

Resumen

Este PFC presenta, en primer lugar, las bases para la formalización de simulaciones numéricas de procesos de inyección de materiales de tipo cemento como los que se utilizan en las técnicas de mínima invasión de vertebroplastia y cifoplastia. Mediante estas técnicas quirúrgicas, el cirujano inyecta un cemento óseo a través de una cánula en una vértebra fracturada por compresión debido a problemas de osteoporosis, por ejemplo. En segundo lugar, se diseña, implementa y se programa un sistema ultrasónico de medida destinado a la determinación experimental de propiedades y funciones materiales específicas de los cementos simulados aunque constituye un sistema modular y escalable para la realización de cualquier valoración no destructiva mediante ultrasonidos.

Se describe en primer lugar el Estado del Arte de la aplicación clínica y de los materiales utilizados. En segundo lugar, se ha dado continuidad a trabajos y proyectos anteriores mejorando algunas realizaciones relacionadas con la simulación de la descripción del flujo mediante técnicas de Level Set. Para ello se ha documentado adecuadamente la memoria con los fundamentos básicos relacionados con el flujo de fluidos y el método de los elementos finitos que aseguren la continuidad del trabajo y se han descrito las simulaciones paso a paso de manera que faciliten el uso de la herramienta comercial que se ha hecho servir (COMSOL Multiphysics) en ulteriores proyectos. En tercer lugar se ha diseñado, construido y programado un sistema ultrasónico de medida destinado a la determinación de aquellas propiedades de los cementos utilizados que constituyen parámetros de entrada que el entorno de simulación necesita.





INDICE

RESUMEN	1
INDICE	3
1. PREFACIO	7
1.1. Origen del proyecto	7
1.2. Motivación	7
1.3. Requerimientos previos	8
2. INTRODUCCIÓN	9
2.1. Objetivos del proyecto	9
2.2. Alcance e interés del proyecto	10
3. ESTADO DEL ARTE	11
3.1. Introducción	11
3.2. Aspectos clínicos, técnicas y cementos empleados en el tratamiento de las fracturas vertebrales	11
3.2.1. Datos anatómico-fisiológicos del tejido óseo y de la vértebra	12
3.2.2. Patología ósea: la osteoporosis	14
3.2.3. Técnicas quirúrgicas de mínima invasión aplicadas en el tratamiento de las fracturas osteoporóticas	15
3.3. Cementos óseos empleados en el tratamiento de las fracturas vertebrales	20
3.3.1. Cementos acrílicos	20
3.3.2. Cementos bioactivos de fosfato de calcio	20
3.3.3. Propiedades requeridas para un cemento óseo inyectable	21
3.4. Conclusión	24
4. CADENA DE MEDIDA ULTRASÓNICA	25
4.1. Introducción	25
4.2. Ordenador	27
4.3. Tarjeta generadora de señal	28
4.4. Osciloscopio (digitalizador)	30
4.5. Cámara de ensayos	31
4.5.1. Palpadores y cables	31
4.5.2. Montaje y fijación de palpadores y muestra	32
4.6. Metodología de uso y funcionamiento	35
4.7. Conclusiones	39



5. MODELO MATEMÁTICO	41
5.1. Ecuaciones de la Mecánica de fluidos	41
5.1.1. Introducción	41
5.1.2. Ecuación de continuidad	49
5.1.3. Ecuación de conservación de cantidad de movimiento	50
5.1.4. Ecuación de conservación de la energía	52
6. DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	57
6.1. Introducción a los métodos numéricos	57
6.2. Dinámica de fluidos computacional	58
6.3. Métodos de discretización	59
6.3.1. Diferencias finitas	59
6.3.2. Volúmenes finitos	60
6.3.3. Elementos finitos	61
7. ENTORNO DE PROGRAMACIÓN Y SIMULACIÓN: COMSOL	83
7.1. Etapa 1: definición del modelo matemático	84
7.2. Etapa 2: proceso de discretización	84
7.3. Etapa 3: fase de análisis	85
7.4. Etapa 4: fase de resolución	85
7.5. Etapa 5: Estudio de resultados	86
8. DESCRIPCIÓN DE LA PROGRESIÓN DEL FLUJO Y SU APLICACIÓN EN LA CIFOPLASTIA. MÉTODO DE LEVEL SET	87
8.1. ¿Qué es Level Set?	87
8.2. El módulo Level Set de Comsol	91
8.3. Resumen de resultados anteriores (Level Set)	99
8.3.1. Progresión de un flujo newtoniano en una cánula	99
8.3.2. Progresión del flujo en presencia de obstáculos	100
8.3.3. Progresión del flujo newtoniano en la técnica de cifoplastia	102
9. MEJORA DE LOS PARÁMETROS COMPUTACIONALES	105
9.1. Introducción	105
9.2. Influencia de gamma con la malla según el tipo de entrada	105
9.2.1. Mallado estructurado y condición de presión de entrada especificada	105
9.2.2. Malla no estructurada y presión de entrada especificada	108
9.2.3. Malla triangular y velocidad de entrada especificada	110
9.3. Presencia de obstáculos	112
9.3.1. Influencia de la posición y del tamaño	112
9.3.2. Influencia de la forma del obstáculo	115



9.4. Presencia de obstáculos múltiples (porosidad)	118
9.5. Estudio de la kifoplastia.....	123
10. IMPACTO AMBIENTAL _____	127
11. COSTE DEL PROYECTO _____	128
CONCLUSIONES _____	131
AGRADECIMIENTOS _____	132
BIBLIOGRAFÍA _____	133





1. Prefacio

1.1. Origen del proyecto

El presente Proyecto Fin de Carrera (PFC) se enmarca dentro de los objetivos generales definidos en el proyecto MAT2005-02778 que está financiado por el Ministerio de Educación y Ciencia, y que lleva por título “Desarrollo, optimización y procesado de nuevos cementos óseos para cirugía vertebral”. Este proyecto de investigación se está desarrollando en colaboración con varios departamentos de la Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Industrial de Barcelona (ETSEIB) y de la Escola Universitària d'Enginyeria Tècnica Industrial de Barcelona (EUETIB), i.e. Ciència dels Materials i Enginyeria Metal·lúrgica (ETSEIB), Física Aplicada (ETSEIB) y Mecànica de Fluids (ETSEIB y EUETIB).

1.2. Motivación

El presente PFC se plantea como una necesidad de investigación para entender y dar soluciones a los problemas asociados a la gestión de las Fracturas Vertebrales por Compresión (FVC) en cirugía de mínima invasión. Las FVC son una de las consecuencias más comunes de la osteoporosis. Se trata de un problema global que afecta a un gran número de población. Los efectos más notables son dolor, pérdida de calidad de vida y dependencia. Preferentemente afecta a mujeres y hombres en edad adulta pero hoy en día la incidencia en jóvenes ha aumentado. El coste sanitario es enorme.

La vertebroplastia (VP) y la cifoplastia (CP) son técnicas quirúrgicas de mínima invasión que consisten en inyectar un cemento polimérico en la vértebra dañada. La cifoplastia, a diferencia de la vertebroplastia, intenta recuperar, previamente a la inyección, la deformación de la columna vertebral producida por compresión (cifosis). Se han reportado ventajas (eliminación inmediata del dolor, mejora de la calidad de vida, independencia) y desventajas (elevada exotermia, toxicidad, elevada rigidez como posible causa de fracturas adyacentes, extravasación del cemento en el canal medular o en corriente sanguínea, embolia pulmonar, falta de bioactividad y regeneración tisular) en el uso de cementos poliméricos.

Ante esta perspectiva, la motivación del presente proyecto es establecer los marcos adecuados que permitan, por una parte, la simulación de procesos de inyección de



cementos óseos y, por otra parte, la valoración ultrasónica no destructiva de las propiedades materiales de estos materiales destinados a la obtención de las especificaciones óptimas a la hora de ejecutar dichas técnicas quirúrgicas.

1.3. Requerimientos previos

La realización de este PFC ha obligado al cumplimiento de varias etapas que han asegurado el alcanzar los objetivos preestablecidos. En primer lugar, un estudio exhaustivo del Estado del Arte, tanto de aplicación clínica como de materiales utilizados. Para ello el estudiante ha utilizado las distintas bases de datos que el Servicio de Bibliotecas de la UPC pone a su disposición. El estudiante también se ha tenido que formar en el uso y costumbres de funcionamiento de los laboratorios de experimentación y de simulación del Grup de Recerca Interdepartamental per a la Col·laboració Científica Aplicada (GRICCA - EUETIB), básicamente los relacionados con los métodos y técnicas de fabricación y caracterización de cementos, con los entornos de programación y de simulación así como la instrumentación específicamente destinada a valoraciones ultrasónicas.



2. Introducción

2.1. Objetivos del proyecto

El objetivo principal de este PFC es aproximarse al estudio computacional de las propiedades de inyectabilidad de cementos de fosfato de calcio como posibles biomateriales de gestión en las FVC. Los objetivos parciales son:

a) Valoración de los módulos del entorno de simulación por elementos finitos Comsol Multiphysics relacionados con dinámica de fluidos y con técnicas computacionales de simulación de progresión de flujo (Level Set) y documentación pormenorizada que facilite la continuidad del trabajo en posteriores proyectos.

b) Identificación y establecimiento de las condiciones de simulación idóneas para el flujo de cementos óseos y para la descripción de su progresión en cánulas de inyección.

c) Identificación y valoración de los parámetros computacionales y su selección.

d) Diseño de la cadena de medida ultrasónica destinada a la determinación de propiedades y funciones materiales. Selección de la instrumentación y valoración técnica.

e) Diseño y fabricación del montaje experimental destinado a la fijación de las probetas de prueba y sujeción de transductores.

f) Programación y automatización de las medidas experimentales mediante LabVIEW.

Como ya se ha comentado en el apartado 1.2. Motivación, los procedimientos quirúrgicos que se utilizan hoy en día para gestionar las FVC son la VP y la CP. Mediante estos procedimientos el cirujano inyecta a través de una cánula el cemento óseo en la zona de fractura, o bien directamente (VP) o previa formación de una cavidad creada en el cuerpo vertebral mediante el inflado de un globo (CP). Por lo tanto, los objetivos de este PFC pretenden cubrir la simulación computacional de las características de flujo de materiales tipo cemento para estas aplicaciones clínicas, ayudándose de las propiedades características de estos materiales (tiempos de fraguado, resistencia a la compresión o viscosidad) así como de las características geométricas o condiciones de contorno impuestas tanto por las cánulas de inyección, la presión de inyección o las características intrínsecas de las cavidades óseas.



