en este capítulo sirve de base para el desarrollo de un modelo metabólico del disco intervertebral (el cual se explicara en detalle en el capítulo 5), donde se desarrollaron códigos computacionales para simular la concentración de nutrientes en el disco, para el cual fue necesario realizar una descripción de las ecuaciones que rigen el proceso difusivo-convectivo-reactivo; y además simular el comportamiento mecánico del disco mediante la implementación de las ecuaciones de poroelasticidad lineal, estudiando como la carga afecta el metabolismo de dicha estructura, adicionando los términos

necesarios para obtener un código MEC-MRD (Método de Elementos de Contorno y el Método de Reciprocidad Dual).

4.2 Ecuación de difusión-convección-reacción

Algunos fenómenos como la dispersión de partículas, transferencia de calor, concentración de químicos, crecimiento de poblaciones y algunos más, que son propios de diversas áreas y en particular de la ingeniería y ciencias aplicadas, pueden ser modelados con la ecuación de difusión-convección-reacción en régimen transitorio

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla u - D \nabla^2 u - ku = 0 \quad \vec{x} \in \Omega, \quad t > t_0 \quad (4.2.1)$$

donde $\vec{v}$ es la velocidad del medio, D es el coeficiente de difusión y k es la velocidad de reacción. El objetivo es encontrar un campo escalar que satisfaga la ecuación (4.2.1), que por razones de simplicidad y con el objetivo de hacer que esta obra sea de apoyo para interesados en los detalles del MEC, consideraremos la ecuación (4.2.1) en régimen estacionario sobre dominios bidimensionales o tridimensionales

$$D \nabla^2 u - \vec{v} \cdot \nabla u + ku = 0 \text{ en } \Omega, \quad (4.2.2)$$

con las siguientes condiciones sobre la frontera del dominio:

$$\text{Condición de Dirichlet: } u = u_0 \quad \text{sobre } \Gamma_1 \quad (4.2.3)$$

$$\text{Condición de Newmann: } q = \frac{\partial u}{\partial n} = \nabla u \cdot n = q_0 \quad \text{sobre } \Gamma_2$$

donde n es el vector normal exterior a la frontera, $\Gamma = \partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, $\vec{v}$ es el vector velocidad del medio, k es el coeficiente de reacción, u_0 y q_0 son valores conocidos, como se indica en la Figura 4.2.1.

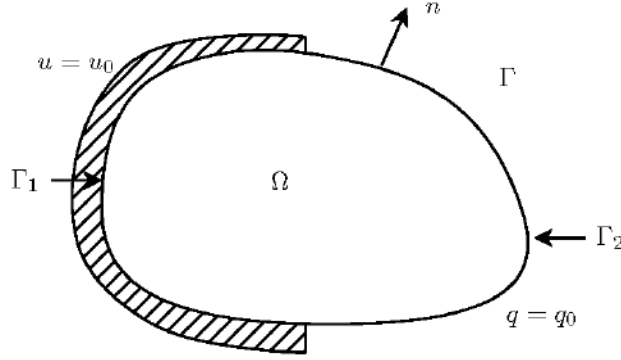


Figura 4.2.1. Definición geométrica del problema.

4.3 Formulación integral

Aplicando el método de residuos ponderados y utilizando las identidades de Green (Inglessis & Cerrolaza, 2003; Banerjee, 2004) se obtiene la formulación débil de la ecuación (4.2.2)

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} u^* (D \nabla^2 u - \vec{v} \cdot \nabla u + k u) d\Omega \\
 &= \int_{\Gamma} D u^* (\nabla u \cdot n) d\Gamma - \int_{\Omega} D \nabla u \cdot \nabla u^* d\Omega \\
 & - \int_{\Gamma} u^* u \vec{v} \cdot n d\Gamma + \int_{\Omega} u \vec{v} \cdot \nabla u^* d\Omega + \int_{\Omega} k u u^* d\Omega \quad (4.3.1) \\
 &= D \int_{\Gamma} u^* q d\Gamma - D \int_{\Gamma} u (\nabla u^* \cdot n) d\Gamma - \int_{\Gamma} u^* u \vec{v} \cdot n d\Gamma \\
 & + \int_{\Omega} D u \nabla^2 u^* d\Omega + \int_{\Omega} u \vec{v} \cdot \nabla u^* d\Omega + \int_{\Omega} k u u^* d\Omega
 \end{aligned}$$

donde la función u^* es conocida como la solución fundamental asociada y es la solución de la expresión (4.3.2)

$$D\nabla^2 u^* + \vec{v} \cdot \nabla u^* + ku^* = -\delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \quad (4.3.2)$$

en la cual δ es la función delta de Dirac.

4.3.1 Solución fundamental

Cuando $k = 0$ y $v = 0$, la ecuación (4.2.2) se conoce como ecuación de Laplace, cuya solución fundamental u^* para medios isotrópicos y que satisface $\nabla^2 u^* = \delta(\vec{x} - \vec{x}_i)$, tiene expresiones simples y bien conocidas (Brebbia & Domínguez, 1992)

$$u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{1}{r(\vec{x}, \vec{x}_i)} \right), \quad \vec{x}, \vec{x}_i \in \Omega \text{ en dos dimensiones} \quad (4.3.3)$$

$$u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{1}{4\pi r(\vec{x}, \vec{x}_i)}, \quad \vec{x}, \vec{x}_i \in \Omega \text{ en tres dimensiones}$$

donde $\vec{r}(\vec{x}, \vec{x}_i)$ es el vector posición y $r(\vec{x}, \vec{x}_i)$ es la distancia del punto de colocación ($\vec{x}_i$) al punto de integración ($\vec{x}$). La ecuación integral de contorno obtenida en la ecuación (4.3.1) es la base fundamental para la formulación del Método de Elementos de Contorno.

Sin embargo, en el caso de la ecuación general de difusión-convección-reacción, la solución fundamental es bastante más compleja y se deducirá aquí para ilustrar el procedimiento general utilizado para su derivación. Sea L un operador diferencial que actúa en un espacio de funciones definido por

$$L[u(\vec{x})] = f(\vec{x}) \quad (4.3.4)$$

En Haberman (2003) se demuestra que la solución a la ecuación anterior con condiciones de contorno es de la forma

$$u(\vec{x}) = \int_a^b G(\vec{x}, \vec{x}_0) f(\vec{x}_0) d\vec{x}_0 \quad (4.3.5)$$

De aquí se sigue que el operador inverso a L es un operador integral, donde $G(\vec{x}, \vec{x}_0)$ es la función de Green asociada a L y es la función de influencia sobre la fuente $f(\vec{x})$. Para el caso particular en el que $f(\vec{x})$ es una fuente concentrada en $\vec{x} = \vec{x}_i$, es decir, $f(\vec{x}) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_i)$, se cumple que

$$u(\vec{x}) = \int_a^b G(\vec{x}, \vec{x}_0) \delta(\vec{x}_0 - \vec{x}_i) d\vec{x}_0 = G(\vec{x}, \vec{x}_i) \quad (4.3.6)$$

A partir de esta expresión se puede decir que la Función de Green es la respuesta en $\vec{x}$ debida a la fuente concentrada en $\vec{x}_i$. De esta manera

$$L^*[G(\vec{x}, \vec{x}_i)] = -\delta(\vec{x} - \vec{x}_i); \quad \vec{x}, \vec{x}_i \in \Omega \text{ y } \vec{x} \neq \vec{x}_i \quad (4.3.7)$$

donde L^* es conocido como el operador adjunto a L . Sea $u^* = G(\vec{x}, \vec{x}_i)$ una función de Green que satisface el operador (4.3.7) sin imponer condiciones de contorno. A la función u^* se le denomina Solución Fundamental, como se mencionó en la sección anterior.

Entonces la solución fundamental u^* puede definirse físicamente como la respuesta en cualquier punto de un medio conductor infinito bajo la acción de una excitación energética en un punto específico del medio conocido como “punto fuente”.

De aquí en adelante se considerará el punto $\vec{x}$ como un punto en el dominio sobre el cual se determinarán los efectos producidos por la fuente puntual y a dicho punto se le llamará punto de integración, mientras que al punto $\vec{x}_i$ se le denominará punto fuente o de colocación y representa la excitación de la carga unitaria.

La solución fundamental gracias a sus características representa un elemento indispensable para la utilización del método de elemento de contorno, sin embargo, no siempre es posible hallar una. A continuación, se detallan los cálculos necesarios para encontrar la solución fundamental del problema en estudio.

La solución fundamental para problemas estacionarios en dos dimensiones se deduce a partir de la ecuación (4.3.7), cuyo operador L^* está dado en este caso por la expresión (4.3.8) la cual se deduce de la ecuación (4.3.2)

$$L^*(\bullet) = D\nabla^2(\bullet) + \vec{v} \cdot \nabla(\bullet) + k(\bullet) \quad (4.3.8)$$

Considerando la dependencia temporal, la ecuación (4.3.8) se escribe como

$$\begin{aligned} D\nabla^2 u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) + \vec{v} \cdot \nabla u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) + k u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) - \frac{\partial u^*}{\partial t}(\vec{x}, \vec{x}_i, t) \\ = -\delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

Para resolver la ecuación diferencial anterior, se utiliza la Transformada Doble de Fourier (2D), la cual se define como

$$F(\vec{\lambda}) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}) e^{-i\vec{\lambda}\vec{x}} d\vec{x},$$

donde $\vec{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2)$ y $f(\vec{x})$ es una función absolutamente integrable, con un número máximo de discontinuidades y un grado de oscilación finito, mientras que la transformada inversa se define por

$$f(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(\vec{\lambda}) e^{i\vec{\lambda}\vec{x}} d\vec{\lambda}$$

La transformada de Fourier así definida goza de una serie de propiedades de continuidad (Haberman, 2003), las cuales garantizan que puede extenderse a un espacio de funciones generalizadas. En vista de este hecho y dado que u^* es una función generalizada, es posible aplicar la transformada de Fourier (que se denotará por $\widehat{u^*}$) a cada uno de los términos involucrados en la ecuación (4.3.9). Por tanto

$$\widehat{\nabla^2 u^*}(\vec{x}, \vec{x}_i, t) = -\vec{\lambda}^2 \widehat{u^*}(\vec{\lambda}, \vec{x}_i, t), \text{ siendo } \vec{\lambda}^2 = \|\vec{\lambda}\|^2$$

$$\widehat{\nabla u^*}(\vec{x}, \vec{x}_i, t) = i. \vec{\lambda} \widehat{u^*}(\vec{\lambda}, \vec{x}_i, t)$$

$$\frac{\partial \widehat{u^*}}{\partial t}(\vec{x}, \vec{x}_i, t) = \frac{\partial \widehat{u^*}}{\partial t}(\vec{\lambda}, \vec{x}_i, t)$$

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}_i) = -\frac{1}{4\pi^2} e^{-i \vec{x}_i \vec{\lambda}}$$

Entonces, la expresión (4.3.9) puede reescribirse como sigue

$$-D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) \widehat{u^*} + i v_x \lambda_1 \widehat{u^*} + i v_y \lambda_2 \widehat{u^*} + k \widehat{u^*} - \frac{\partial \widehat{u^*}}{\partial t} = -\frac{1}{4\pi^2} e^{-i \vec{x}_i \vec{\lambda}}$$

Considerando que $\vec{\lambda}$ y $\vec{x}_i$ están fijos y agrupando convenientemente los términos de la ecuación anterior se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widehat{u^*}}{\partial t} + [D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - i v_x \lambda_1 - i v_y \lambda_2 - k] \widehat{u^*} \\ = \frac{1}{4\pi^2} e^{-i \vec{x}_i \vec{\lambda}} \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

la cual depende únicamente del tiempo y puede verse como una ecuación diferencial ordinaria, cuyo factor integrante es

$$e^{(D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - i v_x \lambda_1 - i v_y \lambda_2 - k) t}$$

De esta manera multiplicando la ecuación (4.3.10) por el factor integrante e integrando sobre $[0, t]$ se puede obtener

$$\widehat{u}^* e^{(D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - i v_x \lambda_1 - i v_y \lambda_2 - k)t} = \frac{1}{4\pi^2} e^{-i \vec{x}_i \vec{\lambda}} \int_0^t e^{(D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - i v_x \lambda_1 - i v_y \lambda_2 - k)\tau} d\tau$$

Así, se tiene que

$$\widehat{u}^*(\vec{\lambda}, \vec{x}_i, t) = \frac{1}{4\pi^2} e^{-i \vec{x}_i \vec{\lambda}} \int_0^t e^{(D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - i v_x \lambda_1 - i v_y \lambda_2 - k)(\tau - t)} d\tau.$$

Aplicando la transformada inversa de Fourier, puede escribirse que

$$\begin{aligned} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{4\pi^2} e^{-i \vec{x}_i \vec{\lambda}} \int_0^t e^{(D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - i v_x \lambda_1 - i v_y \lambda_2 - k)(\tau - t)} d\tau \right] e^{i \vec{\lambda} \vec{x}} d\lambda_1 d\lambda_2 \end{aligned}$$

Después de cierta manipulación algebraica y tomando en cuenta que $\vec{x} = (x, y)^T$ y $\vec{x}_i = (x_{i_1}, x_{i_2})^T$, se tiene

$$\begin{aligned} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) \\ = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^t \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{(D(\lambda_1^2 + \lambda_2^2) - i v_x \lambda_1 - i v_y \lambda_2 - k)(\tau - t) + [i \lambda_1 (x - x_{i_1}) + i \lambda_2 (y - x_{i_2})]} \right] d\lambda_1 d\lambda_2 \right] d\tau \end{aligned}$$

Ahora, al asociar de la siguiente manera se obtiene

$$\begin{aligned} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) \\ = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^t e^{k(t - \tau)} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{[-D\lambda_1^2 + i v_x \lambda_1](t - \tau) + i \lambda_1 (x - x_{i_1})} d\lambda_1 \right] \\ \times \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{[-D\lambda_2^2 + i v_y \lambda_2](t - \tau) + i \lambda_2 (y - x_{i_2})} d\lambda_2 \right] d\tau \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

Llamando

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{[-D\lambda_1^2 + i v_x \lambda_1](t-\tau) + i \lambda_1 (x - x_{i_1})} d\lambda_1; \quad I_2 \\ = \int_{-\infty}^{\infty} e^{[-D\lambda_2^2 + i v_y \lambda_2](t-\tau) + i \lambda_2 (y - x_{i_2})} d\lambda_2$$

La ecuación (4.3.11) puede expresarse de la siguiente manera

$$u^* (\vec{x}, \vec{x}_i, t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^t e^{k(t-\tau)} I_1 \cdot I_2 d\tau \quad (4.3.12)$$

Para resolver I_1 , se escribirá el argumento de la forma

$$[-D\lambda_1^2 + i v_x \lambda_1](t - \tau) + i \lambda_1 (x - x_{i_1}) = i \lambda_1 [v_x(t - \tau) + (x - x_{i_1})] - D\lambda_1^2(t - \tau) \\ = -D(t - \tau) \left[\lambda_1^2 - \frac{i \lambda_1}{D(t - \tau)} [v_x(t - \tau) + (x - x_{i_1})] \right],$$

donde

$$\left[\lambda_1^2 - \frac{i \lambda_1}{D(t - \tau)} [v_x(t - \tau) + (x - x_{i_1})] \right] \\ = \left[\lambda_1 - \frac{i [v_x(t - \tau) + (x - x_{i_1})]}{2D(t - \tau)} \right]^2 \\ + \left[\frac{[v_x(t - \tau) + (x - x_{i_1})]^2}{4D^2(t - \tau)^2} \right]$$

Sustituyendo estos cambios en la ecuación de I_1 y simplificando, se tiene que

$$I_1 = e^{-\frac{[v_x(t-\tau) + (x-x_{i_1})]^2}{4D(t-\tau)}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D(t-\tau) \left[\lambda_1 - \frac{i [v_x(t-\tau) + (x-x_{i_1})]}{2D(t-\tau)} \right]^2} d\lambda_1$$

Considerando ahora un primer cambio de variable dado por

$$m = \left[\lambda_1 - \frac{i[v_x(t - \tau) + (x - x_{i_1})]}{2D(t - \tau)} \right]$$

se puede escribir I_1 como,

$$I_1 = e^{-\frac{[(x-x_{i_1})+v_x(t-\tau)]^2}{4D(t-\tau)}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-K(t-\tau)m^2} dm$$

Luego al realizar un segundo cambio

$$L = m \cdot \sqrt{D(t - \tau)} , \quad dm = \frac{dL}{\sqrt{D(t - \tau)}},$$

se tiene que

$$I_1 = e^{-\frac{[(x-x_{i_1})+v_x(t-\tau)]^2}{4D(t-\tau)}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-L^2} dL}{\sqrt{D(t - \tau)}}$$

Es bien conocido que (Abramowitz & Stegun, 1965)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

y por tanto se puede obtener

$$I_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{D(t - \tau)}} e^{-\frac{[(x-x_{i_1})+v_x(t-\tau)]^2}{4D(t-\tau)}}$$

De la misma manera se tiene que

$$I_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{D(t - \tau)}} e^{-\frac{[(y-x_{i_2})+v_y(t-\tau)]^2}{4D(t-\tau)}}$$

Entonces, al sustituir estas dos últimas expresiones en la ecuación (4.3.12) se obtiene

$$\begin{aligned}
& u^* (\vec{x}, \vec{x}_i, t) \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^t \frac{\pi e^{k(t-\tau)}}{D(t-\tau)} e^{\frac{-[(x-x_{i_1})+v_x(t-\tau)]^2 - [(y-x_{i_2})+v_y(t-\tau)]^2}{4D(t-\tau)}} d\tau \quad (4.3.13)
\end{aligned}$$

Desarrollando el argumento de la exponencial, la ecuación anterior queda

$$\begin{aligned}
& u^* (\vec{x}, \vec{x}_i, t) \\
&= \frac{e}{4\pi} e^{-\frac{[(x-x_{i_1})v_x + (y-x_{i_2})v_y]}{2D}} \int_0^t \frac{e^{-\frac{[(x-x_{i_1})^2 + (y-x_{i_2})^2]}{4D(t-\tau)} + (t-\tau)\left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k\right]}}{D(t-\tau)} d\tau
\end{aligned}$$

Si ahora se introducen los siguientes cambios

$$\varphi = \left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k \right] (t - \tau), \quad d\varphi = - \left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k \right] d\tau,$$

$$t - \tau = \frac{\varphi}{\left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k \right]}$$

en la expresión (4.3.13), se obtiene

$$\begin{aligned}
& u^* (\vec{x}, \vec{x}_i, t) \\
&= \frac{e}{4\pi D} e^{-\frac{[(x-x_{i_1})v_x + (y-x_{i_2})v_y]}{2D}} \\
&\times \int_0^{\left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k \right] t} e^{-\frac{\left[\frac{(x-x_{i_1})^2 + (y-x_{i_2})^2}{4D} \right] \left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k \right]}{\varphi}} e^{-\varphi} \frac{d\varphi}{\varphi} \quad (4.3.14)
\end{aligned}$$

Por otra parte, tomando

$$\beta = \sqrt{\left[\frac{(x - x_{i_1})^2 + (y - x_{i_2})^2}{4} \right] \left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D^2} + \frac{k}{D} \right]}$$

y teniendo en cuenta que $\vec{v} = (v_x, v_y)$ y $\vec{r} = (x - x_{i_1}, y - x_{i_2})$, la ecuación (4.3.14) puede escribirse como

$$u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) = \frac{1}{4\pi D} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \int_0^{\left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k \right] t} \frac{e^{-\frac{\beta^2}{\varphi} - \varphi} d\varphi}{\varphi}$$

Si el tiempo es suficientemente grande, esto es, cuando $t \rightarrow \infty$, el problema temporal tiende al problema estacionario. Entonces,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i, t) = \frac{1}{4\pi D} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{\left[\frac{v_x^2 + v_y^2}{4D} + k \right] t} \frac{e^{-\frac{\beta^2}{\varphi} - \varphi} d\varphi}{\varphi}$$

Por lo tanto

$$u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{1}{4\pi D} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\beta^2}{\varphi} - \varphi} d\varphi}{\varphi}$$

Haciendo el cambio

$$\varphi = \beta e^\theta; \quad d\varphi = \beta e^\theta d\theta$$

se llega a

$$\begin{aligned}
u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) &= \frac{1}{4\pi D} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(e^{-\theta} + e^{\theta})} d\theta \\
&= \frac{1}{2\pi D} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \int_0^{\infty} e^{-2\beta \cosh(\theta)} d\theta \\
&= \frac{1}{2\pi D} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} K_0(2\beta)
\end{aligned} \tag{4.3.15}$$

donde K_0 es la función de Bessel modificada de orden cero (Abramowitz & Stegun, 1965). Finalmente se concluye que la solución fundamental asociada a la ecuación difusión-convección-reacción bidimensional estacionaria con velocidad constante es

$$u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{1}{2\pi D} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} K_0\left(\frac{\|v\|}{2D} r\right) \tag{4.3.16}$$

donde $\vec{x} = (x, y)^T$, $\vec{x}_i = (x_{i_1}, x_{i_2})^T$, $r = \sqrt{(x - x_{i_1})^2 + (y - x_{i_2})^2}$ y $\|v\| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ es el modulo del vector velocidad.

La derivada normal de la solución fundamental es la siguiente

$$\begin{aligned}
q^* = \nabla u^* \cdot n &= \frac{\partial u^*}{\partial n} = \frac{\partial u^*}{\partial r} \left(\frac{\partial r}{\partial n} \right) \\
&= \frac{\partial u^*}{\partial r} \left(\frac{\partial r}{\partial x} \left(\frac{\partial x}{\partial n} \right) + \frac{\partial r}{\partial y} \left(\frac{\partial y}{\partial n} \right) + \frac{\partial r}{\partial z} \left(\frac{\partial z}{\partial n} \right) \right) \\
&= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{r}}{2D}} \left[\frac{v_n}{2D} K_0(\mu r) - \mu K_1(\mu r) \frac{\partial r}{\partial n} \right]
\end{aligned} \tag{4.3.17}$$

donde v_n representa el producto interno entre el vector velocidad y el vector normal, $-K_1$ es la derivada de la función K_0 , conocida como función de Bessel

modificada de orden uno (Abramowitz & Stegun 1965) y $\mu = \frac{\|v\|}{2D}$. Ahora considerando que

$$\frac{\partial r}{\partial n} = \frac{\partial r}{\partial x} \left(\frac{\partial x}{\partial n} \right) + \frac{\partial r}{\partial y} \left(\frac{\partial y}{\partial n} \right) + \frac{\partial r}{\partial z} \left(\frac{\partial z}{\partial n} \right), \quad \frac{\partial x}{\partial n} = n_x, \quad \frac{\partial y}{\partial n} = n_y, \quad \frac{\partial z}{\partial n} = n_z \quad (4.3.18)$$

y por tanto

$$\frac{\partial r}{\partial n} = \frac{1}{r} [n_x(x - x_{i_1}) + n_y(y - x_{i_2})] \quad (4.3.19)$$

Para calcular la solución fundamental tridimensional se procede de la misma manera, empleando la transformada de Fourier respectiva, obteniéndose (Grigoriev & Dargush 2005)

$$u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{1}{4\pi D r(\vec{x}, \vec{x}_i)} e^{-\frac{\vec{r} \cdot \vec{v} + |\vec{r}| |\vec{v}|}{2D}}, \quad (4.3.20)$$

$\vec{x}, \vec{x}_i \in \Omega$ en tres dimensiones

4.4 Formulación integral para puntos en el contorno

En este apartado se formulará la ecuación integral de contorno para puntos en la frontera del dominio. Las integrales de dominio presentes en la ecuación (4.3.2) pueden ser calculadas empleando las propiedades de la función delta de Dirac como sigue

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} u (D \nabla^2 u^* + \vec{v} \cdot \nabla u^* + k u^*) d\Omega &= \int_{\Omega} u (-\delta(\vec{x} - \vec{x}_i)) d\Omega \\ &= -u(\vec{x}_i) = -u_i \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

Por lo cual la ecuación integral de contorno (4.4.1) se transforma en

$$u(\vec{x}_i) + \int_{\Gamma} u \left(q^* - u^* \frac{v_n}{D} \right) d\Gamma - \int_{\Gamma} u^* q d\Gamma = 0 \quad (4.4.2)$$

Luego de aplicar las condiciones de contorno, la ecuación (4.4.2) puede ser reescrita como

$$\begin{aligned} u(\vec{x}_i) + \int_{\Gamma_1} u \left(q^* - u^* \frac{v_n}{D} \right) d\Gamma - \int_{\Gamma_2} u^* q d\Gamma = \\ \int_{\Gamma_1} u^* q_0 d\Gamma - \int_{\Gamma_2} u_0 \left(q^* - u^* \frac{v_n}{D} \right) d\Gamma \end{aligned} \quad (4.4.3)$$

Se puede observar que para cada $\vec{x}_i \in \Omega$ y $\vec{x} \in \Gamma$ se obtiene una nueva ecuación integral para obtener el valor de u en cualquier punto interno. El MEC se caracteriza por estudiar el problema en la frontera del dominio, por lo que es necesario considerar el comportamiento de la ecuación (4.4.3) cuando $\vec{x}_i \rightarrow \Gamma$. Por tanto, es importante tener en cuenta la siguiente observación: para el caso en que $\vec{x}_i$ esté próximo a $\vec{x}$, el radio r tiende a cero, por lo cual las integrales presentes en (4.4.3) son singulares y se deben calcular en el sentido del valor principal de Cauchy (Inglessis & Cerrolaza, 2003; Beer, 2001).

Considérese una semiesfera de radio ϵ para el caso tridimensional o un círculo de radio ϵ para el caso bidimensional, como ilustra la Figura 4.4.1

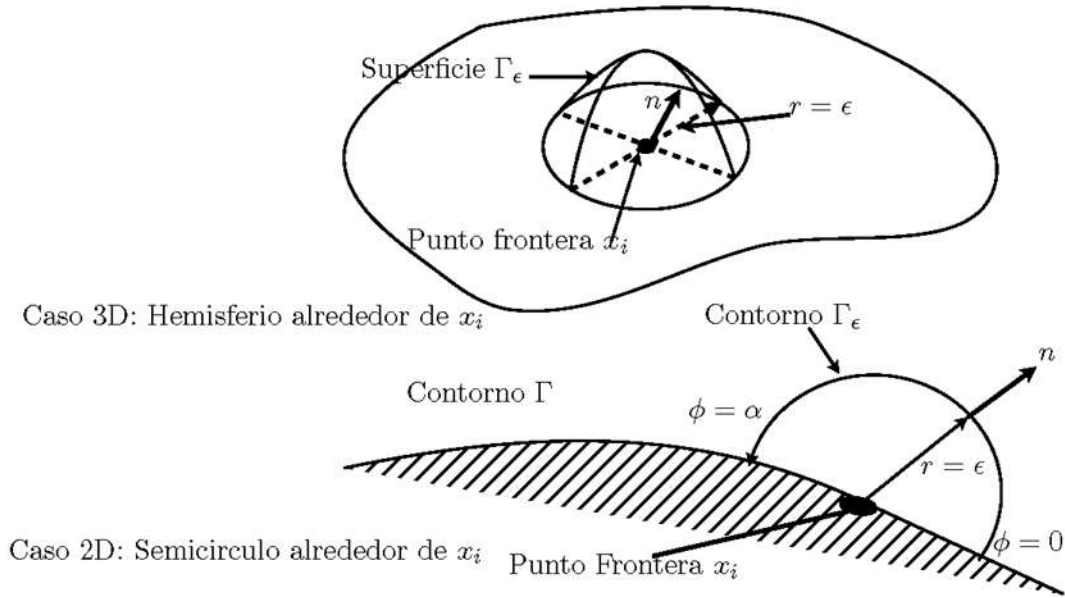


Figura 4.4.1. Puntos de colocación en la frontera para los casos bi y tri-dimensional.

En la ecuación integral (4.4.2), las integrales se pueden tomar en el sentido de valor principal de Cauchy con la extensión del dominio alrededor del punto $\vec{x}_i$ con un arco o una parte de la esfera de radio ϵ como se muestra en la Figura 4.4.1.

