

Un nuevo método de empaquetamiento de partículas: aplicaciones en el modelado del tejido óseo

Irvin Pérez · Yordanis Pérez · Carlos Recarey · Miguel Cerrolaza

Recibido: Septiembre 2010, Aceptado: Noviembre 2010
©Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, España 2010

Resumen Se presentan métodos de empaquetamiento de partículas diseñados para modelar la estructura ósea, tanto del hueso cortical como del trabecular. Los métodos están basados en algoritmos de avance frontal modificados, capaces de disminuir la densidad de grandes conjuntos de círculos o esferas, y de permitir la creación de agujeros elípticos que representen las trabéculas del hueso esponjoso. Se muestran algunos resultados preliminares de huesos modelados con las técnicas descritas.

A NEW METHOD FOR PARTICLE PACKAGING: APPLICATIONS IN BONE TISSUE MODELING

Summary Packing-particle methods to simulate compact and spongy bone-tissue are presented. The methods are based on modified front-advance algorithms, able to reduce the density of large sets of circles or spheres. As well, elliptical shape holes to represent trabeculae in spongy bone are allowed. Some preliminary results of bone modeling using the methods proposed are presented and discussed.

I. Pérez · Y. Pérez · C. Recarey
Centro de Métodos Computacionales y Numéricos en Ingeniería
Universidad Central de Las Villas, Santa Clara, Cuba
e-mail: {ypbrito,recarey}@uclv.edu.cu, hotei.mat@gmail.com

M. Cerrolaza
Instituto Nacional de Bioingeniería
Universidad Central de Venezuela, Caracas, Venezuela
e-mail: miguel.cerrolaza@inabio.edu.ve

1. Introducción

En este trabajo se describen algoritmos de empaquetamiento para obtener conjuntos de partículas para ser utilizados en el Método de Elementos Distintos (MED). Para la mayoría de las aplicaciones con este método, es deseable que en dichos conjuntos las partículas se ubiquen dejando el menor espacio vacío posible entre ellas. La Figura 1 muestra un ejemplo de empaquetamiento de una estructura de edificio de dos niveles:

En la literatura consultada se han encontrado diferentes protocolos de generación para distintos tipos de partículas. Para el caso de discos, en [1] se presenta un algoritmo eficiente y sencillo, el cual puede extenderse fácilmente a otras partículas planas. Este trabajo comienza exponiendo una revisión de los principales métodos de generación reportados hasta el momento y fundamenta la necesidad de la existencia de estos métodos. La idea general del algoritmo que se propone en [1] (posteriormente se publicaron resultados basados en la misma idea esencial [2-3]) consiste en actualizar dinámicamente un frente de discos que están rodeando por fuera a todos los demás. El mantenimiento de este frente hace posible que la cantidad de discos que tienen que ser tenidos en cuenta para agregar uno nuevo, sea muy pequeña.

El algoritmo permite obtener una densidad óptima localmente, y permite generar los empaquetamientos a una gran velocidad. Se menciona un ejemplo en el que se obtuvieron 10^6 discos en 3.77s en una PC con un procesador de 1GHz. Se plantea también que se pueden realizar aumentos posteriores de la fracción de área mediante la compresión de la frontera y compactación gravitacional, sirviendo esta última para eliminar posibles inestabilidades en la posición de algunos discos.

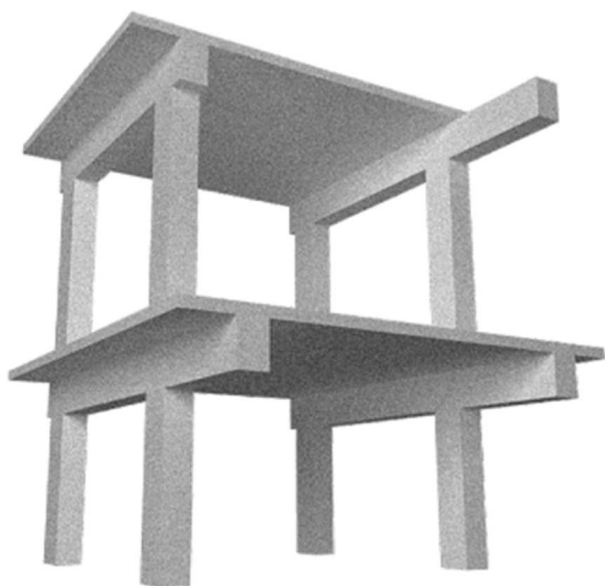


Figura 1. Empaquetamiento de 9368687 esferas que simulan la estructura de un edificio de dos niveles

La principal desventaja son las dificultades para hacer la extensión a 3D. La extensión 2D a otras partículas está expuesta en [4], para lo cual solo es necesario formular cómo detectar la intersección de dos partículas y cómo hallar el centro de la nueva partícula que se agrega al empaquetamiento, de manera que esté en contacto exterior con otras dos determinadas de antemano. Estas formulaciones están hechas en [4] para polígonos y elipses. En el artículo también se menciona la extensión del algoritmo al empaquetamiento de esferas en 3D y se explican las dificultades que esto conlleva.

Los empaquetamientos de elipses también fueron descritos en [5]. Estos autores presentan un algoritmo constructivo de avance frontal mediante el cual cada nueva elipse que se agrega está en tangencia con otras dos, lográndose la tangencia de una manera casi exacta a través de la representación de cada elipse mediante cuatro arcos de circunferencia. En [6] se extiende esta representación a tres dimensiones, aunque en este último caso el algoritmo de generación es mucho menos eficiente y directo y está basado en un esquema de cinemática de no interpenetración de cuerpos sólidos. En esta representación se formula un interesante problema de empaquetamiento ligado a la optimización y que surge de un problema industrial, consistente en determinar la proporción óptima entre tres tamaños diferentes de partículas esféricas que permita obtener un conjunto de esferas de densidad máxima. El problema se intenta resolver a través de un conjunto de simulaciones con el MED, en cada una de las cuales las esferas se dejan caer en un contenedor y luego se les aplica

una vibración para aumentar la densidad. Se presenta además el modelo matemático del problema de empaquetar esferas logrando la densidad máxima posible, en forma de un problema de optimización no convexa con restricciones cuadráticas y función objetivo lineal. Sin embargo, como bien aclaran los autores, dicho modelo solo tiene un valor teórico, debido a que su complejidad no permite aplicarlo a conjuntos con una gran cantidad de esferas.