2.2. Alcance e interés del proyecto

La osteoporosis se ha convertido, debido al envejecimiento creciente de la población, en uno de los problemas médicos más importantes de nuestro tiempo que conlleva un enorme incremento de la incidencia de fracturas óseas. Sólo en Estados Unidos ocurren cada año alrededor de 700,000 FVC relacionadas con la osteoporosis, i.e. el doble de las fracturas de cadera. Según datos oficiales, en España los costes de hospitalización por estos conceptos en el año 2002 excedieron de €41 millones, i.e. el 0.078% de los gastos totales en concepto de hospitalización y cuidados especiales [1]. La mayoría de estas FVC ocurren en la población adulta y representan una carga personal y social muy importante. Como ya se ha comentado, la VP y la CP se han utilizado con éxito para el tratamiento de las FVC. Sin embargo, aunque el polimetilmetacrilato (PMMA) se ha utilizado en series clínicas, no parece que sea éste el material más idóneo debido, entre otras desventajas, a los riesgos de necrosis térmica localizada y a los sucesivos colapsos de vértebras adyacentes producidos por una falta de continuidad en la transferencia de cargas mecánicas.

En el presente PFC el campo de interés a nivel de materiales se ha centrado en los cementos de fosfatos de calcio (CFC) como posibles substitutos de los cementos de PMMA. Los CFC están considerados como materiales muy prometedores para la realización de cirugía mínimamente invasiva en la reparación de defectos óseos debido a su excelente biocompatibilidad, bioactividad y osteotransductividad, i.e. que después de ser implantados son rápidamente integrados en la estructura ósea y transformados en tejido óseo. Por lo tanto, los CFC pueden ser una buena alternativa al uso de PMMA tanto en VP como en CP debido a las numerosas ventajas que pueden aportar en estas aplicaciones, como son un menor riesgo de extravasación del cemento y una mejor restauración de la altura del cuerpo vertebral y de la biomecánica de la columna, entre otras.

En consecuencia, el alcance e interés de este PFC están justificados plenamente ya que los resultados obtenidos podrán utilizarse para optimizar la aplicación clínica de los CFC mejorando las propiedades de inyectabilidad de los cementos utilizados en el tratamiento de las FVC. Para una comprensión más profunda de todo el campo de interés se presenta a continuación el Estado del Arte.



3. Estado del arte

3.1. Introducción

La VP y la CP son dos técnicas quirúrgicas de mínima invasión introducidas para la gestión clínica de las FVC por causa osteoporótica. En estas aplicaciones, un cemento óseo se inyecta bajo presión en la estructura porosa del tejido óseo esponjoso.

El PMMA ha sido y sigue siendo el material de elección para la reconstrucción de los defectos vertebrales o restauración de la altura vertebral, a pesar de algunas desventajas reconocidas divulgadas. Recientemente, los cementos óseos de fosfato de calcio han sido propuestos como material alternativo en el tratamiento de las fracturas vertebrales, principalmente debido a su carácter bioactivo y a su semejanza con la fase mineral apatítica del tejido óseo. Sin embargo, los cirujanos han evidenciado grandes dificultades encontradas durante el protocolo de relleno del defecto vertebral, relacionadas principalmente con la mala inyectabilidad.

Por estas razones y por la motivación del continuo interés de cara a las técnicas de mínima invasión con materiales bioactivos, en este capítulo se realiza una revisión bibliográfica de la literatura que tiene interés para este PFC. La conclusión que se alcanza es que la inyectabilidad, intrínsecamente relacionada con las propiedades reológicas, no ha sido sistemáticamente analizada, y requiere para su mejor entendimiento y optimización del estudio de modelos dinámicos y/o biomecánicos.

3.2. Aspectos clínicos, técnicas y cementos empleados en el tratamiento de las fracturas vertebrales

Las fracturas vertebrales de causa osteoporótica constituyen un problema importante de salud de cara al envejecimiento de la población y representan más de la mitad del total de las fracturas producidas, con significativo impacto en la calidad de vida de los individuos [2,3]. Por lo tanto, la identificación de los pacientes con riesgo de futuras fracturas vertebrales, de prevención y tratamiento de las mismas constituye una prioridad para el sector médico [4].



3.2.1. Datos anatómo-fisiológicos del tejido óseo y de la vértebra

El tejido óseo es un tipo de tejido conjuntivo caracterizado por un gran contenido en sales de fosfato de calcio. Alrededor del 25% del tejido óseo es agua, un 25% son fibras proteínicas como el colágeno y el 50% restante es una mezcla de sales minerales de fosfato de calcio [5].

Se distinguen dos tipos de tejido óseo: compacto y esponjoso. El hueso compacto está constituido de anillos concéntricos de matriz ósea que rodean los canales que alojan los vasos sanguíneos (Figura 3.1). El hueso esponjoso se parece a una “esponja” con bastantes huecos. Estos espacios están rellenos de médula ósea (Figura 3.1).

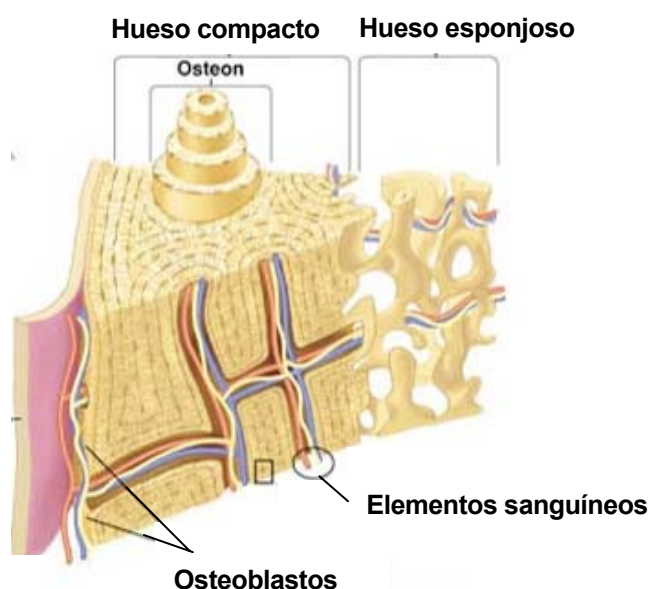


Fig. 3.1. Hueso compacto y esponjoso (Copyright © 2003 Pearson Education, Inc, publishing as Benjamin Cummings) (de referencia [5].)

Una vértebra típica consta de dos partes esenciales: un segmento anterior, el cuerpo vertebral, y una parte posterior, el arco vertebral. Estas dos partes adjuntas delimitan el foramen (agujero) vertebral. El arco vertebral consta de un par de pedículos y un par de láminas, y apoya las apófisis vertebrales (cuatro articulares, dos transversales, y una espinosa). El cuerpo vertebral es la parte principal de una vértebra, y es más o menos en forma cilíndrica. La superficie anterior presenta algunas pequeñas aberturas, para el paso de los vasos de nutrición; en la superficie posterior hay sólo una única apertura amplia e irregular, o en ocasiones más de una, para la salida de las venas basi-vertebrales del cuerpo



vertebral.

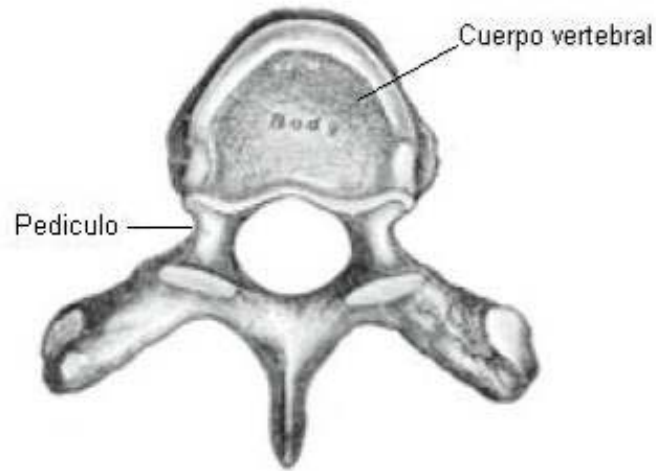


Fig. 3.2. Vista axial de una vertebra. Se presentan las partes componentes de la misma (de referencia [6]).

Desde el punto de vista estructural, el cuerpo vertebral se compone de tejido esponjoso, cubierto por una fina capa de hueso compacto; este último es perforado por numerosos orificios, algunos de gran tamaño para el paso de los vasos. El interior del hueso es atravesado por uno o dos grandes canales, para la recepción de las venas, que convergen hacia una única apertura grande e irregular, o varias pequeñas aperturas, situadas en la parte posterior del cuerpo vertebral (Figura 3.3.).

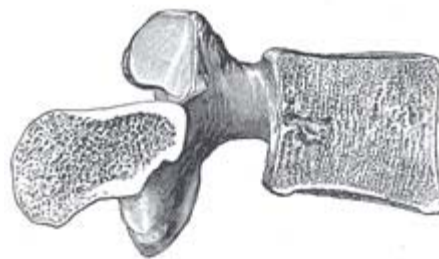


Fig. 3.3. Sección sagital en una vertebra (de referencia [6]).



3.2.2. Patología ósea: la osteoporosis

El tejido óseo está sometido a un remodelado continuo mediante procesos de formación y reabsorción, y también sirve como almacén de calcio del organismo. A partir de los 35 años se inicia la pérdida de pequeñas cantidades de hueso. Esta pérdida de hueso puede ser aumentada por varios factores y sobretodo por enfermedades.

La osteoporosis es una enfermedad caracterizada por la pérdida de contenido mineral del tejido óseo y cambios en la microarquitectura (Figura 3.4.) que debilitan el hueso y disminuyen su resistencia mecánica, así que las actividades diarias o normales pueden crear tensiones que exceden la resistencia vertebral y pueden ocasionar fracturas [7].

Estos cambios ocurren en edad avanzada, así como con determinados factores genéticos y ambientales que influyen en la pérdida de hueso después de alcanzar la masa máxima del hueso. Comparado con los hombres, la fractura en las mujeres se produce generalmente antes; sobre todo en los años primeros de la menopausia [8], debido a una disminución de los niveles de estrógenos que ocasionan una rápida pérdida de hueso.

Las fracturas causadas por osteoporosis son un problema de salud importante. Cada año en los Estados Unidos se contabilizan 700,000 casos de FVC [9]. Estas fracturas pueden adquirir en uno de cada tres casos un carácter doloroso crónico [10]. Las fracturas ocurren en huesos cuboides (tales como cuerpos vertebrales) y en huesos largos (tales como el fémur proximal, el radio distal y la meseta tibial). Las fracturas por compresión predisponen a una deformidad progresiva de la columna vertebral (*cifosis*), cambios en la biomecánica vertebral y pueden aumentar el riesgo de futuras fracturas vertebrales [11].