Con la extensión del dominio de tal manera que $\Omega = \Omega \cup \Omega_\epsilon$ y $\Gamma = \Gamma \cup \Gamma_\epsilon$, siendo Ω_ϵ el dominio extendido y Γ_ϵ la frontera que envuelve a dicho dominio, se consigue que $\vec{x}_i$ se ubique en el interior del nuevo dominio, con lo cual es posible escribir

$$u(\vec{x}_i) = \int_{\Gamma \cup \Gamma_\epsilon} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) q(\vec{x}) d\Gamma - \int_{\Gamma \cup \Gamma_\epsilon} u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + q^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] d\Gamma \quad (4.4.4)$$

Esta expresión puede ser reescrita en el sentido del Valor Principal de Cauchy como sigue

$$\begin{aligned}
u(\vec{x}_i) &= \int_{\Gamma} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) q(\vec{x}) d\Gamma - \int_{\Gamma} u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + q^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] d\Gamma \\
&\quad + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_{\epsilon}} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) q(\vec{x}) d\Gamma_{\epsilon} \\
&\quad - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_{\epsilon}} u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + q^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] d\Gamma_{\epsilon}
\end{aligned} \tag{4.4.5}$$

Entonces, tomando el primer límite de la expresión (4.4.5) en el caso bidimensional y considerando que Γ_{ϵ} está determinado por el arco de radio ϵ y abertura α , tal como se muestra en la Figura 4.4.1, entonces

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_{\epsilon}} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) q(\vec{x}) d\Gamma_{\epsilon} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_{\epsilon}} \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}}{2D}} K_0(\mu\epsilon) q(\vec{x}) d\Gamma_{\epsilon} \\
&= \frac{1}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\alpha} \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}}{2D}} K_0(\mu\epsilon) q(\vec{x}) \epsilon d\phi \\
&= \frac{\alpha}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}}{2D}} K_0(\mu\epsilon) q(\vec{x}) \epsilon = 0
\end{aligned}$$

En el caso tridimensional, el contorno Γ_{ϵ} es la parte de la superficie de una esfera de radio ϵ , por lo que el primer límite resulta

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_{\epsilon}} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) q(\vec{x}) d\Gamma_{\epsilon} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\alpha} \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{v} + |\epsilon||v|}{2D}}}{4\pi D \epsilon} q(\vec{x}) \epsilon^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{e^{-\frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{v} + |\epsilon||v|}{2D}}}{4\pi D} q(\vec{x}) \epsilon \int_0^{\alpha} \sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = 0
\end{aligned}$$

Por lo tanto, la primera integral del Valor principal de Cauchy presente en la ecuación (4.4.5) satisface la condición

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_{\epsilon}} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) q(\vec{x}) d\Gamma_{\epsilon} = 0$$

Ahora, para el segundo límite de la ecuación (4.4.5), nuevamente se calculará el caso bidimensional y luego el tridimensional. En dos dimensiones se tiene que

$$\begin{aligned}
& \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\epsilon} u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + q^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] d\Gamma_\epsilon \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + q^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] \int_0^\alpha \epsilon d\varphi \\
&= \alpha \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}}{2D}} K_0(\mu \epsilon) \epsilon \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}}{2D}} \left[\frac{v_n}{2D} K_0(\mu \epsilon) - \mu K_1(\mu \epsilon) \frac{\partial \epsilon}{\partial n} \right] \epsilon \right] \\
&= \alpha \lim_{\epsilon \rightarrow 0} u(\vec{x}) \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}}{2D}} [-\mu K_1(\mu \epsilon)] \epsilon = -\frac{\alpha}{2\pi} u(\vec{x})
\end{aligned}$$

mientras que en el caso tridimensional se puede escribir

$$\begin{aligned}
& \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\epsilon} u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + q^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] d\Gamma_\epsilon \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\alpha \int_0^{2\pi} u(x) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} \frac{e^{-\frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{v} + |\vec{\epsilon}| |\vec{v}|}{2D}}}{4\pi D \epsilon} \right. \\
&\quad \left. - \left[\frac{D \vec{\epsilon} \cdot \vec{n}}{\epsilon^2} + \frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{n} v}{2\epsilon} + \frac{v_n}{2} \right] \frac{e^{-\frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{v} + |\vec{\epsilon}| |\vec{v}|}{2D}}}{4\pi D \epsilon} \right] \epsilon^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi \\
&= u(x) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} - \left[\frac{D \vec{\epsilon} \cdot \vec{n}}{\epsilon^2} + \frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{n} v}{2\epsilon} + \frac{v_n}{2} \right] \frac{e^{-\frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{v} + |\vec{\epsilon}| |\vec{v}|}{2D}}}{4\pi D \epsilon} \epsilon^2 \int_0^\alpha \int_0^{2\pi} \sin(\theta) d\theta d\varphi \\
&= -u(\vec{x}_i) \sin^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right)
\end{aligned}$$

Una observación que se puede realizar a partir de los límites antes calculados es que si $\alpha = \frac{\pi}{2}$ (superficie suave) se tiene que el coeficiente es 0.5. Entonces la ecuación (4.4.5) se transforma en

$$u(\vec{x}_i) = \int_{\Gamma} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \frac{\partial u}{\partial \hat{n}}(\vec{x}) - u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + \frac{\partial u^*}{\partial \hat{n}}(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] d\Gamma + \frac{\alpha}{2\pi} u(\vec{x}_i)$$

Agrupando términos, se obtiene una expresión integral para los puntos en la frontera, dada por

$$c(\vec{x}_i)u(\vec{x}_i) = \int_{\Gamma} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) \frac{\partial u}{\partial \hat{n}}(\vec{x}) - u(\vec{x}) \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^*(\vec{x}, \vec{x}_i) + \frac{\partial u^*}{\partial \hat{n}}(\vec{x}, \vec{x}_i) \right] d\Gamma \quad (4.4.6)$$

donde, para el caso bidimensional $c(\vec{x}_i)$ viene dado por

$$c(\vec{x}_i) = \left(1 - \frac{\alpha}{2\pi}\right) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } \vec{x}_i \in \Gamma \text{ y } \Gamma \text{ es suave} \\ 1 - \frac{\alpha}{2\pi} & \text{si } \vec{x}_i \in \Gamma \text{ y } \Gamma \text{ no es suave} \\ 1 & \text{si } \vec{x}_i \in \Omega \end{cases} \quad (4.4.7)$$

A partir de la expresión (4.4.6) se puede calcular el valor de la variable u sobre la frontera. Sin embargo, es necesario calcular las integrales de contorno y dichas integrales no tienen una expresión cerrada por lo cual es necesario dividir el dominio en elementos, lo que será explicado en detalle más adelante.

4.5 Discretización de la frontera

La discretización de la expresión (4.4.6) conduce a la obtención del sistema de ecuaciones, a partir del cual los valores de la variable sobre la frontera son calculados. Consideraremos un dominio Ω cuya frontera es dividida en N elementos (Figura 4.5.1), que para dominios bidimensionales son

segmentos de curvas (elementos) y para tridimensionales pueden ser superficies triangulares (elementos triangulares) o cuadriláteros (elementos cuadriláteros). Los puntos donde los valores de la variable son desconocidos se denominan nodos. Para el caso que los nodos sólo están en el punto medio del elemento, la discretización se realiza con elementos constantes (Figura 4.5.1.a), para el caso que los nodos son los extremos del elemento (Figura 4.5.1.b) se realiza con elementos lineales y si el elemento es curvo la discretización es de elementos cuadráticos (Figura 4.5.1.c) donde por elemento se tienen los nodos extremos y un tercer nodo ubicado en el punto medio del arco (elemento).

De manera análoga se procede para los elementos correspondientes a la discretización de dominios tridimensionales. Para el caso en el que se considere necesario se pueden definir elementos o interpolaciones de grados superiores (interpolaciones cúbicas, cuárticas, entre otras) para tener una mejor discretización del dominio (Banerjee, 1994; Becker, 1992).

Al realizar la división de la frontera en N elementos, la ecuación (4.4.6) puede ser reescrita para un punto $\vec{x}_i$ dado de la siguiente manera

$$c(\vec{x}_i)u(\vec{x}_i) + \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} u \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right] d\Gamma - \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} q u^* d\Gamma = 0 \quad (4.5.1)$$

Dependiendo del tipo de interpolación sobre las variables de estudio, es necesario realizar ahora consideraciones sobre la expresión (4.5.1) para obtener cada una de las ecuaciones por cada $\vec{x}_i$.

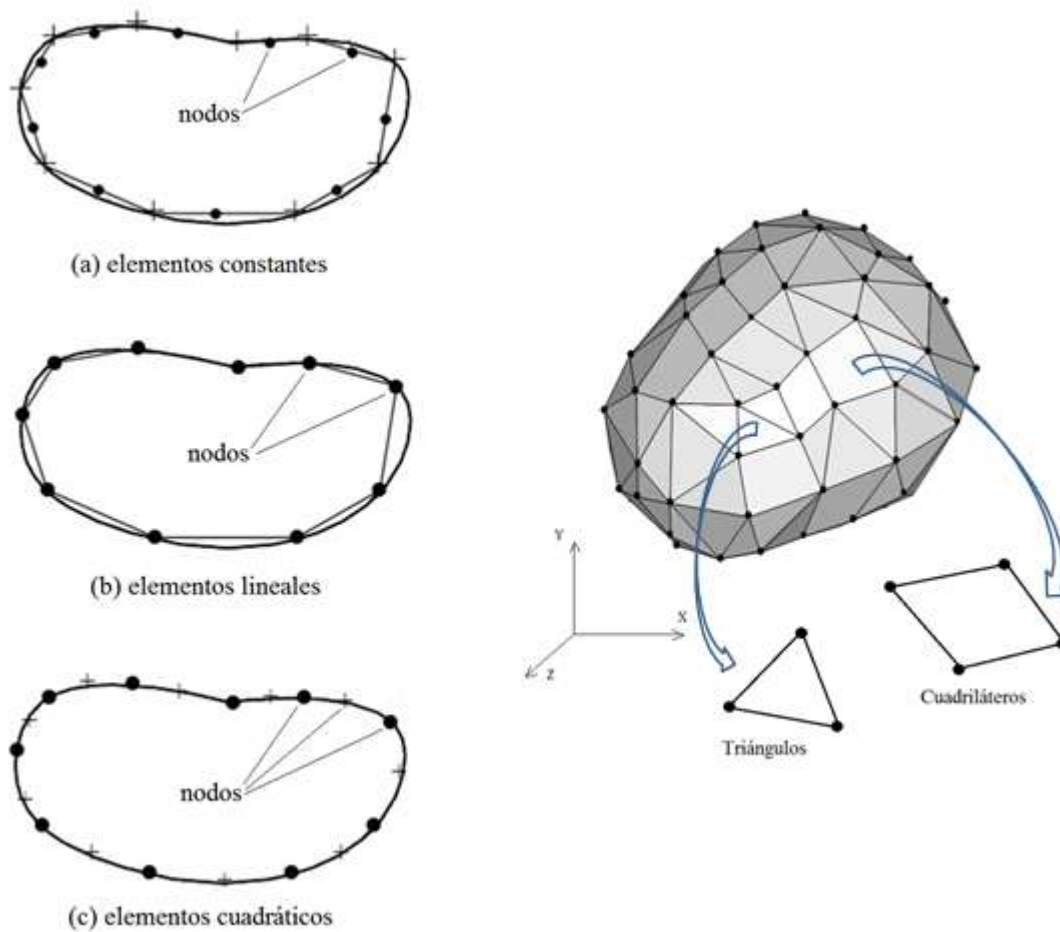


Figura 4.5.1. Tipos de elementos para discretizar la frontera. Izquierda: dominios bidimensionales discretizados con elementos constantes, lineales y cuadráticos. Derecha: dominios tridimensionales discretizados con elementos triangulares y cuadriláteros

4.5.1 Elementos constantes

Los valores u y q se consideran constantes sobre cada elemento y se calculan en el nodo del centro del elemento. Para este tipo de discretización la superficie siempre es suave por lo que el término libre tiene coeficiente $\frac{1}{2}$. Los valores u y q , al ser constantes, quedan fuera de las integrales y se empleará la notación de u_j y q_j para el elemento j , entonces de la ecuación (4.5.1) se tiene

$$\frac{1}{2}u(\vec{x}_i) + \sum_{j=1}^N u_j \int_{\Gamma_j} \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right] d\Gamma - \sum_{j=1}^N q_j \int_{\Gamma_j} u^* d\Gamma = 0 \quad (4.5.2)$$

Ahora sólo es necesario calcular dos tipos de integrales sobre cada elemento cuando se evalúa la solución fundamental en los nodos i y j pertenecientes al elemento j . Para representar dichas integrales es común emplear la siguiente notación (Brebbia & Domínguez, 1992)

$$\bar{H}_{ij} = \int_{\Gamma_j} \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right] d\Gamma; \quad G_{ij} = \int_{\Gamma_j} u^* d\Gamma \quad (4.5.3)$$

Sustituyendo la ecuación (4.5.3) en (4.5.2) se tiene

$$\frac{1}{2}u(\vec{x}_i) + \sum_{j=1}^N u_j \bar{H}_{ij} - \sum_{j=1}^N q_j G_{ij} = 0 \quad (4.5.4)$$

Incorporando el término libre y tomando $H_{ij} = \frac{1}{2} \delta_{ij} + \bar{H}_{ij}$, donde δ es el delta de Kronecker, se tiene la siguiente expresión

$$\sum_{j=1}^N u_j H_{ij} - \sum_{j=1}^N q_j G_{ij} = 0 \quad (4.5.5)$$

Ahora, si se asume que i varía de 1 a N y que las integrales dadas en (4.5.3) se pueden calcular para el punto medio de cada elemento, se obtiene un sistema de ecuaciones, el cual se puede expresar de forma matricial como

$$\mathbf{H}u - \mathbf{G}q = 0 \quad (4.5.6)$$

donde $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ son matrices densas de orden $N \times N$ y u y q son vectores de dimensión N . Es fácil ver que para N_1 valores de u y N_2 valores de q conocidos sobre Γ_1 y Γ_2 respectivamente se tiene que $N_1 + N_2 = N$, ya que sólo hay N incógnitas en el sistema de ecuaciones (4.5.6). La aplicación de las condiciones de contorno reordena el sistema moviendo las columnas de $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ multiplicadas por el u_j o q_j correspondiente, al lado derecho cuando los valores de u o de q son conocidos y al lado izquierdo en caso contrario. Al pasar todas las incógnitas al lado izquierdo se obtiene un sistema de ecuaciones de la forma

$$\mathbf{A}x = b \quad (4.5.7)$$

donde x guarda los valores desconocidos de u y q sobre la frontera, b es calculado por la multiplicación de las correspondientes columnas de $\mathbf{H}$ o $\mathbf{G}$ y los valores conocidos de u o q .

4.5.2 Elementos lineales

Se considera que los valores de u y q varían linealmente sobre el elemento. Una vez obtenidos los valores de u y q en los nodos del elemento se interpolan mediante las funciones $N_1(\xi)$ y $N_2(\xi)$ para el caso bidimensional, donde ξ corresponde a la coordenada homogénea. Para el caso tridimensional, si la división del dominio en elementos se realiza por triángulos o cuadriláteros, la interpolación se realiza mediante las funciones $N_i(\xi, \eta)$, siendo ξ y η las coordenadas homogéneas. Entonces para el caso bidimensional la interpolación de las variables está dada por

$$\begin{aligned}
u(\xi) &= u_1 N_1 + u_2 N_2 = [u_1 \ u_2] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \end{bmatrix} \\
q(\xi) &= q_1 N_1 + q_2 N_2 = [q_1 \ q_2] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.5.8}$$

donde la coordenada homogénea $\xi \in [-1, 1]$ y las funciones de interpolación para este caso son

$$N_1(\xi) = \frac{1 - \xi}{2}; \quad N_2(\xi) = \frac{1 + \xi}{2} \tag{4.5.9}$$

En dominios tridimensionales discretizados con elementos triangulares, la interpolación de las variables es

$$\begin{aligned}
u(\xi) &= u_1 N_1 + u_2 N_2 + u_3 N_3 = [u_1 \ u_2 \ u_3] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix} \\
q(\xi) &= q_1 N_1 + q_2 N_2 + q_3 N_3 = [q_1 \ q_2 \ q_3] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.5.10}$$

donde las coordenadas homogéneas $(\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, 1]$ y las funciones de interpolación para este caso son

$$\begin{aligned}
N_1(\xi, \eta) &= \xi \\
N_2(\xi, \eta) &= \eta \\
N_3(\xi, \eta) &= 1 - \xi - \eta
\end{aligned} \tag{4.5.11}$$

Por último, para elementos cuadriláteros de 4 nodos las interpolaciones son las siguientes

$$\begin{aligned}
u(\xi) &= u_1 N_1 + u_2 N_2 + u_3 N_3 + u_4 N_4 = [u_1 \ u_2 \ u_3 \ u_4] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \end{bmatrix} \\
q(\xi) &= q_1 N_1 + q_2 N_2 + q_3 N_3 + q_4 N_4 = [q_1 \ q_2 \ q_3 \ q_4] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.5.12}$$

con coordenadas homogéneas $(\xi, \eta) \in [-1, 1] \times [-1, 1]$ y las funciones de interpolación para este caso son

$$\begin{aligned}
N_1(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\
N_2(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\
N_3(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \\
N_4(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta)
\end{aligned} \tag{4.5.13}$$

Entonces al considerar la interpolación sobre las integrales de la ecuación (4.5.1) para el elemento j -ésimo, se tiene que la primera integral presentes en dicha expresión se puede escribir como

$$\int_{\Gamma_j} u \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right] d\Gamma = \int_{\Gamma_j} [N_1 \ N_2] \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}, \tag{4.5.14}$$

para dominios bidimensionales, donde por cada nodo del elemento j , se tienen los términos

$$h_{ij}^1 = \int_{\Gamma_j} N_1 \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma \quad (4.5.15)$$

$$h_{ij}^2 = \int_{\Gamma_j} N_2 \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma$$

De manera similar, para la segunda integral en la ecuación (4.5.1) se puede escribir

$$\int_{\Gamma_j} q u^* d\Gamma = \int_{\Gamma_j} [N_1 \ N_2] u^* d\Gamma \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix}$$

donde

$$g_{ij}^1 = \int_{\Gamma_j} N_1 u^* d\Gamma ; \quad g_{ij}^2 = \int_{\Gamma_j} N_2 u^* d\Gamma \quad (4.5.16)$$

Ahora, en el caso tridimensional, tomando elementos triangulares la interpolación queda como

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_j} u \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right] d\Gamma \\ = \int_{\Gamma_j} [N_1 \ N_2 \ N_3] \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.5.17)$$

donde para cada nodo del elemento j se tienen los términos

$$h_{ij}^1 = \int_{\Gamma_j} N_1 \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma$$

$$h_{ij}^2 = \int_{\Gamma_j} N_2 \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma \quad (4.5.18)$$

$$h_{ij}^3 = \int_{\Gamma_j} N_3 \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma$$

Se procede de manera similar para la segunda integral de la ecuación (4.5.1). Como el valor de u es único en cada nodo entonces el valor u_2 del elemento j es igual al u_1 del elemento $j + 1$ (Figura 4.5.2), mientras que en las esquinas el valor del flujo puede ser diferente, ya que depende del vector normal en elementos contiguos.

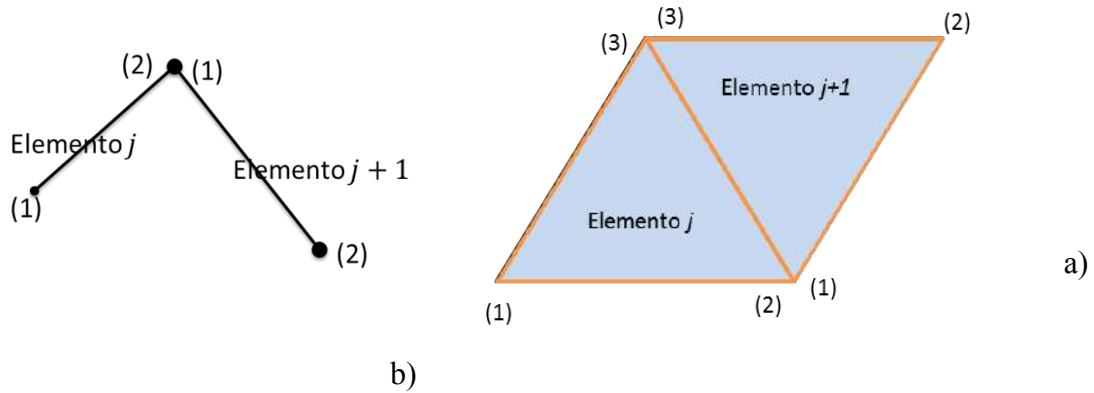


Figura 4.5.2. Elementos de variación lineal: a) segmentos rectos. b) elementos triangulares

Tomando este hecho junto con las ecuaciones (4.5.15) y (4.5.16), entonces la expresión (4.5.1) se puede escribir

$$\begin{aligned}
c(\vec{x}_i)u(\vec{x}_i) + [\bar{H}_{i1} \quad \bar{H}_{i2} \quad \dots \quad \bar{H}_{i\bar{N}}] \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{\bar{N}} \end{bmatrix} \\
- [G_{i1} \quad G_{i2} \quad \dots \quad G_{idN}] \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_{dN} \end{bmatrix} = 0
\end{aligned} \tag{4.5.19}$$

donde el término $\bar{H}_{ij}$ es igual al h_{ij}^2 sobre el elemento j sumado al $h_{i,j+1}^1$ perteneciente $j + 1$. Es decir, para elementos lineales (Fig. 4.5.2.a) se tiene

$$\bar{H}_{ij} = h_{ij}^2 + h_{ij+1}^1 \tag{4.5.20}$$

Mientras que para elementos triangulares (Fig. 4.5.2.b) se tendría

$$\bar{H}_{ij} = h_{ij}^2 + h_{ij+1}^1 \quad \text{y} \quad \bar{H}_{ij} = h_{ij}^3 + h_{ij+1}^3 \tag{4.5.21}$$

además

$$d = \begin{cases} 2 & \text{elementos rectos} \\ 3 & \text{elementos triangulares} \\ 4 & \text{elementos cuadriláteros} \end{cases} \tag{4.5.22}$$

y $\bar{N}$ es el número de nodos de la discretización. La expresión (4.5.19) representa la ecuación para el nodo i , y puede ser rescrita como

$$\sum_{j=1}^N u_j H_{ij} - \sum_{j=1}^{dN} q_j G_{ij} = 0 \quad (4.5.23)$$

y en forma matricial

$$\mathbf{H}\mathbf{u} - \mathbf{G}\mathbf{q} = \mathbf{0} \quad (4.5.24)$$

donde $\mathbf{H}$ es una matriz cuadrada de orden $\bar{N} \times \bar{N}$ y $\mathbf{G}$ es rectangular de dimensiones $\bar{N} \times dN$.

4.5.3 Elementos de orden superior

Usualmente es conveniente realizar interpolaciones curvilíneas para geometrías arbitrarias. Para este caso de elementos cuadráticos, con elementos de tres nodos, es más sencilla de implementar, aunque podrían ser empleados elementos de órdenes superiores. Al considerar elementos de orden k como se muestra en la Figura 4.5.3, donde el vector posición es función del sistema cartesiano (x, y) .

Las variables u y q pueden ser escritas en términos de las funciones de interpolación que dependen de la coordenada homogénea ξ .

$$\begin{aligned} u(\xi) &= u_1 N_1 + u_2 N_2 + u_3 N_3 + \cdots + u_k N_k \\ &= [u_1 \ u_2 \ u_3 \ \dots \ u_k] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_k \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.5.25)$$

$$q(\xi) = q_1 N_1 + q_2 N_2 + q_3 N_3 + \cdots + q_k N_k$$

$$= [q_1 \ q_2 \ q_3 \ \dots \ q_k] \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_k \end{bmatrix}$$

donde las funciones de interpolación para la variable ξ son

$$N_i(\xi) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^k \frac{\xi - \xi_j}{\xi_i - \xi_j} \quad (4.5.26)$$

$$\text{y} \quad \xi_i = -1 + \frac{2i}{k} \quad (4.5.27)$$

Dichas funciones son de grado k en la variable ξ . Para las expresiones dadas en (4.5.25) son conocidos los valores nodales de u y q . Las integrales a lo largo del elemento de orden k se obtienen de forma similar al caso lineal, tomando en cuenta que ahora se tienen k valores nodales desconocidos.

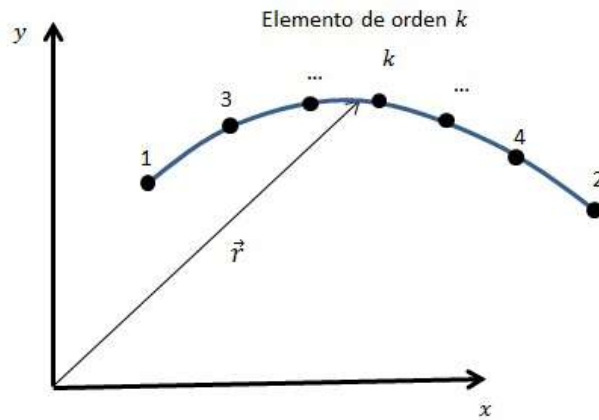


Figura 4.5.3. Elementos curvilíneos de orden k

La Figura 4.5.4 muestra elementos triangulares de seis nodos y cuadriláteros de ocho nodos. Las aristas de estos elementos siguen una geometría cuadrática. Igualmente, la interpolación sobre las aristas de estos elementos es de segundo orden, es decir, cuadrática.

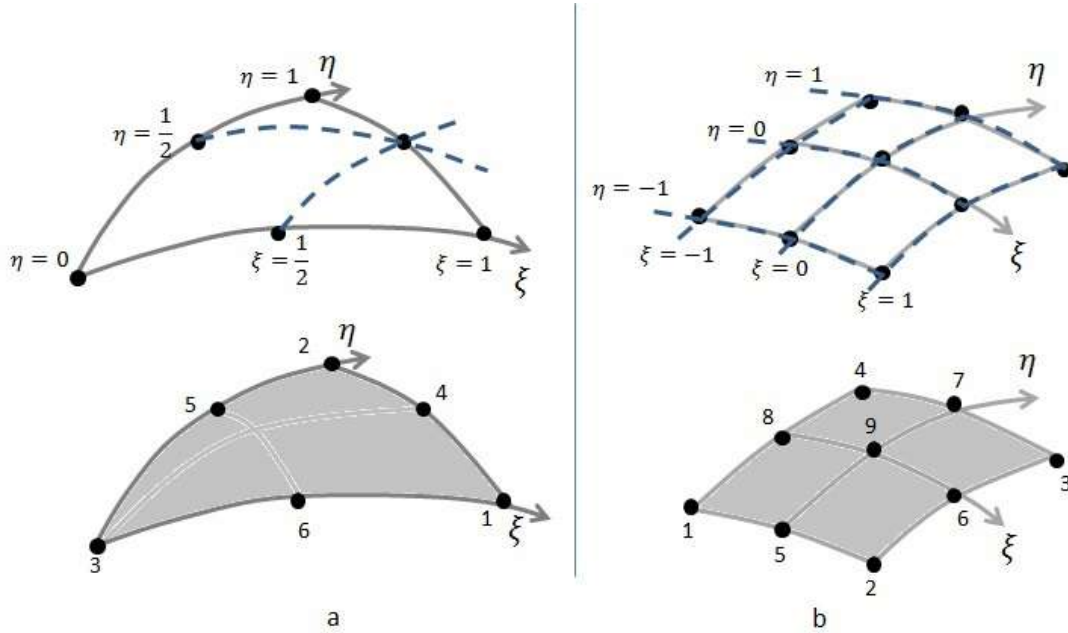


Figura 4.5.4. Elementos con aristas de segundo orden (cuadráticas). Izquierda: elementos triangulares de seis nodos. Derecha: elementos cuadriláteros de ocho nodos.

Las funciones de interpolación en elementos triangulares serán

$$\begin{aligned}
 N_1(\xi, \eta) &= \xi (2\eta - 1) \\
 N_2(\xi, \eta) &= \eta (2\eta - 1) \\
 N_3(\xi, \eta) &= (1 - \xi - \eta)(2(1 - \xi - \eta) - 1) \\
 N_4(\xi, \eta) &= 4 \xi \eta \\
 N_5(\xi, \eta) &= 4(1 - \xi - \eta)\eta \\
 N_6(\xi, \eta) &= 4(1 - \xi - \eta)\xi
 \end{aligned} \tag{4.5.28}$$

mientras que en elementos cuadriláteros son

$$\begin{aligned}
N_1(\xi, \eta) &= \frac{1}{4} \xi (\xi - 1) \eta (\eta - 1) \\
N_2(\xi, \eta) &= -\frac{1}{4} (1 + \xi) (1 - \eta) \xi \eta \\
N_3(\xi, \eta) &= \frac{1}{4} (1 + \xi) (1 + \eta) \xi \eta \\
N_4(\xi, \eta) &= \frac{1}{4} (\xi - 1) (1 + \eta) \xi \eta \\
N_5(\xi, \eta) &= \frac{1}{2} (1 - \xi^2) \eta (\eta - 1) \\
N_6(\xi, \eta) &= \frac{1}{2} (1 + \xi) (1 - \eta^2) \xi \\
N_7(\xi, \eta) &= \frac{1}{2} (1 - \xi^2) (1 + \eta) \eta \\
N_8(\xi, \eta) &= \frac{1}{2} (\xi - 1) (1 - \eta^2) \xi \\
N_9(\xi, \eta) &= (1 - \xi^2) (1 - \eta^2)
\end{aligned} \tag{4.5.29}$$

Como se puede observar, el número k de funciones de interpolación no guarda relación directa con el grado de dichas funciones, como pasa en el caso bidimensional. Al realizar las interpolaciones de los valores nodales de u o q , tenemos que los coeficientes de la matriz $\mathbf{H}$ se expresan como

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma_j} u \left[\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right] d\Gamma &= \int_{\Gamma_j} [N_1 \ N_2 \ \dots \ N_k] \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_k \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} h_{ij}^1 & h_{ij}^2 & \dots & h_{ij}^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_k \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.5.30}$$

donde

$$h_{ij}^n = \int_{\Gamma_j} N_n \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma, \quad n = 1, \dots, k. \quad (4.5.31)$$

De manera análoga, se obtiene la expresión de los elementos de la matriz G

$$g_{ij}^n = \int_{\Gamma_j} N_n u^* d\Gamma, \quad n = 1, \dots, k. \quad (4.5.32)$$

Para obtener el sistema de ecuaciones algebraico es necesario resolver las integrales (4.5.31) y (4.5.32). En el caso de elementos constantes es posible obtener soluciones cerradas de estas integrales, mientras que en elementos lineales y de orden superior es necesario calcular estas expresiones mediante integración numérica.

4.6 Integración numérica

Para resolver las integrales (4.5.31) y (4.5.32) en el caso de elementos lineales o de orden superior, se tienen dos tipos de integrales: no singulares y singulares.

4.6.1 Integración no singular

Se trata del caso cuando $\vec{x} \neq \vec{x}_i$, por lo cual la solución fundamental es acotada sobre el elemento donde está posicionado $\vec{x}$. Al calcular las integrales (4.5.31) y (4.5.32) se emplea integración Gaussiana (Brebbia & Domínguez 1992) que para el caso bidimensional (elementos unidimensionales) es

$$\int_{-1}^1 f(\xi) d\xi \approx \sum_{i=1}^n f(\xi_i) w_i \quad (4.6.1)$$

y para el caso bidimensional (elementos superficiales)

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_0^{1-\xi} f(\xi, \eta) d\eta d\xi \\ \approx \sum_{i=1}^n w_i f(\xi_i, \eta_i) \end{aligned} \quad (4.6.2)$$

En dominios triangulares

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(\xi, \eta) d\xi d\eta \\ \approx \sum_{i=1}^n w_i w_j f(\xi_i, \eta_i) \end{aligned} \quad (4.6.3)$$

En dominios cuadriláteros

En este caso, la solución u es interpolada sobre el elemento Γ_j por las funciones $N_1, N_2, \dots, N_k$, donde k indica número de funciones de la interpolación o funciones de forma empleadas. Entonces para emplear las expresiones anteriores es necesario realizar una transformación de coordenadas del elemento Γ_j al intervalo $[-1, 1]$, al rectángulo o triángulo dependiendo el tipo de elemento usado en la discretización. La interpolación de la posición sobre el elemento tiene la forma

$$x = N_1 x_1 + N_2 x_2 + \dots + N_k x_k; \quad y = N_1 y_1 + N_2 y_2 + \dots + N_k y_k, \quad y \quad (4.6.4)$$

$z = N_1 z_1 + N_2 z_2 + \dots + N_k z_k$ (en el caso tridimensional). La transformación de coordenadas para segmentos curvos es

$$d\Gamma = \sqrt{\left(\frac{dx}{d\xi}\right)^2 + \left(\frac{dy}{d\xi}\right)^2} d\xi = |J|d\xi \quad (4.6.5)$$

En el caso tridimensional se tiene que definir la forma de pasar del espacio cartesiano x, y, z global al sistema ξ, η, n definido sobre el elemento, donde ξ y η son las coordenadas que caracterizan al elemento homogéneo y n está en dirección normal, como ilustra la Figura 4.6.1

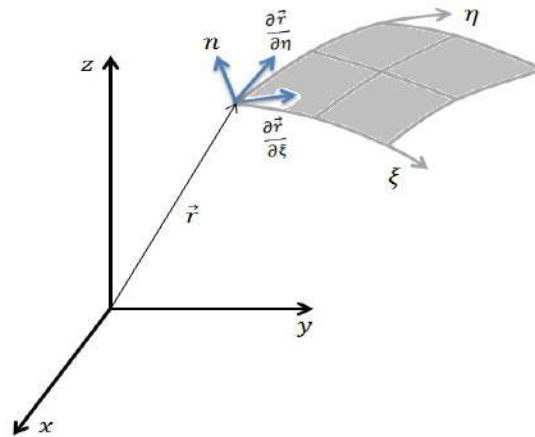


Figura 4.6.1. Sistema cartesiano (x, y, z) y sistema adimensional (ξ, η, n) .