En [7] se describe otro método bastante general. Ahí se exponen técnicas para colocar objetos arbitrarios en el espacio, cercanos entre sí y empleando técnicas de avance frontal. Para obtener empaquetamientos densos, se discuten dos procedimientos: colocación de un objeto más cercano (durante la generación) y mover o agrandar (después de la generación). Se muestran ejemplos de la formulación con partículas tales como elipses, colisiones de esferas o partículas aproximadas por estas últimas. Cuando la detección de intersección entre dos cuerpos es muy complicada, se recomienda hacerlo mediante la aproximación de estos con esferas, reduciéndose el problema a la detección de la intersección entre esferas. La formulación tiene una desventaja principal: al agrandar los objetos para lograr una mayor densidad, se pierde el control sobre la distribución estadística que siguen las dimensiones de estos. Por lo demás, en los ejemplos presentados se aprecia una alta eficiencia desde el punto de vista computacional y una gran generalidad, ya que los procedimientos expuestos son aplicables a distintos métodos numéricos, como por ejemplo el MEF o el MED.

En [8] se discute otro método de gran generalidad en cuanto al tipo de partículas, donde se presenta un código para generar empaquetamientos de varias formas de partículas, aunque los resultados solo se muestran para partículas esféricas. El diseño de clases implementado permite agregar cualquier nuevo tipo de partícula para ser empaquetada, para lo cual basta solamente conocer un procedimiento para colocar una en contacto con otras dos (caso 2D) o con otras tres (caso 3D) y un procedimiento de detección de intersección. El autor presenta ejemplos de conjuntos de esferas generados a velocidades superiores a las 1000 por segundo con fracción de volumen global superior al 51 %, además de ejemplos de más de $2 \cdot 10^6$ esferas.

En [9] se propone una metodología para implementar una biblioteca de clases destinada a ser usada en el código presentado en [8]. Están implementados algoritmos para empaquetar colisiones de círculos en 2D, elipses aproximadas con círculos y polígonos, y colisiones de esferas en 3D. El algoritmo de generación es independiente del tipo de partícula y el diseño de clases permite fácilmente agregar otros nuevos tipos de partículas.

A diferencia de algoritmos constructivos de avance frontal descritos anteriormente, también existen esquemas de generación basados en un reacomodamiento colectivo, tales como los discutidos en [10]. Estos autores han desarrollado un algoritmo en 3D para el empaquetamiento de esferas que es fácilmente adaptable a otros tipos de partículas. El algoritmo está basado en una idea geométrica de compresión empleando un eficiente método de búsqueda de vecinos [11], diseñado para objetos de tamaños significativamente diferentes. La idea general del algoritmo formulado consiste en generar capas de esferas que se comprimen hasta llenar la geometría deseada. Se presenta un ejemplo en el cual se generaron 26787 esferas en 181s con una fracción de volumen del 52.89 % en una PC de 1.4 GHz.

Otro ejemplo de esquema de reacomodamiento colectivo se basa en la idea de generar capas de partículas que luego son comprimidas hasta alcanzar una posición estable, empleando para ello el Método del Gradiente Conjugado [12]. Se presentan ejemplos de empaquetamientos obtenidos con partículas esféricas y también con polígonos no necesariamente convexos.

Para obtener empaquetamientos de manera dinámica, también es posible aprovechar una malla de tetraedros tal como las que se usan en el Método de Elementos Finitos (MEF), inscribiendo una esfera u otro tipo de partícula dentro de cada tetraedro [13].

En algunas aplicaciones prácticas, se necesita obtener una densidad máxima, lo cual se puede lograr formulando matemáticamente el problema del empaquetamiento como uno de optimización. En [14] se plantea el problema del empaquetamiento de esferas en 3D que ocupen el mayor volumen posible, mediante un problema de optimización cuadrática no convexa con restricciones cuadráticas y función objetivo lineal, siendo algunas variables reales y otras binarias. Se demuestra computacionalmente que el algoritmo propuesto puede obtener la optimización satisfactoriamente hasta un tamaño límite. Se tiene la desventaja del alto costo computacional (la cantidad de esferas en cada instancia no sobrepasa las 10), por lo cual este modelo matemático no es apropiado para grandes cantidades de partículas.

Una formulación que también permite obtener empaquetamientos de densidad máxima con mucho menos costo computacional se expone en [15]. Su ventaja respecto al trabajo [14] consiste en que plantea un problema de optimización no convexa con restricciones cuadráticas y función objetivo lineal, en el cual todas las variables son reales. De ahí que se reporte haber generado modelos de hasta 30 discos en 2D (en este caso la dimensión del problema de optimización no aumenta su complejidad). En [15] también se plantean interesantes

problemas ligados al empaquetamiento de partículas. Se describe una aplicación industrial en la cual es necesario determinar la proporción óptima de tres tamaños diferentes de partículas esféricas que permita obtener un conjunto de esferas de densidad máxima, y se aborda este problema a través de un conjunto de simulaciones.

Para aumentar la densidad de un conjunto de partículas obtenido previamente, es posible aplicar un proceso de optimización local con una reducción considerable de la porosidad. En [16] se obtienen mediante este método porosidades inferiores al 10 % en el caso 2D e inferiores al 30 % en el caso 3D para círculos y esferas respectivamente.

Otros resultados interesantes se reportan en [17], con aplicaciones directas a curvas y superficies supercuádricas.

En la búsqueda bibliográfica realizada no existe suficiente evidencia de que existan métodos de empaquetamiento de partículas para el MED que permitan modelar la estructura ósea desde un punto de vista geométrico, lo cual es el principal objetivo de la presente investigación.