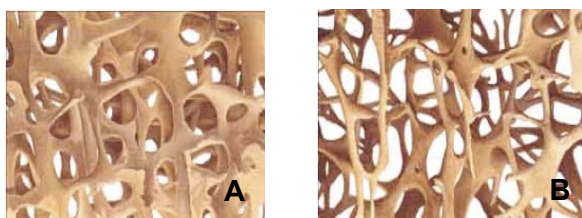


Fig. 3.4. (A) Hueso trabecular normal, (B) Hueso trabecular osteoporótico (de referencia [12]).



Los factores de riesgo independientes incluyen: mujer sobre 50, varón sobre 70 de edad, dependencia esteroides, fumador, consumo excesivo de alcohol, carencia del ejercicio, calcio dietético bajo, y carencia de la exposición a la luz del sol.

Para evitar este fenómeno su puede actuar sobre el modo de vida, es decir hacer ejercicios físicos, que estimulan la densificación ósea y la musculación, alimentación equilibrada que aporte cada día las proporciones de calcio y de vitamina D adecuadas, o, si la menopausa se ha instalado, administración de un tratamiento medicinal: SERMs (*Selective Estrogen Receptor Modulator*) [12, 13].

3.2.3. Técnicas quirúrgicas de mínima invasión aplicadas en el tratamiento de las fracturas osteoporóticas

En los últimos años se ha generado un gran interés en todos los campos médicos para las técnicas de mínima invasión. La cirugía de la columna vertebral no se ha mantenido lejana de este creciente interés. Así lo demuestra el hecho de que se han desarrollado y se han llevado al nivel de protocolo clínico varias técnicas, entre las cuales se destacan las técnicas de refuerzo vertebral, como son la VP y la CP.

La VP y la CP son dos técnicas de mínima invasión, ideadas para el tratamiento de las fracturas vertebrales secundarias a la osteoporosis o enfermedades degenerativas, con el objetivo de aliviar el dolor, reforzar la columna vertebral y la movilización temprana del paciente.

Vertebroplastia

La técnica de VP percutánea con PMMA ha sido introducida por primera vez en 1987. Hoy en día, las fracturas osteoporóticas por compresión representan la indicación más importante para la VP [4,14]. Se puede recurrir a la VP cuando los distintos tratamientos conservativos (descanso en cama, medicamentos para el dolor) no han logrado mejorar el dolor de la fractura, es decir hasta 7 meses después de la fractura [15].

La VP percutánea implica la inyección, en una vértebra fracturada, de un cemento de baja viscosidad a una presión relativamente alta, para posibilitar la penetración en la estructura intersticial del tejido esponjoso del cuerpo vertebral parcialmente colapsado y rellenar las cavidades formadas tras la fractura [4].

Las ventajas de la VP son su inmediata eficacia después de la intervención y su coste



relativamente bajo: 150-300\$ para cada vértebra [16]. La VP se usa principalmente para reducir el dolor asociado con una fractura vertebral. El principal inconveniente es que no se puede corregir la deformación de la columna inducida por las fracturas, por el hecho de que no se puede recuperar la altura original del cuerpo vertebral.

Cifoplastia

La técnica de CP es una variedad de la VP que se desarrolló en los años 90 y ha sido aplicada por primera vez en 1998 [17]. Mientras que la VP se utiliza hasta 7 meses después de la fractura, la CP puede intervenir en los próximos días después de la fractura y como máximo 10 días después [15].

La CP es un procedimiento en el que se inserta un globo dentro de una vértebra fracturada y comprimida y se infla, después de lo cual se inyecta un cemento óseo dentro de la cavidad resultante (Figura 3.5.). La inyección se hace lleva a cabo de la siguiente manera: el cirujano empieza a inyectar el cemento situando la cánula en el fondo de la cavidad. Sigue inyectando el cemento al mismo tiempo que retira poco a poco la cánula de manera que el llenado de la cavidad se lleve a cabo de la forma más uniforme posible. La CP está diseñada para aliviar el dolor, restaurar la altura de la vértebra y mejorar la deformidad de la columna (*cifosis*) asociada con las FVC.

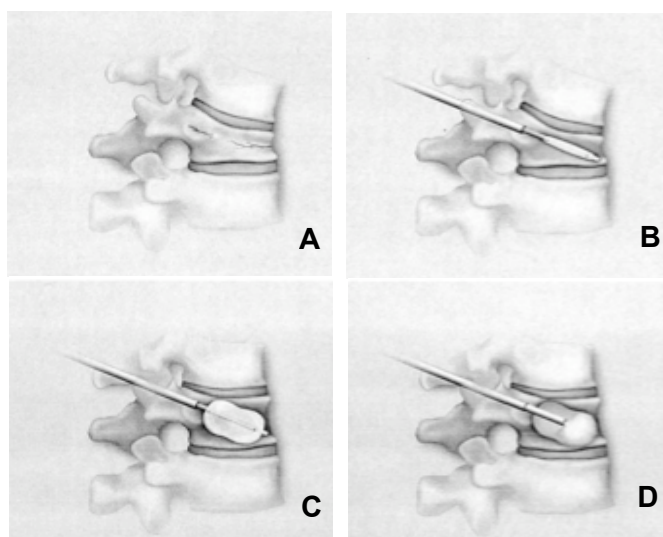


Fig. 3.5. (A) Vértebra fracturada; (B) Introducción del globo; (C) Inflado del globo; (D) Rellenado de la cavidad por el cemento (de referencia [18]).



La ventaja principal de la CP es que asegura la restauración de la altura del cuerpo vertebral con la ayuda de un globo hinchable, lo que permite, tras la retirada del balón, la inyección de un cemento de alta viscosidad bajo una presión baja de inyección, y así se previene el riesgo de extravasación de cemento [4]. El coste de una unidad de CP es de 3400\$ [17].

Materiales y protocolo clínico

Para las 2 técnicas de mínima invasión que son la VP y la CP, se trata de inyectar el cemento al nivel del hueso esponjoso. El modo operatorio es el siguiente:

- (a) El paciente se posiciona adecuadamente, en decúbito prono o decúbito lateral, en función de la región vertebral intervenida.
- (b) Se colocan adecuadamente las cámaras de fluoroscopia para proyectar imágenes en tiempo real de las vértebras involucradas.
- (c) Bajo anestesia local o general se hace una incisión de 1cm para insertar la aguja/cánula a través del pedículo de la vértebra a curar.
- (d) Cuando es ideal la posición de las agujas, se inyectará el cemento directamente en la fractura para la VP o en una cavidad creada en el cuerpo vertebral gracias a un globo hinchado para la CP (Figura 3.6.), bajo una guía fluoroscópica para controlar su repartición del cemento y así prevenir los fenómenos de extravasación (ver sección 3.2.3 *Resultados y complicaciones*).

El material utilizado para la intervención quirúrgica es el siguiente [18,19,20]:

- (1) El balón, que esta constituido por una especie de plástico muy resistente. Una marca comercial extensamente utilizada es *KyphX® Inflatable Bone Tamps* [18].
- (2) Un dispositivo de presión que permite que el médico supervise la presión de inflado, el volumen y el desinflado controlado del balón.
- (3) Un sistema estéril de herramientas quirúrgicas (alambres guía, cánula de trabajo de 4,2 mm de diámetro, catéter para balones de 10, 15 o 20 mm de longitud) disponibles para alcanzar y crear un canal de trabajo pequeño dentro del hueso fracturado, que servirá a posteriori para la colocación adecuada de los balones y la inyección del cemento.



- (4) Un sistema inyector estéril que permite empujar el cemento en la cavidad bajo control manual; una jeringa *Luerlock* de 2-3 mL; una cánula/aguja de 10-12 cm y de 3 mm de diámetro [18,20].

Resultados y complicaciones

En la mayoría de los pacientes tratados tanto con VP como con CP se registra una significativa disminución del dolor (entre 73-97%) [21-27]. Algunos autores han divulgado la capacidad de la CP para recuperar la altura vertebral y mejorar la rectitud de la columna [27,28]. El porcentaje de las complicaciones es reducido, pero la extravasación del cemento fuera de los límites vertebrales resulta frecuentemente en la VP.

En las dos técnicas pueden aparecer complicaciones [29] a corto o largo plazo:

- Complicaciones a corto plazo: la extravasación del cemento, que representa del 38% al 72,5% de los casos para la VP [30], y puede provocar embolias pulmonares o complicaciones neurológicas si parte del cemento se infiltra en los canales por donde pasan los vasos sanguíneos; incremento del dolor producido por el calor o por la presión sobre la medula espinal o las raíces nerviosas.
- Complicaciones a largo plazo: resorción ósea o incremento del riesgo de fractura de los cuerpos vertebrales adyacentes [31] (principalmente para cementos acrílicos).