“ n ” es el vector normal a la superficie del elemento en el punto bajo consideración

(tomada de Brebbia *et al.*, 1984)

La transformación de coordenadas entre el espacio cartesiano x, y, z y el espacio adimensional ξ, η, n en un punto P se expresa como

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial P}{\partial \xi} \\ \frac{\partial P}{\partial \eta} \\ \frac{\partial P}{\partial n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial n} & \frac{\partial y}{\partial n} & \frac{\partial z}{\partial n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial P}{\partial x} \\ \frac{\partial P}{\partial y} \\ \frac{\partial P}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (4.6.6)$$

donde

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial n} & \frac{\partial y}{\partial n} & \frac{\partial z}{\partial n} \end{pmatrix} \quad (4.6.7)$$

es la matriz Jacobiana. Además como la posición de P sobre el elemento se puede obtener a través de las funciones de forma N_i se tiene que el vector derivada de P con respecto al sistema global es desconocido. Al multiplicar por la matriz inversa $\mathbf{J}^{-1}$ se puede escribir que

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial P}{\partial x} \\ \frac{\partial P}{\partial y} \\ \frac{\partial P}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial n} & \frac{\partial y}{\partial n} & \frac{\partial z}{\partial n} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial P}{\partial \xi} \\ \frac{\partial P}{\partial \eta} \\ \frac{\partial P}{\partial n} \end{pmatrix} \quad (4.6.8)$$

Este tipo de transformaciones permite describir diferenciales de volumen o superficie en términos de coordenadas de superficie o curvilíneas (Brebbia & Domínguez 1992). Un diferencial de volumen $d\Omega$ puede ser escrito como

$$d\Omega = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial n} \right| d\xi d\eta dn = |\bar{J}| d\xi d\eta dn \quad (4.6.9)$$

y para nuestro caso

$$d\Gamma = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right| d\xi d\eta = |\bar{J}| d\xi d\eta \quad (4.6.10)$$

donde $\bar{J}$ es el Jacobiano reducido y $|\bar{J}|$ es la norma del vector normal $\vec{n}$, es decir

$$\vec{n} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} = (n_1, n_2, n_3)^T = \left(\frac{\partial x}{\partial n}, \frac{\partial y}{\partial n}, \frac{\partial z}{\partial n} \right)^T \quad (4.6.11)$$

y

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi}, \frac{\partial y}{\partial \xi}, \frac{\partial z}{\partial \xi} \right), \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta}, \frac{\partial y}{\partial \eta}, \frac{\partial z}{\partial \eta} \right) \quad (4.6.12)$$

Entonces se puede ver que

$$n_1 = \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \xi} \right); \quad n_2 = \left(\frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} \right); \quad (4.6.13)$$

$$n_3 = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right)$$

$$|\bar{\mathbf{J}}| = \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} \quad (4.6.14)$$

Luego, los elementos de $\mathbf{H}$ se pueden calcular mediante la siguiente expresión

$$\begin{aligned} h_{ij}^k &= \int_{\Gamma_j} N_k \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma \\ &= \int_{\Gamma_e} N_k \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) |\bar{\mathbf{J}}| d\xi \quad \text{en 2-D} \\ h_{ij}^k &= \int_{\Gamma_j} N_k \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) d\Gamma \\ &= \int_{\Gamma_e} N_k \left(\frac{\vec{v}_n}{D} u^* + q^* \right) |\bar{\mathbf{J}}| d\xi d\eta \quad \text{en 3-D} \end{aligned} \quad (4.6.15)$$

donde Γ_e corresponde a la frontera del elemento en coordenadas homogéneas ξ para el elemento curvo y (ξ, η) , para el elemento triangular o cuadrilátero. De manera análoga se obtienen las expresiones para los elementos de $\mathbf{G}$ sobre las nuevas coordenadas.

4.6.2 Integración singular

Para el caso $\vec{x}_i \rightarrow \vec{x} \Rightarrow r \rightarrow 0$, las soluciones fundamentales son singulares y la integración Gaussiana no es efectiva, por lo que es necesario emplear cuadraturas especiales, como Gauss-Laguerre para la integración de los

elementos de G . Sin embargo, los elementos H_{ii} de H presentan singularidades fuertes, por lo que no es recomendable emplear cuadraturas. Se pueden aplicar otras técnicas como la que se describe a continuación.

Considerando el problema de difusión-convección-reacción sobre el mismo dominio Ω , donde los flujos (q) son nulos y el potencial (u) es unitario, se tiene que

$$\mathbf{H}u - \mathbf{G}q = 0 \quad (4.6.16)$$

y se transforma en

$$\mathbf{H}u = 0 \quad (4.6.17)$$

Como los elementos H_{ij} son no nulos y conocidos para $i \neq j$ y los valores desconocidos corresponden cuando $i = j$ ($r \rightarrow 0$), entonces de la expresión anterior se tiene

$$H_{ii} = - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N H_{ij} \quad (4.6.18)$$

Además se puede observar que al emplear esta expresión no es necesario calcular el coeficiente geométrico $c(\vec{x}_i)$ (Banerjee & Butterfield, 1979; Beer, 2001). En la Figura 4.6.2 se muestra el esquema para el cálculo de los elementos de las matrices $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$.

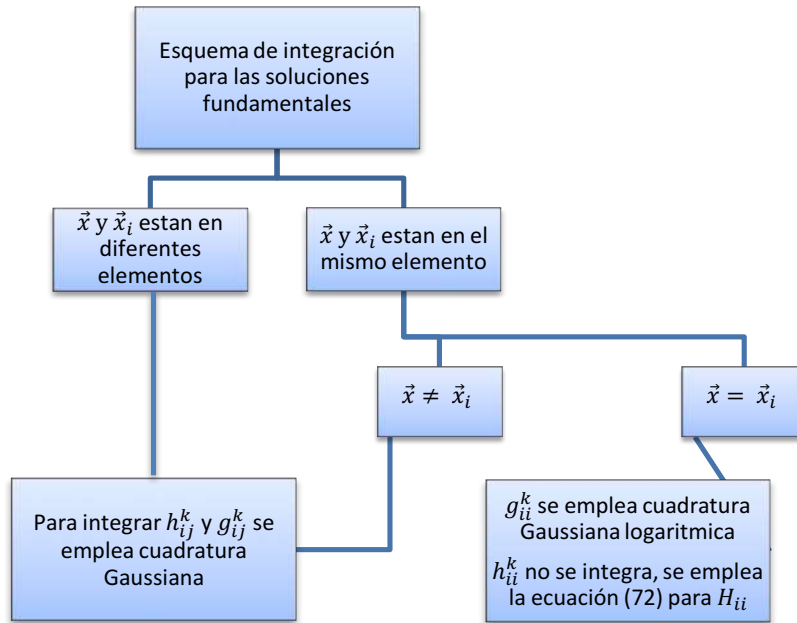


Figura 4.6.2. Esquemas de integración

Mediante el cálculo de los elementos de las matrices $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ se obtiene la representación matricial del Método de Elementos de Contorno para la ecuación de difusión-convección-reacción en régimen estacionario

$$\mathbf{H}u - \mathbf{G}q = 0 \quad (4.6.19)$$

luego al aplicar las condiciones de borde se obtiene el sistema de ecuaciones a resolver que es de la forma

$$\mathbf{A}x = b \quad (4.6.20)$$

donde $\mathbf{A}$ contiene las columnas de $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ donde los valores, nodales o sobre el elemento, de u o q son desconocidos y b es la suma de las columnas de $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ donde los valores son conocidos.

En recientes trabajos se está explorando la posibilidad de realizar la integración de los elementos de las matrices $\mathbf{H}$ y $\mathbf{G}$ mediante integración

analítica de las soluciones fundamentales. Por esta razón se presenta aquí un caso particular para la integración de las soluciones fundamentales asociadas al Laplaciano bidimensional empleando elementos lineales para la discretización de la frontera.

4.7 Integración analítica de las soluciones fundamentales

u^* y q^*

La integración de dichas soluciones, $h_{ij}^1, h_{ij}^2, g_{ij}^1$ y g_{ij}^2 , se puede realizar mediante paquetes de cálculo científico, aunque no es recomendable integrar de manera directa, ya que los resultados obtenidos pueden ser difíciles de manejar o factorizar.

Primero se realizará la integración de los elementos de la matriz $\mathbf{H}$, para lo cual se tienen que expresar $n_1, n_2, \vec{x} = (x, y), \bar{J}(\xi)$ y $r(\vec{x}_i, \vec{x})$ en términos de la variable de integración ξ . Las coordenadas del punto de integración x, y están dadas en términos de las funciones de interpolación $N_k(\xi)$ con $k = 1, 2$.

$$x(\xi) = x_1 N_1 + x_2 N_2, \quad y(\xi) = y_1 N_1 + y_2 N_2 \quad (4.7.1)$$

donde (x_1, y_1) y (x_2, y_2) son los nodos del elemento a integrar. El Jacobiano y las componentes del vector normal (n_1, n_2) dependen de las derivas de $x(\xi)$ e $y(\xi)$,

$$|J(\xi)| = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi}\right)^2} \quad (4.7.2)$$

$$n_1 = \frac{1}{|J(\xi)|} \frac{\partial y}{\partial \xi} = \frac{y_2 - y_1}{\sqrt{a}}, \quad n_2 = \frac{1}{|J(\xi)|} \frac{\partial x}{\partial \xi} = -\frac{x_2 - x_1}{\sqrt{a}}$$

Es fácil ver que el Jacobiano sobre cada elemento es constante ya que las funciones de forma son lineales (ver Tabla 4.7.1).

Al estudiar el término $\left(r(\vec{x}_i, \vec{x}(\xi))\right)^2$, con $\vec{x}_i = (x_i, y_i)$, se observa que se puede escribir como un polinomio cuadrático de la siguiente manera

$$\begin{aligned} r^2(\vec{x}_i, \vec{x}(\xi)) &= (x(\xi) - x_i)^2 + (y(\xi) - y_i)^2 \\ &= f\xi^2 + g\xi + h \end{aligned} \quad (4.7.3)$$

Dicho polinomio es positivo y presenta una raíz doble, particularmente cuando el punto de integración coincide con el punto de colocación. Aprovechando esta propiedad se escribirá el polinomio mostrado en la ecuación (4.7.3) en términos de los vértices de la parábola

$$r^2(\vec{x}_i, \vec{x}(\xi)) = f(\xi - Vx)^2 + Vy \quad (4.7.4)$$

Las expresiones para f, g, h, Vx y Vy aparecen en la Tabla 4.7.1. Por último, para obtener los elementos de la matriz $\mathbf{H}$ es necesario escribir las diferencias de las componentes de los puntos de integración y colocación y los componentes del vector posición $\vec{r}$, como polinomios lineales en la variable ξ de la siguiente manera

$$\begin{aligned} (x(\xi) - x_i) &= b\xi + e \\ (y(\xi) - y_i) &= z\xi + n \end{aligned} \quad (4.7.5)$$

Los valores de los coeficientes e, h aparecen en la Tabla 4.7.1. Al sustituir las ecuaciones (4.7.3), (4.7.4) y (4.7.5) en las expresiones para los elementos de matriz $\mathbf{H}$, ecuación (4.5.15), y considerando el cambio de coordenadas presentado en expresión (4.6.5), se obtienen las expresiones regulares ($i \neq j$) de la integral de q^*

$$\begin{aligned}
h_{ij}^1 &= \int_{-1}^1 q^*(\vec{x}_i, \vec{x}) N_1(\xi) |J(\xi)| d\xi \\
&= -\frac{1}{4} \frac{(b h - z e)(Int1 - Int2)}{\pi} \\
h_{ij}^2 &= \int_{-1}^1 q^*(\vec{x}_i, \vec{x}) N_2(\xi) |J(\xi)| d\xi \\
&= \frac{1}{4} \frac{(b h - z e)(Int1 + Int2)}{\pi}
\end{aligned} \tag{4.7.6}$$

donde

$$\begin{aligned}
Int1 &= \int_{-1}^1 \frac{\xi}{f(\xi - Vx)^2 + Vy} d\xi, \\
Int2 &= \int_{-1}^1 \frac{1}{f(\xi - Vx)^2 + Vy} d\xi
\end{aligned} \tag{4.7.7}$$

En la Tabla 4.7.1 aparecen las expresiones cerradas de las integrales dadas en la expresión (4.7.7). Con el valor de $Int1$ y $Int2$ se pueden calcular los elementos de la matriz $\mathbf{H}$, salvo los valores de la diagonal, los cuales se obtienen al resolver $\mathbf{H}u = 0$ donde u es un vector con todas las entradas unitarias. Dicho problema se presenta al asumir la variable u constante sobre la frontera y las incógnitas son los elementos de la diagonal de $\mathbf{H}$, como se explicó en secciones previas. Para la integración de u^* se procede de manera análoga. Al sustituir la expresión (4.7.4) en los términos de la ecuación (4.5.6) se obtienen los correspondientes elementos de la matriz $\mathbf{G}$, quedando expresados como

$$\begin{aligned}
g_{ij}^1 &= \int_{-1}^1 u^*(\vec{x}_i, \vec{x}) N_1(\xi) |J(\xi)| d\xi = \frac{\sqrt{a}}{8\pi} (IntB1 - IntB2) \\
g_{ij}^2 &= \int_{-1}^1 u^*(\vec{x}_i, \vec{x}) N_2(\xi) |J(\xi)| d\xi = -\frac{\sqrt{a}}{8\pi} (IntB1 + IntB2)
\end{aligned} \tag{4.7.8}$$

donde,

$$\begin{aligned}
IntB1 &= \int_{-1}^1 \ln(f(\xi - Vx)^2 + Vy) \xi d\xi \\
IntB2 &= \int_{-1}^1 \ln(f(\xi - Vx)^2 + Vy) d\xi
\end{aligned} \tag{4.7.9}$$

Las expresiones cerradas para las integrales $IntB1$ y $IntB2$ aparecen en la Tabla 4.7.1. Cuando $i = j$ solo es necesario considerar el límite $\vec{x}_i \rightarrow \vec{x}$ sobre estas expresiones para obtener los términos diagonales de $\mathbf{G}$.

Tabla 4.7.1. Expresiones para los coeficientes de la integración analítica

$ \begin{aligned} b &= \frac{x_2 - x_1}{2} \\ z &= \frac{y_2 - y_1}{2} \\ e &= \frac{x_2 + x_1}{2} + x_i \\ h &= \frac{y_2 + y_1}{2} + y_i \\ a &= f = b^2 + z^2 \end{aligned} $	$ \begin{aligned} g &= 2eb + 2hz \\ l &= e^2 + h^2 \\ Vx &= -\frac{g}{2f} \\ Vy &= l - \frac{g^2}{4f} \end{aligned} $
--	---

$$\begin{aligned}
Int1 &= \left(2f Vx \arctan \left(2 \frac{\sqrt{f Vy}}{Vy + f Vx^2 - f} \right) \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{f Vy} \ln \left(\frac{f(Vx - 1)^2 + Vy}{f(Vx + 1)^2 + Vy} \right) \right) \frac{1}{2f\sqrt{f Vy}} \\
Int2 &= \arctan \left(2 \frac{\sqrt{f Vy}}{Vy + f Vx^2 - f} \right) \frac{1}{\sqrt{f Vy}} \\
IntB1 &= -\frac{1}{2f} (f + Vy) \ln \left(\frac{f(Vx + 1)^2 + Vy}{f(Vx - 1)^2 + Vy} \right) \\
&\quad - \frac{1}{2} Vx^2 \ln \left(\frac{f(Vx - 1)^2 + Vy}{f(Vx + 1)^2 + Vy} \right) \\
&\quad - \frac{1}{2f\sqrt{f Vy}} \left(4\sqrt{f Vy} f Vx \right. \\
&\quad \left. - 4Vx Vy \arctan \left(\frac{\sqrt{f Vy}}{Vy + f Vx^2 - f} \right) f \right) \\
IntB2 &= \ln((f(Vx - 1)^2 + Vy)(f(Vx + 1)^2 + Vy)) \\
&\quad + \ln \left(\frac{f(Vx + 1)^2 + Vy}{f(Vx - 1)^2 + Vy} \right) Vx \\
&\quad + \frac{2}{\sqrt{f Vy}} Vy \arctan \left(2 \frac{\sqrt{f Vy}}{Vy + f Vx^2 - f} \right) - 4
\end{aligned}$$

Estos aportes implican una reducción en tiempo de computo a la hora de implementar el análisis por elementos de contorno ya que no es necesaria la integración Gaussiana, además mejora la respuesta o solución aproximada ya que elimina el error cometido al integrar por cuadraturas.

4.8 Método de Reciprocidad Dual

Como se mencionó al principio de este capítulo algunos fenómenos propios de diversas áreas en particular de la ingeniería pueden ser modelados con la ecuación de difusión-convección-reacción (ecuación 4.2.1).

En esta sección se describirá una formulación en elementos de contorno y reciprocidad dual (MDR) para la ecuación de difusión-convección-reacción considerando el término reactivo de forma general

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla u - D \nabla^2 u = p \quad \vec{x} \in \Omega, \quad t > t_0 \quad (4.8.1)$$

donde $\vec{v}$ es un vector de velocidad del medio, D es el coeficiente de difusión y $p = p(c, \vec{x}, t)$ es el término reactivo. Las condiciones de contorno están definidas de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \bar{u}(\vec{x}, t) &= g(\vec{x}, t) \quad \text{sobre } \Gamma_1 \\ \frac{\partial \bar{u}(\vec{x}, t)}{\partial n} &= h(\vec{x}, t) \quad \text{sobre } \Gamma_2 \end{aligned} \quad (4.8.2)$$

siendo la condición inicial $u(\vec{x}, t_0) = f(\vec{x})$, y donde g define el valor del campo sobre la frontera Γ_1 , h es el flujo en dirección normal sobre la frontera Γ_2 y f representa el valor del campo escalar para el tiempo t_0 , además $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \equiv \Gamma = \partial\Omega$ es la frontera del dominio.

Aplicando el método de residuos ponderados e integrando sobre el dominio Ω se obtiene la formulación débil de la ecuación (4.8.1)

$$\int_{\Omega} u^* D \nabla^2 u \, d\Omega = \int_{\Omega} u^* \left(\frac{\partial u}{\partial t} - p + \vec{v} \cdot \nabla u \right) d\Omega \quad (4.8.3)$$

donde la función u^* viene dada por la ecuación (4.2.6) que es conocida como la solución fundamental para el Laplaciano (Brebbia & Dominguez, 1992) asociada a la expresión (4.8.1) y que es solución de la ecuación (4.8.3)

$$-\nabla^2 u^* = \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \quad (4.8.4)$$

en la cual δ es la función delta de Dirac. Siguiendo la metodología para obtener la ecuación integral de contorno, presentada en secciones anteriores, podemos ver que la ecuación (4.8.3) se puede escribir

$$\begin{aligned} D \left(c(\vec{x}_i) u_i + \int_{\Gamma} q^* u - u^* q d\Gamma \right) \\ = \int_{\Omega} u^* \left(\frac{\partial u}{\partial t} - p + \vec{v} \cdot \nabla u \right) d\Omega \end{aligned} \quad (4.8.5)$$

donde $q = \frac{dc}{dn}$, con n el vector normal exterior al contorno (de igual manera para q^*).

La integral de dominio, lado izquierdo de la ecuación (4.8.5), se puede aproximar realizando una selección de una función de forma global $\phi(\vec{x}_i, \vec{x}_k) = \phi_k$, que es la base fundamental para el MRD, donde

$$\hat{b} = \frac{\partial u}{\partial t} - p + \vec{v} \cdot \nabla u \approx \sum_{k=1}^{\bar{N}+L} \beta_k \phi_k \quad (4.8.6)$$

y $\beta_i \in \mathbb{R}$. La restricción que deben cumplir las funciones de forma global es

$$-\nabla^2 \hat{u}_k = \phi_k \quad (4.8.7)$$

y al sustituir las ecuaciones (4.8.6) y (4.8.7) en el lado derecho de la expresión (4.8.5) se puede escribir la integral sobre el dominio Ω como

$$\int_{\Omega} u^* \hat{b} d\Omega = \sum_{k=1}^{\bar{N}+L} \beta_k \int_{\Omega} -\nabla^2 \hat{u}_k u^* d\Omega \quad (4.8.8)$$

Nuevamente, al obtener la ecuación integral de contorno de la ecuación (4.8.8) se tiene que la aproximación de la integral de dominio presente en la ecuación (4.8.5) es

$$\int_{\Omega} u^* \hat{b} d\Omega = \sum_{k=1}^{\bar{N}+L} \beta_k \left(\hat{u}_k + \int_{\Gamma} \hat{u}_k q^* - \hat{q}_k u^* d\Gamma \right) \quad (4.8.9)$$

Al sustituir la expresión (4.8.9) en la ecuación (4.8.5), se obtiene la ecuación integral de contorno asociada a la ecuación de difusión-convección-reacción

$$\begin{aligned} D \left(c(\vec{x}_i) u_i + \int_{\Gamma} q^* u - u^* q d\Gamma \right) \\ = \sum_{k=1}^{\bar{N}+L} \beta_k \left(\hat{u}_k + \int_{\Gamma} \hat{u}_k q^* - \hat{q}_k u^* d\Gamma \right) \end{aligned} \quad (4.8.10)$$

Ahora, para obtener la solución (numérica) de la ecuación (4.8.5), es necesario obtener el valor de las integrales de frontera presentes en la expresión (4.8.10) como se discutió en secciones previas.

4.9 Funciones de forma globales

4.9.1 Funciones de forma en coordenadas cartesianas

Se puede observar que la selección de las funciones de forma globales no tiene restricciones por la formulación excepto por la matriz $\mathbf{F}$ (de la cual se comentará en secciones siguientes) que es la evaluación de las funciones de forma, la cual debe ser no singular. Para realizar dicha selección es común proponer una expansión para la función $\phi(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$, y luego calcular $\hat{u}$ y $\hat{q} = \frac{\partial \hat{u}}{\partial n}$ a partir de la ecuación (4.8.7).

En algunos trabajos (Partridge *et al.*, 1992; Partridge & Brebbia, 1990) se propone realizar la sección de la función ϕ como una suma de potencias de r , siendo r la distancia entre $\vec{x}_i$ y $\vec{x}_j$, de la siguiente forma

$$\phi = 1 + r + r^2 + \dots + r^m \quad (4.9.1)$$

donde las soluciones particulares $\hat{u}$ y $\hat{q}$ para la función ϕ , en términos de r , son para el caso tridimensional

$$\begin{aligned} \hat{u} &= \frac{r^2}{6} + \frac{r^3}{12} + \dots + \frac{r^{m+2}}{(m+2)(m+3)} \\ \hat{q} &= (r_x n_1 + r_y n_2 + r_z n_3) \left(\frac{1}{3} + \frac{r}{4} + \dots + \frac{r^m}{m+3} \right) \end{aligned} \quad (4.9.2)$$

y para el caso bidimensional

$$\begin{aligned} \hat{u} &= \frac{r^2}{4} + \frac{r^3}{9} + \dots + \frac{r^{m+2}}{(m+2)^2}; \\ \hat{q} &= (r_x n_1 + r_y n_2) \left(\frac{1}{2} + \frac{r}{3} + \dots + \frac{r^m}{m+2} \right) \end{aligned} \quad (4.9.3)$$

Con la expansión dada en (4.9.1) se puede observar que garantiza la no singularidad de la matriz $\mathbf{F}$, ya que $F_{ii} = \phi(x_i, x_i) = 1$ porque $r = 0$, obligando así a que la diagonal de $\mathbf{F}$ sea diferente de cero. Sin embargo se han estudiado diferentes combinaciones de las funciones de forma global como por ejemplo considerar expansiones como la presentada en (4.9.1) cuando $\vec{x}_i = \vec{x}_j$ y para el caso $\vec{x}_i \neq \vec{x}_j$ expansiones solo en r , es decir sin considerar el término independiente. En otros estudios se han empleado series trigonométricas o polinomios en las variables x, y y z (Brebbia & Domínguez, 1992).

4.9.2 Funciones de forma para el caso axisimétrico

En la selección de un conjunto de soluciones particulares y una función de forma global, no existe un caso general. Sin embargo, diversos trabajos han empleado funciones de tipo polinómicas en la variable r (la distancia entre el punto de colocación y un punto fuente) obteniendo excelentes resultados (Bai & Lu, 2004; Ang. & Ooi., 2008; Park & Banerjee, 2002; Park & Banerjee, 2007; Partridge & Brebbia, 1990). Siguiendo la metodología presentada por Bai & Lu (2004) se calcularán expresiones para este conjunto de funciones en el caso axisimétrico. Considérese la ecuación de Poisson

$$D\nabla^2 \hat{u} = r^\nu, \quad \nu = 1, 2, 3, \dots \quad (4.9.4)$$

donde $r(\vec{x}, \vec{x}_n) = \sqrt{(x - x_n)^2 + (y - y_n)^2 + (z - z_n)^2}$, cuya solución es

$$\hat{u} = \frac{r^{\nu+2}}{D(\nu+2)(\nu+3)} \quad (4.9.5)$$

En coordenadas cilíndricas la ecuación (4.9.4) es escrita como

$$D \left(\frac{\partial^2 \hat{p}^p}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \hat{p}^p}{\partial r} + \frac{\partial^2 \hat{p}^p}{\partial z^2} \right) = r^v - D \frac{\partial^2 \hat{p}^p}{\partial \theta^2} \quad (4.9.6)$$

donde la distancia del punto de integración al punto fuente puede ser expresada como

$$r = \sqrt{R^2 + \xi_n^2 - 2R\xi_n \cos(\theta - \theta_n) + (z - z_n)^2} \quad (4.9.7)$$

donde $\vec{x} = (R \cos(\alpha), R \sin(\alpha), z)^T = (R, 0, z)^T$, $\vec{x}_n = (\xi_n \cos(\theta - \theta_n), \xi_n \sin(\theta - \theta_n), z)^T$.

Al sustituir la expresión (4.9.5) en la ecuación (4.9.6), se obtiene la siguiente expresión

$$\nabla_A^2 \hat{c} = \phi \quad (4.9.8)$$

donde ∇_A^2 denota el Laplaciano en coordenadas cilíndricas (Bai & Lu, 2004). Ya que la ecuación (4.9.8) es lineal y v es positiva se pueden considerar la sumatoria sobre $\hat{u}$ y ϕ , desde m_1 a m_2 , por lo cual la ecuación (4.9.5) se puede escribir de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \hat{u} &= \sum_{v=m_1}^{m_2} \frac{r^{v+2}}{D(v+2)(v+3)} \\ \phi &= \sum_{v=m_1}^{m_2} r^v - \frac{v}{v+3} r^{v-2} \xi_n^2 \sin^2(\theta - \theta_n) \\ &\quad - \frac{r^v}{v+3} \frac{\xi_n}{R} \cos(\theta - \theta_n) \end{aligned} \quad (4.9.9)$$

Considerando que $\cos(\theta - \theta_n) = 1$ se obtienen expresiones singulares de ϕ cuando $R \rightarrow 0$. Para nodos sobre el eje de simetría se toma $\cos(\theta - \theta_n) = 0$. Para evitar la selección de un ángulo θ en el caso de f , se tomó la integral del promedio de las expresiones dadas en (4.9.9) y se obtienen las ecuaciones generales para las soluciones particulares $\hat{u}$, $\hat{q}$ y la función de forma global ϕ

$$\begin{aligned}
\phi &= \frac{2\alpha}{\pi} \sum_{v=m_1}^{m_2} L^v \int_0^{\pi/2} (1 - m^2 \sin^2(\theta))^{v/2} d\theta \\
\hat{u} &= \frac{2}{\pi D} \sum_{v=m_1}^{m_2} \frac{L^{v+2}}{(v+2)(v+3)} \int_0^{\pi/2} (1 - m^2 \sin^2(\theta))^{v+2/2} d\theta \\
\hat{q} &= \frac{2\alpha}{\pi} \sum_{v=m_1}^{m_2} \frac{L^v}{(v+3)} \left\{ [r n_r \right. \\
&\quad \left. + (z - z_n) n_z] \int_0^{\pi/2} (1 - m^2 \sin^2(\theta))^{v/2} d\theta \right. \\
&\quad \left. + n_r \xi_n \int_0^{\pi/2} (1 - m^2 \sin^2(\theta))^{v/2} \cos(2\theta) d\theta \right\}
\end{aligned} \tag{4.9.10}$$

donde

$$\begin{aligned}
m &= \frac{2\sqrt{R\xi_n}}{L} \\
L &= \sqrt{(R + \xi_n^2)^2 + (z - z_n)^2} \\
n_r &= \frac{\partial r}{\partial n}, n_z = \frac{\partial r}{\partial z} \quad y \quad \hat{q} = \frac{\partial \hat{c}}{\partial n}
\end{aligned} \tag{4.9.11}$$

En secciones siguientes se presentarán ejemplos numéricos de problemas en dos dimensiones o tridimensionales con simetría axial cuyas formulaciones son similares cambiando sólo las soluciones fundamentales.

4.10 Implementación numérica

La implementación numérica del método se basa en la discretización del contorno del dominio ya que las integrales que aparecen en la expresión (4.8.10) son referidas sólo a la frontera. Luego la expresión discretizada de la ecuación (4.8.10) es la siguiente (Partridge & Brebbia, 1990; Partridge *et al.*, 1992; Brebbia & Domínguez, 1992)

$$\begin{aligned}
 & D \left(c(\vec{x}_i) u(\vec{x}_i) + \sum_{j=1}^N u \int_{\Gamma_j} q^* d\Gamma - q \int_{\Gamma} u^* d\Gamma \right) \\
 &= \sum_{k=1}^{\bar{N}+L} \beta_k \left(\hat{u}(\vec{x}_i, \vec{x}_k) + \sum_{j=1}^N \hat{u}(\vec{x}_k, \vec{x}_j) \int_{\Gamma_j} q^* d\Gamma \right. \\
 &\quad \left. - \hat{q}(\vec{x}_k, \vec{x}_j) \int_{\Gamma_j} u^* d\Gamma \right) \quad (4.10.1)
 \end{aligned}$$

donde $\vec{x}_i$ y $\vec{x}_j$ son denominados puntos de colocación e integración respectivamente, $c(\vec{x}_i)$ parámetro geométrico. La representación matricial de la ecuación (4.10.1) es la siguiente

$$D(Hu - Gq) = (H\hat{U} - G\hat{Q})\beta \quad (4.10.2)$$

donde $\hat{U}$ y $\hat{Q}$ son matrices de dimensión $\bar{N} \times \bar{N}$ y $d\bar{N} \times \bar{N}$ respectivamente, las cuales se obtienen de la evaluación de las soluciones particulares de la ecuación (4.8.7), de las cuales se hablará más adelante, y $\bar{N}$ y d se indican en la expresión (4.5.22). H y G son las matrices de la formulación clásica de elementos de contorno, que corresponden a la evaluación de las soluciones fundamentales y β es el vector de coeficientes β_i desconocidos.