2. Métodos de empaquetamiento

Inicialmente se contaba con algoritmos de empaquetamiento que permiten generar partículas con una alta densidad ([8] y [9]), de hasta aproximadamente un 51 % de fracción de volumen. Sin embargo, un método de empaquetamiento tal y como los que existen en la actualidad no es suficiente para modelar huesos, debido a que es necesario reproducir la ortotropía, y esto se debe realizar desde la fase de generación del medio. Uno de los algoritmos empleados en la presente investigación ha sido el implementado en [8] y [9], aunque una alternativa que tiene algunos elementos en común es la presentada en [18].

El algoritmo de empaquetamiento formulado e implementado aquí se basa en el esquema de generación de avance frontal de [4], consistente en los siguientes tres pasos:

1. Generación de la partícula que debe ser agregada al empaquetamiento.
2. Selección de un frente activo y determinación de la posición en la cual la nueva partícula está en contacto con otra más (caso 2D) o con otras dos (caso 3D) que forman parte del frente.
3. Chequeo de si la partícula generada interseca otras existentes. Si no ocurre solapamiento la nueva partícula es aceptada y se continúa con el ciclo de generación hasta llenar el volumen (3D) o área (2D). En

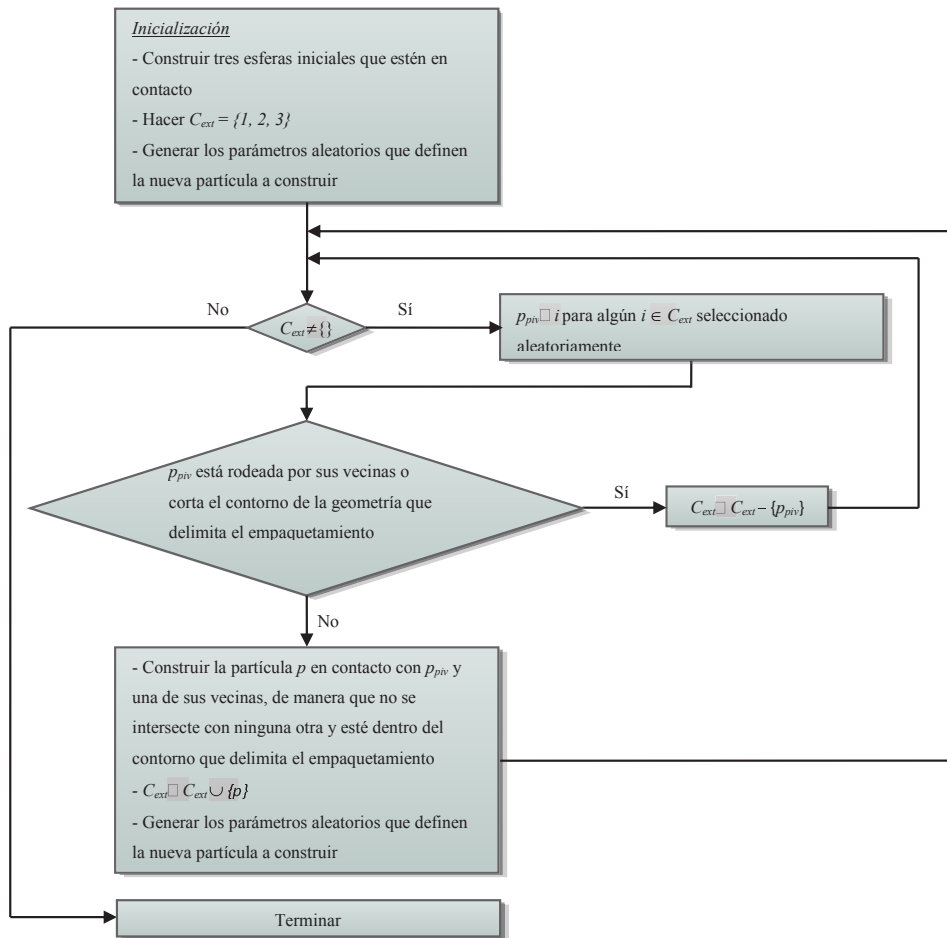


Figura 2. Algoritmo propuesto para el empaquetamiento

caso contrario se rechaza la posición y se regresa al paso 2, hasta que no exista un frente activo.

Con la finalidad de ilustrar al lector el funcionamiento del algoritmo, a continuación se incluye un pseudocódigo del algoritmo propuesto (Figura 2):

Notas:

- 1) En el pseudocódigo anterior, la partícula i -ésima se identifica con el número i .
- 2) El procedimiento de generación anterior se basa en mantener en todo momento un frente activo que se actualiza cada vez que se agrega una partícula o cada vez que una partícula está totalmente rodeada por otras, por lo que puede considerarse como un esquema de avance frontal. El frente activo es denotado por la variable C_{ext} .
- 3) La variable p_{piv} se utiliza para denotar una partícula llamada pivote, que representa la parte del frente que va a crecer inmediatamente, ya que la nueva partícula a agregar estará en contacto con p_{piv} y una de sus vecinas.

En [8] y [9] se realiza una implementación de dicho esquema, considerando un conjunto de variantes del método que proporcionan distintos patrones geométricos con determinada eficiencia cada uno. La principal ventaja de dicha investigación es que se pueden generar empaquetamientos con una fracción de volumen de aproximadamente 51 % con una velocidad aproximada de 1260 partículas por segundo.

En el algoritmo descrito anteriormente, los frentes de avance están compuestos por tríos de esferas no necesariamente tangentes entre sí. Otra variante algorítmica que se ha implementado está descrita en [18], en la cual cada frente de avance está compuesto por tres esferas tangentes, a las cuales se les coloca una nueva tangente a ellas tres (de forma similar a como se plantea en [4]). Esta formulación tiene la ventaja de presentar una velocidad media superior a las 3000 partículas por segundo en la mayoría de los casos, y densidades cercanas al 50 % para una distribución U [1,2] de los radios de las esferas.

La ventaja de los métodos descritos en este apartado es que permiten obtener conjuntos de partículas con una alta densidad, pero no permiten reproducir las trabéculas orientadas del hueso esponjoso. Sin embargo, realizándoles las modificaciones convenientes, sí permiten modelar de una forma realista materiales óseos, como se verá a continuación.

