
DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES EFETIVAS DA ESTRUTURA ÓSSEA PELO MÉTODO DE HOMOGENEIZAÇÃO ASSIMPTÓTICA

U. P. Silva *, A. R. Aguiar *, J. Bravo-Castillero **, R. Rodríguez-Ramos **

*Programa de Pós-Graduação Interunidades em Bioengenharia, EESC/FMRP/IQSC. Universidade de São Paulo - USP, São Carlos, Brasil.

**Facultad de Matemática y Computación, Universidad de la Habana, San Lázaro y L. Vedado, Habana 4, CP-10400, Cuba.

e-mail: uziel@sc.usp.br

Abstract: The bone structure is modeled as a composite material containing a periodic distribution of circular cylindrical holes in a linear transversely isotropic piezoelectric matrix. To obtain its effective properties, the Asymptotic Homogenization Method (MHA) is used. A set of local problems is then defined and solutions to these problems are presented, yielding the effective elastic, piezoelectric, and dielectric coefficients of the composite. Furthermore, results are presented for cortical bones, which compare very well with results found in the literature. This work is an ongoing research effort to understand the overall behavior of bone structures from their microstructural behavior. **Palavras-chave:** Elasticity, Piezoelectricity, Asymptotic Homogenization Method, Bone.

Introdução

Materiais piezoelétricos têm despertado considerável interesse devido às suas propriedades eletromecânicas, as quais estão relacionadas à produção de ambos, deformação mecânica sob a ação de cargas elétricas e campo elétrico sob a aplicação de cargas mecânicas, [1].

O osso exibe um comportamento elástico-linear para pequenas deformações e pode ser modelado como um composto heterogêneo, anisotrópico e piezoelétrico, [2-4]. A origem da piezoelectricidade no osso é atribuída ao efeito piezoelétrico das moléculas de colágeno cristalizadas, [4]. Duarte [5] atribui à piezoelectricidade a aceleração do processo de consolidação de fraturas ósseas por ultra-som de baixa intensidade. No entanto, a velocidade do processo de consolidação de fraturas depende da qualidade óssea.

A qualidade óssea compreende os aspectos da estrutura e composição óssea que contribuem para a rigidez e resistência do osso e são independentes da densidade mineral óssea, tais como *turnover* ósseo, microarquitetura, mineralização, microdanos e composição da matriz óssea e mineral, [6]. Alterações microestruturais, tais como redução do número e largura das trabéculas, são alguns sinais característicos de que há osteoporose e que, portanto há redução da resistência óssea, [7]. Porém, alterações nas trabéculas não podem

ser medidas por técnicas tradicionais de medição da qualidade óssea, tais como a densitometria óssea. O entendimento das propriedades efetivas de estruturas ósseas possibilita compreender alterações na microestrutura e é de grande interesse no desenvolvimento de experimentos e na correta interpretação das observações experimentais. Este entendimento possibilita também a criação de novas tecnologias, tais como a plataforma Juvent1000 DMT® [8], para tratar e prevenir o desenvolvimento da osteoporose de forma não invasiva e sem o uso de medicamentos.

O Método de Homogeneização Assimptótica (MHA) fornece um procedimento matemático rigoroso que possibilita calcular as propriedades efetivas de meios não homogêneos contendo uma microestrutura periódica, [9-15]. Neste trabalho, admite-se que a microestrutura óssea é periódica e utiliza-se o MHA para gerar um modelo analítico que consiga capturar a resposta eletromecânica do osso. Para isto, considera-se que a microestrutura óssea pode ser modelada por um elemento representativo de volume (RVE). Este elemento contém informações sobre a geometria e as propriedades materiais da microestrutura.

Materiais e Métodos

Modela-se o osso como um sólido poroso composto de furos cilíndricos circulares vazios distribuídos periodicamente em uma matriz óssea, a qual assume-se que é transversalmente isotrópica.

A matriz ocupa a região M ilustrada na Figura 1.a e a célula periódica ocupa a região Y ilustrada na Figura 1.b. A região Y é um paralelogramo contendo um furo circular, centrado na interseção das diagonais do paralelogramo, de raio R e contorno Γ . Considera-se uma distribuição periódica destas células na região M com períodos $\omega_1 = (\varepsilon, 0)$ e $\omega_2 = (0, \varepsilon)$.

Um material piezoelétrico linear possui a seguinte relação constitutiva, [16],

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} - e_{kij} E_k, \\ D_i = e_{ikl} \varepsilon_{kl} + \varepsilon_{ik} E_k. \end{cases} \quad (1)$$

Adota-se em (1) a convenção usual de soma sobre todos os índices latinos repetidos, os quais variam de 1 a 3.