Adicionalmente, como se describió anteriormente, se pueden encontrar los valores de la variable u o q en puntos internos. Considérense L nodos internos, con lo cual se puede extender la ecuación (4.10.1) de la siguiente manera

$$D(\bar{\mathbf{H}}u - \mathbf{G}q) = (\bar{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{Q}})\beta \quad (4.10.3)$$

con

$$\bar{\mathbf{H}} = [\mathbf{H}|\mathbf{e}_{N+1} \mathbf{e}_{N+2} \cdots \mathbf{e}_{N+L}] \quad (4.10.4)$$

donde $\mathbf{e}_l, l = \bar{N} + 1, \dots, \bar{N} + L$ son los vectores canónicos de tamaño $N + L$, la dimensión de $\bar{\mathbf{H}}$ y $\hat{\mathbf{U}}$ es $(\bar{N} + L) \times (\bar{N} + L)$, de $\mathbf{G}$ es $((\bar{N} + L) \times d\bar{N})$ y de $\hat{\mathbf{Q}}$ es $(d\bar{N} \times (\bar{N} + L))$ respectivamente. Para ilustrar mejor la idea anterior, se incluye la representación matricial dada en (4.10.3) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \times \\ \mathbf{H} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \left[\bar{N} \right] \\ u \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \times \\ \mathbf{G} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} d\bar{N} \\ \left[d\bar{N} \right] \\ q \end{array} \right] = \\ & \left(\left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \times \\ \mathbf{H} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \times \\ \hat{\mathbf{U}} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} + L \\ \left[\bar{N} + L \right] \\ \beta \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \times \\ \mathbf{G} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} d\bar{N} \\ \times \\ \hat{\mathbf{Q}} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} + L \\ \left[\bar{N} + L \right] \\ \beta \end{array} \right] \right) \end{aligned} \quad (4.10.5)$$

y para L puntos internos se tiene la siguiente representación

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{c} L \\ \left[L \right] \\ u \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} L \\ \times \\ \mathbf{I} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} L \\ \left[L \right] \\ u \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} L \\ \times \\ \mathbf{G} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} d\bar{N} \\ \left[d\bar{N} \right] \\ q \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} L \\ \times \\ \mathbf{H} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \left[\bar{N} \right] \\ u \end{array} \right] \\ & + \left(\left[\begin{array}{c} L \\ \times \\ \mathbf{H} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} \\ \times \\ \bar{\mathbf{U}} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} + L \\ \left[\bar{N} + L \right] \\ \beta \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} L \\ \times \\ \mathbf{G} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} d\bar{N} \\ \times \\ \hat{\mathbf{Q}} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \bar{N} + L \\ \left[\bar{N} + L \right] \\ \beta \end{array} \right] \right) \end{aligned} \quad (4.10.6)$$

$$+ \begin{bmatrix} L & \times & L \\ I & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L & \times & (\bar{N} + L) \\ \hat{U} & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{N} + L \\ \beta \end{bmatrix}$$

A partir de los esquemas para puntos en la frontera (ecuación (4.10.5)) y dentro del dominio (ecuación (4.10.6)), se puede obtener una representación válida para puntos en cualquier parte del modelo

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{N} & NF & \bar{N} \\ L & \times & \bar{N} \end{bmatrix} & 0 \\ \begin{bmatrix} L & NI & \bar{N} \\ L & \times & L \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} L & \times & L \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{N} \\ L \end{bmatrix} \\ u \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{N} & NF & d\bar{N} \\ L & \times & d\bar{N} \end{bmatrix} & 0 \\ \begin{bmatrix} L & NI & d\bar{N} \\ L & \times & 0 \end{bmatrix} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\bar{N} \\ q \end{bmatrix} \quad (4.10.7)$$

$$\left(\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{N} & NF & \bar{N} \\ L & \times & \bar{N} \end{bmatrix} & 0 \\ \begin{bmatrix} L & NI & \bar{N} \\ L & \times & L \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} L & \times & L \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{N} & \times & (\bar{N} + L) \\ L & \times & (\bar{N} + L) \end{bmatrix} \\ \hat{U} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{N} & NF & d\bar{N} \\ L & \times & d\bar{N} \end{bmatrix} & 0 \\ \begin{bmatrix} L & NI & d\bar{N} \\ L & \times & 0 \end{bmatrix} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\bar{N} & \times & (\bar{N} + L) \\ \hat{Q} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \bar{N} + L \\ \beta \end{bmatrix}$$

Esta expresión se puede escribir de forma compacta como se muestra en la ecuación (4.10.3), en la cual es válida para puntos internos y sobre la frontera. Por otra parte a partir de la ecuación (4.8.6) se puede obtener el vector de coeficientes β , de la siguiente manera

$$\hat{b} \approx F\beta \quad (4.10.8)$$

entonces

$$\beta \approx F^{-1}\hat{b} \quad (4.10.9)$$

y F_{ij} son las evaluaciones de la función de forma global $\phi(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ en los $N + L$ nodos. Al sustituir la ecuación (4.10.9) en la expresión (4.10.3) se obtiene la siguiente ecuación

$$D(\bar{H}u - \mathbf{G}q) = (\bar{H}\hat{\mathbf{C}} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{Q}})F^{-1} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - p + \vec{v} \cdot \nabla u \right) \quad (4.10.10)$$

Es importante observar que al sustituir el vector $\hat{b}$ aparece el gradiente de u . Como el problema es encontrar el campo escalar $u(\vec{x}, t)$, este término es desconocido y por tanto es necesario aproximarlo. En el trabajo de Partridge & Brebbia (1990) se plantea una manera de aproximar dicho término para la ecuación de Helmholtz, la cual ha resultado ser eficiente para la aproximación del gradiente en ecuaciones más generales.

$$\nabla^2 u = u \quad \vec{x} \in \Omega \quad (4.10.11)$$

Para este caso

$$\beta \approx F^{-1}u \quad (4.10.12)$$

Por tanto las derivadas parciales de u se pueden escribir como

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} \beta = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} \mathbf{F}^{-1} u \\ \frac{\partial u}{\partial y} &\approx \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} \beta = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} \mathbf{F}^{-1} u \\ \frac{\partial u}{\partial z} &\approx \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial z} \beta = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial z} \mathbf{F}^{-1} u \end{aligned} \quad (4.10.13)$$

Al sustituir la ecuación (4.10.3) en la expresión (4.10.10) se obtiene la ecuación matricial de reciprocidad dual y elementos de contorno

$$\begin{aligned}
 D(\bar{\mathbf{H}}u - \mathbf{G}q) &= (\bar{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{C}} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{Q}})\mathbf{F}^{-1} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - p \right. \\
 &\quad \left. + \left(\mathbf{V}_x \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \mathbf{V}_y \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \mathbf{V}_z \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial z} \right) \mathbf{F}^{-1} u \right)
 \end{aligned} \tag{4.10.14}$$

con

$$\begin{aligned}
 (V_x)_{ij} &= \delta_{ij} v_x(\vec{x}) \\
 (V_y)_{ij} &= \delta_{ij} v_y(\vec{x}) \\
 (V_z)_{ij} &= \delta_{ij} v_z(\vec{x})
 \end{aligned} \tag{4.10.15}$$

La ecuación (4.10.14) es la completa discretización espacial del problema. Se puede observar que si la velocidad es nula la ecuación (4.10.14) se representa un problema de difusión con fuente p o difusión-reacción.

4.11 Integración en el tiempo

En el tratamiento de la variable temporal se puede considerar (para un incremento Δt) que la solución espacial para u está posicionada entre los niveles de tiempo m y $m + 1$, de la misma manera para q ,

$$\begin{aligned}
 u &= (1 - \mu)u^m + \mu u^{m+1}, \\
 q &= (1 - \mu)q^m + \mu q^{m+1}
 \end{aligned} \tag{4.11.1}$$

cuyo parámetro $\mu \in [0, 1]$. Por comodidad en la notación se tiene que $u(\vec{x}, t_m) = u^m$, $q(\vec{x}, t_m) = q^m$. Luego para la derivada temporal se toma un esquema en diferencias finitas hacia adelante

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u^{m+1} - u^m}{\Delta t} \quad (4.11.2)$$

Sustituyendo las expresiones (4.11.1) y (4.11.2) en la ecuación (4.10.14) se obtiene la completa discretización espacio temporal

$$\begin{aligned} (\mathbf{S} + \mu \mathbf{M})u^{m+1} - D\mu \mathbf{G}q^{m+1} = \\ (\mathbf{S} + (1 - \mu)\mathbf{M})u^m - D(1 - \mu)\mathbf{G}q^m \\ - \Delta t \mathbf{S}p((1 - \mu)u^m + \mu u^{m+1}) \end{aligned} \quad (4.11.3)$$

con

$$\mathbf{M} = D\bar{\mathbf{H}} - \Delta t \mathbf{S} \left(\mathbf{V}_x \frac{\partial F}{\partial x} + \mathbf{V}_y \frac{\partial F}{\partial y} \right) \mathbf{F}^{-1} \quad (4.11.4)$$

$$\mathbf{S} = \frac{-(\bar{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{C}} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{Q}})\mathbf{F}^{-1}}{\Delta t} \quad (4.11.5)$$

Al aplicar las condiciones de borde y las condiciones iniciales se obtendrá un sistema de ecuaciones y la linealidad o no-linealidad del mismo dependerá de la forma del término reactivo y de las condiciones de contorno.

4.12 Modelos con simetría axial

Considerando ahora un dominio 3D con simetría axial, la ecuación integral de contorno (4.8.10) se puede transformar en una ecuación integral de contorno axisimétrica mediante la integración de cada término con respecto a la dirección angular y cambiando la integral de superficie en una integral de línea. Usando la siguiente relación

$$d\Gamma = r \, d\theta \, dl \quad (4.12.1)$$

La ecuación integral (4.8.10) puede ser escrita como

$$\begin{aligned}
 & cu_i + \int_l \int_0^{2\pi} q^* u \, r d\theta - \int_0^{2\pi} u^* q \, r d\theta \, dl \\
 &= \sum_{k=1}^{\bar{N}+L} \beta_k \left(\hat{u}_k + \int_l \int_0^{2\pi} q^* \hat{u}_k \, r d\theta - \int_0^{2\pi} u^* \hat{q}_k \, r d\theta \, dl \right)
 \end{aligned} \tag{4.12.2}$$

donde se tiene que $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\vec{x}, \vec{x}_i)$ es el vector que une $\vec{x} = (x, y, z)$ con el punto $\vec{x}_i = (x_i, y_i, z_i)$, r es la norma de $\mathbf{r}$ y n es el vector normal, como se muestra en la Figura 4.12.1.

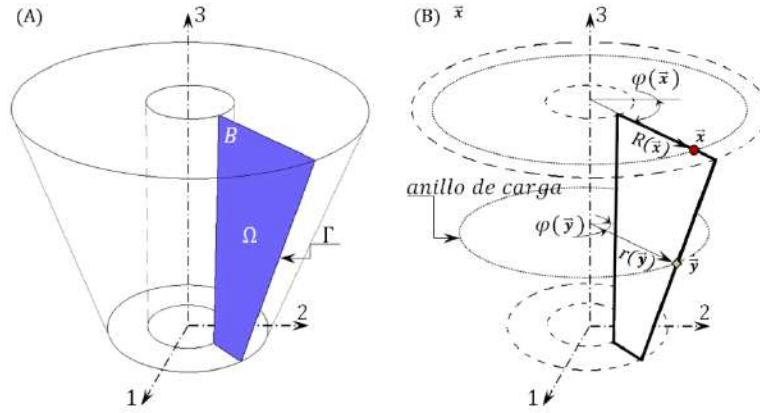


Figura 4.12.1. Dominio axisimétrico (González *et al.*, 2008).

Luego de la ecuación (4.12.2) se obtiene la siguiente ecuación integral de contorno

$$\begin{aligned}
 & c u_i + \int_{\Gamma} q_{axi}^* u - u_{axi}^* q d\Gamma \\
 &= \sum_{k=1}^{\bar{N}+L} \beta_k \left(\hat{u}_{axi_k} + \int_{\Gamma} q_{axi}^* \hat{u}_{axi_k} - u_{axi}^* \hat{q}_{axi_k} d\Gamma \right)
 \end{aligned} \tag{4.12.3}$$

la cual es análoga a la obtenida para el problema de potencial en 2D o 3D. Esto trae como consecuencia que la formulación axisimétrica sea similar a la formulación obtenida para la ecuación (4.8.10). Sin embargo, los nuevos núcleos axisimétricos se calculan integrando los núcleos previos en el intervalo $[0, 2\pi]$ y multiplicando por 2π veces el radio (r) del anillo que forma el punto $\vec{x}_i$ sobre la superficie y las soluciones particulares y la función de forma global, siendo necesario realizar el cambio de coordenadas cartesianas a cilíndricas.

En general las soluciones fundamentales axisimétricas se obtienen a partir de la siguiente expresión

$$\begin{aligned} q_{axi}^*(\vec{x}, \vec{y}) &= r \int_0^{2\pi} q^* d\theta \\ u_{axi}^*(\vec{x}, \vec{y}) &= r \int_0^{2\pi} u^* d\theta \end{aligned} \quad (4.12.4)$$

donde u^* y q^* son las soluciones fundamentales. Considerando que

$$\begin{aligned} x_i &= r \cos(\theta), \quad y_i = r \sin(\theta), \quad z_i = z_i \\ x &= R \cos(\theta), \quad y = R \sin(\theta) = 0, \quad z = z \end{aligned} \quad (4.12.5)$$

las soluciones axisimétricas son

$$\begin{aligned} q_{axi}^*(\vec{x}, \vec{x}_i) &= \frac{1}{\pi r C} n_r K\left(m, \frac{\pi}{2}\right) \\ &- \frac{R^2 - r^2 + (z - z_i)^2}{\pi r C D} n_r E\left(m, \frac{\pi}{2}\right) \frac{2(z - z_i)}{\pi C D} n_z E\left(m, \frac{\pi}{2}\right) \end{aligned} \quad (4.12.6)$$

$$u_{axi}^*(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{1}{\pi C} K\left(m, \frac{\pi}{2}\right) \quad (4.12.7)$$

donde

$$\begin{aligned}\nabla^2 u &= u \quad \vec{x} \in \Omega \\ C &= \sqrt{(R+r)^2 + (z-z_i)^2} \\ D &= (R-r)^2 + (z-z_i)^2 \\ m &= \frac{2\sqrt{Rr}}{C}\end{aligned}\tag{4.12.8}$$

y $K\left(m, \frac{\pi}{2}\right)$ y $E\left(m, \frac{\pi}{2}\right)$ son integrales elípticas de primera y segunda clase.

Debido a la similitud en las formulaciones de elementos de contorno y reciprocidad dual, tanto en coordenadas cartesianas como en coordenadas cilíndricas (simetría axial), la consideración de múltiples dominios será análoga.

En la siguiente sección se tratará el problema de múltiples regiones, es decir, cuando el dominio en estudio está formado por varios subdominios homogéneos.

4.13 Múltiples regiones

En esta sección solo se considerará, sin pérdida de generalidad, un dominio Ω constituido por solo dos subdominios (o regiones) homogéneas, Ω_1 y Ω_2 respectivamente como lo muestra la Figura 4.13.1

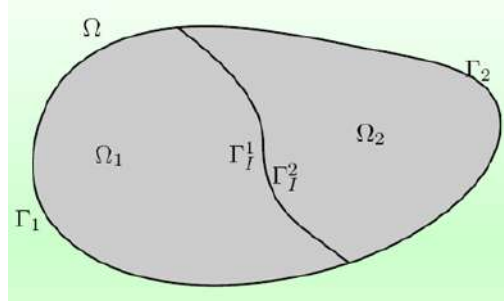


Figura 4.13.1. Dominio con múltiples regiones.

El contorno de cada región ($\partial\Omega$) se puede descomponer en Γ_j y Γ_I , que tales $\Gamma_j \cup \Gamma_I = \partial\Omega_j$, $j = 1, 2$, donde Γ_I es la interface del contorno correspondiente a Ω_1 y Ω_2 . Luego el sistema de ecuaciones para cada región viene dado por

$$[H_j \ H_I] \begin{bmatrix} u_j \\ u_I^j \end{bmatrix} - [G_j \ G_I] \begin{bmatrix} q_j \\ q_I^j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad j = 1, 2. \quad (4.13.1)$$

Las condiciones de continuidad y de equilibrio sobre la interface Γ_I pueden ser expresadas como

$$\begin{aligned} u_I^1 &= u_I^2 = u_I \\ q_I^1 + q_I^2 &= 0 \Rightarrow q_I^1 = -q_I^2 = q_I \end{aligned} \quad (4.13.2)$$

Al introducir estas condiciones en las ecuaciones dadas en la ecuación (4.13.1) se puede obtener el siguiente sistema de ecuaciones sobre el dominio Ω .

$$\begin{bmatrix} H_1 & H_I & 0 \\ 0 & H_1 & H_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_I \\ u_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} G_1 & G_I & 0 \\ 0 & -G_I & G_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ q_I \\ q_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.13.3)$$

Por último al aplicar las condiciones de contorno sobre la ecuación (4.13.3) se obtiene un sistema de ecuaciones algebraico que para el problema de difusión-convección-reacción ($Ax = b$).

4.14 Ejemplos numéricos

4.14.1 Flujo de calor sobre placa en L

En el primer ejemplo se presenta la solución del problema de flujo de temperatura sobre una región con forma de “L” con condiciones de borde mostradas en la Figura 4.14.1.a. Además, el coeficiente de conductividad térmico se considera unitario. Para la discretización de la frontera se emplearon 38 elementos lineales y 78 nodos internos en su mayoría en la vecindad de la esquina entrante, como ilustra la Figura 4.14.1.b. La solución analítica en series de la temperatura T en el entorno de la esquina entrante (punto (2,2)) es la siguiente (véase Prem, 1995)

$$T(r, \theta) = 0.667 - 0.156r^{\frac{2}{3}} \cos\left(\frac{2\theta}{3}\right) - 0.025r^{\frac{4}{3}} \cos\left(\frac{4\theta}{3}\right) - \frac{8}{9} \cos(2\theta) + \dots \quad (4.13.4)$$

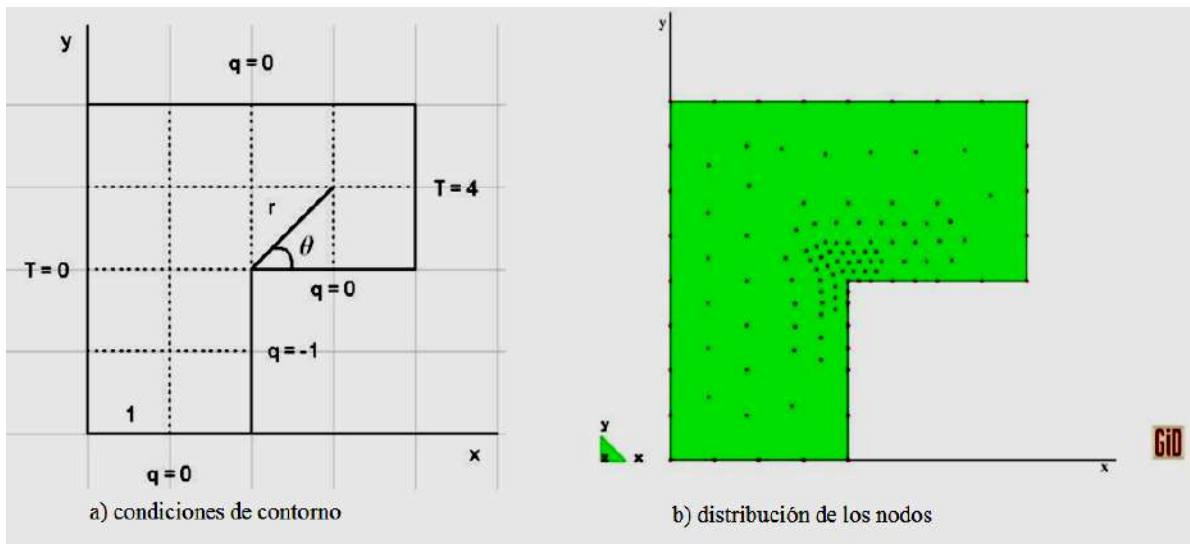


Figura 4.14.1. Geometría, condiciones de contorno y discretización del problema

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 4.14.1, donde se consideraron 4, 8, 16, 42, 64 puntos de Gauss para la integración numérica sobre los elementos.

Tabla 4.14.1. Resultados numéricos para distintos conjuntos de puntos de Gauss.

x	y	MEC			Solución	Error
		NG=4	NG=16	NG=64		
					Analítica	Absoluto MEC(64)
1.8513	1.9365	0.16911970	0.16373756	0.16333642	0.14486796	1.8468E-02
2.	1.875	0.67332702	0.66968918	0.66941810	0.66700000	2.4181E-03
1.8246	2.0625	1.13625621	1.13436270	1.13422172	1.15018150	1.5959E-02
2.	2.	0.35606756	0.35246611	0.35219758	0.33822852	1.3969E-02
1.9375	2.1083	0.57703102	0.57388994	0.57365573	0.56685746	6.7982E-03
2.125	2.	0.79061499	0.78768838	0.78747024	0.78716030	3.0994E-04

4.14.2 Convección-difusión entre dos esferas

El siguiente ejemplo considera el problema de conducción de calor estacionario entre dos paredes esféricas perfectamente unidas, con radios:

interno R_1 , zona de contacto R_2 y externo R_3 (Figura 4.14.2). Se establece que se tienen dos dominios homogéneos para emplear la metodología de múltiples regiones.

La esfera interna tiene conductividad k_1 es mantenida a temperatura T_1 sobre la frontera de radio R_1 , mientras que la esfera externa con conductividad k_2 es mantenida a una temperatura T_2 sobre la frontera externa de radio R_3 . Los valores numéricos fueron $R_1 = 1.0$, $R_2 = 1.5$, $R_3 = 2.0$, $T_1 = 5.0$, $T_2 = 3.0$, $k_1 = 1.0$ y $k_2 = 2.0$

Se emplearon 63 nodos en la frontera y 65 nodos internos distribuidos en ambas regiones. La solución analítica para este problema se puede encontrar en Carslaw & Jaeger (1959). Las temperaturas calculadas se presentan en la Tabla 4.14.2, donde se aprecia la precisión del método para el caso de múltiples regiones. Se puede observar la eficiencia del MEC para obtener la solución numérica del problema, además de su flexibilidad para el cálculo de valores dentro del dominio, ya que no es necesaria una malla estructurada sino solo una malla de la frontera.

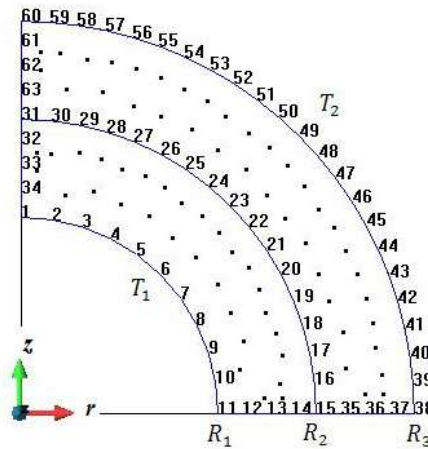


Figura 4.14.2. Difusión térmica entre dos paredes esféricas. Distribución de los nodos.

Tabla 4.14.2. Distribución de temperatura en una esfera compuesta.

Nodos	Radio	Temperatura	
		Sol. Exacta	Sol. MEC
1-11	1.0	5.0	Cond-Front
12	1.125	4.4667	4.4652
13	1.25	4.0400	4.0426
14	1.375	3.6909	3.6993
15-31	1.5	3.400	3.3960 ^a
35	1.625	3.2769	3.2856
36	1.75	3.1714	3.1766
37	1.875	3.08	3.0839
38-60	2.0	3	Cond-Front

^aValores promedios de los nodos sobre la interface.

4.14.3 Transferencia de calor con convección en un tubo

En este ejemplo se plantea el estudio de la transferencia de calor convectivo en un tubo. La distribución de velocidades está dada por

$$v = v_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R_d} \right)^2 \right] \quad (4.14.2)$$

donde v_0 y R_d son la media de velocidad del fluido y el radio del tubo. Para este ejemplo se considera el radio de la tubería unitario y $0 \leq z \leq 1$; para la discretización de la frontera se usaron 32 nodos y 52 nodos internos, como muestra la Figura 4.14.3.

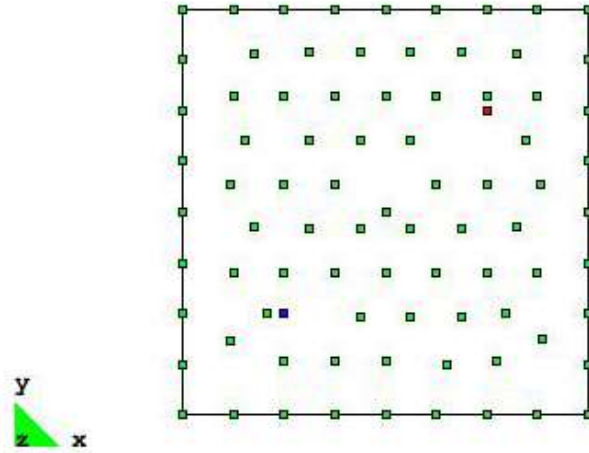


Figura 4.14.3. Distribución de los nodos para el tubo.

Las condiciones iniciales y de contorno son

$$\frac{dT}{dn} = 0, \quad r = 0 \text{ y } z = 1, \quad \frac{dT}{dn} = -T, \quad r = 1, \quad t > 0 \quad (4.14.3)$$

$$T = 0K, \quad z = 0, \quad T = 1K, \quad (r, z) \in \Omega, \quad t = 0$$

En la Figura 4.14.4 se presenta la comparación de los resultados obtenidos con elementos finitos y con reciprocidad dual, en la cual se puede observar la similitud de los mismos.

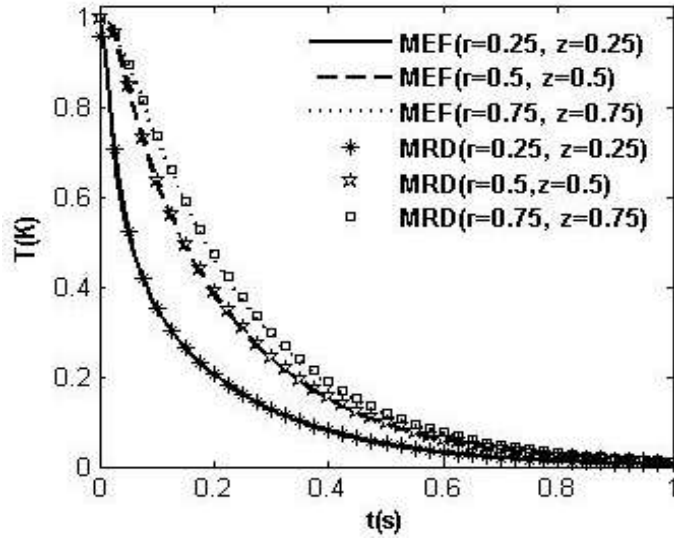


Figura 4.14.4. Resultados de temperatura obtenida por MEF (Bai & Lu, 2004) y MRD.

4.14.4 Conducción de calor transiente

En el siguiente ejemplo se verificó el comportamiento del código ante condiciones de contorno dependientes en el tiempo. Considérese la región Ω limitada por $r^2 + z^2 \leq 4$ y $1 \leq z \leq 2$, es decir, una porción de la parte superior de la esfera de radio 2. Las condiciones inicial y de borde son las siguientes

Según Ang. & Ooi (2008) la solución exacta de este problema es

$$T = -1 + z + (r^2 + z^2)^{-1/2} \sin\left(\frac{4}{\pi} \sqrt{r^2 + z^2}\right) \text{ para } \Omega$$

$$T = e^{-3\pi^2 t/16} (r^2 + z^2)^{-1/2} \text{ para } 0 \leq r \leq \sqrt{3}, \quad z = 1, \quad t > 0. \quad (4.14.4)$$

$$T = -1 + z + \frac{1}{2} e^{-3\pi^2 t/16} \text{ sobre } r^2 + z^2 = 4, \quad t > 0.$$

$$T(r, z, t) = -1 + z + (r^2 + z^2)^{-1/2} \times \sin\left(\frac{4}{\pi} \sqrt{r^2 + z^2}\right) e^{-3\pi^2 t/16} \quad (4.14.5)$$

El dominio fue discretizado con 29 nodos en la frontera y 21 nodos internos, como ilustra la Figura 4.14.5. El coeficiente de difusión es 3 (en las unidades correspondientes).

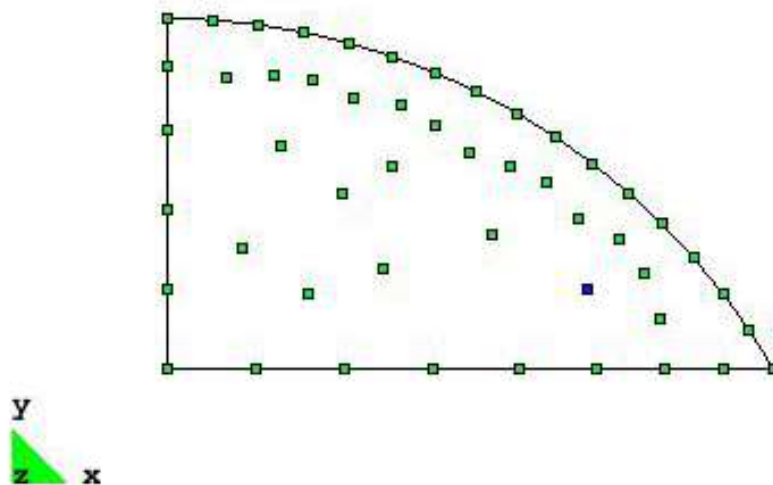


Figura 4.14.5. Nodos para la porción de la esfera.

Los resultados se muestran en la Figura 4.14.6, donde se puede notar que los resultados obtenidos por el código se aproximan adecuadamente a la solución analítica incluyendo los puntos cercanos a la frontera.