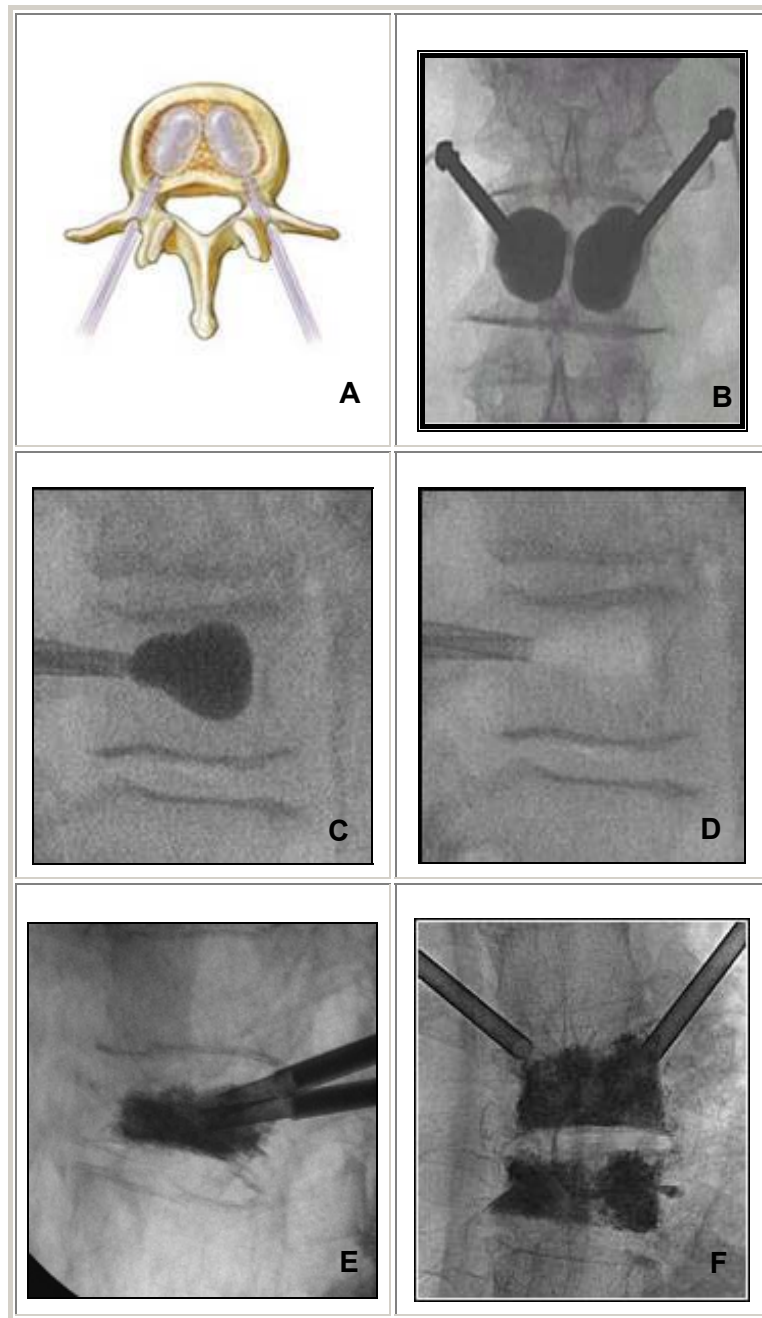


Fig. 3.6. (A) Vista axial de una vértebra: penetración transpedicular bilateral de las cánulas de trabajo. Imágenes fluoroscópicas de la región vertebral intervenida: (B) Proyección antero-posterior que evidencia los dos globos inflados dentro del cuerpo vertebral; (C) Proyección lateral de la misma región; (D) Proyección lateral de la misma región, tras la retirada de los globos; (E) Proyección lateral evidenciando la inyección del cemento (F) Proyección antero-posterior evidenciando la inyección del cemento (de referencia [18]).



3.3. Cementos óseos empleados en el tratamiento de las fracturas vertebrales

En este capítulo se amplía el estado del arte de los cementos óseos inyectables utilizados en el tratamiento de las fracturas vertebrales.

3.3.1. Cementos acrílicos

Un cemento acrílico se obtiene a partir de la mezcla de una fase en polvo con una fase líquida. Normalmente la fase en polvo esta constituida por PMMA, un iniciador (para catalizar el proceso de polimerización) y un agente radiopaco. La fase líquida monomérica incluye cantidades de acelerador (que bloquea la catálisis en el polvo que inicia la formación de radicales libres) y estabilizadores (para prevenir la polimerización prematura).

El PMMA representa el cemento más extensamente utilizado en la aplicación clínica. Las principales ventajas que presentan estos cementos son una buena biocompatibilidad, buenas características biomecánicas, son fáciles de manipular y baratos [32]. Sin embargo, los cementos acrílicos tienen algunos inconvenientes y después de la operación pueden ocurrir algunos problemas: las propiedades mecánicas de estos cementos son superiores a las del hueso, lo que puede provocar fracturas de los cuerpos vertebrales adyacentes [33-37]. Según BAROUD et al. [16] la presión aumenta del 13-18% sobre las vértebras adyacentes. Además no son bioactivos y no permiten la regeneración del hueso. El cemento acrílico se queda siempre en el cuerpo vertebral y como tiene propiedades diferentes de las del hueso, puede ocurrir que con el tiempo no haya más interconexiones hueso-material, con el consiguiente desacoplo en la transferencia de cargas. Por fin la reacción de polimerización del PMMA es exotérmica y este incremento de temperatura puede provocar necrosis en el tejido óseo [16].

3.3.2. Cementos bioactivos de fosfato de calcio

Los cementos de fosfato de calcio (CFC) se obtienen a partir de la mezcla de una solución acuosa con uno o más fosfatos de calcio, que al disolverse dan lugar a la precipitación de un fosfato de calcio menos soluble. Independientemente de la composición inicial de los CFC, se forman sólo dos productos finales: apatita y brushita. Las propiedades de fraguado y de endurecimiento de un cemento apatítico de fosfato tricálcico, son controladas por procesos de disolución y precipitación, conforme con la ecuación (Ec. 3.1):





Los CFC han llegado en el sector médico hace 15-20 años con los estudios de Brown y Chow [38]. Estaban utilizados principalmente para aplicaciones dentales y ortopédicas y desde hace poco tienen aplicaciones también en técnicas quirúrgicas de mínima invasión como la VP y la CP.

Los fosfatos de calcio presentan algunas ventajas en comparación con los cementos acrílicos, como una alta biocompatibilidad, es decir que tienen una composición similar a la de la fase mineral del tejido óseo y tienen una buena bioactividad o sea una buena osteointegración: colonización ósea y degradación [32]. Además son fáciles de manipular y tienen buenas propiedades mecánicas, parecidas a las del hueso [39].

Sin embargo la inyectabilidad de estos cementos no es reproducible. Su comportamiento en el momento de inyectarlos necesita más estudios. Los principales problemas encontrados con estos cementos son las dificultades de rellenar el tejido óseo por culpa de una mala inyección y de la decohesión del cemento, que se separa en dos fases: una líquida que se inyecta y otra sólida que forma un conglomerado en la jeringa y actúa como filtro. Según diferentes estudios [40,41] se puede mejorar la inyectabilidad de los CFC actuando sobre diferentes factores como el tamaño de las partículas, la temperatura, la relación Líquido/Polvo o la adición de aditivos, como el ácido cítrico.

La mayor parte de los estudios sobre VP o CP se hace mediante los cementos acrílicos porque hoy en día es el único cemento que tiene buena reproducibilidad e inyectabilidad. Sin embargo, parece imprescindible entender y poder predecir el comportamiento de los CFC durante la inyección para las técnicas de mínima invasión.

3.3.3. Propiedades requeridas para un cemento óseo inyectable

Un sustituto óseo para la aplicación en cirugía vertebral de mínima invasión debe cumplir una serie de requisitos [4] relacionados con la técnica médica de aplicación, las propiedades biomecánicas del cemento, la respuesta biológica después de implantación o el factor socio-económico.

(1) Un sustituto óseo óptimo para VP debe ser fácil de aplicar, es decir, facilidad de



manipulación de los componentes, procedimiento de mezcla simple y que se pueda aplicar de forma percutánea en el cuerpo vertebral a través de una cánula. Esto supone que el material tenga una viscosidad inicial baja, que puede ser equilibrada para evitar el potencial de extravasación si el material es demasiado líquido. De gran importancia es la radiopacidad del material, que permite la visualización fluoroscópica del flujo de cemento inyectado. Es deseable también un tiempo de fraguado alrededor de 10 min, durante el cual la viscosidad del cemento tiene que mantenerse constante para permitir una aplicación controlada. Por fin la temperatura de curado debe ser lo mas baja posible.

- (2) Después de la implantación el material tiene que proporcionar un refuerzo inmediato del cuerpo vertebral y por consiguiente una movilización temprana del paciente. Las propiedades mecánicas óptimas del material (resistencia mecánica y rigidez) tienen que ser comparables con las del tejido óseo, para evitar las diferencias de carga por comparación con las regiones adyacentes no-intervenidas. Las regiones reforzadas no tienen que deteriorarse con el tiempo.
- (3) El material no debe inducir reacciones adversas sobre los tejidos circundantes. Los cementos óseos bioactivos constituyen una ventaja, pero el hecho de si tiene que ser un material biodegradable o no, sigue siendo un problema abierto.
- (4) El precio del material tiene que ser razonable para facilitar la aplicación, y de esta manera favorecer la reinserción social de los individuos y reducir las perdidas económicas.

Asimismo los requerimientos **[33, 42, 14]** para un cemento óseo inyectable “ideal” destinado a la aplicación en VP y CP son los siguientes:

- Fácil de inyectar en el cuerpo vertebral colapsado
- Componentes fáciles de manipular y preparación simple
- Radiopacidad elevada
- Pasta con viscosidad inicial baja (sin que tenga potencial de extravasación)
- Trabajabilidad de 6-10 min aproximadamente



- Tiempo de fraguado alrededor de 15 min, acompañado de una viscosidad constante
- Baja temperatura de curado
- Propiedades mecánicas adecuadas (comparables con las del cuerpo vertebral normal)
- Cohesión adecuada, lo que significa que la pasta endurece en un medio líquido sin desintegrarse
- Microporosidad y macroporosidad para facilitar la circulación de los fluidos biológicos y para ofrecer el andamio para la colonización celular
- Excelente osteoconductividad, osteoinductividad, bioactividad
- No tóxico; tasa de resorción adecuada
- Coste bajo



3.4. Conclusión

La CP parece presentar mayores ventajas desde el punto de vista de la restauración de la altura del cuerpo vertebral y también de la disminución de los riesgos de extravasación gracias al globo, que permite utilizar una presión de inyección más baja que en el caso de la VP y que permite trabajar con cementos de viscosidad más alta.

Por estas razones, en la última parte de este PFC vamos a interesarnos particularmente en la técnica de la CP porque esta técnica presenta buenas perspectivas futuras. Así nuestro objetivo será modelizar la inyección del cemento desde la cánula hasta la cavidad creada por el globo y el medio poroso.



4. Cadena de medida ultrasónica

4.1. Introducción

¿Qué son los ultrasonidos?

Los ultrasonidos son vibraciones en un medio material similares a las ondas sonoras pero cuya frecuencia (por encima aproximadamente de los 20 kHz) es demasiado elevada para su percepción por el oído humano. El uso científico y tecnológico de los ultrasonidos es altísimo. Son utilizados tanto en aplicaciones industriales para la medición de distancias, caracterización interna de materiales o ensayos no destructivos, como en medicina, en ecografía, fisioterapia, ultrasonoterapia etc. En la naturaleza, animales como los delfines o murciélagos los hacen servir a modo de radar para su orientación. En el presente trabajo se está más interesado en el uso de los ultrasonidos como mecanismo destinado a la monitorización de los cambios en la microestructura de los cementos (u otras sustancias materiales, naturalmente) durante su fraguado. Esto es, es bien conocido que como cualquier otra onda material, la transmisibilidad de la señal a través de un medio cuya impedancia sónica se modifique por efecto de algún proceso físico-químico se va a ver afectada. Una vez constituida la cadena de medida que es el objetivo del presente trabajo, quedará a disposición de los investigadores interesados la selección de los indicadores de las señales patrón (amplitudes, frecuencias, desfases etc.) cuyas variaciones puedan ser correlacionadas con dichos cambios estructurales y diseñar así los experimentos idóneos para cada caso.