Observe de (1) que as componentes do tensor tensão, σ_{ij} , e do vetor deslocamento elétrico, D_i , estão linearmente relacionadas com as componentes do tensor deformação, ε_{kl} , e do vetor campo elétrico, E_k , respectivamente. As propriedades do material são dadas pelas componentes dos tensores elástico, C_{ijkl} , piezoelétrico, e_{kij} , e de permissividade dielétrica, ε_{ik} .

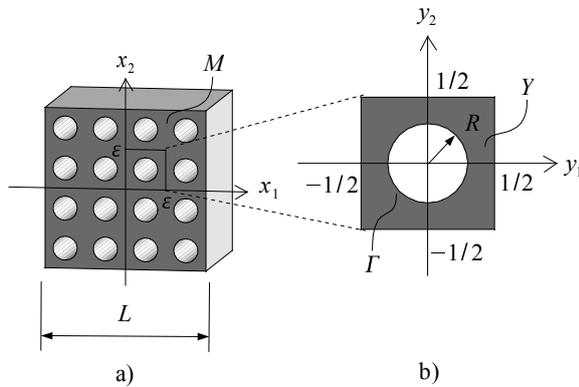


Figura 1: a) Compósito poroso consistindo de cilindros circulares periodicamente distribuídos em um meio piezoelétrico; b) Célula periódica elementar quadrada com coordenadas ($y_1=x_1/\varepsilon-1/2$, $y_2=x_2/\varepsilon-1/2$).

O MHA é um método utilizado para encontrar os coeficientes que representam as propriedades elásticas, piezoelétricas e dielétricas de um meio heterogêneo através de uma expansão assintótica em forma de série de potências de um parâmetro geométrico pequeno ε . Este parâmetro é o quociente entre uma grandeza geométrica da célula periódica por uma grandeza geométrica de todo o composto. Neste trabalho, $\varepsilon = 1/L$, conforme ilustrado na Fig.1. Em geral, a solução do problema original converge para a solução do problema homogeneizado quando $\varepsilon \rightarrow 0$.

A aplicação deste método necessita da solução de problemas de valor de contorno locais ${}_p L$ e ${}_{pq} L$ sobre a célula periódica para a determinação dos coeficientes efetivos do meio homogeneizado, [12], [17] e [18].

Definição dos problemas locais na célula periódica

Os problemas locais ${}_p L$ consistem em encontrar os vetores deslocamento Y -periódicos ${}_p M(y)$ e os potenciais Y -periódico ${}_p N(y)$ que satisfaçam as seguintes condições

$${}_{pq} \sigma_{i\delta,\delta} = 0 \text{ em } Y, \quad (2)$$

$${}_{pq} D_{\delta,\delta} = 0 \text{ em } Y, \quad (3)$$

$${}_{pq} \sigma_{i\delta} n_\delta = -C_{i\delta pq} n_\delta \text{ sobre } \Gamma, \quad (4)$$

$${}_{pq} D_\delta n_\delta = -e_{\delta pq} n_\delta \text{ sobre } \Gamma, \quad (5)$$

$$\langle {}_{pq} M_i \rangle = 0 \text{ e } \langle {}_{pq} N \rangle = 0. \quad (6)$$

Em (2)-(6), a vírgula denota a derivada parcial em relação à componente y_δ . Índices latinos variam de 1 a 3 e índices gregos variam de 1 a 2. Em (4) e (5), n_δ são as componentes do vetor unitário normal a Γ . Os parênteses angulares em (6) definem a média sobre a célula periódica, a qual é dada por $\langle F \rangle = \int_X F dX$.

Em (2)-(5), as componentes de tensão e de deslocamento elétrico são apresentadas em [17] e [18] e satisfazem relações constitutivas piezoelétricas lineares dadas por

$$\begin{cases} {}_{pq} \sigma_{i\delta} = C_{i\delta k\lambda} {}_{pq} M_{k,\lambda} + e_{\lambda i\delta} {}_{pq} N_{,\lambda}, \\ {}_{pq} D_\delta = e_{\delta k\lambda} {}_{pq} M_{k,\lambda} - \varepsilon_{\delta\lambda} {}_{pq} N_{,\lambda}. \end{cases} \quad (7)$$