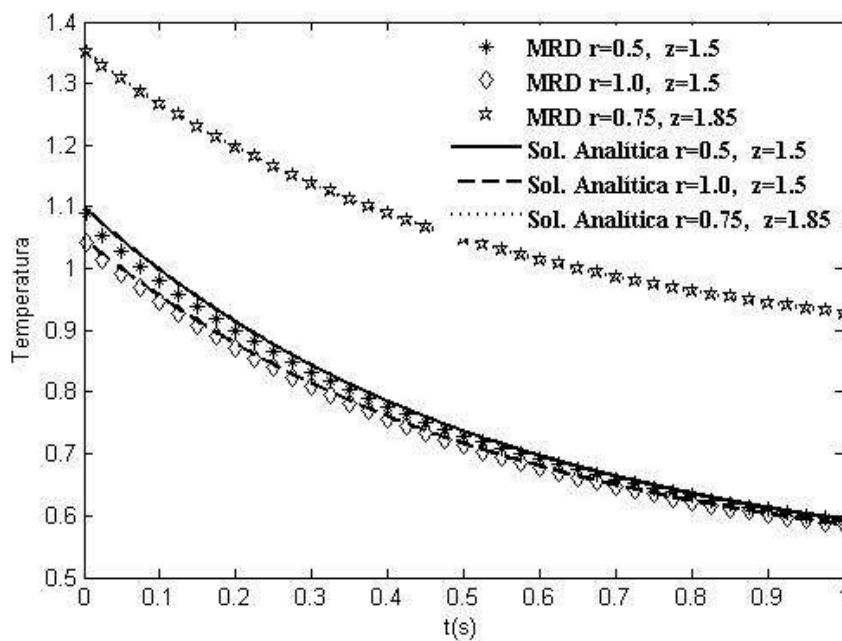


Figura 4.14.6. Comparación de la solución analítica vs numérica para $(r=0.5, z=1.5)$, $(r=1, z=1.5)$, $(r=0.75, z=1.85)$.

CAPÍTULO 5
MODELADO DE DIFUSIÓN
DE NUTRIENTES CON EL
MÉTODO DE ELEMENTOS
DE CONTORNO

CAPÍTULO 5. MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO

5.1 Introducción

Para estudiar el fenómeno de transporte de nutrientes en el disco intervertebral (DIV), se presenta un esquema que considera el efecto de la carga mecánica sobre la entrega de nutrientes en el DIV bajo ciertas consideraciones, combinando dos modelos: el modelo cuasi-estático presentado por Mokhbi-Soukane *et al.* (2007) para calcular la concentración de nutrientes dentro del DIV (oxígeno, glucosa y lactato) a través del nivel de pH y el modelo de Ferguson *et al.* (2004), donde la influencia por largo tiempo de una carga compresiva sobre la concentración de nutrientes fue estudiada.

Un modelo de transporte de masa no-lineal y acoplado, definido por la ecuación de difusión-convección-reacción fue implementado para simular la respuesta de células óseas. El Método de Reciprocidad Dual (DRBEM) fue también formulado para considerar los términos de dominio. Siguiendo los trabajos de Soukane *et al.* (2009), la simulación dinámica de los factores que afectan la nutrición de los discos intervertebrales fue llevada a cabo, donde se consideraron además cambios geométricos (González *et al.*, 2013; Nieto, 2014). Otras simulaciones incluyeron el análisis de la distribución de glucosa dentro del disco, de acuerdo a lo reportado por Huang & Gu (2008).

5.2 Difusión de nutrientes usando el Método de Elementos Finitos

La mayoría de los trabajos en el área de simulación de tejidos biológicos han sido implementados usando el Método de Elementos Finitos. Galbusera *et al.* (2011) compararon

4 modelos basados en MEF para describir el reingreso de fluidos dentro del disco intervertebral. El trabajo de Yao & Gu (2007) se basó en un análisis mediante elementos finitos para dominios no-homogéneos dependiendo del transporte de soluto dentro del disco intervertebral. Zhu *et al.* (2012) discutieron un modelo de elementos finitos para simular la dinámica y las condiciones del transporte de nutrientes en el disco intervertebral. Isaksson *et al.* (2009) presentaron un modelo de elementos finitos bi-dimensional, junto con un enfoque estadístico, para simular la curación y crecimiento de tejidos en fracturas de huesos largos.

En particular Ferguson *et al.* (2004) incluyen el análisis convectivo de fluidos dentro del disco intervertebral causado por la aplicación de la carga de trabajo diaria. Estos autores desarrollaron un modelo poroelástico difusivo acoplado, describiendo el disco intervertebral como un dominio axisimétrico con diferentes regiones propias de cada tejido, como muestra la Figura 5.2.1. En el análisis se logró predecir el comportamiento del fluido dentro del disco y campo de velocidad producido por la carga mecánica.

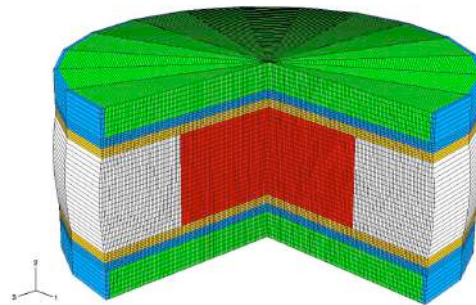


Figura 5.2.1. Modelo de Elementos Finitos de un disco intervertebral lumbar, con distintas regiones: núcleo pulposo, anillo fibroso, placa de cartílago, hueso vertebral (Ferguson *et al.*, 2004).

Adicionalmente Mokhbi-Soukane *et al.* (2007) emplearon un modelo difusivo axisimétrico de disco intervertebral lumbar con cuatro regiones (véase la Figura 5.2.2) para estudiar la concentración de nutrientes y su relación con el pH del tejido, tomando tres diferentes configuraciones de la malla (sin deformación, 11% y 20% de pérdida de fluido), para simular la carga mecánica, sin embargo no estudiaron este fenómeno en cada instante de tiempo. Este estudio reportó resultados sobre los factores que afectan la nutrición sobre los tejidos del disco intervertebral mediante la evaluación de la concentración de oxígeno,

glucosa y ácido láctico. Los resultados están contenidos en las Figuras 5.2.3. Las relaciones químicas entre estos tipos de soluto fueron tomadas como no lineales debido a evidencia experimental (Bibby *et al.*, 2005). Estos resultados son buenos ejemplos para validar la aplicación desarrollada en MEC.

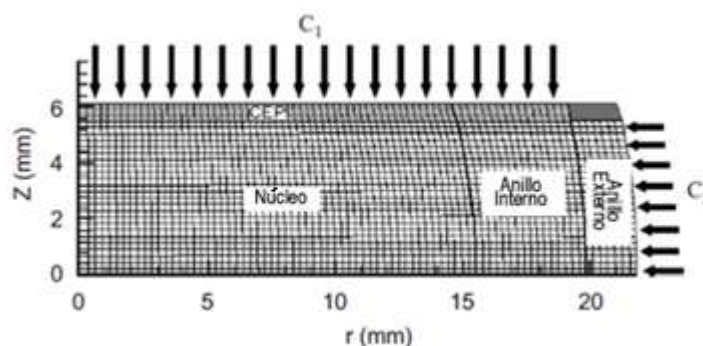


Figura 5.2.2. Modelo axisimétrico de elementos finitos para disco intervertebral. Núcleo, anillo interno, anillo externo y (CEP) placa de cartilago. Fuente de nutrientes en la periferia del anillo externo y del CEP (Mokhbi-Soukane *et al.*, 2007).

En el trabajo de Huang & Gu (2008) se presenta un modelo axisimétrico de un disco intervertebral lumbar en el cual se describe el comportamiento de la entrega de nutrientes bajo diversos tipos de carga mecánica (sin compresión, con compresión estática y compresión dinámica), además de incorporar la contribución mecánica sobre el coeficiente de difusión de la concentración de oxígeno y la concentración de ácido láctico, donde estas últimas fueron las variables de estudio de este modelo.

Sin embargo, cuando se buscan modelos basados en métodos integrales de contorno pocos trabajos son encontrados. Pueden mencionarse los trabajos de Ochiai & Takeda (2009) quienes presentaron un modelo de elementos de contorno para simular la convección difusión usando un método libre de malla y la modelación bidimensional de adhesión celular presentada en el trabajo de Jiang & Yang (2012). Estos autores formularon el problema usando un modelo acoplado entre un modelo de elementos finitos para las células y un modelo de elementos de contorno para el sustrato. En otro sentido Haider & Guilak (2007) han usado una formulación de elementos de contorno en la transformada de Laplace para un modelo de tensiones en el cartilago.

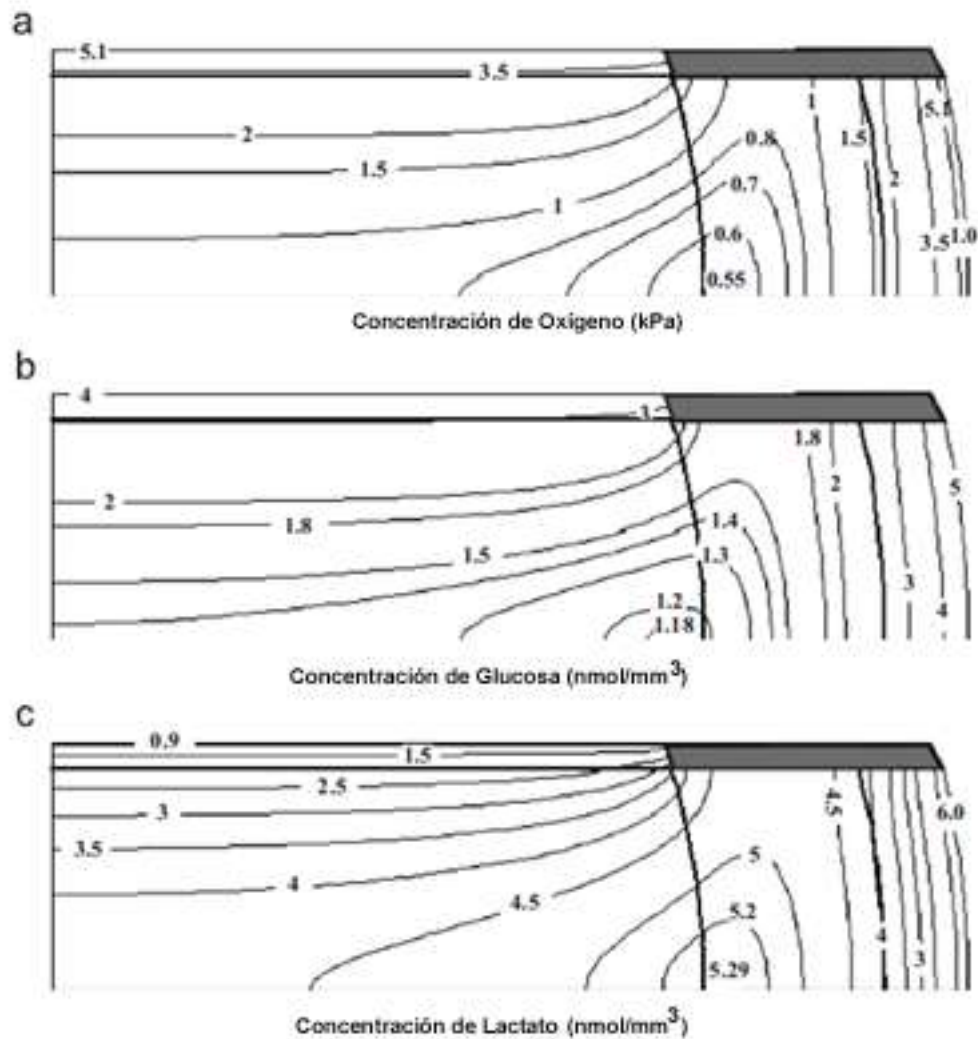


Figura 5.2.3. Concentraciones de nutrientes calculadas por el modelo de Mokhbi-Soukane *et al.* (2007). (a) concentración de oxígeno, (b) concentración de glucosa y (c) concentración de ácido láctico.

Por otro lado, recientes avances en el MEC, muestran formulaciones para resolver problemas dependientes del tiempo en el sentido de formulaciones integrales referidas solo a la frontera del dominio de estudio. Entre estas formulaciones se destaca el método de reciprocidad dual (MRD, Partridge *et al.*, 1992) el cual ha sido implementado anteriormente para poroelasticidad lineal (Park & Banerjee, 2007) y análisis difusivo-convectivo-reactivo

(Ferragut et al. 2007). Las ventajas de los métodos integrales incluyen la alta precisión de las soluciones tanto en la frontera del dominio como dentro del mismo y el buen desempeño para obtener la solución de problemas acoplados (multifísica) en múltiples regiones (Partridge *et al.*, 1992; Banerjee, 1994; Beer, 2001).

5.3 Modelo de nutrición del disco intervertebral con el MEC

De acuerdo a la complejidad del fenómeno biológico en estudio es necesario realizar algunas consideraciones. Una de ellas es restringir el modelo para dominios axisimétricos con la finalidad de aprovechar las formas de ciertos tejidos como huesos largos, discos intervertebrales, vasos sanguíneos entre otras estructuras, además facilita la creación de mallas (de contorno) bi-dimensionales.

Otra consideración importante es la de considerar la isotropía en el dominio, la cual permitirá emplear propiedades del material como coeficientes escalares. Además las estructuras biológicas de interés están constituidas por diferentes tejidos, razón por la cual la heterogeneidad del medio será modelada con varias regiones de material homogéneo.

Se plantea el estudio del transporte de masa en el disco intervertebral considerando distintos tipos de solutos (oxígeno, glucosa y ácido láctico) y asumiendo la influencia de la carga sobre el disco y el transporte de nutrientes. Para modelar el intercambio de solutos dentro del disco intervertebral, se propuso un modelo combinado para el cálculo de la concentración de diferentes tipos de soluto (oxígeno, lactato y glucosa) y un modelo poroelástico axisimétrico de un disco intervertebral lumbar, considerando cuatro diferentes regiones: núcleo pulposo (NP), platillo cartilaginoso (CEP), anillo exterior (OA) y el anillo interior (IA), como esta descrito en la Figura 5.3.1. Las dimensiones del disco son 43.5mm de diámetro, 12.5mm de altura inicial y 0.5mm de espesor del CEP, de acuerdo con Ferguson *et al.* (2004), Mokhbi-Soukane *et al.* (2007) y Martini *et al.* (2009).

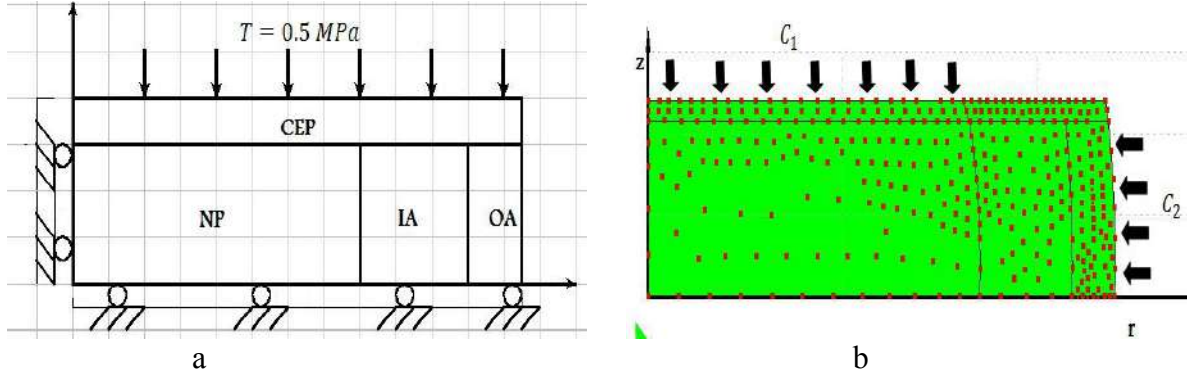


Figura 5.3.1. Modelo basado en elementos de contorno axisimétrico para el disco intervertebral: componentes y condiciones de contorno. (a) Las partes son: núcleo (NP), el anillo interno (IA), anillo externo (OA) y la placa cartilaginosa (CEP). (b) Los nutrientes son entregados a través del anillo exterior y la placa.

A partir de la ecuación (4.8.1) se obtiene un conjunto de ecuaciones de difusión que están acopladas mediante el nivel de pH, la producción de lactato y el consumo de oxígeno. Dicho sistema de ecuaciones es el siguiente

$$\begin{aligned}
 D_{oxi} \nabla^2 c_{O_2} &= -F_{O_{2cons}} + \frac{dc_{O_2}}{dt} \\
 D_{lac} \nabla^2 c_{lac} &= 2 F_{lacpro} + \frac{dc_{lac}}{dt} \\
 D_{glu} \nabla^2 c_{glu} &= -F_{lacpro} + \frac{dc_{glu}}{dt}
 \end{aligned} \tag{5.3.1}$$

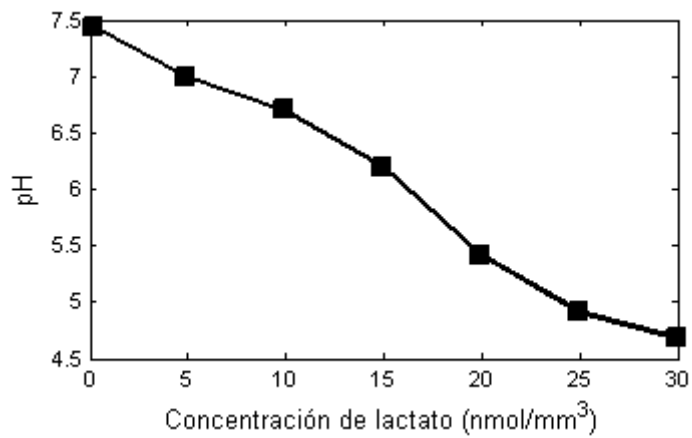
donde c_{O_2} , c_{lac} , c_{gluc} son las concentraciones de oxígeno, ácido láctico y glucosa respectivamente, $F_{O_{2cons}}$ y F_{lacpro} son las funciones que regulan el consumo de oxígeno y la producción de lactato por las células. El consumo de oxígeno depende del nivel de pH y el c_{O_2} , mientras tanto, la producción de lactato depende de las concentraciones c_{lac} y c_{O_2} (Bibby *et al.*, 2005). Adicionalmente, la producción de energía está dada por glicolisis, en la cual una molécula es dividida en dos moléculas de ácido láctico (Bibby *et al.*, 2005). Entonces la tasa de producción de lactato y el consumo de glucosa es tomada como 2.0 a través del disco.

Los nutrientes son entregados al disco intervertebral por los vasos sanguíneos localizados en la frontera del disco (Figura 5.3.1), mientras el transporte de sustancias a través del disco es principalmente por difusión. La parte superior y el anillo externo son consideradas permeables, debido a la baja presión en las venas y la alta vascularización del cuerpo vertebral. Las condiciones de contorno y los coeficientes de difusión dentro de cada región son mostrados en la Tabla 5.3.1.

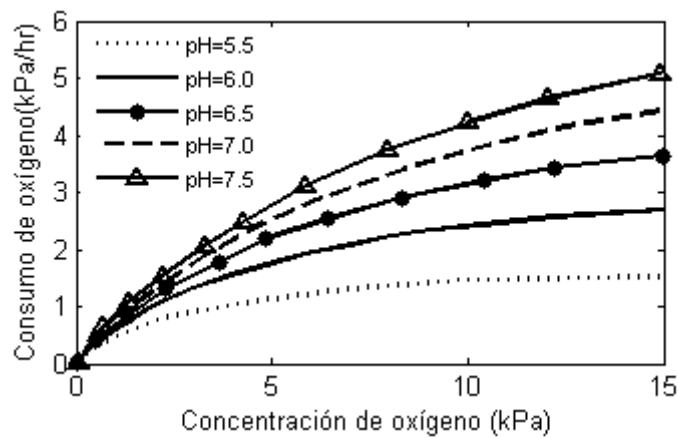
Los resultados se muestran en la Figura 5.3.2, donde se coleccionan las concentraciones de lactato vs pH, consumo de lactato vs producción de lactato y la de concentración de oxígeno vs consumo de oxígeno.

Tabla 5.3.1. Propiedades del disco (difusividad D , concentración en la frontera C_i , $i = 1$ para el CEP sobre el núcleo, $i = 2$ para la periferia del OA, ϵ es el fracción del volumen) (Mokhbi-Soukane *et al.*, 2007)

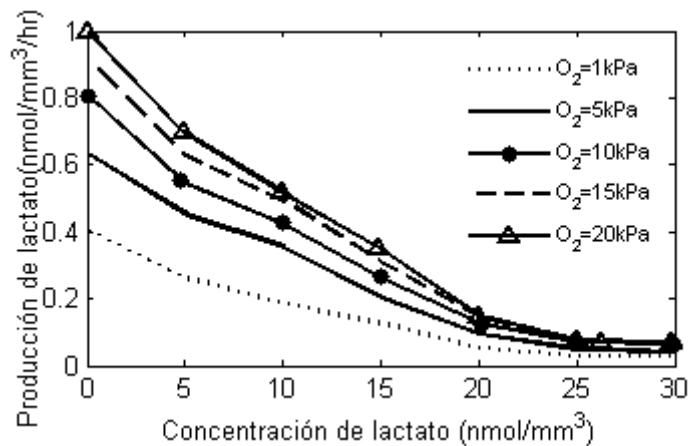
	$\epsilon(\%)$	Células	Oxígeno		Ácido láctico		Glucosa	
		$(10^3 \text{ cells}/\text{mm}^3)$	D	C_i	D	C_i	D	C_i
			mm^2/h	(kPa)	mm^2/h	Nmol/mm^3	mm^2/h	Nmol/mm^3
Núcleo	80	4.0	5.0		2.02		1.36	
IA	73	6.0	4.16		1.68		1.13	
OA	66	12.	3.4	5.8	1.37	0.9	0.92	5.0
CEP	60	15.	2.81	5.1	1.13	0.8	0.76	4.0



(a) Concentración de lactato vs pH



(b) Concentración de oxígeno vs consumo de oxígeno



(c) Concentración de lactato vs producción de lactato

Figura 5.3.2. Relaciones entre la concentración oxígeno y lactato con el consumo de oxígeno y la producción de lactato en función al nivel de pH

La influencia de largos períodos de carga compresiva sobre la concentración de nutrientes es investigada por alteraciones en la geometría y sobre los coeficientes de difusión como es mostrado en la ecuación (5.3.2). Un ciclo diurno de carga fue simulado considerando dos períodos: uno de 16 horas de carga compresiva equivalente a 0.5MPa sobre la placa y un período final de 8 horas de recuperación simulado con 0.2 MPa en la placa y el anillo exterior. Este período fue considerado suficiente para promover el reingreso del fluido al disco.

$$D_i = D_i^0 \exp \left(-A \left(\frac{r_i}{\sqrt{kv}} \right)^B \right) \quad (5.3.2)$$

donde i es el soluto, r_i es el radio del soluto ($r_{o_2} = 0.1nm$, $r_{lac} = 0.255nm$ y $r_{glu} = 0.38nm$), k es la permeabilidad, ν es la viscosidad del agua, D_i^0 es la difusión inicial (ver Tabla 5.3.1) y A, B son constantes del material (ver Tabla 5.3.2).

Tabla 5.3.2. Propiedades poroelásticas (Ferguson *et al.*, 2004; Huang & Gu, 2008)

	Modulo elástico	Coefficiente de Poisson	Índice de vacío inicial e_0	Permeabilidad inicial k_0	M	A	B
	E(MPa)	ν		(m^4/Ns)			
Núcleo	1.5	0.17	4.0	7.5×10^{-16}	8.5	1.25	0.681
Anillo	2.5	0.17	2.33	7.5×10^{-16}	8.5	1.29	0.37
Cartílago	5	0.17	4.0	7.5×10^{-15}	8.5	0	0

Un modelo experimental propuesto por Ferguson *et al.* (2004) es también implementado para caracterizar la dependencia del tipo de tejido sobre la permeabilidad, de acuerdo a

$$k = k_0 \left(\frac{e(1 + e_0)}{e_0(1 + e)} \right)^2 \exp \left(M \left(\frac{1 + e}{1 + e_0} - 1 \right) \right) \quad (5.3.3)$$

donde e es el índice de vacío

$$e = \frac{\phi_f}{1 - \phi_f} \quad (5.3.4)$$

y ϕ_f es la porosidad (fracción de fluido) del tejido como función de la deformación del volumen $J = dV/dV_0$, como se describe a continuación

$$\phi_f = 1 - J^{-1}(1 - \phi_0) \quad (5.3.5)$$

Además, en la Tabla 5.3.2 se presentan las propiedades físicas del modelo. Por otro lado debido a la no-linealidad del modelo se utilizó el Método de Newton para aproximar la solución del problema, calculando $F(X) = 0$, donde la function F es descrita como

$$F(X_k) = \left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{H} \right) X_{k+1} - \mathbf{G}q^{k+1} - \mathbf{M}\phi(X_{k+1}) - \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} X_k \quad (5.3.6)$$

El esquema de Newton para X es

$$X_{k+1} = X_k + J(X_k)^{-1} F(X_k) \quad (5.3.7)$$

donde $J(X_k)$ es la matrix Jacobiana, $X = c(r, z, t_{m+1}) = c^{m+1}$ y

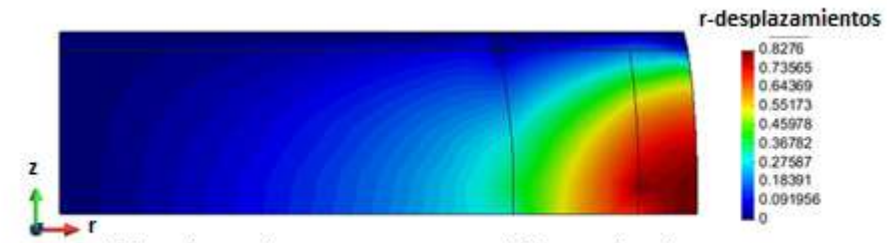
$$\mathbf{M} = \frac{1}{D} (\mathbf{G}\mathbf{Q} - \mathbf{H}\mathbf{C}) \quad (5.3.8)$$

5.4 Resultados numéricos y discusión

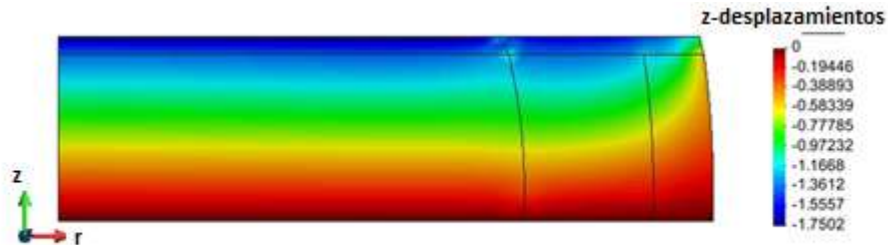
Disco sano

Como se mencionó anteriormente, el análisis fue dividido en dos períodos: uno de 16 horas de actividad diaria donde el disco pierde altura por la compresión el cual fue continuamente calculado y un período de 8 horas de reingreso del fluido donde la altura del disco es recuperada, como muestra la Figura 5.4.1.

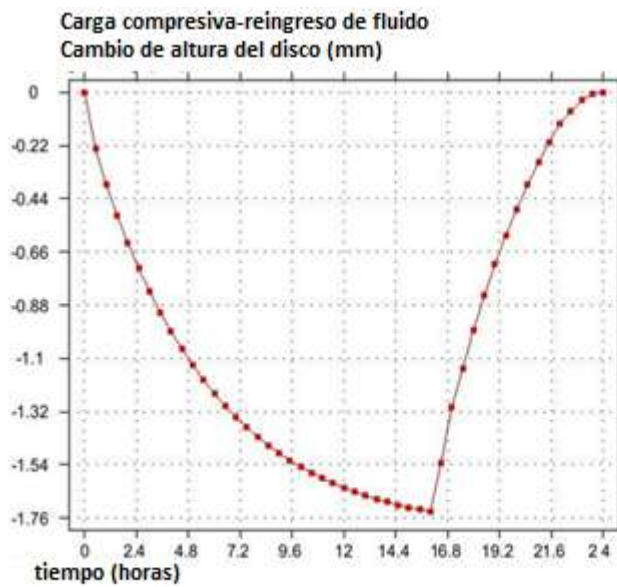
Mokhbi-Soukane *et al.* (2007) sugieren que una pobre entrega de nutrientes es un potencial mecanismo para la degradación del disco. Durante la aplicación de la carga, la geometría cambia, lo que contribuye con el transporte de sustancias dentro del disco intervertebral. Sin embargo, el proceso de compresión también reduce la difusión del soluto.



a) Desplazamientos en r para $t=16$ horas (mm)



b) Desplazamientos en z para $t=16$ horas (mm)



c) Desplazamientos medidos en la parte superior del disco durante el ciclo de carga

Figura 5.4.1. a) y b) Desplazamientos (r , z) en $t=16$ horas, dentro del disco intervertebral (González *et al.*, 2013). c) Cambio de altura del disco durante un ciclo diurno de carga (medido desde la parte superior del disco).

La pérdida de altura del disco durante el ciclo de carga de 16 horas fue recuperada durante el período de descanso, debido a que el reingreso del fluido durante el período sin carga es más rápido que la pérdida de fluido bajo la carga compresiva (Figura 5.4.1.c). El cambio de geometría durante el período de carga tiene implícito dos fenómenos opuestos entre sí. La disminución de altura del disco contribuye al transporte de sustancias dentro del disco. Sin embargo, esta disminución también implica la pérdida de fluido, lo que dificulta la difusión (Ferguson *et al.*, 2004). Estos fenómenos sugieren un delicado equilibrio en el proceso de entrega de nutrientes dentro del disco, donde un suministro deficiente de nutrientes es un posible mecanismo para la degeneración del mismo (Ishihara & Urban, 1999).

Las concentraciones de oxígeno y glucosa decrecen con la distancia desde la fuente hasta el núcleo mientras que la concentración de ácido láctico son más altas en la interface entre el núcleo y el anillo, como se muestra en las Figuras 5.4.2 y 5.4.3. La máxima concentración de ácido láctico (5.475 nmol/mm^3) y la más baja concentración de oxígeno (0.76 kPa) fue encontrada en la misma región, mientras que la concentración de glucosa (0.56 nmol/mm^3) fue alcanzada en el núcleo (Figura 5.4.3). La variación de pH fue de 7.05 a 7.5 a través del disco. Las diferencias entre el modelo basado en MEC-MRD y MEF (Mokhbi-Soukane *et al.*, 2007), están principalmente en el cálculo de la permeabilidad, ya que depende de la deformación, que para el caso del MEC se calculó sobre cada región y en el caso del MEF se obtuvo dentro de cada elemento finito.