A continuación se presenta pues la descripción del sistema ultrasónico de medida destinado a la determinación de constantes y funciones materiales. Se describen inicialmente los distintos instrumentos que configuran el sistema de medición así como los transductores (palpadores en terminología ultrasónica) utilizados y el diseño de la cámara de ensayo que es donde se ubica la muestra. En primer lugar se lleva a cabo la descripción funcional de cada elemento de la cadena de medida y, posteriormente, se presentan algunos detalles específicos que los hacen relevantes para esta aplicación así como una descripción simple de procedimiento y uso.

Como puede verse en la figura 4.1 que siguen, el montaje está constituido por un ordenador PC (1) convencional que incorpora en una de sus ranuras PCI la tarjeta generadora de



señales de formas de onda arbitraria. Desde el ordenador es posible seleccionar los parámetros apropiados para cada ensayo: tipo de señal de excitación, frecuencia, amplitud, modo de generación etc.

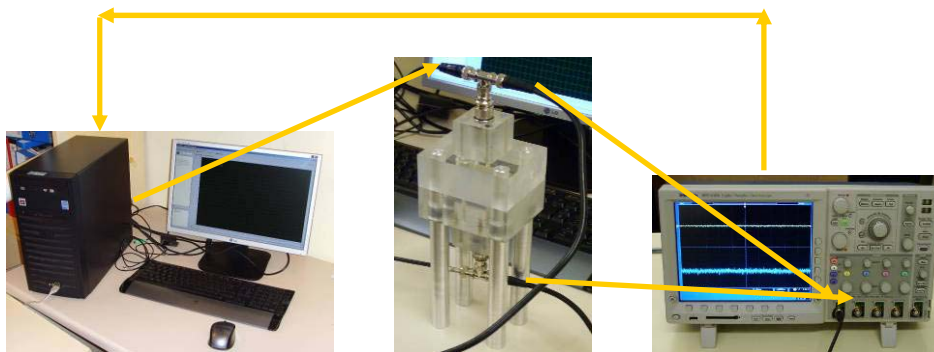


Fig. 4.1 Representación esquemática de la cadena de medida ultrasónica e identificación de elementos

La señal generada es la señal de excitación del transductor piezoeléctrico emisor (2) que es el encargado de transformar la señal eléctrica en la señal ultrasónica con la que se irradiará la muestra. Dicha onda ultrasónica atraviesa el montaje de la cámara de ensayo (3) que es donde se encuentra la muestra material bajo estudio (4). La señal transmitida es detectada por el transductor receptor (5) que es el encargado de transformar la señal ultrasónica en la señal eléctrica que acabará siendo visualizada en el osciloscopio (6) (que hace las veces de equipo digitalizador) y posteriormente enviada al PC vía la conexión USB entre osciloscopio y ordenador en el que será registrada.



4.2. Ordenador

El ordenador utilizado es un PC compatible con 2 GB de memoria RAM que ejecuta *Windows XP Service Pack 3*. En una de sus ranuras PCI es donde se ubica la tarjeta generadora de forma de onda arbitraria.

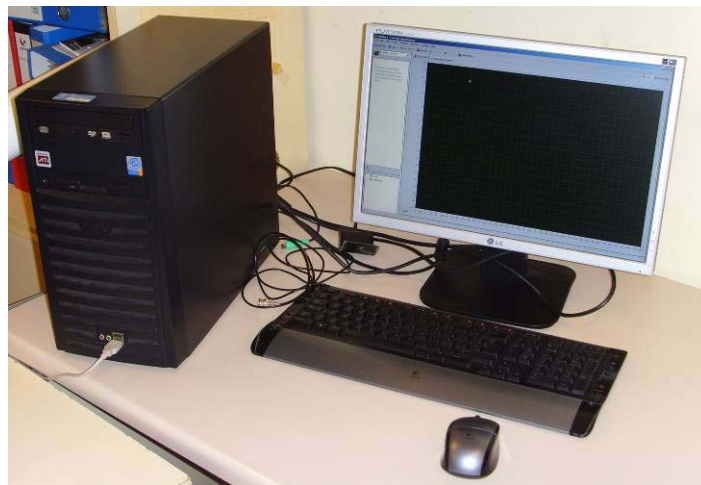


Fig. 4.2. Ordenador PC compatible en el que, además de los programas de adquisición de datos, se encuentra la tarjeta generadora de forma de onda arbitraria.

El PC incorpora el entorno de programación destinado a la elaboración de los programas destinados a la adquisición de datos, almacenamiento y tratamiento de la información así como la visualización de resultados parciales o la generación de informes globales. El programa que se ha hecho servir para asegurar la conectividad entre los elementos de la cadena es *LabVIEW 8.5* del que la UPC dispone de licencia de campus. No debe perderse de vista que el objetivo del presente trabajo no considera la programación específica de ningún diseño experimental particular, sino tan solo el uso básico de los programas que aseguren la funcionalidad de la cadena de medida.

El programa *LabVIEW* permite el desarrollo de programas de uso general mientras que el paquete completo incorpora una aplicación específica denominada *Signal Express* que todavía simplifica más si cabe la configuración y ejecución de los ensayos.



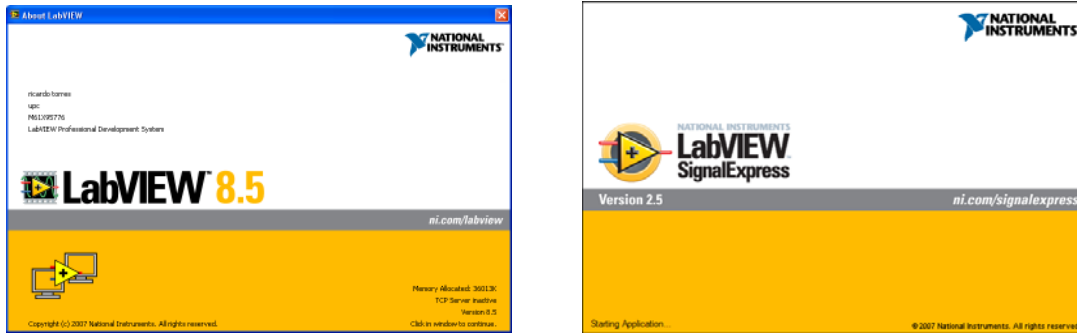


Fig. 4.3. Entorno de programación LabVIEW de uso general y aplicación LabVIEW Signal Express con la que programar los ensayos.

4.3. Tarjeta generadora de señal

La tarjeta generadora de señales de forma de onda arbitraria es una tarjeta de *National Instruments* modelo PCI NI 5421 de 100 megamuestras por segundo y 16 bits de resolución.



Fig. 4.4. Tarjeta generadora de formas de onda arbitrarias de National Instruments modelo PCI 5421. Imagen extraída de la hoja de especificaciones suministrada por el fabricante.

La configuración de la tarjeta pasa, como ocurre otros equipos semejantes suministrados por este fabricante, por validar su correcta instalación mediante la herramienta *Measurement and Automation Explorer* (abreviadamente MAX, véase la figura 4.5.) lo que asegurará que los programas ulteriormente utilizados localizarán adecuadamente en el sistema los controladores necesarios para su correcto direccionado y uso funcional



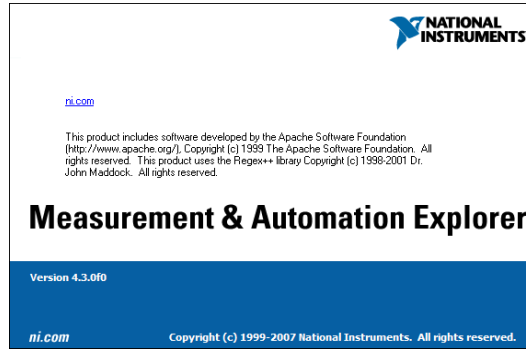


Fig. 4.5. Herramienta Measurement & Automation Explorer (MAX) de uso general destinada a la valoración de la correcta instalación del hardware así como de los controladores necesarios.

Este fabricante suministra también una herramienta específica denominada *NI-FGEN Soft Front Panel* que permite probar de una forma muy simple el correcto funcionamiento de la tarjeta generadora (figura 4.6).

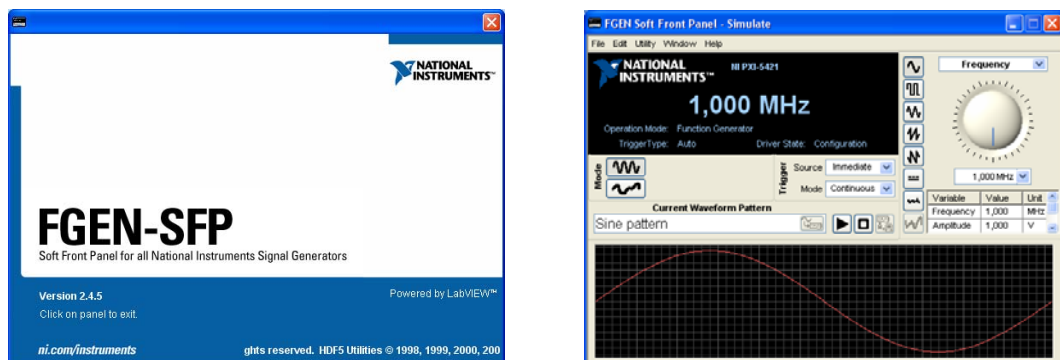


Fig. 4.6. Herramienta específica NI-FGEN Soft Front Panel para generación simple de cualquier forma de onda.

Dicha aplicación permite la generación tanto de señales estándar como otras de forma arbitraria. Para la construcción de señales de forma arbitraria se dispone de una herramienta muy útil y extraordinariamente sencilla de utilizar denominada *NI Analog Waveform Editor* (figura 4.7) a partir de la que disponer, llegado el caso, de una librería de señales almacenadas en ficheros y accesibles desde cualquiera de las aplicaciones en uso.