3. Modelación geométrica de materiales óseos

El hueso trabecular puede considerarse como una masa continua con agujeros alargados según las líneas de fuerza, siendo un material ortótropo[19]. En el presente trabajo, esto se ha modelado a través de empaquetamientos de partículas circulares o esféricas que forman agujeros elípticos que tienen su eje mayor orientado según una dirección determinada.

Por otro lado, el MED es una herramienta que permitirá modelar de una manera directa la ortotropía de un material mediante los mencionados agujeros elípticos, lo cual podrá comprobarse cuando se efectúen las simulaciones correspondientes con los empaquetamientos descritos.

En esta investigación se han desarrollado diversos métodos que permiten obtener empaquetamientos de partículas que forman huecos elípticos (en forma de trabécula), los cuales están cubiertos de una capa compacta de partículas, lo cual puede ser empleado para modelar el hueso trabecular rodeado del cortical. A continuación se describen dichos métodos.

Método 1

Luego de cubrir el empaquetamiento con una malla de rectángulos, se definen elipses inscritas en algunos de ellos (con semiejes paralelos a los lados) y se eliminan los círculos que estén dentro de ellas. La existencia de las elipses se puede definir a través de una matriz binaria cuyos elementos se pueden definir de una forma determinista o aleatoria. Por ejemplo, la matriz correspondiente a la Figura 3 es

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Método 2

En este método se superpone un empaquetamiento de círculos grandes sobre uno de círculos pequeños y

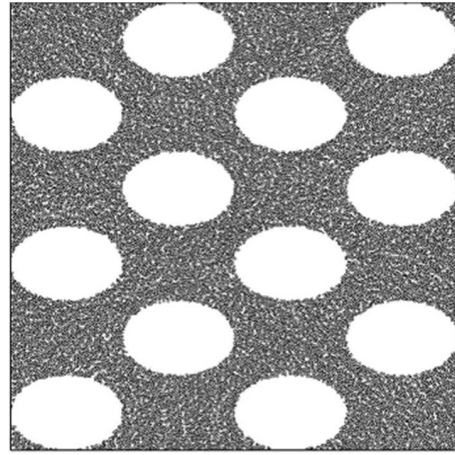


Figura 3. Empaquetamiento con agujeros elípticos uniformes

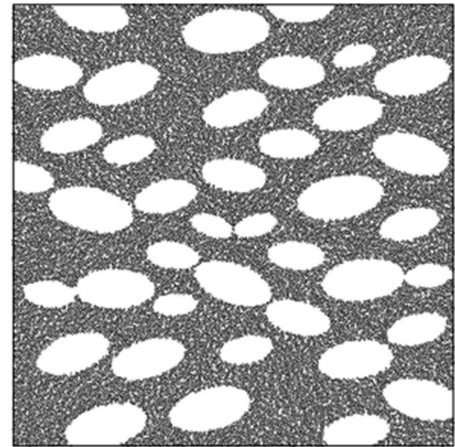


Figura 4. Agujeros elípticos aleatorios

se eliminan los pequeños que caigan dentro de elipses inscritas en los grandes. Las elipses tienen un pequeño ángulo de inclinación aleatorio. En el ejemplo mostrado en la Figura 4, se ha llenado un cuadrado de lado 600 con círculos de radios distribuidos $U[1,2]$. Los agujeros elípticos han sido obtenidos a partir de un empaquetamiento de círculos de radios distribuidos $U[30,60]$.

Método 3

Este método selecciona sucesivamente una partícula de forma aleatoria y a partir de ella construye otra concéntrica con la primera y con un radio que se encuentra determinado aleatoriamente por los valores de radios mínimo y máximo de las partículas del empaquetamiento. La selección de la partícula P_i se realiza generando un número aleatorio entre uno y la cantidad de partículas con que cuenta el empaquetamiento. El nuevo círculo P_k que se colocara a partir de P_i es-

tará determinado por el centro de P_i y su radio sigue una distribución cuyos valores máximo ($radio_{max}$) y mínimo ($radio_{min}$) son calculados por la siguiente expresión:

$$radio_{max} = \frac{Rpart_{max}}{Relación\ de\ densidad} \quad (1)$$

$$radio_{min} = \frac{Rpart_{min}}{Relación\ de\ densidad} \quad (2)$$

donde $Rpart_{max}$ y $Rpart_{min}$ son los radios máximo y mínimo de las partículas del empaquetamiento y la *Relación de densidad* es la relación existente entre la zona porosa y la zona densa del material en estudio. De esta manera, para determinar el nuevo radio (r'_k) se genera un número aleatorio siguiendo la distribución $U(Rpart_{max}, radio_{min})$, como muestra la Figura 5.

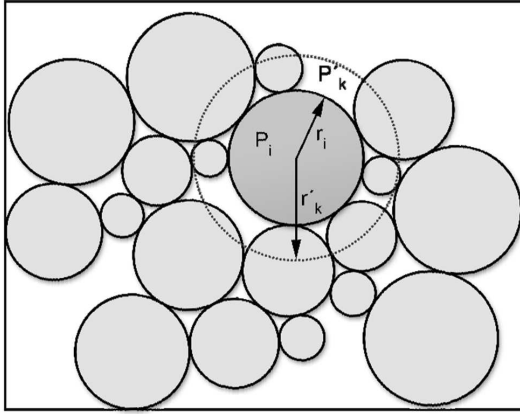


Figura 5. Círculo concéntrico con la partícula seleccionada aleatoriamente

En el próximo paso, se eliminan todas las partículas que intercepten al círculo recién construido P'_k y se repite el paso anteriormente descrito. Este proceso se va a repetir hasta eliminar una cantidad tope de partículas del empaquetamiento, la cual se calcula de la siguiente manera:

$$Cantidad\ partículas\ eliminar = cantidad\ de\ partículas * Relación\ de\ densidad$$

donde la *cantidad partículas* se refiere al número total de partículas con que cuenta el empaquetamiento y la *Cantidad partículas eliminar* se refiere al número máximo de partículas que se van a eliminar del empaquetamiento. Mientras no se haya alcanzado esta cifra, se repetirá el proceso anteriormente descrito. Dos ejemplos de empaquetamientos obtenidos se muestran en las Figuras 6 y 7.