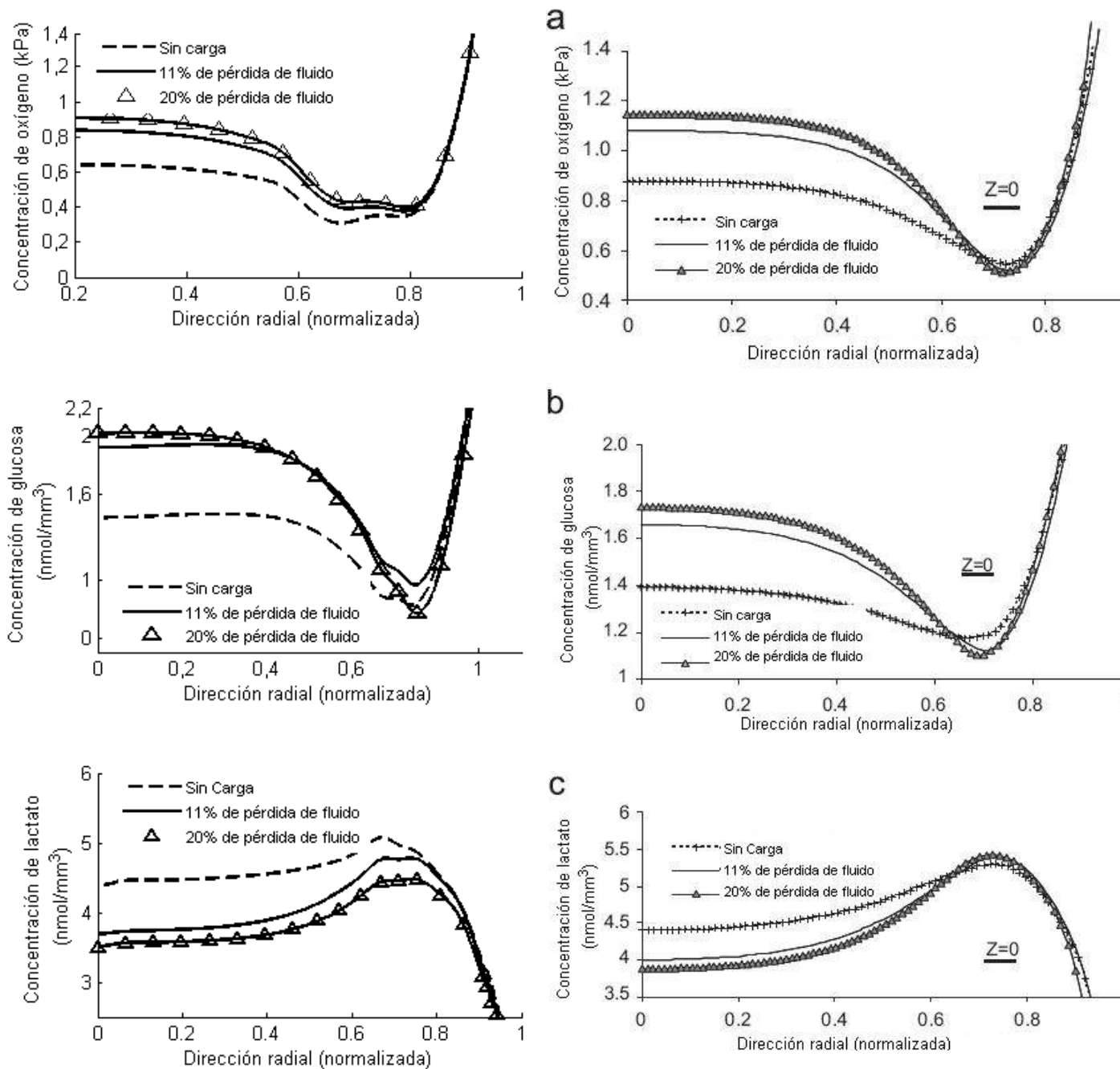
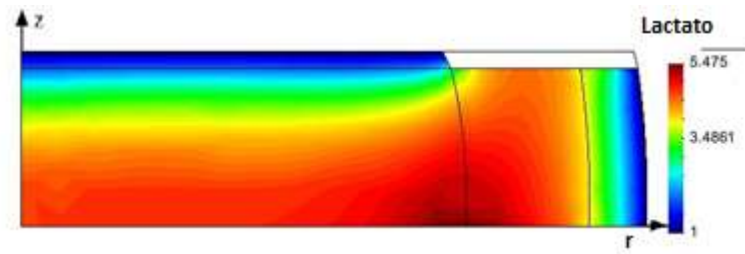
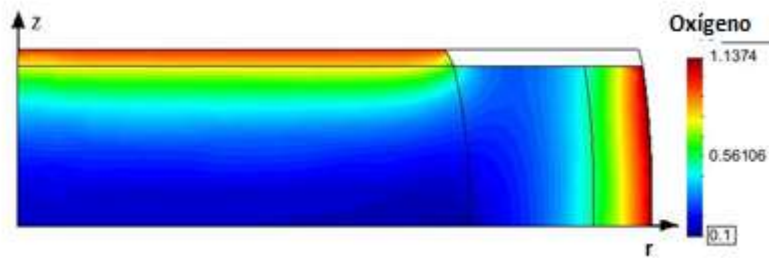


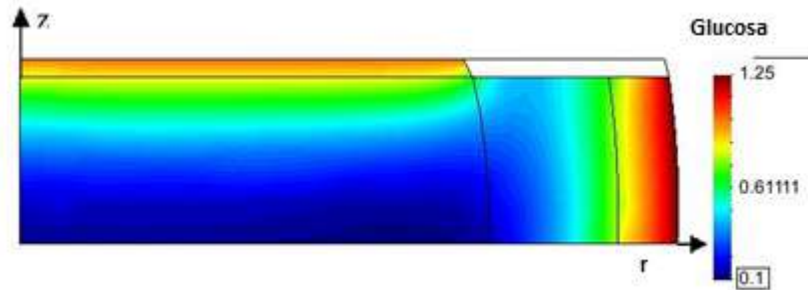
Figura 5.4.2. Comparación del cambio de concentración de soluto en dirección radial para la sección transversal $Z=0$. a) concentración de oxígeno, b) concentración de glucosa, c) concentración de ácido láctico. Lado izquierdo: resultados obtenidos por el modelo MEC-MRD (González *et al.*, 2013). Lado derecho: resultados del modelo de elementos finitos presentado por Mokhbi-Soukane *et al.* (2007)



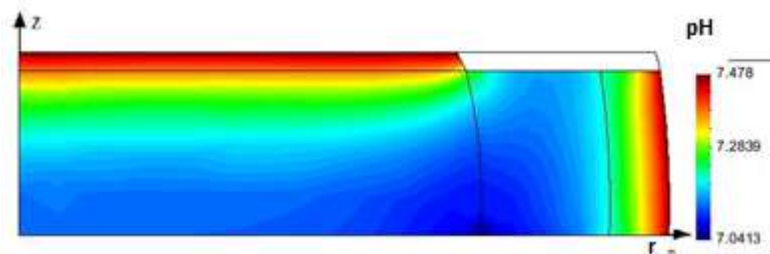
a) Concentración de lactato.



b) Concentración de oxígeno.



c) Concentración de glucosa.



d) pH

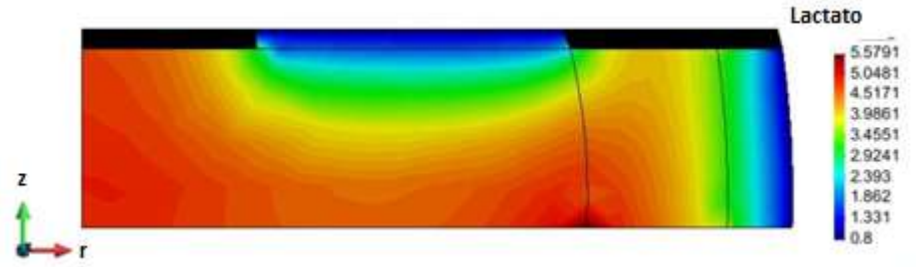
Figura 5.4.3. Concentración de lactato [nmol/mm^2], oxígeno [kPa], glucosa [nmol/mm^2] y pH para $t = 16h$ (González *et al.*, 2013).

5.5 Disco con fractura de la placa cartilaginosa

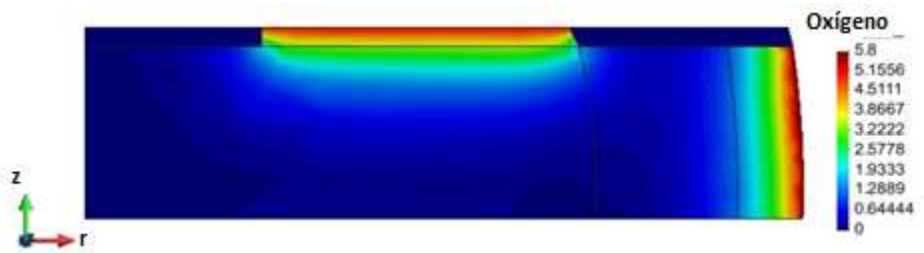
Algunas fracturas de la placa cartilaginosa (nodos de Schmorl) producen alteraciones en el transporte de nutrientes (Ishihara & Urban, 1999; Mokhbi-Soukane *et al.*, 2007). Las células producen grandes cantidades de ácido láctico en el centro del disco debido a las bajas concentraciones de oxígeno y glucosa presentes en esa región. La Figura 5.4.4 muestra un disco intervertebral con un nodo de Schmorl en la región central de la placa cartilaginosa ubicada sobre el núcleo. Las máximas concentraciones de lactato fueron encontradas en la interfase entre el núcleo y el anillo interior (5.7 nmol/mm^3) y en el centro del disco (4.8057 nmol/mm^3). En estos puntos también se encuentran las mínimas concentraciones de oxígeno y glucosa: en el centro se obtuvo 0.09 kPa de oxígeno y 1.2538 nmol/mm^3 de glucosa, mientras que en la interface núcleo-anillo se encontró 0.0011 kPa de oxígeno y $0.74217 \text{ nmol/mm}^3$ de glucosa. El envejecimiento y los estímulos mecánicos ambientales afectan la estructura del disco y sus propiedades, por lo tanto, el transporte de nutrientes. Los nutrientes son entregados a las células del disco principalmente por difusión ya que el disco es en gran medida avascular. Las células del disco usan el oxígeno y la glucosa y producen ácido láctico, esto conduce a cambios en las concentraciones que dependen del balance entre la tasa de transporte y actividad celular.

En concordancia con el modelo basado en MEF presentado por Mokhbi-Soukane *et al.* (2007), las concentraciones de oxígeno y glucosa decrecen con la distancia desde la fuente en el CEP y OA, mientras la concentración de lactato incrementa hasta alcanzar un máximo cercano a la interfase núcleo-anillo. El máximo valor calculado fue 5.475 nmol/mm^3 , mientras que los valores mínimos de oxígeno y glucosa fueron 0.76 kPa y 0.56 nmol/mm^3 y el valor mínimo para el pH fue 7.05. La simulación de la alteración de la placa de cartílago por el nodo de Schmorl muestran que las concentraciones de oxígeno y glucosa caen a niveles muy bajos en el centro del disco, debajo del área alterada (Figura 5.4.4) mientras que las contracciones de lactato aumentan. Esto confirma que una pobre entrega de nutrientes es un mecanismo potencial de degeneración del disco (Ishihara & Urban, 1999; Ferguson *et al.*,

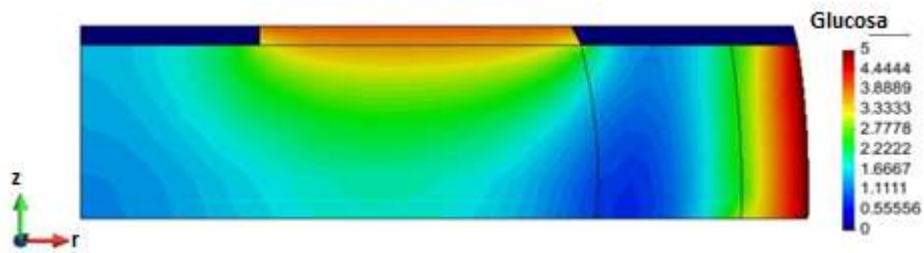
2004). Los valores calculados están dentro de los rangos fisiológicos y concuerdan con el modelo de Mokhbi-Sukane y con trabajos previos.



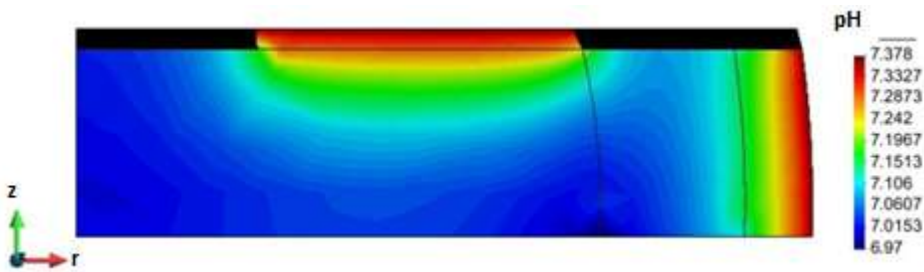
a) Concentración de lactato



b) Concentración de oxígeno



c) Concentración de glucosa



d) pH

Figura 5.4.4. Concentraciones calculadas de lactato [nmol/mm^2], oxígeno [kPa], glucosa [nmol/mm^2] y pH para $t = 16h$ en el disco con el nodo de Schmorl en la región central de la placa de cartílago sobre el núcleo (González *et al.*, 2013)

La implementación de este modelo puede extenderse al estudio de otros procesos biológicos como la descripción el comportamiento celular en caso de curación de fracturas y/o remodelado óseo, los cuales están presentes el fenómeno de difusión y la influencia de estímulo mecánico sobre la difusión y viceversa.

La aplicación de cargas sobre la zona de estudio influye en la cantidad de células de diferentes tipos, por ende en la formación de tejidos. Además la aparición o absorción de tejido influye en la manera por la cual la zona de estudio soporta las cargas mecánicas. Dicho modelo puede emplearse para predecir comportamiento de algunas patologías por ejemplo fracturas óseas o disrupciones del disco intervertebral y servir de herramienta para la toma de decisiones con respecto al tratamiento de dichas patologías.

5.6 Efecto de las cargas dinámicas

En esta sección se consideran distintos tipos de condiciones mecánicas referidas al disco que fue sometido a carga estática (véase la Figura 5.3.1.a). En caso de la carga dinámica se considera de tipo sinusoidal como se observa en la Figura 5.5.1

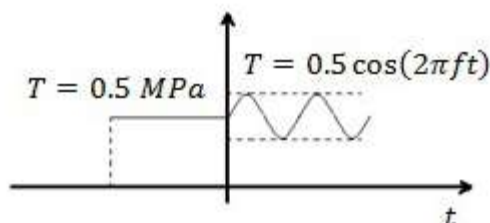


Figura 5.5.1. Configuración de la carga estática (zona izquierda) y carga dinámica (zona derecha) sobre el modelo (Huang & Gu, 2008).

5.5.1 Modelo metabólico con ausencia de glucosa

Con el objetivo de validar este modelo se presenta una comparación con el trabajo de Huang & Gu (2008) en el cual sólo se consideran las variables de estudio el oxígeno y ácido láctico, es decir la contribución de la glucosa en la producción de ácido láctico por glicolisis

no es estudiada. Las siguientes variables adimensionales son introducidas para facilitar la formulación

$$\hat{r} = \frac{r}{h_0}, \hat{z} = \frac{z}{h_0}, \hat{c}_{O_2} = \frac{c_{O_2}}{c_{O_2}^*}, \hat{c}_{lac} = \frac{c_{lac}}{c_{lac}^*} \quad (5.5.1)$$

donde r y z hacen referencia a los ejes coordenados, h_0 es la altura del disco desde el centro del nucleo, $\hat{c}_{O_2}^*$ y $\hat{c}_{lac}^*$ están referidas a las concentraciones de oxígeno y ácido láctico respectivamente sobre la placa de cartílago y que establecen las condiciones de contorno de esa área.

En el modelo de Huang & Gu, 2008 se considera la región del anillo fibroso como un solo tejido y no se considera el *endplate*, por lo cual dicho modelo sólo está representado por dos regiones, a diferencia del que se presentó en la sección anterior, que considera que el anillo fibroso está constituido por dos tipos de tejido con patrones de difusión diferentes (González *et al.*, 2013; Ferguson *et al.*, 2004; Mokhbi-Sukane *et al.*, 2007).

Se puede observar en la Figura 5.5.2 que el presente modelo mantiene rangos similares en los valores de las concentraciones que los obtenidos en la simulación de Huang & Gu (2008). Sin embargo, se encuentran algunas diferencias en los resultados con respecto a las concentraciones en el eje $\hat{z}$, lo cual puede ser atribuible a la inclusión de la placa de cartílago, lo que representa una diferencia con el modelo de Huang & Gu (2008).

5.5.2 Modelo metabólico con glicólisis

En esta parte se ha incorporado en el modelo la concentración de glucosa y su partición en la nutrición de las células presentes en el disco. En general, los valores de oxígeno y glucosa son menores y la concentración de lactato aumentó con la distancia, medida desde la frontera (fuente de nutrientes) al centro del disco (Figuras 5.5.3 y 5.5.4).

Se puede observar en las Figuras 5.5.2 y 5.5.4 que la diferencia entre nuestro modelo y el modelo propuesto por Huang & Gu radica en la inclusión del proceso de glicólisis, el cual tiene una contribución importante en la producción de ácido láctico por parte de las células.

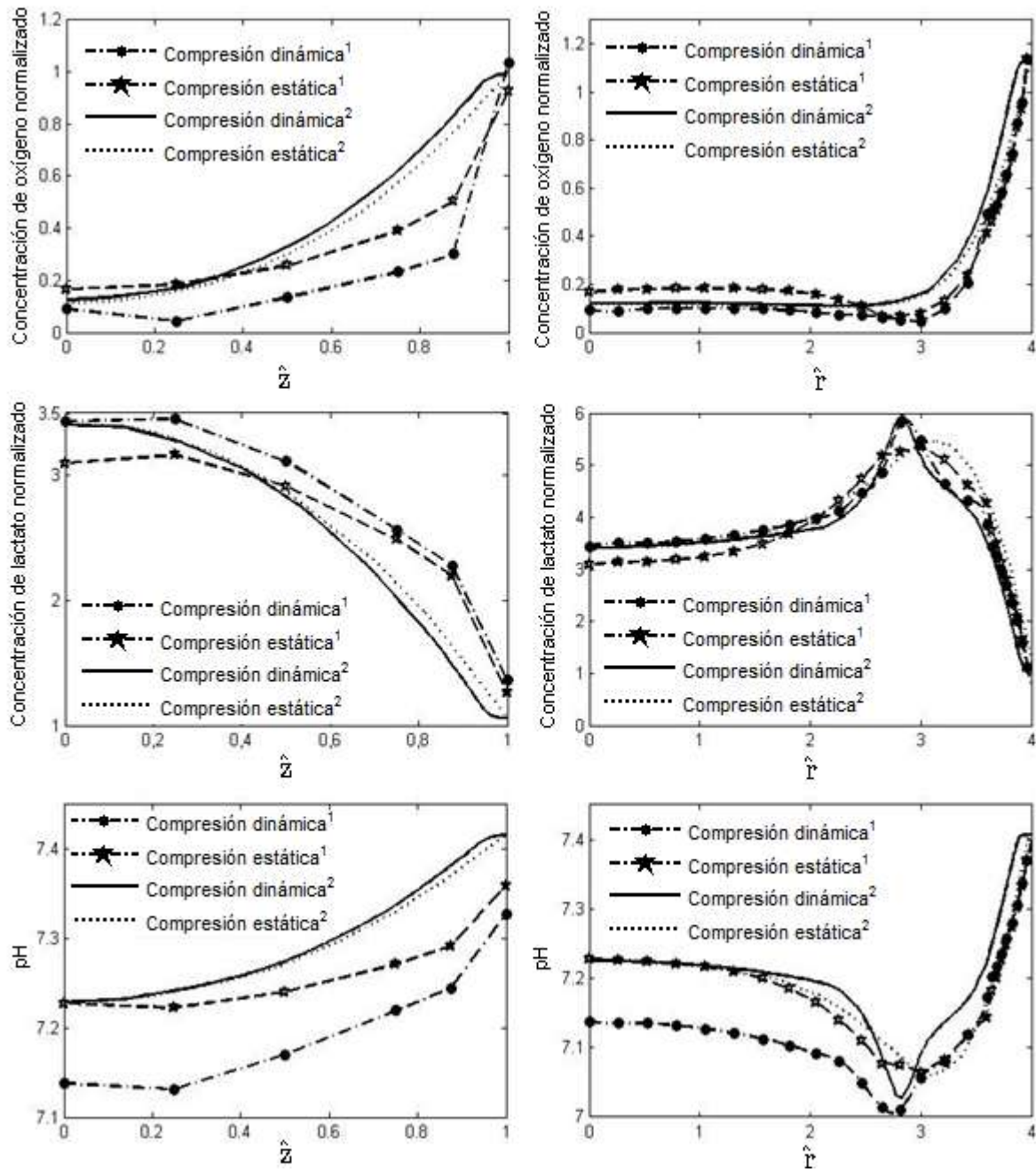


Figura 5.5.2. Comparación del presente modelo¹ con el modelo de Huang & Gu (2008)².
(en nuestro modelo no se incluye la contribución de la concentración de la glucosa)

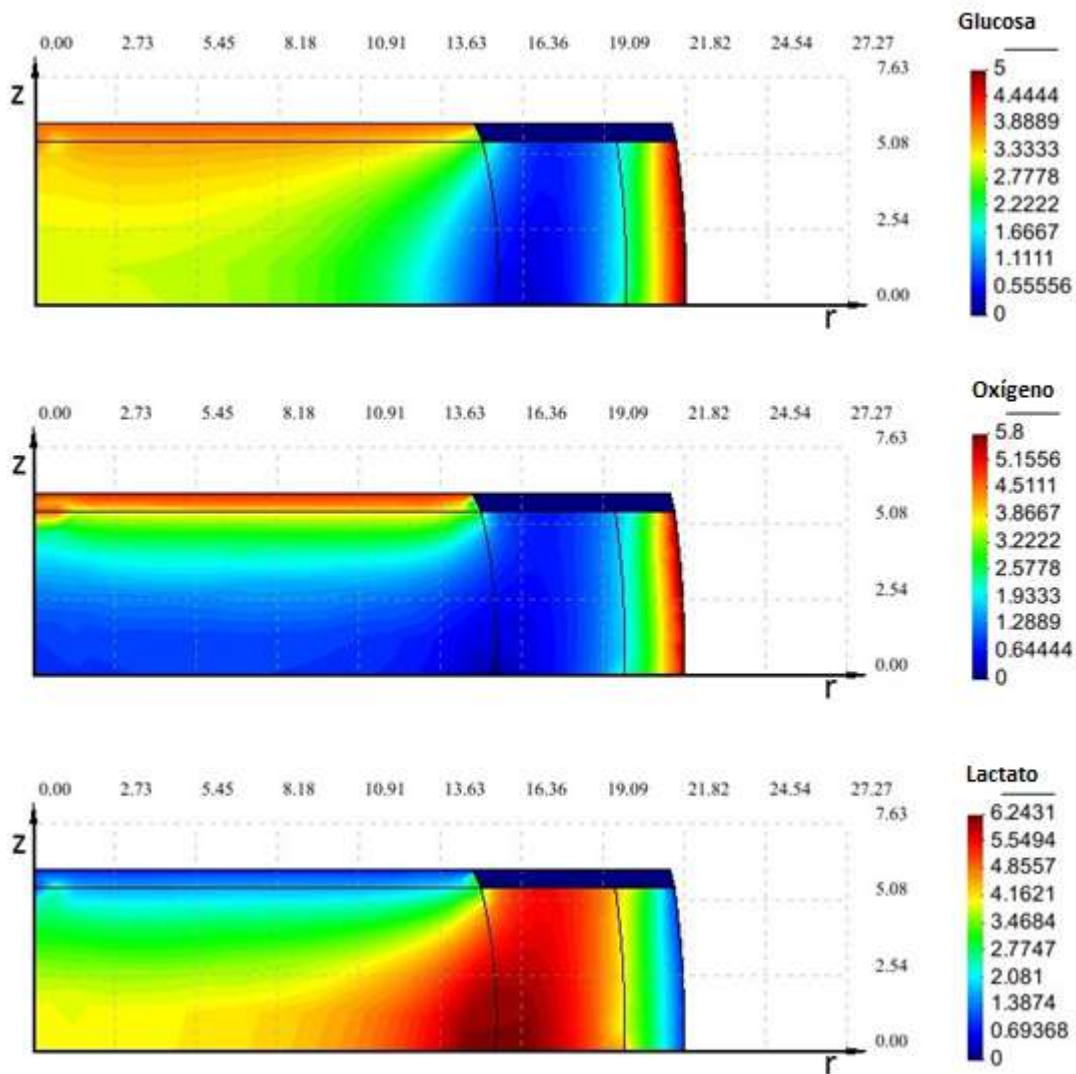


Figura 5.5.3. Concentración de glucosa [nmol/mm²], oxígeno [kPa] y ácido láctico [nmol/mm²] para la carga máxima a compresión sobre el eje z.

Como fue sugerido previamente por Mokhbi-Sukane et al. (2007), un suministro pobre en nutrientes es un mecanismo potencial para la degeneración del disco. Durante la aplicación de la carga, el cambio de la geometría conduce al transporte de sustancias dentro del disco intervertebral. Sin embargo, el proceso de compresión también reduce la difusión de solutos, como ilustra la Figura 5.5.4.

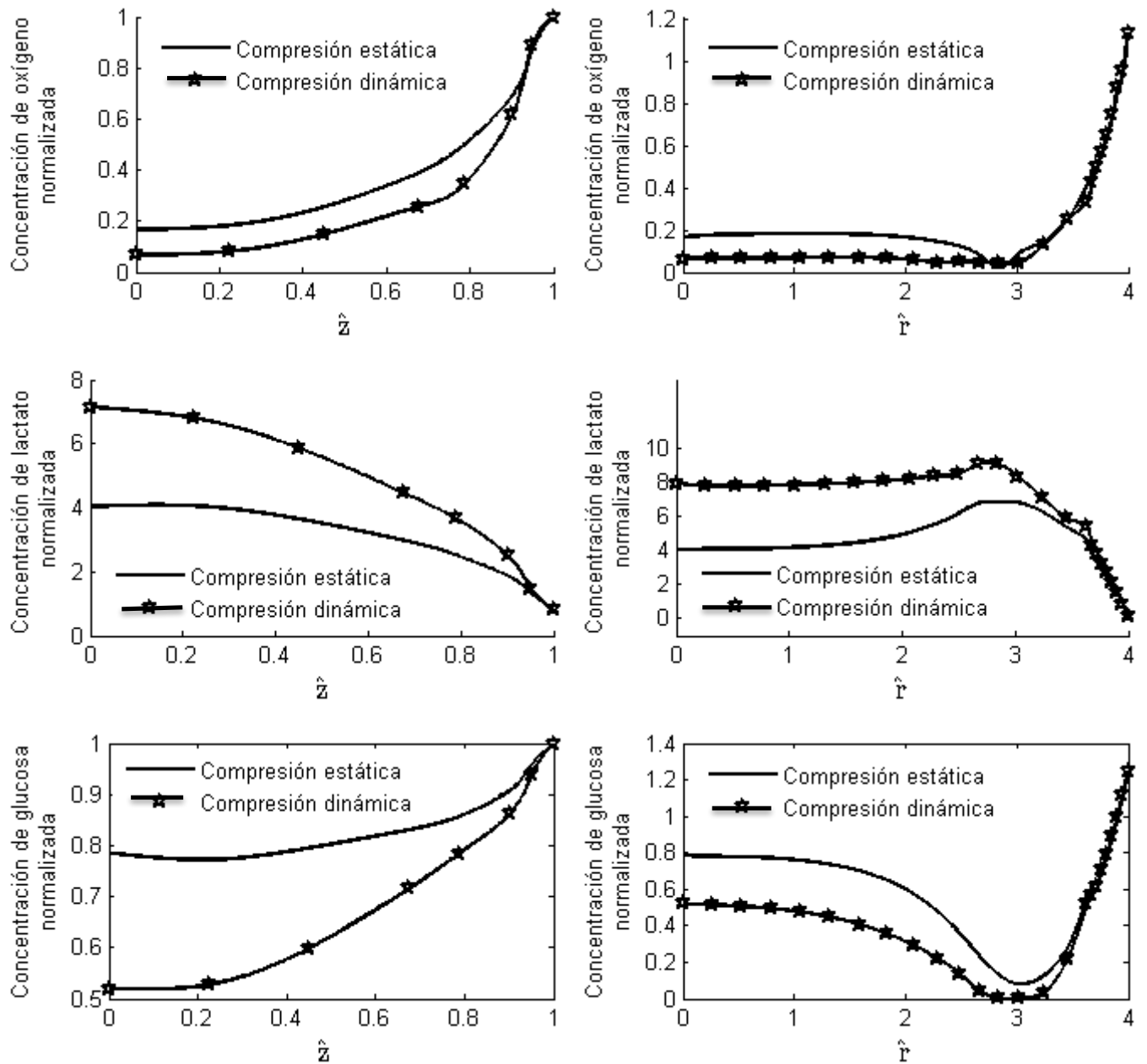


Figura 5.5.4. Comparación de las distribuciones de glucosa, oxígeno y ácido láctico a lo largo de los radios $z = 0$ y $r = 0$. El disco fue sometido a una carga sinusoidal dinámica con una frecuencia de $f=0.1$ Hz y 200 ciclos de carga.

La máxima concentración de lactato se encontró en la cercanía de la interfaz del anillo-núcleo interno para los estados de carga estática y dinámica. Por otro lado, en el caso de carga estática se observó un aumento de las concentraciones de oxígeno y glucosa, además

de una disminución en la concentración de lactato (Figura 5.5.4), al ser comparadas con el estado de carga estática. El cambio gradual de la altura del disco indica que las variaciones en la geometría del disco durante un período de carga estática facilitan el transporte de sustancias dentro del mismo.

La carga dinámica aumentó el consumo y la producción de lactato en oxígeno de la glucosa, lo que condujo a pobres concentraciones de oxígeno-glucosa en el núcleo, lo que indica que este tipo de cargas pueden convertirse en un mecanismo para la degeneración del disco.

El envejecimiento y el ambiente (estímulos mecánicos) afectan a la estructura y propiedades del disco y, por lo tanto, el transporte de nutrientes. Los nutrientes se suministran a las células del disco principalmente por difusión, ya que el disco se considera no vascularizado. Las células del disco utilizan el oxígeno y la glucosa y producen ácido láctico, lo que conduce a cambios en las concentraciones que dependen del equilibrio entre las tasas de transporte de nutrientes y la actividad celular.

Las tasas metabólicas de oxígeno y lactato de las células del disco intervertebral se incrementan con el aumento de la concentración de oxígeno o el pH (Huang & Gu, 2008; Bibby *et al.*, 2005) y el pH es inversamente dependiente de la concentración de lactato, como se observa en la Figura 5.3.2. Por lo tanto, un aumento en la concentración de oxígeno y/o una disminución en la concentración de lactato en el disco, inducida por la carga dinámica, aumentaría el consumo de oxígeno y la producción de lactato de células (véanse las Figuras 5.3.2 y 5.5.4). La glucosa se transforma en lactato por glucólisis, un proceso principal que suministra energía para las células del disco intervertebral (Bibby *et al.*, 2005).

En este estudio, un modelo poroelástico difusivo acoplado se llevó a cabo utilizando el método de los elementos de contorno, para evaluar la influencia de la carga sobre la altura del disco y el transporte de los nutrientes en el disco intervertebral.