Os coeficientes materiais em (7) satisfazem as propriedades clássicas de simetria

$$C_{ijkl} = C_{klij} = C_{jikl} = C_{ijlk}, \quad e_{kij} = e_{kji}, \quad \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}. \quad (8)$$

Os problemas locais ${}_p L$ consistem em encontrar os vetores deslocamento Y -periódicos ${}_p M(y)$ e os potenciais Y -periódicos ${}_p N(y)$ que satisfaçam as equações diferenciais (2), (3), a condição (6), a relação constitutiva (7), e

$$\begin{cases} {}_p \sigma_{i\delta} n_\delta = -e_{pi\delta} n_\delta \\ {}_p D_\delta n_\delta = \varepsilon_{\delta p} n_\delta \end{cases} \text{ sobre } \Gamma. \quad (9)$$

Resultados

As constantes elásticas, piezoelétricas e dielétricas homogeneizadas, isto é, as constantes efetivas, são dados por

$$\begin{cases} \bar{C}_{ijpq} = \langle C_{ijpq} + C_{ijkl} {}_{pq} M_{k,l} + e_{kij} {}_{pq} N_{,k} \rangle, \\ \bar{e}_{ipq} = \langle e_{ipq} + C_{ikl} {}_{pq} M_{k,l} - \varepsilon_{ik} {}_{pq} N_{,k} \rangle, \end{cases} \quad (10)$$

onde ${}_{pq} M_{k,l}$ e ${}_{pq} N_{,k}$ são soluções dos problemas ${}_p L$ definidos por (2)-(7), e por

$$\begin{cases} \bar{e}_{pij} = \langle e_{pij} + C_{ijkl} M_{k,l} - e_{kij} N_{,k} \rangle, \\ \bar{\varepsilon}_{ip} = \langle \varepsilon_{ip} + \bar{e}_{ikl} M_{k,l} - \varepsilon_{ik} N_{,k} \rangle, \end{cases} \quad (11)$$

onde ${}_p M_{k,l}$ e ${}_p N_{,k}$ são soluções dos problemas ${}_p L$ definidos por (2), (3), (6), (7) e (9). A barra sobrescrita refere-se à propriedade efetiva.

Para o caso particular de uma matriz transversalmente isotrópica, as constantes elásticas, piezoelétricas e dielétricas que aparecem na relação constitutiva (1) podem ser escritas em termos de 10 constantes independentes ($k, l, n, p, m, q, r, s, t, u$): cinco constantes elásticas $2k = C_{1111} + C_{1122}$, $2m = C_{1111} - C_{1122} (= 2C_{1212})$, $l = C_{1133} = C_{2233}$, $n = C_{3333}$, $p = C_{1313} = C_{2323}$; três piezoelétricas $q = e_{311} = e_{322}$, $r = e_{333}$, $s = e_{113} = e_{223}$ e duas dielétricas $t = \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22}$, $u = \varepsilon_{33}$, [19]. A notação acima é uma extensão da notação de Hill [20].

Assim, substituindo as relações acima nas expressões (10) e (11) obtém-se:

$$2\bar{k} = 2k_v + k \langle {}_{11}M_{\alpha,\alpha} + {}_{22}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} 2\bar{l} &= 2l_v + l \langle {}_{11}M_{\alpha,\alpha} + {}_{22}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \\ &= 2l_v + 2k \langle {}_{33}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\bar{n} = n_v + l \langle {}_{33}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} 2\bar{q} &= 2q_v + q \langle {}_{11}M_{\alpha,\alpha} + {}_{22}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \\ &= 2q_v + 2k \langle {}_{33}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \bar{r} &= r_v + q \langle {}_{33}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \\ &= r_v + l \langle {}_{33}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\bar{u} = u_v - q \langle {}_{33}M_{\alpha,\alpha} \rangle, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \bar{m}_1 &= m_v + m \langle {}_{11}M_{1,1} - {}_{11}M_{2,2} \rangle, \\ &= m_v + m \langle {}_{22}M_{1,1} - {}_{22}M_{2,2} \rangle, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\bar{m} = m_v + m \langle {}_{12}M_{2,1} - {}_{12}M_{1,2} \rangle, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \bar{p} &= p_v + p \langle {}_{13}M_{3,1} \rangle + s \langle {}_{13}N_{,1} \rangle, \\ &= p_v + p \langle {}_{23}M_{3,2} \rangle + s \langle {}_{23}N_{,2} \rangle, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \bar{s} &= s_v + s \langle {}_{13}M_{3,1} \rangle - t \langle {}_{13}N_{,1} \rangle, \\ &= s_v + s \langle {}_{23}M_{3,2} \rangle - t \langle {}_{23}N_{,2} \rangle, \\ &= s_v + p \langle {}_{13}M_{3,1} \rangle + st \langle {}_{13}N_{,1} \rangle, \\ &= s_v + p \langle {}_{23}M_{3,2} \rangle + st \langle {}_{23}N_{,2} \rangle, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \bar{t} &= t_v - s \langle {}_{13}M_{3,1} \rangle + t \langle {}_{13}N_{,1} \rangle, \\ &= t_v - s \langle {}_{23}M_{3,2} \rangle + t \langle {}_{23}N_{,2} \rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