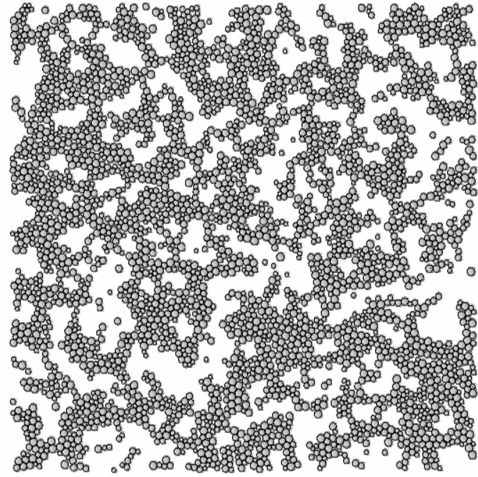


Figura 6. Empaquetamiento obtenido con $Rpart_{min} = 1,0$ $Rpart_{max} = 2,0$ y *relación de densidad* 0.5

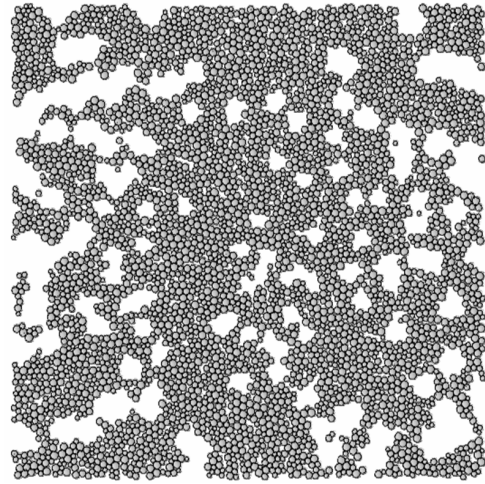


Figura 7. Empaquetamiento obtenido con $Rpart_{min} = 1,0$ $Rpart_{max} = 2,0$ y *relación de densidad* 0.3

Método 4

En este método se calcula un umbral a partir de los parámetros $Rpart_{min}$, $Rpart_{max}$ y la *relación de densidad* de la siguiente manera:

$$umbral = Rpart_{max} - relación\ de\ densidad * (Rpart_{max} - Rpart_{min}) \quad (3)$$

Luego se eliminan todas las partículas cuyo radio sobrepase el umbral calculado.

Las Figuras 8 y 9 son ejemplos preliminares obtenidos. En estas se puede observar que si bien el método permite disminuir la densidad, no posibilita obtener huecos, ya que la pérdida de densidad es aproximadamente “uniforme” en todo el sistema de partículas.

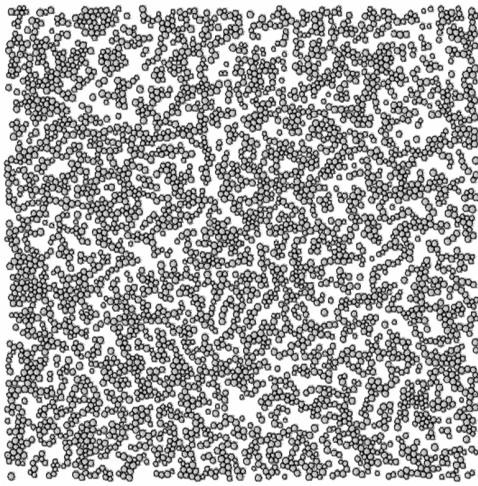


Figura 8. Empaquetamiento obtenido con $Rpart_{min} = 1,0$ $Rpart_{max} = 2,0$ y relación de densidad 0.3

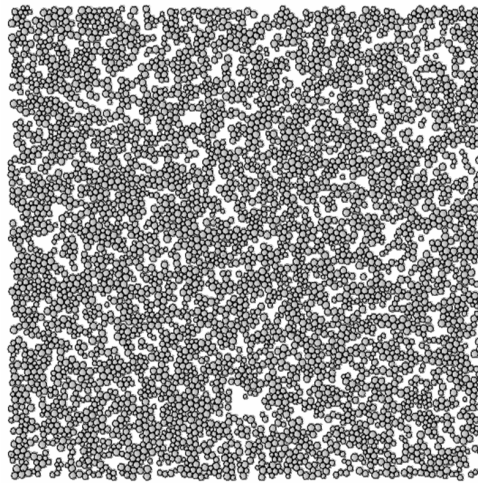


Figura 9. Empaquetamiento obtenido con $Rpart_{min} = 1,0$ $Rpart_{max} = 2,0$ y relación de densidad 0.15

Método 5

El método 4 propuesto anteriormente no es una buena solución para el problema tratado, a pesar de ser una alternativa para rebajar la densidad de un material en un por ciento preestablecido. El método que se aborda a continuación se ha combinado con una técnica de avance frontal. Consiste en construir un empaquetamiento representado por círculos tratados como partículas y círculos tratados como huecos. Para esto se cuenta con una distribución para cada uno de los dos tipos de elementos (partículas y huecos) que se irán construyendo a través del método de avance frontal. Cada frente de avance puede estar formado por dos círculos o dos huecos o hueco y círculo. El problema geométrico afrontado

es el mismo que en las tradicionales variantes de esta técnica de generación con la diferencia que en la fase final se eliminarán todos los círculos que representan huecos. Para determinar si el próximo elemento a colocar representará una partícula o un hueco se asocia una probabilidad a cada elemento determinada por la siguiente ecuación

$$P_{hueco} + P_{partícula} = 1 \quad (4)$$

donde P_{hueco} es la probabilidad de que el círculo sea un hueco y $P_{partícula}$ la probabilidad de que el círculo sea una partícula. De esta manera generando un número aleatorio de cero a uno y teniendo la probabilidad asociada a uno de los elementos es posible lograr empaquetamientos porosos con una técnica de avance frontal. Con el método descrito anteriormente pueden obtenerse sistemas de partículas tales como los muestran las Figuras 10 y 11.