En general, las concentraciones de oxígeno y glucosa disminuyeron con la distancia de la fuente en el CEP y OA, mientras que la concentración de lactato aumentó alcanzando un máximo cerca de la interfaz núcleo-anillo.

Este modelo incorpora el estudio de diferentes concentraciones de soluto en cada instante de tiempo, así como la influencia de los cambios en la forma del disco, causada por

la carga estática o dinámica, sobre de las concentraciones de oxígeno, lactato y glucosa que conduce a una mejor simulación del complejo proceso de entrega de nutrientes dentro del disco intervertebral. Este trabajo representa una contribución importante en la aplicación del método de los elementos de contorno para los problemas biológicos.

A white clipboard icon is centered at the top of the page. It consists of a white rectangular clip at the top, with a white line extending downwards to form a rectangular frame with rounded corners.

CAPÍTULO 6

OTRAS APLICACIONES DEL MEC EN BIOMECÁNICA

CAPÍTULO 6. OTRAS APLICACIONES DEL MEC EN BIOMECÁNICA

6.1 Introducción

Existen diversos modelos matemáticos para simular varios fenómenos biológicos como los aplicados al estudio de tejido óseo (Wessel *et al.*, 2004; Gómez *et al.*, 2005), la influencia térmica sobre los tejidos (Lu *et al.*, 1998), remodelación ósea (Martínez *et al.*, 2006) y fenómeno de transporte de masa en el disco intervertebral (Motaghinasab *et al.*, 2012; Ferguson *et al.*, 2004), los cuales despiertan un gran interés en la comunidad de métodos numéricos.

En este capítulo se describen tres aplicaciones del método de los elementos de contorno en la biomecánica computacional a saber: remodelación ósea externa, consolidación ósea y efecto de la piezoelectricidad en la curación de fracturas óseas. Se asume que la historia de cargas y la energía de deformación son las magnitudes que gobiernan el proceso de remodelado.

6.2 Remodelado óseo externo

Hasta ahora, el método de los elementos finitos ha sido el más utilizado como técnica numérica en modelos computacionales de remodelación ósea. Este método ha sido muy exitoso para simular alteraciones en la densidad ósea en el tiempo, producto de factores biológicos y mecánicos. Sin embargo, cuando los factores externos (principalmente mecánicos) que afectan a la masa ósea son capaces de producir cambios considerables en su geometría, este método resulta poco atractivo pues esta modificación geométrica lleva a una distorsión en la malla (formada por nodos y elementos con conectividades predefinidas),

haciendo necesario el remallado (definición de un nuevo grupo de nodos y elementos con diferentes conectividades).

Uno de los modelos existentes en este campo, usando el método de Elementos de Contorno, es el propuesto por Martínez *et al.* (2006). En él se utiliza la densidad de energía de deformación y la variable de daño como estímulo mecánico para determinar los cambios de forma, producto del proceso de adaptación ósea. Los autores asumen que el nivel de daño y la energía de deformación calculados cerca del periósteo y endósteo controlan la respuesta de este proceso. La teoría de daño permite tomar en cuenta dentro del modelo el historial de cargas y la acumulación de daño en la microestructura ósea.

En cada iteración, el método de los elementos de contorno proporciona el estado de tensiones y deformaciones en cada nodo de la malla, lo que permite calcular el estímulo mecánico. El contorno se adapta entonces indirectamente, en función del tiempo y del estado mecánico predominante. En el modelo se implementó una técnica de suavizado de superficies para prevenir variaciones bruscas en el contorno. El modelo fue validado comparando los resultados numéricos con mediciones experimentales reportadas por otros autores como Rubin & Lanyon (1984).

Este modelo limitará su aplicación a la simulación de la remodelación ósea tridimensional en diáfisis de huesos largos sometidos a alteraciones mecánicas. En esta zona predomina el hueso cortical, lo que permite asumir condiciones de homogeneidad pues la densidad de la sección transversal es prácticamente constante y el material está sometido a flexo-compresión principalmente. El modelo teórico para simular el proceso de remodelado fue basado inicialmente en un modelo propuesto por Doblaré *et al.* (2004) que toma en cuenta la evolución del daño creado sobre el tejido óseo.

6.2.1 Formulación y algoritmos

En el modelo teórico se propone una función de estímulo compuesta que controle la activación de las células osteoprogenitoras y de los osteoblastos (las cuales se encuentran en las superficies de los huesos) dependiendo no sólo de la deformación (a través de la densidad

de energía de deformación), sino también de una variable de daño que tome en cuenta la historia de cargas y la acumulación de daño a nivel microestructural.

La función compuesta de estímulo $S(\xi, d)$ se define como (Doblaré *et al.*, 2004)

$$S(\xi, d) = \frac{\xi}{\xi - c} (1 - d)^k \quad (6.2.1)$$

$$\begin{aligned} S(0, d) &= 0 \\ S(\xi, 1) &= 0 \\ \lim_{\xi \rightarrow 0} S(\xi, 0) &= 1 \end{aligned} \quad (6.2.2)$$

donde c y k son parámetros del modelo y la función ξ , que depende principalmente de la variable de deformación (Carter y Beaupré, 2001), se expresa como

$$\xi = \left(\sum N_i \bar{\varepsilon}_i^m \right)^{1/m} \quad (6.2.3)$$

siendo N_i el número de ciclos por cada caso de cargas, m una constante empírica utilizada para ponderar las contribuciones entre las deformaciones y el número de ciclos de carga. $\bar{\varepsilon}_i$ es la energía cíclica de deformación efectiva y es un escalar expresado en términos de la densidad de energía de deformación U , de forma que

$$\bar{\varepsilon}_i = \sqrt{\frac{2U}{E}} \quad (6.2.4)$$

$$U = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} \quad (6.2.5)$$

donde σ_{ij} y ε_{ij} son los tensores de tensión y deformación, respectivamente.

La variable daño, introducida en la ecuación (6.2.1), afecta directamente a la función estímulo. Doblaré *et al.* (2004) determinaron una ley de evolución del daño consistente con los datos experimentales obtenidos por Pattin *et al.* (1996), quienes realizaron estudios *in vitro* de muestras de tejido óseo sometidos a cargas cíclicas. La función $S(\xi, d)$ se introduce

en la curva trilineal para hallar la velocidad de crecimiento de $U (\dot{U}(S))$ mostrada en la Figura 6.2.1

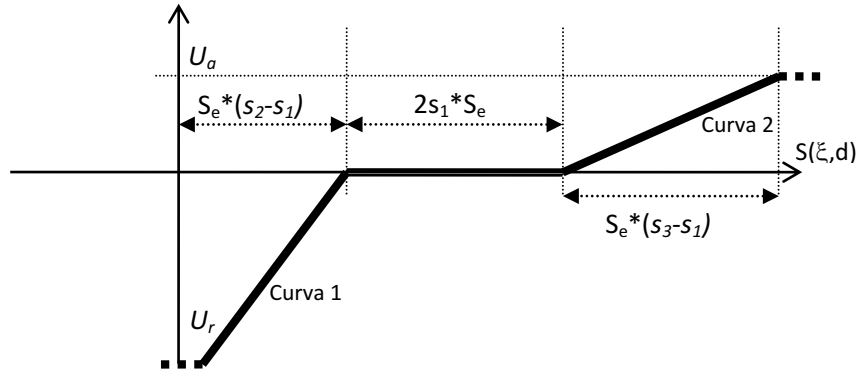


Figura 6.2.1. Curva trilineal de función compuesta para la adaptación ósea, donde U es la tasa de crecimiento (o decrecimiento) óseo y S es el estímulo mecánico sobre el tejido óseo

A continuación se indican someramente los pasos del algoritmo desarrollado para evaluar la remodelación ósea en el tiempo:

- Definición de la geometría a través de la digitalización de coordenadas de la superficie, tanto de tomografías como de micro tomografías axiales computarizadas o cualquier otra técnica de obtención de datos. Las coordenadas (x_1, x_2, x_3) de cada punto introducido corresponderá a un nodo de la malla.
- Introducción de datos referentes a propiedades mecánicas del material (E, G, ν) , parámetros de remodelado $(S_e, s_1, s_2, s_3, U_r, U_a)$ y otros parámetros a utilizarse en el cálculo de la función de estímulo, como son el período de tiempo a estudiar, paso de tiempo, función de carga (constante o periódica)
- Definición de los grafos de control que definirán las superficies en estudio.
- Cálculo estructural por el método de los elementos de contorno para hallar tensiones en el contorno.

- Cálculo de la función compuesta S_e , sobre cada punto del contorno. Cálculos matriciales que involucran el tensor de deformaciones.

- Evaluación de la función estímulo en la curva trilineal de remodelado, donde

$$\dot{U} = \begin{cases} \text{curva 1} & \text{si } 0 \leq S \leq (s_2 - s_1)S_e \\ 0 & \text{si } (s_2 - s_1)S_e < S < (s_3 - s_1)S_e \\ \text{curva 2} & \text{si } (s_3 - s_1)S_e < S \end{cases} \quad (6.2.6)$$

- Obtención de las nuevas coordenadas de los nodos del contorno
- Establecimiento de una tolerancia en la variación global de las coordenadas, que permita garantizar la estabilidad de la solución
- Cálculo de la nueva superficie suavizada a través de funciones β -spline.
- Recalculo de coordenadas en los puntos del contorno. El proceso es iterativo y se realiza hasta encontrar convergencia.

6.2.2 Representación con superficies β -spline

Las superficies β -spline son herramientas de diseño geométrico que se originan a partir de la representación de superficies b-spline. Este concepto define parámetros adicionales como la curvatura (β_1) y la tensión (β_2) para cada superficie del parche. El objeto de estos parámetros es cambiar la continuidad paramétrica entre cada parche manteniendo la continuidad geométrica. Las superficies β -spline son definidas por un grupo de vértices de control, en el espacio tridimensional, los que se organizan en un grafo de topología rectangular. Este conjunto de vértices de control se denomina grafo de control y se denota por $\{V, E\}$ (véase la Figura 6.6.2). Sus vértices forman el conjunto

$$V = \{V_{ij} | i = 0, 1, \dots, m; j = 0, 1, \dots, n\} \quad (6.2.7)$$

y cuyas caras se definen como

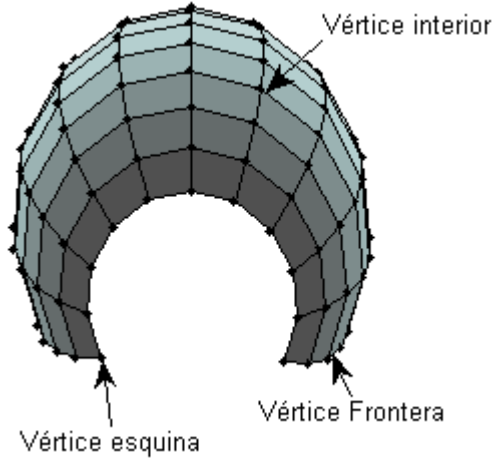


Figura 6.2.2. Esquema de un grafo de control, con vértices interiores, vértices esquina y vértices de contorno

$$Q_{ij}(u, v) = \sum_{r=-2}^1 [b_r(\beta_1, \beta_2; u) \sum_{s=-2}^1 b_s(\beta_1, \beta_2; v)] \text{ para } 0 \leq u < 1 \text{ y } 0 \leq v < 1 \quad (6.2.8)$$

Cada función de la base (b_r y b_s) es una función de β_1 y β_2 , mientras que las variables adimensionales u y v son polinomios cúbicos, cuyos coeficientes polinómicos son a su vez funciones de β_1 y β_2

$$b_r(\beta_1, \beta_2; u) = \sum_{g=0}^3 C_{gr}(\beta_1, \beta_2) u^g \quad 0 \leq u < 1 \quad r = -2, -1, 0, 1 \quad (6.2.9)$$

$$b_s(\beta_1, \beta_2; v) = \sum_{g=0}^3 C_{gs}(\beta_1, \beta_2) v^g \quad 0 \leq v < 1 \quad s = -2, -1, 0, 1$$

donde C_{gr} y C_{gs} son los coeficientes de la función. Cada vértice de control es asociado con una función base, por lo que sólo influye en una porción local de la superficie y no afecta a la superficie restante. El movimiento de un vértice de control modifica sólo una porción local sin producir el efecto lateral de perturbar a las otras partes de la superficie.

Para definir una superficie completamente se necesitan definir las condiciones de contorno. En este caso, la técnica de vértices ficticios es la más utilizada. Para ello, se crean los vértices ficticios alrededor del contorno del grafo de control original, generando parches adicionales. Estos parches son de tamaño definido y la superficie completa está formada por

$m \times n$ parches. El lector estudioso e interesado en los detalles la formulación β -spline puede referirse a Barsky (1988) y Bartels *et al.* (1987).

6.2.3 Resultados numéricos

Se presenta un ejemplo numérico que analiza el remodelado óseo del radio de una oveja. Una de las piernas de la oveja fue operada, extirpándose el peroné. La Figura 6.2.3.a ilustra la anatomía del radio de la oveja. La Figura 6.2.3.b ilustra la sección transversal de la pierna antes de ser operada. La Figura 6.2.3.c muestra la misma pierna pero nueve meses después de retirar el peroné. Se observa la variación geométrica de la sección transversal de la diáfisis del radio, representada por un crecimiento óseo en la zona izquierda.

La Figura 6.2.4 ilustra el modelo tridimensional de elementos de contorno de los huesos analizados, indicándose la malla de elementos utilizada y las cargas que se aplicaron.

A su vez, la Figura 6.2.5 contiene un corte del modelo para mostrar la diáfisis del radio de la oveja y los resultados del análisis en la iteración 1.

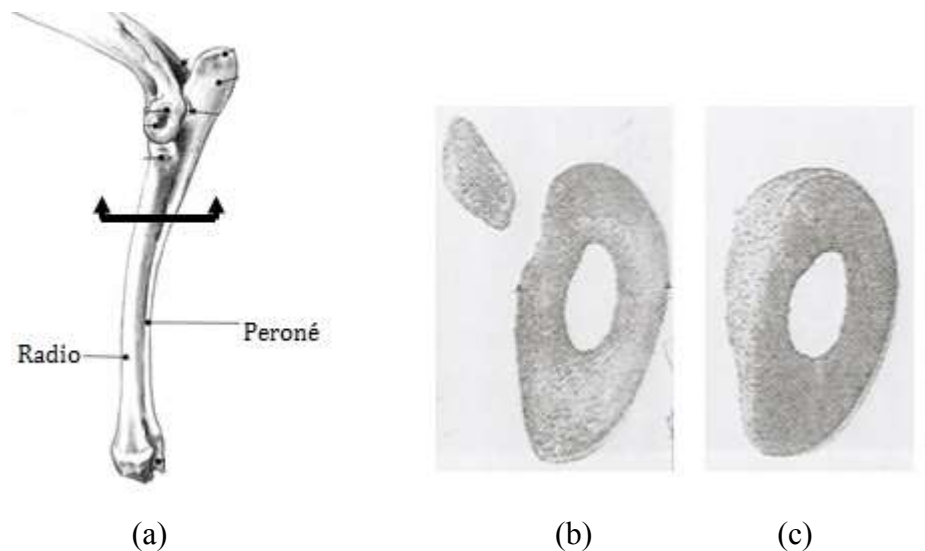
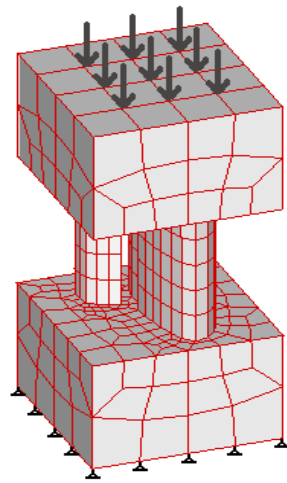
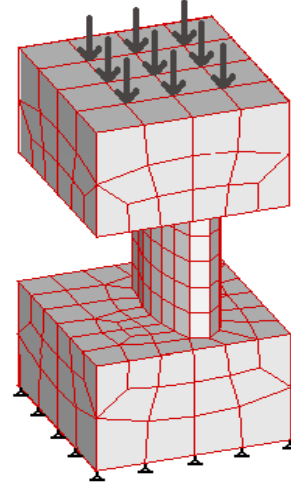


Figura 6.2.3. a) Anatomía del radio de una oveja sometida a un estado de flexo-compresión (Rubin & Lanyon, 1984); b) sección transversal del radio y peroné antes de la extirpación del peroné y c) sección transversal del radio nueve meses después de la extirpación (Martínez, 2004; Martínez *et al.*, 2006)

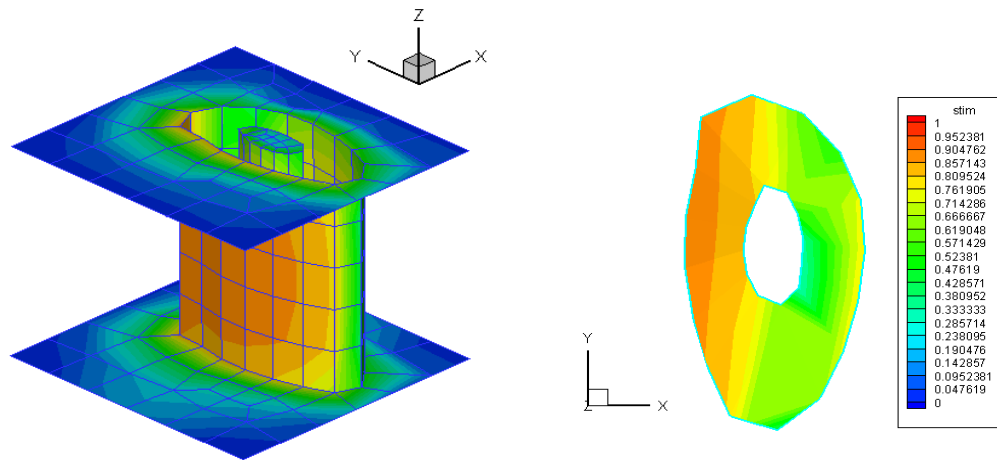


(A)



(B)

Figura 6.2.4. Modelo 3D de elementos de contorno de 326 nodos y 240 elementos. A) con peroné. B) sin peroné (Martínez *et al.*, 2006)



(A)

(B)

Figura 6.2.5. A) Corte transversal en modelo de elementos de contorno. B) distribución de las tensiones en el radio durante la primera iteración. (Martínez *et al.*, 2006)

Finalmente, la Figura 6.2.6 reporta la variación del estímulo, considerando el daño mecánico y la evolución del contorno externo del radio, para las iteraciones 32, 42 y 52.

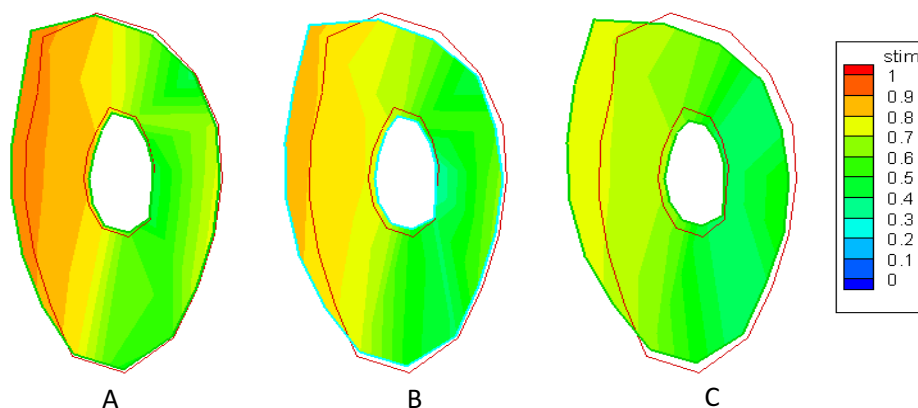


Figura 6.2.6. Evolución en la adaptación ósea y variación del estímulo con daño.

A) evolución del contorno en 32 iteraciones; B) evolución del contorno en la iteración 42; C) forma final del contorno en la iteración 52 (Martínez *et al.*, 2006)

La extirpación del peroné de la pierna de la oveja provoca que el radio deba soportar la carga total que antes era transmitida por el radio y el peroné. Como consecuencia de esto, aparece un crecimiento progresivo de la masa ósea en la zona izquierda de la sección transversal, que puede notarse claramente en la Figura 6.2.6.

Esta investigación propuso modelos de remodelación ósea externa basados en el método de los elementos de contorno. El modelo de remodelación ósea externa tridimensional propuesto ha resultado ser una poderosa herramienta de simulación numérica,

específicamente cuando los factores externos (principalmente mecánicos) que afectan al hueso, son capaces de producir cambios considerables en su geometría.

La necesidad de modificar la geometría en el tiempo (remodelación externa) hace mucho más atractivo el uso de elementos de contorno. Por otro lado, la inclusión de superficies β -spline en los modelos tridimensionales es necesaria para suavizar en cada iteración las superficies modificadas y poder obtener la convergencia.

Además, la introducción de la variable de daño en la función de estímulo que controla el proceso de remodelación ósea, ha demostrado ser de gran utilidad, debido a que toma en cuenta la historia de cargas y la acumulación de daño a nivel microestructural, los cuales originan la formación y crecimiento de grietas en las superficies óseas. Los resultados obtenidos considerando esta variable se asemejan mucho más a los valores experimentales.

6.3 Consolidación ósea

Cuando ocurre una fractura, un proceso altamente complejo se activa de forma natural para reparar la lesión. La reparación de la fractura implica la generación de tejidos intermedios de diferentes características que están estimulados por una gran variedad de factores. La curación comienza con células mesenquimales indiferenciadas que migran desde el tejido circundante para producir un tejido conectivo inicial alrededor del sitio de la fractura, como ilustra la Figura 6.3.1. Después de este complejo proceso, la osificación continua hasta que todo el cartílago haya sido reemplazado por tejido óseo con rigidez suficiente.

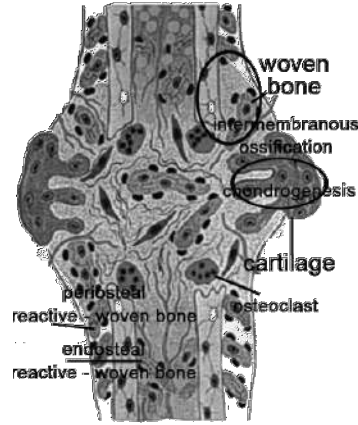


Figura 6.3.1. Esquema de la reparación ósea y consolidación del callo óseo, nueve días después de la fractura. Nótese la osificación endocondral (www.uwo.ca)

6.3.1 Formulación y modelo axisimétrico

El Método de los Elementos de Contorno ha sido aplicado recientemente al modelado y simulación de tejido biológico. Algunos trabajos interesantes, los cuales ilustran la versatilidad del método en esta área, han sido publicados, desde hace unos 20 años (González *et al.*, 2009; Annicchiarico *et al.*, 2007; Martínez *et al.*, 2006; Sfantos y Aliabadi, 2007). El objetivo es por tanto establecer al MEC como una alternativa atractiva a los más conocidos Método de Diferencias Finitas (MDF) y el Método de Elementos Finitos (MEF) para caracterizar la respuesta en términos de deformaciones y tensiones dentro del entorno del callo óseo. La teoría de poroelasticidad de Biot (1956) se muestra más abajo (véase la ecuación 6.3.1) mientras que la ecuación integral de poroelasticidad no-acoplada para cuerpos axisimétricos está dada en la expresión 6.3.2.

$$\begin{aligned}
 (\mu + \lambda)u_{j,ji} + \mu u_{i,jj} - \beta p_{,i} + f_i &= 0 \\
 kp_{,jj} - \alpha \dot{p} - \beta \dot{u}_{j,j} + \psi &= 0 \quad t > t_0
 \end{aligned}
 \tag{6.3.1}$$

$$\begin{aligned}
 C_{ij}U_i(P) + 2\pi \int_{\Omega} U_{ij}^*(P, Q)B_j(Q)r(Q)d\Omega = \\
 2\pi \int_{\Gamma} U_{ij}^*(P, Q)T_j(Q)r(Q)d\Gamma - 2\pi \int_{\Gamma} T_{ij}^*(P, Q)U_j(Q)r(Q)d\Gamma
 \end{aligned}
 \tag{6.3.2}$$

P es el punto de colocación (o punto de carga), Q es el punto de integración, $C_{ij}(P)$ es el término libre y $r(Q)$ es la coordenada radial del punto Q . U_j y T_j son los desplazamientos y tracciones en las direcciones radial y axial, θ se conoce como el exceso de presión de poros, λ y μ son las constantes elásticas de Lamé para un medio drenado, k es la permeabilidad y β es una función de B , llamado el coeficiente de compresibilidad o coeficiente de presión de poros de Skempton.

Los núcleos $U_{ij}^*(P, Q)$ y $T_{ij}^*(P, Q)$ son tomados de las formulaciones del MEC para problemas cuasi-estáticos axisimétricos de termoelasticidad y poroelasticidad (Dargush y Banerjee, 1992; Balas *et al.*, 1989; Bakr y Fenner, 1983; Banerjee, 1994), así como también su comportamiento asintótico (Graciani *et al.*, 2005). Las fuerzas de cuerpo (body forces) y los gradients no son considerados.

Claes y Heigele (1999) sostuvieron que la formación de nuevo hueso en la zona de la fractura ocurre principalmente a lo largo de las aristas de hueso existente o tejido ya calcificado y que el fenotipo óseo depende de la magnitud local de las deformaciones y las tensiones. En la investigación aquí presentada, nosotros incorporamos estas hipótesis en una formulación de elementos de contorno para dominios axisimétricos en problemas poroelásticos no transientes, dentro de un medio elástico, isotrópico y no-homogéneo, modelado con la teoría de consolidación de Biot, como se ilustra en la Figura 6.3.2. Ahora, la presión de poros se considera como parte de la función de estímulo para caracterizar el fenotipo y las propiedades de los nuevos tejidos.

6.3.2 Resultados numéricos

Tanto el desplazamiento interfragmentario (IFM) como las deformaciones interfragmentarias (IFS) se calculan para cada modelo. La Figura 6.3.3.a ilustra la IFM. Basados en una ley constitutiva de poroelasticidad, se propone una correlación diferente (Figura 6.3.3.b) después del análisis de los campos de deformación y presión de poros a lo largo de la trayectoria de osificación en cada etapa del análisis. La hipótesis de que las magnitudes de la deformación y de la tensión hidrostática, a lo largo de las superficies calcificadas, controlan

la diferenciación tisular se confirma una vez más. En consecuencia, la implementación de la herramienta numérica propuesta ha funcionado bien bajo ciertas simplificaciones. Sin embargo, es necesario evaluar esta correlación en más detalle, contrastando resultados con ensayos experimentales.

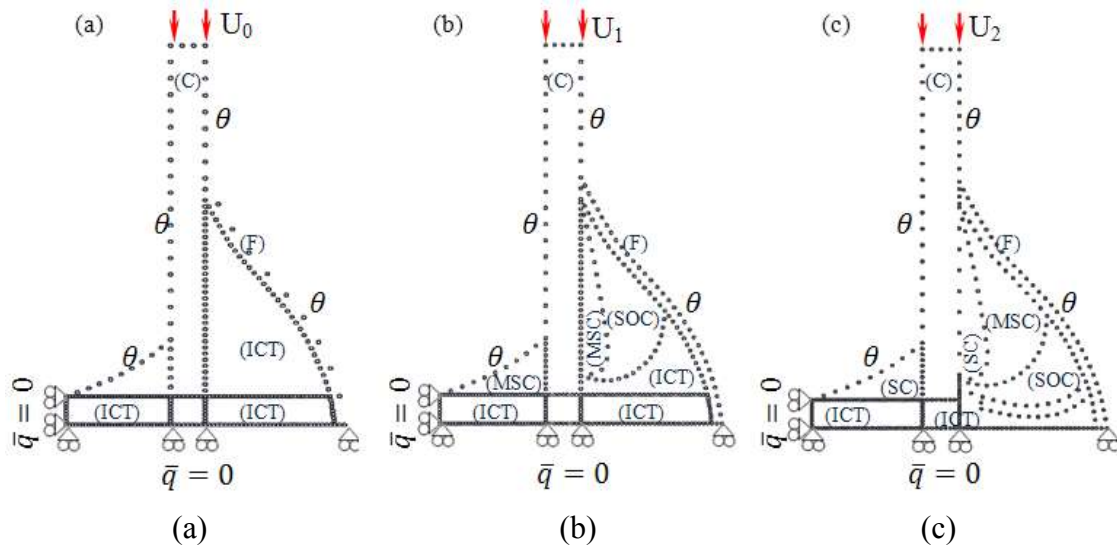


Figura 6.3.2. Modelo axisimétrico con condiciones de borde bifásicas, en tres etapas de la consolidación de la fractura: (a) 1 semana, (b) 4 semanas, (c) 8 semanas.

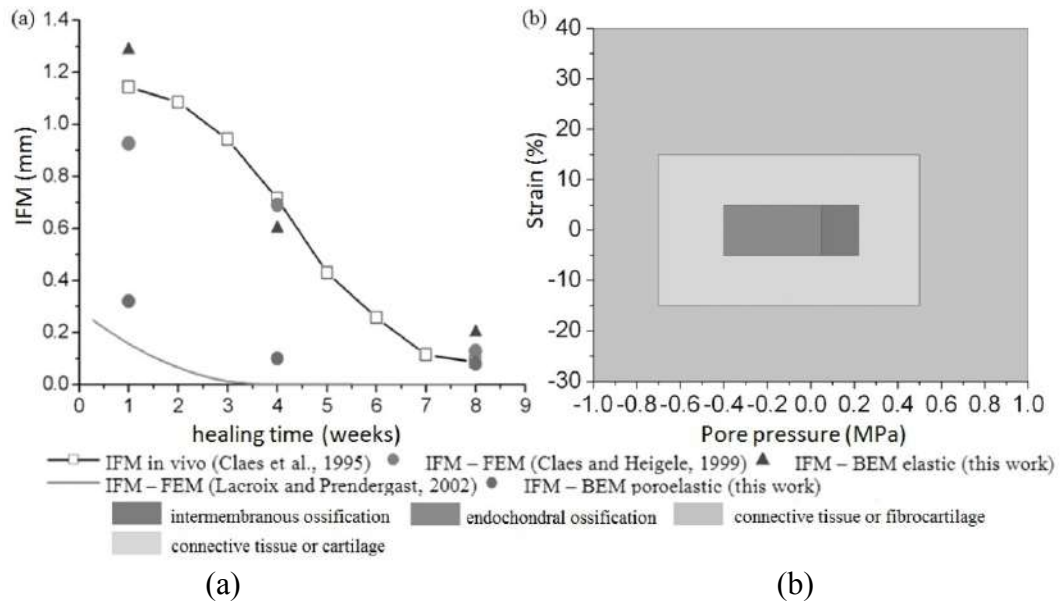


Figura 6.3.3. Comparaciones de las IFM calculadas in-vivo, con MEF y con MEC.