O índice subscrito v nos primeiros termos do lado direito das equações (12)-(22) denota a média aritmética da propriedade relatada sobre a célula. Deste modo,

$$k_v = k(1 - \pi R^2). \quad (23)$$

Além disso, índices gregos repetidos determinam o somatório

$${}_{33}M_{\alpha,\alpha} = {}_{33}M_{1,1} + {}_{33}M_{2,2}. \quad (24)$$

Utilizam-se agora as expressões (10) e (11) para calcular as propriedades efetivas do osso cortical considerando que a parte sólida do osso é elástico-linear e isotrópica e que, portanto, as constantes piezoelétricas e dielétricas da parte sólida são nulas. Considera-se que o módulo de Young e o coeficiente de Poisson da parte sólida sejam dados por $E = 12$ GPa e $\nu = 0,38$, respectivamente, e que a porosidade do osso cortical seja 0,04. Estes dados foram obtidos da Tabela 2 de [21]. Na Tabela 1 comparam-se os valores das propriedades efetivas obtidas pelo MHA com os valores obtidos por [21] via Método dos Elementos Finitos.

Tabela 1: Constantes elásticas efetivas do osso cortical totalmente drenado, onde N é o valor tomado da Tabela 2 de [21] e M é o valor obtido via MHA.

| Constantes Elásticas Efetivas | N | M |
|---|--------|--------|
| $\bar{C}_{1111} = \bar{C}_{2222}$ | 18,631 | 18,660 |
| \bar{C}_{3333} | 19,975 | 19,443 |
| $\bar{C}_{1133} = \bar{C}_{3311} = \bar{C}_{2233} = \bar{C}_{3322}$ | 11,138 | 10,949 |
| $\bar{C}_{1122} = \bar{C}_{2211}$ | 10,701 | 10,736 |
| $\bar{C}_{4444} = \bar{C}_{5555}$ | 4,016 | 4,013 |
| \bar{C}_{6666} | 3,922 | 3,915 |

Discussão

O MHA foi aplicado no modelamento de um sólido com microestrutura periódica para a obtenção das suas propriedades efetivas, as quais compreendem as propriedades elásticas, piezoelétricas e dielétricas. Estes resultados analíticos servem como base de comparação para resultados obtidos por meio de técnicas experimentais para a monitoração da qualidade óssea.

Uma vantagem do MHA sobre outros métodos de homogeneização utilizados na análise das propriedades efetivas da estrutura óssea consiste na determinação destas propriedades a partir da solução de problemas locais definidos sobre uma única célula periódica. Por

outro lado, a própria periodicidade da microestrutura é uma limitação do método, pois, em geral, a microestrutura óssea não é periódica.

Dada uma geometria para a célula periódica, o MHA possibilita determinar as propriedades efetivas e caracterizar as propriedades de simetria da estrutura óssea. Neste trabalho utilizou-se uma célula contendo um furo circular centrado em um quadrado e escreveram-se os coeficientes efetivos em termos de dez constantes independentes. Estes resultados analíticos obtidos pelo MHA são importantes na validação de modelos numéricos e estão sendo comparados com resultados experimentais.

Aplicou-se o MHA na obtenção das propriedades efetivas do osso cortical totalmente drenado. Os valores das constantes elásticas obtidas pelo MHA concordam com os resultados de [21] na faixa de 0,0009% a 0,9% .

Estudos comparativos com outros modelos analíticos e numéricos, como os de Kar-Gupta e Venkatesh [1, 22], para calcular a resposta global eletromecânica de materiais piezoelétricos porosos com comportamento elástico-linear, estão sendo realizados pelo nosso grupo de pesquisa.

Agradecimentos

Este estudo é amparado pelo Programa de Pós-graduação Interunidades em Bioengenharia da USP com o apoio da CAPES.