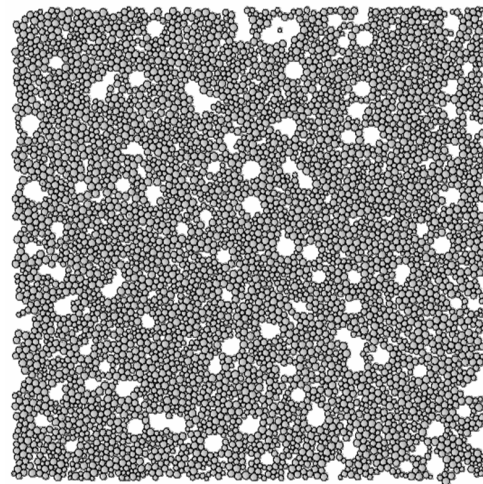


Figura 10. Empaquetamiento obtenido con $radio_{huecos} \sim U[3,5]$, $radio_{partículas} \sim U[1,2]$, $P_{hueco} = 0,02$

Existe una relación entre las distribuciones que siguen las partículas y huecos y sus probabilidades de selección con la densidad final del material. Para tener un control de esta relación es necesario realizar un estudio estadístico que se sale de los objetivos del presente artículo.

Método 6

Este método es una continuación del anterior. Se basa en la forma aparentemente elíptica de las trabéculas del hueso, la cual se ha modelado con huecos elípticos de una inclinación de ángulo ϕ . El método consiste

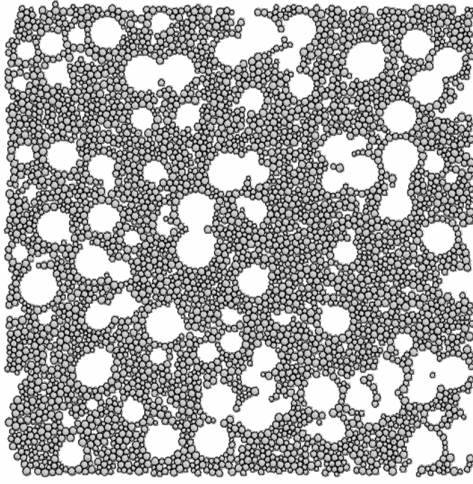


Figura 11. Empaquetamiento obtenido con $radio_{huesos} \sim U[3,10]$, $radio_{partículas} \sim U[1,2]$, $P_{hueco} = 0,02$

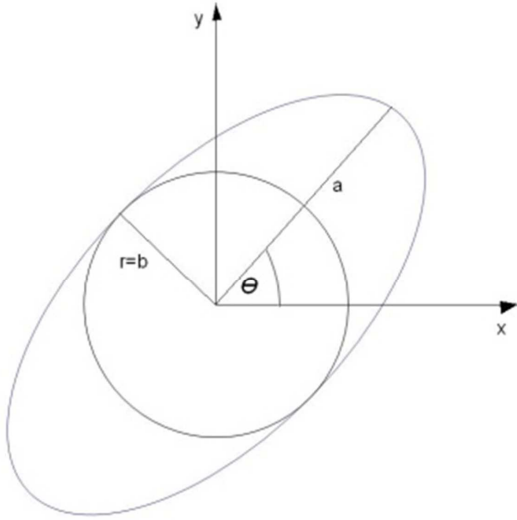


Figura 12. Elipse de semiejes mayor y menor iguales a a y b respectivamente, circunscrita en un círculo que tiene su mismo centro

en inscribir en elipses los círculos que representan huecos que se formarán a partir de estos (véase la Figura 12), y luego eliminar todas las partículas que tengan su centro dentro de alguna de estas elipses, de manera que queden huecos elípticos dentro del empaquetamiento de partículas circulares.

Tal y como muestra la Figura 12, alrededor de los círculos grandes se circunscriben elipses cuyo semieje menor coincide con el radio del círculo. Para verificar si un punto p (que representa el centro de un círculo pequeño) se encuentra dentro de una elipse de centro (x_0, y_0) , semiejes mayor y menor iguales a a y b respectivamente, e inclinación $-\theta$, se evalúa el punto

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} (p - (x_0, y_0)^T)$$

de la ecuación canónica $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$. Si este es menor que 1, el punto está dentro de la elipse, si es igual a 1, el punto está sobre la curva, y si es estrictamente mayor, el punto está por fuera

Las siguientes Figuras 13 y 14 son ejemplos de empaquetamientos obtenidos con el método descrito.

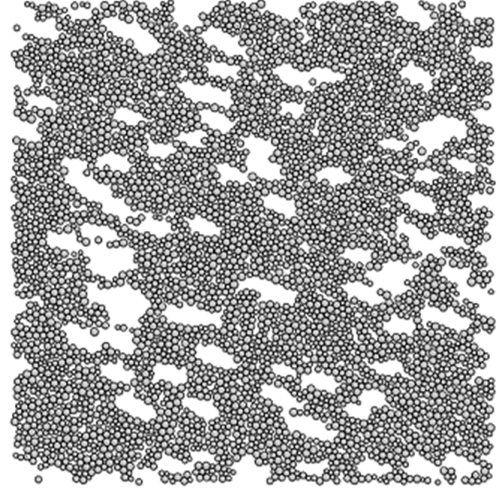


Figura 13. Empaquetamiento obtenido con $\phi \sim U[0^\circ, 30^\circ]$, $radio_{huesos} \sim U[3,5]$, $radio_{partículas} \sim U[1, 2]$, $P_{hueco} = 0,02$

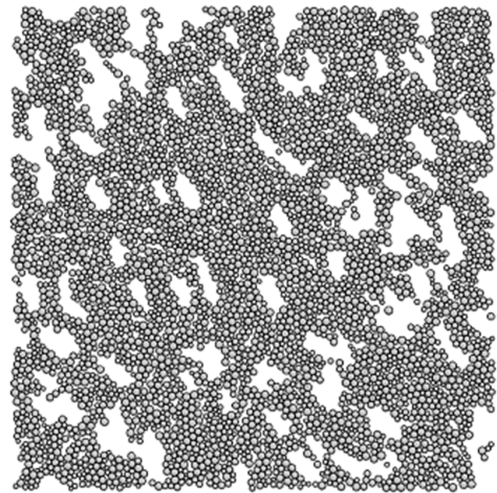


Figura 14. Empaquetamiento obtenido con $\phi \sim U[30^\circ, 90^\circ]$, $radio_{huesos} \sim U(3,5)$, $radio_{partículas} \sim U[1, 2]$, $P_{hueco} = 0,02$

Por último, es necesario decir que debido a la forma en que está definido el método, pueden quedar partícu-

las completamente desconectadas del conjunto, y éstas deben ser eliminadas.