(a) Nuevas correlaciones entre condiciones poroelásticas y tipos de tejido.

(b) Tejido cartilaginoso fue incorporado (Lacroix y Prendergast, 2002)

Esta investigación representa un paso importante en la aplicación del MEC a problemas biológicos y de tejidos humanos. En particular, se ha podido demostrar que el modelado y simulación axisimétrica de la capacidad del hueso para repararse, dentro de un ambiente de diferenciación de tejidos, es posible hacerlo con la teoría de poroelasticidad.

La reparación ósea también depende de la evolución de las células óseas. En régimen estacionario, el modelo de difusión-deformación de Biot (1956) implícito dentro de la ecuación (6.3.1) consiste en la ecuación de Laplace que gobierna la presión de poros. Sin embargo, a pesar de esta relativamente simple fórmula, Lu *et al.* (1998) han podido implementar analogías con los fenómenos de transporte de cargas y masa (Zerroukat *et al.*, 1998; Qiu *et al.*, 1995) para simular la velocidad de cambio de la densidad celular (Soukane *et al.*, 2007; Ferguson *et al.* (2007)). Aquí, las clásicas leyes de balance de masa conducen a una formulación generalizada de la ecuación de difusión-convección-reacción para resolver problemas no-lineales y dependientes del tiempo, así como para obtener nuevas soluciones fundamentales que puedan describir los procesos celulares usando formulaciones integrales.

6.4 Piezoelectricidad en la curación de fracturas

Varios autores han sugerido que la aplicación de cargas genera gradientes locales de potencial dentro del colágeno, proveyendo estímulo local para las células encargadas de regenerar el tejido óseo (Ramtani, 2008; Ahn y Grodzynsky , 2009).

En el desarrollo presentado en esta sección, se ha simulado el comportamiento electromecánico del tejido óseo sometido a potenciales eléctricos, utilizando un modelo de Elementos de Contorno tridimensional y anisotrópico. La implementación se realizó dentro de un código del MEC desarrollado por Beer *et al.* (2008). El tejido óseo fue considerado elástico y piezoeléctrico. Las propiedades mecánicas y el comportamiento del tejido óseo se describen por las mismas ecuaciones ya descritas por Wolff (1892).

La estructura ósea puede ser modificada por potencial inducido como resultado de la aplicación de cargas, lo que sugiere la existencia de una relación entre la deformación del hueso y el potencial generado por las tensiones (Gjelsvik, 1973).

6.4.1 Formulación y ecuaciones básicas

El modelo propuesto por Fernández *et al.* (2012) basado en un campo eléctrico como una función de $(\rho/\rho^*)^\gamma$ es usado aquí. En consecuencia, las ecuaciones constitutivas de piezoelectricidad lineal serán

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= \left(\frac{\rho}{\rho^*}\right)^\gamma C_{ijkl} \gamma_{kl} - \left(\frac{\rho}{\rho^*}\right)^\gamma e_{lij} E_l, \\ D_i &= \left(\frac{\rho}{\rho^*}\right)^\gamma e_{ikl} \gamma_{kl} - \left(\frac{\rho}{\rho^*}\right)^\gamma \varepsilon_{il} E_l\end{aligned}\tag{6.4.1}$$

El tensor de elasticidad C_{ijkl} corresponde a un material transversalmente isotrópico y se mide dentro de un campo eléctrico constante, el tensor de permitividad ε_{il} también corresponde a deformaciones constantes, mientras que el tensor piezoeléctrico e_{ijk} describe el acoplamiento electro-estático. Debido a que las ecuaciones son simétricas, se utiliza la notación contraída de forma de combinar las variables elásticas y eléctricas dentro de vectores y tensores generalizados de piezoelectricidad (Gaul *et al.*, 2003; Denda y Wang, 2009). Esto se logra introduciendo la siguiente notación para el vector de desplazamientos u , el vector de tracciones T , el vector de tensiones Σ y la deformación γ , como sigue

$$\Sigma_{ij} = C_{iJKl} Z_{Kl}\tag{6.4.2}$$

donde Σ , Z y C son

$$\Sigma_{ij} = \begin{cases} \sigma_{ij}, & J \leq 3 \\ D_i, & J = 4 \end{cases}, \quad Z_{Kl} = \begin{cases} \gamma_{kl}, & K \leq 3 \\ -E_l, & K = 4 \end{cases}, \quad C_{iJKl} := \begin{cases} C_{ijkl}, & J, K \leq 3, \\ e_{lij}, & J \leq 3, K = 4, \\ e_{ikl}, & J = 4, K \leq 3, \\ -\varepsilon_{il}, & J = 4, K = 4 \end{cases}$$

siendo ϕ el potencial eléctrico, q es la carga, D es el vector de inducción eléctrica y E es el vector de campo

$$\gamma_{kl} = \frac{(u_{k,l} + u_{l,k})}{2}, \quad E_l = \phi_{,l} \quad (6.4.3)$$

Ahora, trasladando el punto fuente (o de carga) ξ al contorno de un cuerpo tridimensional piezoeléctrico (el procedimiento es similar al presentado en los capítulos 3 y capítulo 4, para elasticidad y potencial) se obtiene la ecuación integral de piezoelectricidad

$$C_{KJ}(\xi)U_J(\xi) = \int_{\Gamma} U_{KJ}^*(x, \xi)T_J(x)d\Gamma - \int_{\Gamma} T_{KJ}^*(x, \xi)U_J(x)d\Gamma, \quad (6.4.4)$$

donde $C_{KJ}(\xi)$ representa los coeficientes del término libre en $\xi \in \Gamma$, los cuales contienen la contribución de las componentes infinitas y la tracción singular en la integral de contorno. La solución fundamental se obtiene resolviendo la ecuación diferencial (6.4.5)

$$\mathcal{L}_{JK}U_{MK}^*(x - \xi) = -\delta(x - \xi)\delta_{JM} \quad (6.4.5)$$

La solución fundamental U_{MK}^* del operador diferencial piezoeléctrico está definida por (6.4.2). Debido a la complejidad del tensor constitutivo C_{ijkl} , el cual contiene hasta 45 constantes del material, no es posible encontrar soluciones exactas (cerradas) para el caso de anisotropía general. Sin embargo, es posible obtener una solución aproximada a la de elasticidad anisótropa (Duarte *et al.*, 2011; Gaul *et al.*, 2003; Thoeni, 2005) y extenderla al caso de piezoelectricidad estática mediante la transformada de Radon y expresándola como una solución fundamental de la formulación integral (Beer *et al.*, 2008; Kölg y Gaul, 2000).

6.4.2 Resultados numéricos

A continuación se presentarán algunos resultados numéricos obtenidos. Se considera un modelo de elementos de contorno de un osteon con condiciones de contorno predefinidas (Fernández *et al.*, 2012). Las soluciones fundamentales para piezoelectricidad anisotrópica en los puntos de integración son calculadas usando interpolación lineal lagrangiana sobre una malla de 100x100x100 puntos. Resultados preliminares sugieren que procesos biológicos a nivel microestructural, como el de curación de fracturas, pueden ser optimizados in áreas sometidas a potenciales negativos a lo largo del eje longitudinal, como muestra la Figura

6.4.1

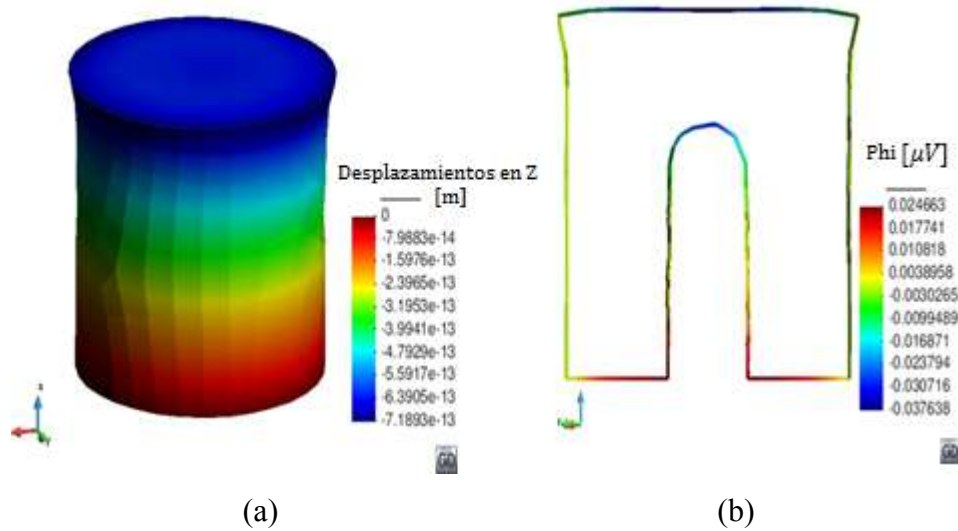


Figura 6.4.1. Osteon en torsión. (a) desplazamientos en el eje z,
(b) distribución de potencial en el eje z

De los resultados de esta investigación puede concluirse que la deposición (creación) de hueso es estimulada por una carga eléctrica superficial. La deposición ósea se incrementa respondiendo a un pulso de corriente alternante. El mecanismo exacto mediante el cual el potencial estimula el crecimiento del tejido no está todavía completamente descifrado. El uso del MEC en este tipo de análisis puede ser una alternativa valiosa en la evaluación de esta teoría, ofreciendo una explicación simple y atractiva para el comportamiento electromecánico del tejido óseo.



CAPÍTULO 7

REFERENCIAS

CAPÍTULO 7. REFERENCIAS

- Abramowitz, M., Stegun, IA., 1965, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publ, New York, USA
- Ahn, A. C., Grodzinsky, A.J., 2009, Relevance of collagen piezoelectricity to Wolff's Law: A critical review, *Medical Engineering & Physics*, **31(7)**:733-741.
- Albrook, D., 1957, Movements of the lumbar spinal column, *Bone Joint Sur*, **39B**:339-345.
- Anderson, C., Chaffin, D., Herrin, G., Mathews, L., 1985, A biomechanical model of the lumbosacral joint lifting activities, *Biomech Engng*. **18(8)**:571-584.
- Ang., W., Ooi., E., 2008. A dual reciprocity boundary element approach for solving axisymmetric heat equation subject to specification of energy, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **32**:210-215.
- Annicchiarico, W., Martínez, G., Cerrolaza, M., 2007, Boundary elements and β -spline surface modeling for medical applications. *J. Appl Math Model*, **31(2)**:194-208.
- Bai, F., Lu, W., 2004, The selection and assemblage of approximation functions and disposal of its singularity in axisymmetric DRBEM for heat transfer problems. *Eng Anal Bound Elem*, **28**:955-965.
- Bakr, A.A., Fenner, R.T., 1983, Boundary integral equation analysis of axisymmetric thermoelastic problems, *J of Strain Analysis*, **18(4)**:239-251.
- Balas, J., Sládek, J., Sládek, V., 1989, *Stress analysis by the boundary element method*. Elsevier, Amsterdam.
- Banerjee, P., 1994. *The boundary element method in engineering*. 2nd ed. McGraw. UK.
- Banerjee, P., Butterfield, R., 1979. *Developments in boundary element methods*. Applied Sciences. London
- Barsky, BA., 1988, *Computer graphics and geometric modeling using b-splines*, Springer, New York. USA

- Bartels, RH., Beatty, JC., Barsky, BA., 1987, An introduction to splines for use in computer graphics & geometry modeling. Morgan Kaufmann. Los Altos. California
- Becker, A., 1992. *The boundary element method in engineering*. McGraw Hill, USA.
- Beer, G., 2001, *Programming the boundary element method: an introduction for engineers*, John Wiley. UK.
- Beer, G., Smith, I., Duenser, C., 2008, *The Boundary Element Method with Programming*, Springer, Wien, New York.
- Bibby, S., Jones, D., Ripley, R. & Urban, J., 2005. Metabolism of the intervertebral disc: effects of low levels of oxygen, glucose and pH on rates of energy metabolism of bovine nucleus pulposus cells. *Spine*, **30**:487-496.
- Biot, M.A., 1956, General solutions of equations of elasticity and consolidation for a porous material. *J. Appl. Mech*, **78**:91-96.
- Bogduk N., Macintosh J., Percy M., 1992, A universal model of the lumbar back muscles in the upright position. *Spine*, **17(8)**:897-913.
- Brebbia CA, Telles J, Wrobel L, 1984, *Boundary Element Techniques: Theory and Appl. in Eng.* Springer-Verlag. Berlín.
- Brebbia, C., Domínguez, J., 1992. *Boundary Elements an Introductory Course*. Computational Mechanics. McGraw Hill. New York.
- Caffiero, M., 2007, *Diseño y manufactura de un dispositivo de sujeción para columnas vertebrales escolióticas por el método de elementos finitos*, Tesis MSc., Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Caprilli, A., 2002, *Análisis, diseño y manufactura de un distensor vertebral en zona lumbar*, Tesis MSc., Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Carrero, W., 2014, *Simulación de osteogénesis y diseño de distractores alveolares por el método de elementos finitos*, Tesis Doctoral, Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Carslaw, H, Jaeger, J., 1959, *Conduction of heat in solids*. London. Oxford Univ. Press.

- Carter, D, Beaupré, G., 2001, *Skeletal Function and Form. Mechanobiology of Skeletal Development, Aging and Regeneration*. Cambridge Press, New York, Melbourne.
- Cerrolaza M., Alarcón E., 1989, A bi-cubic transformation for the numerical evaluation of the cauchy principal value integrals in boundary methods. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **28**:987-999.
- Chaffin, D., Anderson, G., 1984, *Occupational Biomechanics*, John Wiley, Nueva York.
- Cheng, A., Cheng, D., 2005. Heritage and early history of the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **29**:268-302.
- Claes, L.E., Heigele, C.A., 1999, Magnitudes of local stress and strain along bony surfaces predict the course and type of fracture healing. *J of Biomech*, **32**:255-266.
- Cruse, T. A., 1969, Numerical solution in three-dimensional elastostatics. *Int. J. Solids & Struct.* **5**:1295-1274
- Dargush, G.F., Banerjee, P.K., 1991, A boundary element method for axisymmetric soil consolidation, *Int. J. Solids Struct*, **28**:897-915.
- Dargush, G.F., Banerjee, P.K., 1992, Time dependent axisymmetric thermoelastic boundary element analysis. *I. J. Num Meth Engng*, **33**:695-717.
- Denda, M., Wang, C.Y., 2009, 3D BEM for the General Piezoelectric Solids, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, **198**:2950-2963.
- Doblaré, M., García, J.M., Gómez M.J., 2004, Modelling bone tissue fracture and healing: a review. *J. Eng Fract Mech*, **71**:1809-1840.
- Duarte, V., González, Y., Cerrolaza, M., 2011, Boundary element simulation of bone tissue. *Int. J. Biomed Eng & Tech*, **5(2/3)**:211-228.
- Ferguson, S., Ito, K., Nolte, L., 2004, Fluid flow and convective transport of solutes within the intervertebral disc. *J. of Biomech.*, **40**:213-221.
- Fernandez, J.R, García-Aznar, J.M., Martínez, R, 2012, Piezoelectricity could predict sites of formation/resorption in bone remodelling, *J. Theor Biol*, **292**:86-92.
- Ferragut, L., Asensio, M., Monero, S., 2007, A numerical method for solving convection-reaction-diffusion multivalued equations in fire spread modeling. *Adv. in Eng Soft*, **38**: 366-371.
- Firpo, C., 2010, *Manual de ortopedia y traumatología*. 2ª Ed. Dunken, Buenos Aires.

- Galbusera, F., 2011, Comparison of four methods to simulate swelling in poroelastic finite element models of intervertebral discs. *Mech. Behavior Biomed. Mater*, **4**:1234-1242.
- Gámez, B, 2008, *Crecimiento de grietas en hueso cortical por el método de los elementos de contorno*, Tesis Doctoral, Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Garzón-Alvarado, D., Velasco, M., Narvaez-Tovar, C., 2012, Modeling porous scaffold microstructure by a reaction-diffusion system and its degradation by hydrolysis, *Computers in Biology and Medicine*, **42**:147-155.
- Gaul, L., Kölg, M. & Wagner, M., 2003, *Boundary Element Methods for Engineers and Scientists*, Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- Gjelsvik, A., 1973, Bone remodeling and piezoelectricity-I and II, *J. Biomech*, **6**:69-77, 187-193.
- Gómez, M., García, M., Kuiper, J., Doblaré, M., 2005, Influence of fracture gap size on the pattern of bone healing: a computational study. *Theor Bio*, **235**:105-119.
- González, Y., 2007, *Un modelo de regeneración ósea por el método de los elementos de contorno*, Tesis Doctoral, Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- González, Y., Cerrolaza, M., 2008, *Simulación computacional del tejido óseo*, Ed. CDCH, Universidad Central de Venezuela, Caracas
- González, Y., Cerrolaza, M., González, C., 2009. Poroelastic analysis of bone tissue differentiation by using the boundary element method, *Eng Analysis with Bound Elem*, **33**:731-740
- González, Y., González, C., Cerrolaza, M., 2008, Aplicación del método de elementos de contorno para modelar la consolidación ósea. *R. Int. Mét Num Cálculo Dis Ing*, **24**:75-84.
- González, Y., Nieto, F., Cerrolaza, M., 2013. Modeling the nutrients behavior in intervertebral disc: a boundary integral simulation, *J. of Molecular & Cellular Biomech*, **10(1)**:67-84
- Graciani, E., Mantic, V., Paris, F., Blazquez A., 2005, Weak formulation of axisymmetric frictionless contact problems with boundary elements application to interface cracks. *J. Comp. Estruc*, **83**:836-855.

- Gregersen, G., Lucas D., 1967, An in-vivo study of the axial rotation of the human thoracolumbar spine. *J. Bone Joint Surg*, **49A**:247-262
- Grigoriev, M., Dargush, G., 2005, Accurate boundary element solutions for highly convective unsteady flows, *J. Heat Transfer*, 127(10):1138-1150
- Guiggiani, M., Casalini, P., 1987, Direct computation of Cauchy principal value integrals in advanced boundary elements. *I.J. Num Meth Eng*, **24**:1711-1720
- Haberman, R., 2003, *Elementary Applied Partial Differential Equations with Fourier Series and Boundary Value Problems*, Prentice Hall, 3rd Ed. USA
- Haider, M., Guilak, F., 2007, Application of a three-dimensional poroelastic BEM to modeling the biphasic mechanics of cell–matrix interactions in articular cartilage. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng*, **196**:2999-3010
- Hartmann F., 1983, Computing the C-matrix in non smooth boundary points. *In New Developments in Boundary Element Methods* (C.A. Brebbia Ed.) 367-379. Butterworths. London.
- Huang, C., Gu, W., 2008, Effects of mechanical compression on metabolism and distribution of oxygen and lactate in intervertebral disc. *J. Biomech*, **41**:1184-1196
- Inglessis, P., Cerrolaza, M., 2003, *Una introducción al Método de los Elementos de Contorno en Ingeniería y Ciencias Aplicadas*. Ed. CDCH. Universidad Central de Venezuela, Caracas
- Isaksson, H., van Donkelaar, C., Itoa, K., 2009, Sensitivity of tissue differentiation and bone healing predictions to tissue properties. *J. of Biomech*, **42**:555-564
- Ishihara, H., Urban, J., 1999. Effects of low oxygen concentrations and metabolic inhibitors on proteoglycan and protein synthesis rates in the intervertebral disc. *J Orthop Res*, **17(6)**:829-835
- Jiang, H., Yang, B., 2012. Cell–substrate interaction with cell-membrane-stress dependent adhesion. *J. of Biomech*, **45**:209-217
- Kane JH., 1994, *Boundary element Analysis in Engineering Continuum Mechanics*. Prentice Hall. New Jersey
- Kapanji I., 2001, *Cuadernos de Fisiología Articular. Tronco y Raquis*, Vol. 3, 5^a Ed. Médica Panamericana. Maloine

- Kellog, O., 1953, *Foundations of Potential Theory*. Dover, New York
- Kölg, M., Gaul, L., 2000, A boundary element method for transient piezoelectric analysis, *Engng. Anal. Bound. Elem.*, **21**:591-598
- Lacroix, D., Prendergast, P.J., 2002, A mechano-regulation model of tissue differentiation during fracture healing: analysis of gap size and loading. *J. Biomech*, **35**:1163-1171
- Lachat, J. C., Watson, J. O., 1976, Effective numerical treatment of boundary integral equations: formulation for 3D elastostatic. *J. Num Meth Eng*, **10**:991-1005
- Lu, W., Liu, J., Zeng, Y., 1998, Simulation of the thermal wave propagation in biological tissues by the dual reciprocity boundary element method. *Eng Analysis Boundary Elem*, **22**:167-174.
- McGill S., Norman R., 1986, Partitioning of the L4/L5 dynamic moment in disc, ligamentous, and muscular component during lifting. *Spine*, **11**(7):666-678.
- Martínez, G., 2004, *Remodelación ósea externa utilizando el método de los elementos de contorno*, Tesis Doctoral, Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Martínez, G., Cerrolaza M, 2006, A bone adaptation approach using BEM, *Eng Analysis Boundary Elem*, **30**:107-115
- Martínez, G., García-Aznar, J., Doblaré, M., Cerrolaza, M., 2006. External bone remodeling through boundary elements and damage mechanics. *Math & Comp in Simulation*, **73**:183-199.
- Martini, F., Timmons, M., Tallistch, R., 2009, *Anatomía humana*. 6ª ed. Pearson Educación. Madrid.
- Miralles, R. & Puig, M., 1998. *Biomecánica Clínica del Aparato Locomotor*. Masson. Barcelona.
- Mokhbi-Soukane, D., Shirazi-Adl, A., Urban, J., 2007. Computation of coupled diffusion of oxygen, glucose and lactic acid in intervertebral disc. *J. of Biomech*, **40**:2645-2654.
- Mokhbi-Soukane, D., Shirazi-Adl, A., Urban, J., 2009. Investigation of solute concentrations in a 3D model of intervertebral disc. *Eur Spine J*, **18**:254-262.

- Motaghinasab, S., Shirazi-Adl, A., Urban, J., Parnianpour, M., 2012. Computational pharmacokinetics of solute penetration into human intervertebral discs. Effects of endplate permeability, solute molecular weight and disc size. *J. Biomech* **45**:2195-2202
- Muller-Karger, C., 2002, *Simulación ósea por medio de la versión p del método de los elementos finitos*, Tesis Doctoral, Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Nieto, F., 2014, *Modelo para la determinación de la densidad celular basado en el método de frontera para problemas de convección-difusión*, Tesis MSc., Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- NIOSH, 1981, A Work Practices Guide for Manual Lifting, *National Institute for Occupational Safety and Health, Taft Industries*, Cincinnati, USA.
- Ochiai, Y., Takeda, S., 2009, Meshless convection– diffusion analysis by triple-reciprocity boundary element method. *Eng Anal Bound Elem*, **33**:168-175.
- Park, K., Banerjee, P., 2002. Two and three dimensional soil consolidation by BEM via particular integral. *Comp Meth App Mech Eng*, **191**:3233-3255.
- Park, K., Banerjee, P., 2007, A new BEM formulation for transient axisymmetric poroelasticity via particular integrals, *J. Solids & Struct*, **44**:7276-7290.
- Partridge, W., Brebbia, C., 1990. Computer implementation of the BEM dual reciprocity method for the solution of general field equations, *Comm App Num Meth*, **6**:93-89.
- Partridge, W., Brebbia, C. , Wrobel, L., 1992. *The dual reciprocity boundary element method*. Computational Mechanics Publications. UK.
- Pattin, CA., Caler, WE., Carter, DR, 1996, Cyclic mechanical property degradation during fatigue loading of cortical bone. *J Biomech*, **29(1)**:69-79.
- Potvin, J., McGill, S., Norman, R., 1991, Trunk muscle and lumbar ligament contributions to dynamic lifts with varying degrees of trunk flexion. *Spine*, **16(9)**:1099-1107.
- Prem, K., 1995. *An introduction to Boundary Element Method*. CRC Press, London.
- Qiu, Z., Wrobel, L., Power, H., 1995, Boundary element approach to mass and charge transport in electrochemical cells. *Eng Anal Bound Elem*, **15**:299-312.
- Rachwan, C., 2007, Diseño, análisis y manufactura de un fijador intervertebral por el método de los elementos finitos, Tesis MSc., Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad

- Central de Venezuela, Caracas.
- Rachwan, C., Cerrolaza, M., Krivoy, A., 2008, Biomecánica de la columna vertebral, en *Introducción a la Biomecánica de la columna vertebral*, Ed. Svmni, Caracas
- Ramtani, S., 2008, Electro-mechanics of bone remodelling, *J Eng Sci*, **46**:1173–1182.
- Riccardela, P C., 1973, An Implementation of the BEM for planar problems in elasticity and elastoplasticity. *Report. SM-73-10, Dpt Mech Eng Carnegie Mellon Univ. USA.*
- Rich, J., Donahue, T., T, M., 2005, Symptomatic Expansile Vertebral Hemangioma Causing Conus Medullaris Compression. *J. Manip & Phys Therap*, **28(3)**:194-198.
- Rojas, K., 2003, *Diseño, análisis y manufactura de placas de fijación vertebral mediante el método de elementos finitos*, Tesis MSc., Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Rubin, C., Lanyon, L., 1984, Regulation of bone formation by dynamic applied loads, *J. Bone & Joint Surgery*, **66A(3)**:397-402
- Sally, R., Jill P G, U., 2011, Musculoskeletal System. En: *Encyclopedia of Occupational Health and Safety*. International Labor Organization. Génova. Italia
- Schultz A., Anderson G., Ortengreen R., 1982, Loads on the lumbar spine. *Bone Joint Surgery*, **64(A)**:713-720.
- Sfantos, G.K., Aliabadi, M.H, 2007, Total hip arthroplasty wear simulation using the boundary element method, *J of Biomech*, **40**:378–389.
- Shankar, H., Scarlett, J., Abram, S., 2009, Anatomy and pathophysiology of intervertebral disc disease. *Techniques in Regional Anesthesia and Pain Management*, **13(2)**:67-75.
- Soukane, D., Shirazi-Adl, A., Urban, J., 2009, Investigation of solute concentrations in a 3D model of intervertebral disc, *Eur Spine J*. **18(2)**:254-262.
- Tanz, S., 1953, Motion of the Lumbar Spine. America, *J of Roentgenology, Radium Therapy and Nuclear Medicine*, **69**:399-412.
- Telles, J., 1987, A self-adaptive coordinate transformation for efficient numerical evaluation of general boundary element integrals. *J Num Meth Eng*, **24(5)**:959-973.
- Thoeni, K., 2005, *Effiziente Berechnung anisotroper Fundamentallösungen für die Methode der Randelemente*. MSc Thesis, Graz Univ. of Tech., Austria, in German

- Van-Cochran, G. A., 1988, *A Primer of Orthopaedic Biomechanics*. Churchill Livingstone. New York.
- Wessel, C., Wrobel, L., Cisilino, A., 2004, The coupling of the biological growth method and the boundary element method for structural shape optimization. *Structural and multidisciplinary optimization*, **28**:221-227.
- Wolff, J., 1892, *Das Gesetz der Transformation der Knochen*, A. Hirsehwold, German
- Yao, H., Gu, W.-Y., 2007, Three-dimensional inhomogeneous triphasic finite-element analysis of physical signals and solute transport in human intervertebral disc under axial compression. *J of Biomech*, **40**:2071-2077.
- Zabreyko, P., Koshelev, A., Krasnosel'skii, M., Mikhlin, S., Rakovshchik, L., Stet'senko, Y., 1975, *Integral Equations. A Reference Text*. Noordhoff. Amsterdam.
- Zeman, M., 2005, *Parámetros biológicos aplicados a modelos de remodelación ósea: análisis numérico y aplicaciones ante comportamiento patológico*, Tesis Doctoral, Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas.
- Zerroukat, M., Power, H., Wrobel, L., 1998, Heat and solute diffusion with a moving interface: a boundary approach. *Heat Mass Transfer*, **41**:2429-2436.
- Zhu, Q., Jackson, A. , Gu, W.-Y., 2012, Cell viability in intervertebral disc under various nutritional and dynamic loading conditions: a 3D finite element analysis. *J. of Biomech*, **45**: 2769-2777

Félix Manuel Nieto Ruiz

es Licenciado en Matemática graduado de la Universidad Central de Venezuela (2008). Magister Scientiarum en Bioingeniería de la Universidad Central de Venezuela (2013). El profesor Nieto actualmente se desempeña como Profesor Asistente en la Universidad Central de Venezuela, específicamente en la Facultad de Ingeniería en el ciclo básico.



Yomar A. González C.

Nacido el 14 de Julio de 1977 en Venezuela, Ingeniero Mecánico, Universidad Central de Venezuela, 2001. Doctor en Ciencias de la Ingeniería (Mención Honorífica), Universidad Central de Venezuela, 2009. Diplomado en docencia para la educación universitaria, Centro Corporativo Universitario y Universidad del Zulia (Venezuela), 2017.

Su experiencia profesional se realiza en Universidad de Guayaquil, Guayaquil, Ecuador como docente contratado, • Instituto Nacional de Bioingeniería, Universidad Central de Venezuela, Caracas como coordinador de investigación. Fue Beneficiario del programa ALFA-ELBENET (EuropeLatin-American BoundaryElement Network), European Commission, Bruselas, 2005-2006. Beca otorgada por el FONACIT para la realización de estudios de doctorado en la Universidad Central de Venezuela, 2002. Beca-estudio otorgada por la Facultad de Ingeniería de la Universidad Central de Venezuela, 1996-2001.

Ganador de Mención honorífica del jurado al trabajo de tesis doctoral "Un modelos matemático de regeneración ósea por el método de los elementos de contorno". (2007). Premio Bienal "Francisco Duarte" a la monografía titulada Simulación Computacional del Tejido Óseo. Facultad de Ingeniería, Universidad Central de Venezuela. (2010). Premio "Dr. Luis Razetti" a la investigación científica aplicada. Facultad de Medicina. Universidad Central de Venezuela. (2014). Premio Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación, mención "Investigación Tecnológica". Ministerio del Poder Popular para la Educación Universitaria, Ciencia y Tecnología. (2015)

Miguel Cerrolaza Rivas

Graduado de la Universidad Central de Venezuela (1980). Recibió su grado de M.Sc. en la Universidade Federal do Rio de Janeiro (Brasil, 1981), para luego obtener su título de PhD en la Universidad Politécnica de Madrid (España, 1988), seguido de un Post-doctorado en la Ecole Nationale des Ponts et Chaussees (Francia, 1995). Fue profesor titular en la Facultad de Ingeniería Industrial de la Universidad Central de Venezuela (UCV), impartiendo clases en los programas de postgrado de Maestría en Bioingeniería e Ingeniería Estructural. M. Cerrolaza fue también el Director del Instituto Nacional de Bioingeniería de la UCV y Presidente de la Sociedad Venezolana de Métodos Numéricos en Ingeniería. Sus principales intereses en investigación se relacionan con la Bioingeniería y simulación computacional.

ISBN: 978-9942-33-091-8



compAs