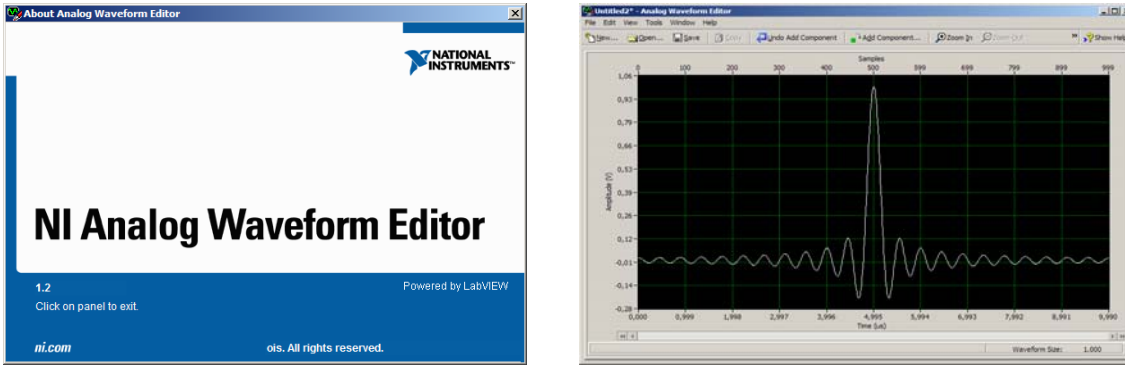


Fig. 4.7. Herramienta NI Analog Waveform Editor para construir señales o combinaciones de señales de formas arbitrarias.

La ventaja del uso de este tipo de generadores es que pueden ensayarse distintos tipos de formas de onda aun cuando los indicadores a monitorizar puedan ser los mismos o bien, con ayuda de esta flexibilidad, especificar indicadores y monitorizaciones alternativas.

4.4. Osciloscopio (digitalizador)

El equipo digitalizador es un osciloscopio Tektronix DPO 4104 de 1 GHz de ancho de banda y velocidad de muestreo de 5 gigamuestras por segundo (GS/s) en sus cuatro canales analógicos. En la figura 4.8 se indican e identifican los ajustes de uso más habitual en el presente trabajo que son los que a la postre especifican las características del registro de la señal transmitida y su posterior transferencia vía USB 2.0 al PC compatible.

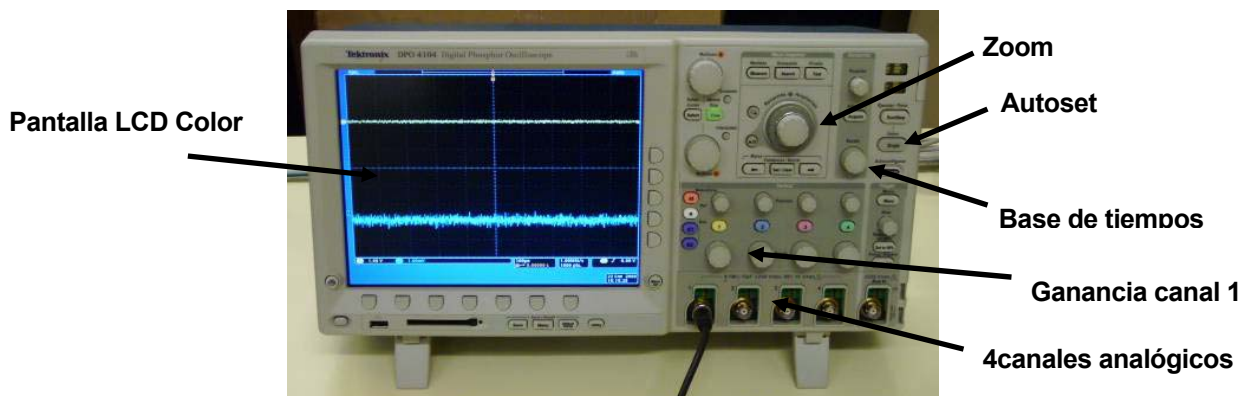


Fig. 4.8. Osciloscopio Tektronix DPO 4104 utilizado.



Este osciloscopio presenta la ventaja de disponer de controladores específicos para integrar su programación en *LabVIEW* de forma se podrán configurar y programar todos los elementos de la cadena de medida con la misma herramienta de *software*.

4.5. Cámara de ensayos

Una vez obtenida la pasta de cemento se coloca en lo que hemos dado en llamar cámara de ensayos que es el montaje destinado a dar soporte al palpador emisor, al palpador receptor y a la muestra de cemento. Del montaje completo y de cada una de sus partes se dispone de sus ficheros *Solid Works*, convenientemente croquizados, para hacerlos fácilmente editables en posteriores usos. La figura 4.9 muestra todo el montaje y sus diferentes componentes:

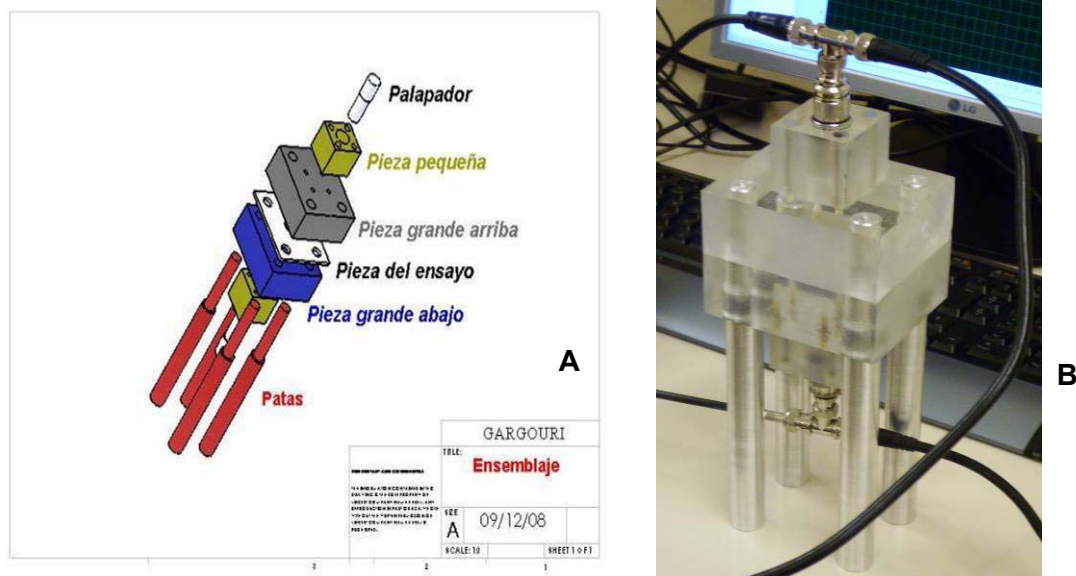


Fig. 4.9. (A) Esquema de la cámara de ensayo, (B) Foto real de la cámara de ensayo

4.5.1. Palpadores y cables

Los palpadores utilizados son piezoeléctricos con frecuencia de resonancia de 2,25 MHz y conectores BNC. Los cables de conexión son cables coaxiales convencionales de 50Ω.



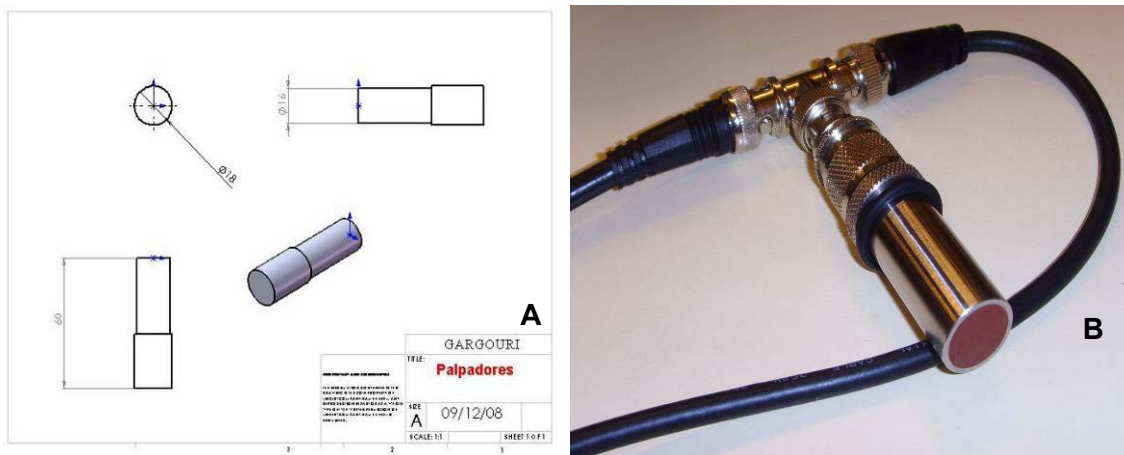


Fig. 4.10. (A) Dimensión de los palpadores, (B) Foto del palpador

4.5.2. Montaje y fijación de palpadores y muestra

Para fijar los palpadores y dejarlos en contacto directo con el cemento, hemos utilizado un montaje de piezas de polietileno. Este montaje esta compuesto de cinco piezas de plástico y cuatro de aluminio. Las imágenes que siguen muestran las diferentes piezas junto con sus dimensiones.

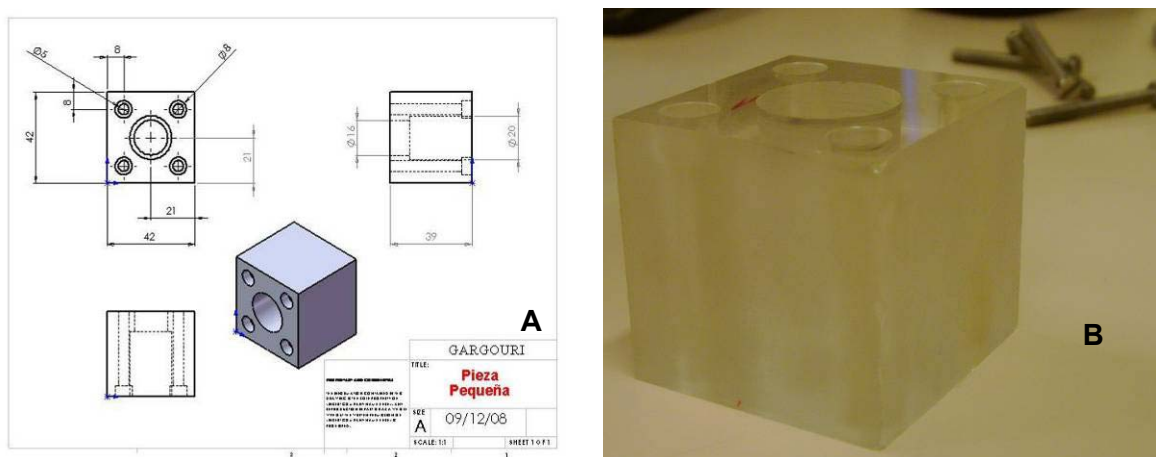


Fig. 4.11. (A) Vistas y dimensiones de una de las piezas del montaje destinada a embutir un palpador: pieza pequeña (se utiliza dos veces), (B) Foto de la pieza pequeña.