4. Selección de métodos de empaquetamiento para materiales óseos

Los seis métodos descritos en el apartado anterior son un intento de modelar la estructura del hueso, tanto su parte cortical como trabecular combinadas. No se puede afirmar a priori que alguno de ellos será el mejor. En cuanto a tiempo de cálculo, todos son equivalentes, por lo cual el único criterio para decidirse por uno o varios de ellos debe ser a través de simulaciones con el Método de Partículas. Desde el punto de vista geométrico, es bastante difícil poder cuantificar en cuánto se parecen las estructuras generadas a los huesos reales.

Lo más que se puede hacer en el estado actual de la investigación es tratar de obtener la misma fracción de volumen que tienen los huesos reales. Para esto existen dos variantes, ya que en la parte trabecular, el medio continuo que contiene a las trabéculas está modelado con esferas pequeñas, y para determinar la densidad del empaquetamiento pudiera considerarse o no la porosidad del conjunto de esferas pequeñas.

5. Extensión a 3D de los métodos anteriores

Los métodos descritos han sido extendidos a tres dimensiones, mediante la creación de agujeros en forma de elipsoides en empaquetamientos de esferas. Un elipsoide en 3D se puede representar por las componentes $\{xCentro, yCentro, zCentro, a, b, \theta_z, \theta_x\}$, donde el significado de los parámetros es el siguiente: para verificar si un punto p pertenece al elipsoide, el punto $M_{z,\theta_z} M_{x,\theta_x} (p - (xCentro, yCentro, zCentro))^T$ se evalúa en el miembro izquierdo de la ecuación canónica $x^2/a^2 + y^2/b^2 + z^2/b^2 = 1$, siendo

$$M_{z,\theta_z} = \begin{pmatrix} \cos \theta_z & -\sin \theta_z & 0 \\ \sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$M_{x,\theta_x} = \begin{pmatrix} 0 & \cos \theta_x & -\sin \theta_x \\ 0 & \sin \theta_x & \cos \theta_x \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

La distribución de θ_x y θ_z ha sido $U[0, 2\pi]$ y $U[-\epsilon_z, \epsilon_z]$ respectivamente, donde ϵ_z se tomó como $\epsilon_z = 0,358$.

La Figura 15 muestra un corte en forma de ortocentro de poca altura, realizado a una generación aplicando el método que ha sido explicado. En esta se puede

observar que la parte exterior no tiene agujeros y sirve para modelar la parte cortical del hueso, mientras que la parte interior del empaquetamiento tiene agujeros elípticos, por lo cual es apropiada para modelar la parte trabecular.

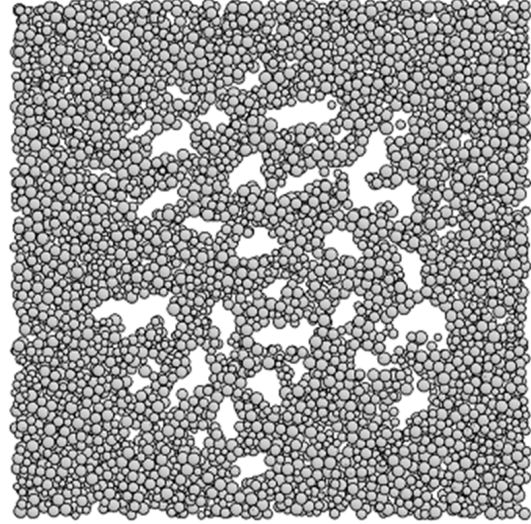


Figura 15. Extensión a 3D del método 6

6. Modelación de huesos humanos

Los métodos descritos anteriormente se emplearán en el llenado de mallas que representen huesos reales, como por ejemplo, los siguientes cráneo y mandíbula (Figuras 16 y 17), obtenidos mediante la aplicación del método 6 extendido a 3D tal y como se explica en la sección 5.

A pesar de que se han obtenido algunos resultados iniciales, hay aspectos que es necesario mejorar. Por ejemplo, aunque a primera vista las trabéculas parecen tener forma elíptica, pueden existir mejores modelos geométricos. Es necesario realizar un estudio de la forma geométrica de las trabéculas para modelarlas mediante huecos en empaquetamientos compactos de esferas o de otro tipo de cuerpos.

Como el objetivo principal de reproducir la estructura geométrica del hueso es simular las características mecánicas de los huesos reales, quizás las partículas esféricas no son las más apropiadas para este objetivo, por lo cual en futuras investigaciones se debe experimentar con otras formas tales como elipses o conglomerados de esferas, siendo importante también la orientación espacial de estas.