Referências

- [1] Kar-Gupta, R., Venkatesh, T.A. (2007) "Electromechanical response of 1-3 piezoelectric composites: An analytical model" *Acta Materialia*, v. 55, p. 1093-1108.
- [2] Hollister, S.J., Fyhrie, D.P., Jepsen, K.J., Goldstein, S.A. (1989) "Analysis of trabecular bone micromechanics using homogenization theory with comparison to experimental results" *Journal of Biomechanics*, v. 22, p. 1025.
- [3] Cowin, S.C. (1985) "The Relationship Between The Elasticity Tensor and The Fabric Tensor" *Mechanics of Materials*, v. 4, p. 137-147.
- [4] Fukada, E., Yasuda, I. (1957) "On Piezoelectric Effect of Bone" *Journal of The Physical Society of Japan*, v. 12, n. 10, p. 1158-1162.
- [5] Duarte, L.R. (1983) "The Simulation of Bone Growth by Ultrasound" *Achieves of Orthopedics and Traumatic Surge*, v. 101, p. 153-159.
- [6] Compston, J. (2006) "Bone quality: what is it and how is it measured?" *Arquivos Brasileiros de Endocrinologia & Metabologia*, vol.50, no.4, p.579-585.
- [7] Sierpowska, J., Hakulinen, M.A., Töyräs, J., Day, J.S., Weinans, H., Kiviranta, I., Jurvelin, J.S., Lappalainen, R. (2006) "Interrelationships between electrical properties and microstructure of human trabecular bone" *Physics in Medicine and Biology*, v. 51, p. 5289-5303.
- [8] Juvent - Dynamic Motion Therapy. [online] Disponível na Internet via WWW. URL: <http://www.dexa.med.br/juvent/index.html>. Arquivo visualizado em 30 de julho de 2008.
- [9] Bensoussan, A., Lions, J.L., Papanicolau, G. (1978), *Asymptotic Analysis for Periodic Structure*. Amsterdam: North-Holland.
- [10] Sanchez-Palencia, E. (1980), *Non Homogeneous Media and Vibration Theory*. Lectures Notes in Physics, v. 127, Berlin: Springer.
- [11] Lions, J. (1981), *Some Methods in The Mathematical Analysis: Analysis of Systems and their Control*. New York: Gordon and Breach.
- [12] Bakhvalov, N.S., Panasenko, G.P. (1989), *Homogenization Averaging Process in Periodic Media*. Dordrecht: Kluwer.
- [13] Kalamkarov, A.L., Kolpakov, A.G. (1997), *Analysis Design and Optimization of Composite Structures*. Chichester, UK: Wiley.
- [14] Rodríguez-Ramos, R., Sabina, F.J., Guinovart-Díaz, R., Bravo-Castillero, J. (2001) "Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents. - I. Elastic and Square Symmetry" *Mechanics of Materials*, v. 33, p. 223-235.
- [15] Hashim, Z. (1983) "Analysis of Composite Materials – a survey" *Journal Appl. Mech.*, v. 50, p. 481-505.
- [16] Ikeda, T. (1990) *Fundamentals of Piezoelectricity*. Oxford University Press, Oxford.
- [17] Sabina, F.J., Rodríguez-Ramos, R., Bravo-Castillero, J., Guinovart-Díaz, R. (2001) "Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents. - II. Piezoelectric and Hexagonal Symmetry" *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 49, p. 1463-1479.
- [18] Bravo-Castillero, J., Guinovart-Díaz, R., Sabina, F.J., Rodríguez-Ramos, R. (2001) "Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents. - II. Piezoelectric and Square Symmetry" *Mechanics of Materials*, v. 33, p. 237-248.
- [19] Schulgasser, K. (1992) "Relationship Between The Effective Properties Of Transversely Isotropic Piezoelectric Composite" *Journal Mech. Phys. Solids*, v. 40, n. 2, p. 473-479.
- [20] Hill, R. (1964) "Theory Of Mechanical Properties Of Fiber-Strengthened Materials: I. Elastic Behaviour" *Journal Mech. Phys. Solids*, v. 12, p. 199-212.
- [21] Swan CC, Lakes RS, Brand RA, Stewart KJ. (2003) "Micromechanically Based Poroelastic Modeling of Fluid Flow in Haversian" *Bone Journal of Biomechanical Engineering*, v.125, p. 25-37.
- [22] Kar-Gupta, R., Venkatesh, T.A. (2006) "Electromechanical response of porous piezoelectric materials" *Acta Materialia*, v. 54, p. 4063-4078.