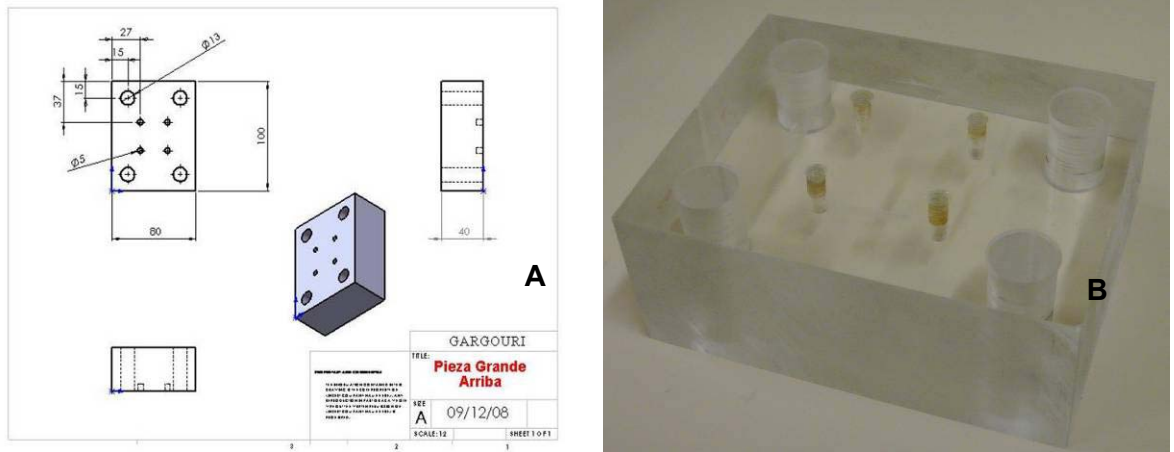


Fig. 4.12. (A) Vistas y dimensiones de una de las piezas del montaje: pieza grande arriba, (B) Foto de la pieza grande arriba.

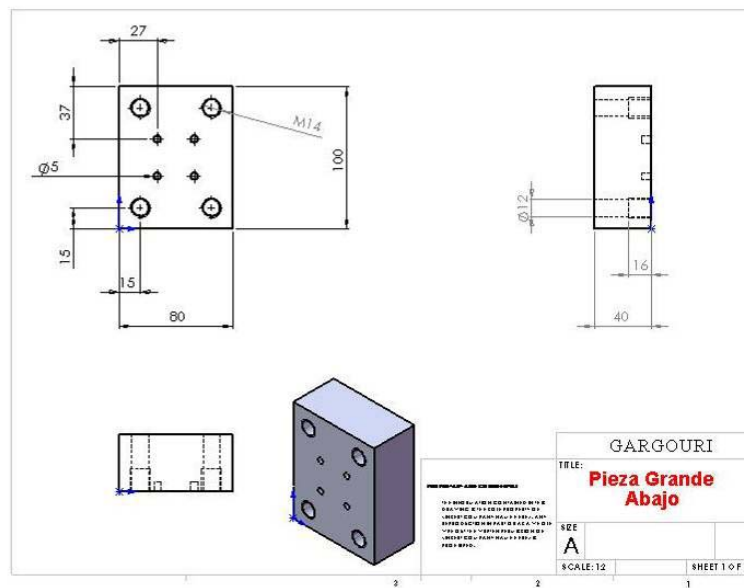


Fig. 4.13. Vistas y dimensiones de una de las piezas del montaje: pieza grande abajo



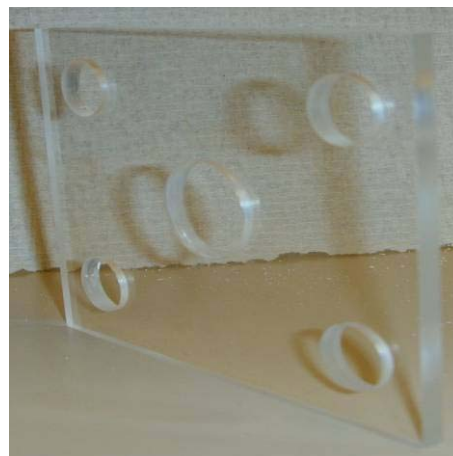
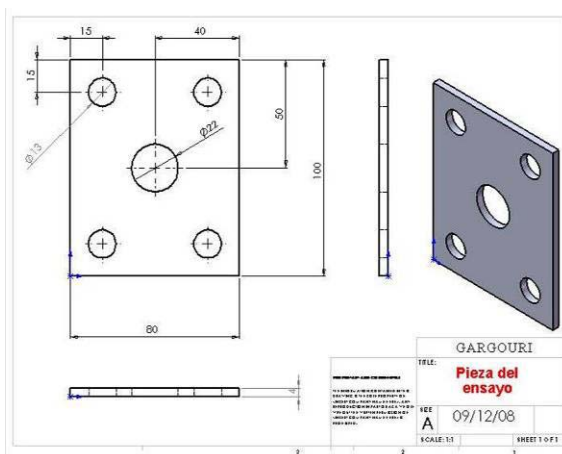


Fig. 4.14. (A) Vistas y dimensiones de una de las piezas del montaje: pieza del ensayo. En la parte central se coloca la muestra de cemento. (B) Foto de la pieza del ensayo.

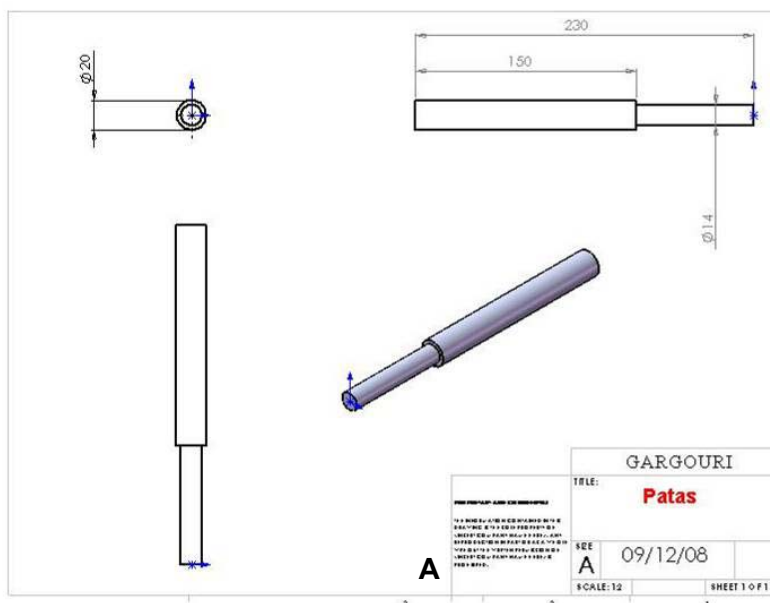


Fig. 4.15. (A) Vistas y dimensiones de una de las piezas del montaje: patas de aluminio para soporte, (B) Foto de una pata de soporte.



4.6. Metodología de uso y funcionamiento

El modo operativo es muy simple. Primero hay que embutir los dos palpadores (véase figura 4.10) para asegurar su fijación. Éstos incorporan una pequeña junta de plástico que los fija firmemente y permiten que queden embutidos al ras. Después debe sujetarse uno de los palpadores (en nuestro caso es el que utilizábamos como receptor) con su elemento de embutición con la que hemos denominado pieza grande inferior mediante tornillos de sujeción (véase la figura 4.13). Para asegurar un contacto correcto entre dicha pieza grande inferior y la superficie del palpador debe utilizarse algún tipo de gel o aceite. Si esto no se hace, las imperfecciones superficiales, aunque pequeñas, eliminarán totalmente la transmisión de la señal ultrasónica.

Ahora deben roscarse las patas soporte de aluminio en la pieza grande inferior de manera que el montaje resultante podrá permanecer de pie de manera estable. Estas patas soporte no sólo asegurar la estabilidad del montaje, sino que hacen las veces de tubos pasantes sobre los que insertar a modo de *sandwich* el resto de elementos. En esos elementos pasantes se ubicará la pieza de metacrilato que tiene un orificio central (figura 4.14) que es donde se colocará la pasta de cemento.

Ahora debe repetirse la operación con el segundo palpador que, después de embutido, debe fijarse con la que se ha denominado pieza grande arriba (figura 4.12) mediante los tornillos de sujeción. Nuevamente debe utilizarse gel o aceite para rellenar el espacio entre la superficie del palpador y la de la pieza grande antes de collarlas. Este último montaje tiene ahora que ser ensamblado, a través de los tubos pasantes, con el montaje previo una vez se haya colocado en el orificio central la muestra a ensayar.

En la figura 4.16 siguiente puede verse los elementos utilizados para la obtención de una muestra ejemplo de sulfato cálcico y llevar a cabo una prueba de ejemplo.