Se debe trabajar también en encontrar métodos para obtener conjuntos de partículas lo más compactos posible, tanto para modelar el hueso cortical como para

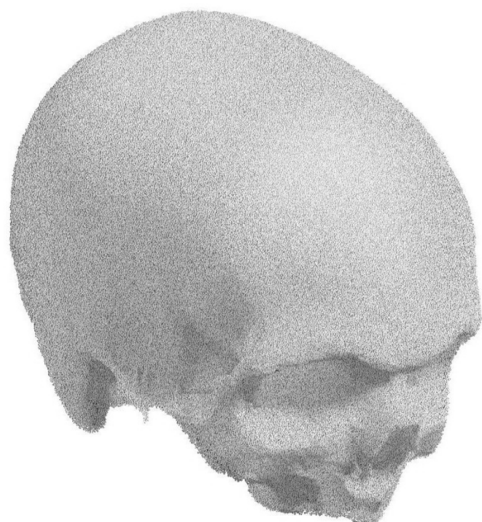


Figura 16. Cráneo humano generado con 1101921 partículas esféricas



Figura 17. Mandíbula humana generada con 73605 partículas esféricas

modelar la parte esponjosa antes de realizarle los agujeros. También se debe investigar cuáles distribuciones estadísticas son las más apropiadas para las dimensiones de los elementos discretos, teniendo en cuenta que no existe una relación física directa entre dichas dimensiones y las características geométricas del tejido óseo.

Otro aspecto importante a tener en cuenta es el tiempo de CPU. Cuando la malla que rodea los elementos discretos tiene poca complejidad, se pueden obtener conjuntos de un gran número de partículas de una forma bastante eficiente. Por ejemplo, en [8] obtiene un conjunto de 1931732 esferas contenidas en un cubo en 85 minutos, en una PC de 2.66 GHz. Sin embargo, con

mallas complejas tales como las de las Figuras 16 y 17, se pierde mucho tiempo en la verificación de la interioridad de puntos dentro de esta, por lo cual es necesario implementar métodos que mejoren la eficiencia en este sentido [16].

7. Conclusiones

Se han desarrollado y descrito métodos de empaquetamiento para simulaciones con el MED que permitan modelar complejos huesos humanos como la mandíbula y el cráneo, modelando características fundamentales de los huesos tales como la ortotropía.

En el caso del hueso trabecular, esto ha sido logrado a través de agujeros elípticos realizados a empaquetamientos lo más compactos posible de círculos o esferas, mientras que el hueso cortical ha sido modelado con empaquetamientos lo más densos posible.

La validez o utilidad de los métodos de empaquetamiento presentados solo puede comprobarse cuando se realicen simulaciones con el MED, y hacia esto está encaminado el trabajo inmediato. Es necesario seguir investigando cómo modelar las trabéculas y qué distribución estadística es la más apropiada para las dimensiones de los elementos discretos. También es necesario comprobar en la práctica con qué tipo de elementos discretos se obtienen resultados que describan mejor el comportamiento mecánico del tejido óseo; así como desarrollar algoritmos de empaquetamiento que permitan obtener una fracción de volumen lo más alta posible.

Por último, con el objetivo de reducir los tiempos de CPU, es necesario implementar métodos más eficientes para determinar la interioridad de un punto en una malla.

Agradecimientos

Al Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (Barcelona, España) y al Instituto Nacional de Bioingeniería (Caracas, Venezuela) por haber financiado parte de esta investigación.

Referencias

1. Feng Y.T., Han K., Owen D.R.J. (2003) Filling domains with disks: an advancing front approach. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 56:699-713
2. Bagi K. (2005) An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies. *Granular Matter* 7:31-43

3. Zsaki A.M. (2009) An efficient method for packing polygonal domains with disks for 2D discrete element simulation. *Computers and Geotechnics* 36:568-576
4. Feng Y.T., Han K., Owen D.R.J. (2002) An advancing front packing of Polygons, Ellipses and Spheres. In *Discrete Element Methods*, Cook B.K., Jensen R.P. (Eds.) ASCE, New York, pp. 104-106
5. Wang Ch.Y., Liang V-Ch. (1997) A packing generation scheme for the granular assemblies of planar elliptical particles. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* 21:347-358
6. Wang Ch-Y., Wang L., Sheng J. (1999) A packing generation scheme for the granular assemblies with 3d ellipsoidal particles. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* 23:815-828
7. Löhner R., Oñate E. (2004) A general advancing front technique for filling space with arbitrary objects. *Int. J. for Num. Meth. in Engng.* 61:1977-1991
8. Pérez Y. (2007) *Implementación del empaquetamiento en el Método de Elementos Distintos*. Tesis de Grado, Universidad Central de Las Villas, Cuba
9. Roselló R. (2007) *Biblioteca de clases para su uso en la fase de empaquetamiento en el Método de Elementos Distintos*. Tesis de Grado, Universidad Central de Las Villas, Cuba
10. Feng Y.T., Han K., Owen D.R.J. (2005) Sphere packing with a geometric based compression algorithm. *Powder Technology* 155:33-41
11. Perkins E., Williams J.R. (2001) A fast contact detection algorithm insensitive to object sizes. *Engineering Computations* 18(1/2):48-61
12. Nandakumar K., Shu Y., Chuang K.T. (1999) Predicting geometrical properties of random packed beds from computer simulation. *AIChE Journal* 45(11):2286-2297
13. Cui L., O'Sullivan C. (2003) Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations. *Granular Matter* 5:135-145
14. Sutou A., Dai Y. (2002) Global optimization approach to unequal sphere packing problems in 3D. *Journal of Optimization Theory and Applications* 114(3):671-694
15. Ferrez J.A. (2001) Dynamic triangulations for efficient 3D simulation of granular materials. Thèse No. 2432, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, pour l'obtention du grade de docteur ès sciences
16. Pérez I., Roselló R., Pérez Y., Díaz-Guzmán H., Recarey C. (2009) Procedimiento de empaquetamiento de partículas genéricas para el método de elementos discretos. *Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing.* 25(2):95-110
17. Rojas Y. (2009) *Algoritmo para la fase de empaquetamiento del Método de Elementos Distintos*. Tesis de grado, Universidad Central de Las Villas, Cuba
18. Buroni F.C., Commisso P.E., Cisilino A., Sammartino M. (2004) Determinación de las constantes elásticas anisótropas del tejido óseo utilizando tomografías computadas. Aplicación a la construcción de modelos de elementos finitos. *Mecánica Computacional XXIII*:3009-3032
19. Goodman J.E., O'Rourke J. (Eds.) (1997) Handbook of Discrete and Computational Geometry. *CRC Press LLC*, section 30