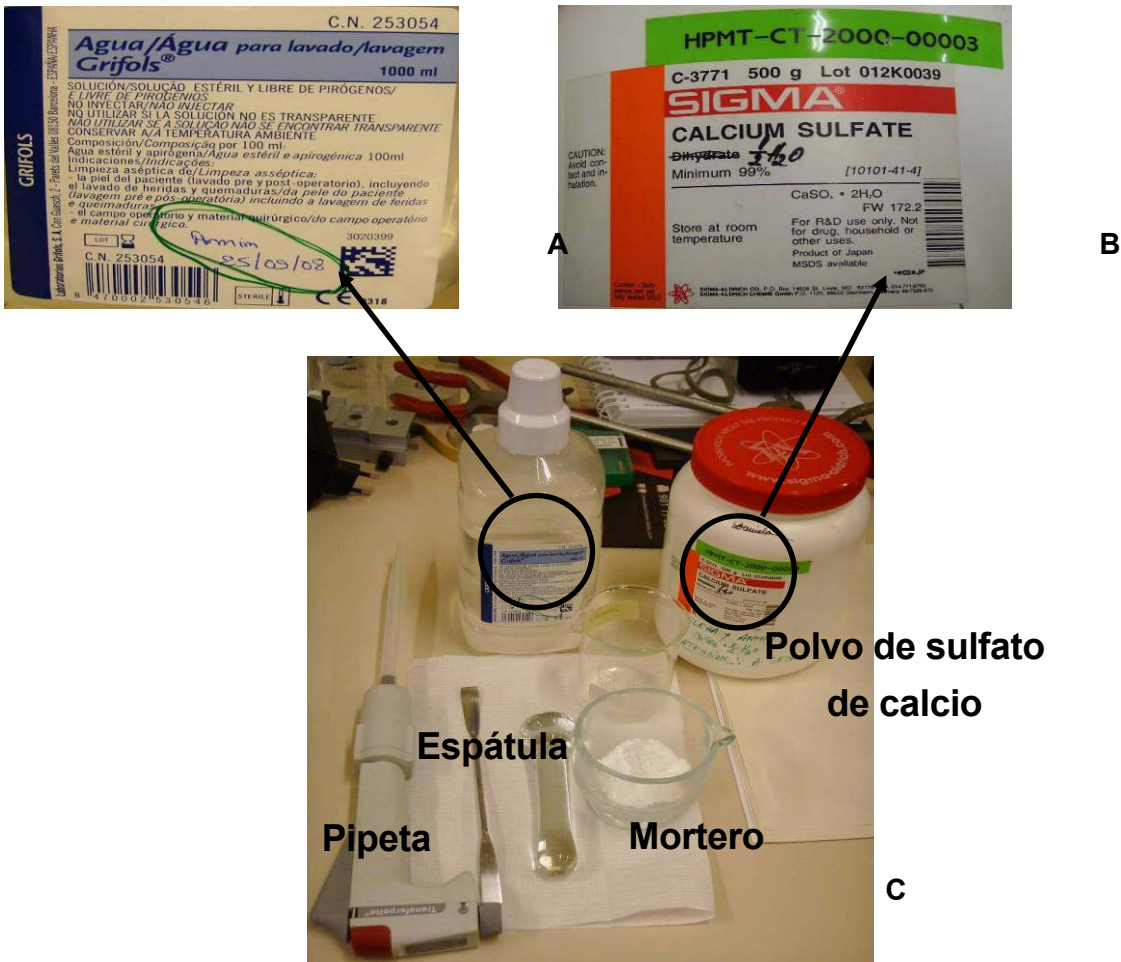


Fig. 4.16. (A) Etiqueta del agua de Grifols, (B) Etiqueta del Sulfato de calcio, (C) Elementos utilizados para hacer el ensayo.

Ahora se prepara el cemento mezclando las proporciones adecuadas de fase liquida (agua Grifols) y polvo durante un minuto (Figura 4.17).

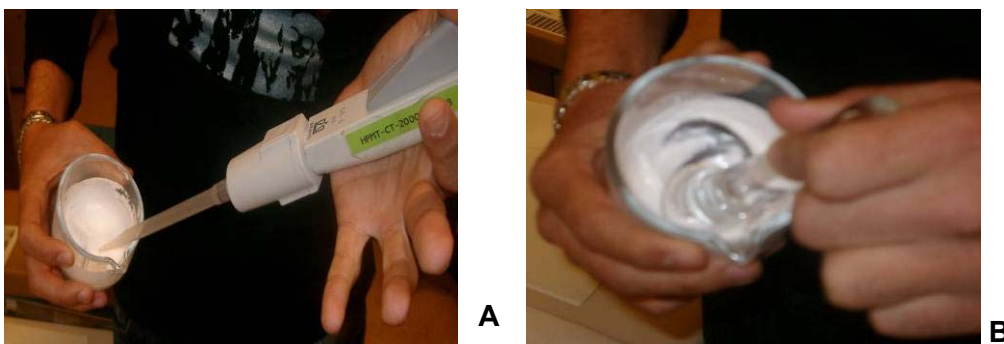


Fig. 4.17. (A) Adición de la fase liquida (Agua de Grifols) al polvo (sulfato de calcio), (B) Mezclar durante 1 minuto.



Una vez realizada la mezcla colocamos la pasta de cemento en el orificio central de la que hemos dado en llamar pieza de ensayo (figura 4.18) y montamos en los pasantes el montaje superior que da soporte al palpador emisor (figura 4.19).



Fig. 4.18. Colocación de la pasta en el orificio central de la pieza de ensayo.



Fig. 4.19. Ensamblado del bloque superior a través de los tubos pasantes para acabar de configurar el montaje completo que se ha denominado cámara de ensayo.

A partir de este momento se está en disposición de enviar las señales de excitación oportunas haciendo uso de cualquiera de las herramientas que se han presentado con anterioridad. Naturalmente que si se debe dar cuenta de un diseño de experimentos diseñado para algún fin específico, deben programarse las rutinas que automaticen en lo posible todo el proceso. A modo de ejemplo en la figura 4.20 se muestra la pantalla del osciloscopio cuando visualiza una función *sinc* de excitación (color amarillo) emitida desde la tarjeta generadora y la señal detectada por el palpador receptor (color azul).



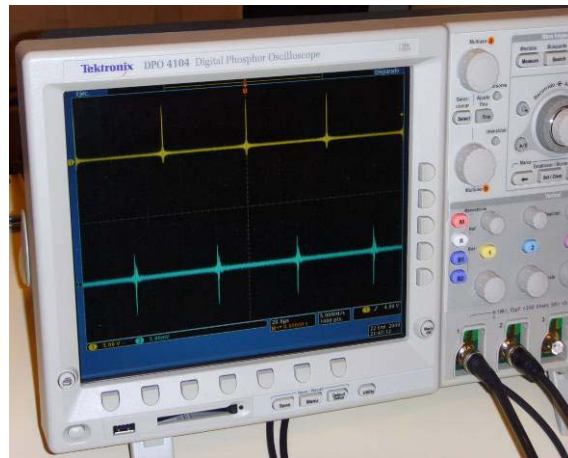


Fig. 4.20. Señal de excitación vista en el canal 1 (amarilla) y señal transmitida (azul) visualizada en el canal 2.

Al final se obtiene la pastilla de cemento resultante (figura 4.21).



Fig. 4.21. Pastilla de cemento de sulfato de calcio fraguado después del ensayo



4.7. Conclusiones

Los objetivos propuestos para esta sección se han alcanzado de manera notable. Puede concluirse que se dispone ahora de una cadena ultrasónica de medida que puede reconfigurarse y readaptarse con mínimo esfuerzo a diferentes situaciones: otros palpadores, otros diseños experimentales, otros protocolos de medida, otros tipos de sustancias etc.

Sin ánimo de ser exhaustivo, puede decirse entonces que:

- Se ha diseñado una cadena completa de medidas ultrasónicas destinada a valorar propiedades y funciones materiales de cementos óseos.
- Se han seleccionado los elementos generadores de señal que debido a sus prestaciones permiten configurar cualquier tipo de señal de excitación
- Se dispone de las herramientas de programación con las que, por una parte, integrar todos los elementos de la cadena de medida y, por otra, establecer cualquier criterio de monitorización y seguimiento de las propiedades de las muestras ensayadas.
- Se ha diseñado *ad-hoc* una cámara de ensayo específica aún cuando puede rediseñarse para cualquier tamaño de palpador o cantidad o tipo de muestra a usar dado que se dispone de los ficheros de croquización para *Solid Works* con los que se simplifica extraordinariamente cualquier otra fase de diseño y ulterior mecanización.
- Se ha configurado la documentación de tal forma que rápidamente cualquier interesado pueda entender el mecanismo de medición y ponerlo en funcionamiento rápidamente.
- Se pone a disposición de otros investigadores de un sistema de medida configurable con el que ejecutar cualquier diseño experimental relacionado.





5. Modelo matemático

5.1. Ecuaciones de la Mecánica de fluidos

5.1.1. Introducción

Resulta conveniente para ulteriores propósitos de simulación disponer de la formulación de las ecuaciones que, en su formas diferencial o integral, modelizarán los flujos de los cementos aquí estudiados. Dichas formulaciones permitirán estudiar los detalles del campo de flujo en aquellas regiones de interés del dominio de trabajo y son, por otra parte, el punto de partida de las soluciones computacionales que se proponen en el presente proyecto. Las ecuaciones que se formularán posteriormente son la ecuación de conservación de la masa (o ecuación de continuidad) y las ecuaciones del movimiento o de cantidad de movimiento y la ecuación de la energía. [43- 46]

El movimiento de un fluido está completamente descrito por las leyes de conservación de tres magnitudes fundamentales: masa, momento y energía. La importancia de este hecho radica en que estas tres leyes determinan, completamente, el comportamiento del sistema sin información dinámica adicional. La única información adicional necesaria está relacionada con la naturaleza del fluido: si es un fluido incompresible, si es un gas ideal, si es un fluido condensable, si es una sustancia viscoelástica, etc.

Así las cosas, un flujo de fluido se considera completamente conocido si, en cualquier instante y en cada punto del dominio, se conocen el campo de velocidades y un número mínimo de propiedades estáticas. El número de estas propiedades depende de la naturaleza del fluido; una propiedad, si el fluido es incompresible (la presión, por ejemplo) o dos, si es un fluido compresible (para un gas ideal, por ejemplo, presión y densidad) en equilibrio termodinámico.

En todos los casos en los que sea necesario, se considerará disponible la información de aquellas propiedades que definen la naturaleza del fluido (por ejemplo, viscosidad o densidad) así como la información necesaria para identificar las fuerzas externas (además de las internas) que inducen movimiento. A modo de ejemplo, gravedad, flotabilidad, fuerzas centrífugas en sistemas rotativos o fuerzas eléctricas y magnéticas en fluidos conductores.



a) Forma general de una ley (escalar) de conservación

Las leyes de conservación son el concepto clave detrás de las leyes de la mecánica de fluidos. A pesar de ser una idea de lógica simple puede llegar a ser conceptualmente compleja.

Se establece la ley de conservación de cierta magnitud U (en general puede ser escalar o vectorial) de acuerdo a la siguiente regla: la variación de la cantidad total de una magnitud U dentro de un dominio dado es igual al balance entre las cantidades de magnitud entrantes y salientes del dominio considerado más la contribución eventual de las posibles fuentes generadoras de esa magnitud. Intentaremos clarificar los conceptos que aparecen en esta definición.

Debe señalarse que ciertas magnitudes como la presión, temperatura o entropía, por ejemplo, no satisfacen una ley de conservación. Esto no significa que no pueda establecerse una ecuación para esas magnitudes sino que esas ecuaciones no responden a una ley de conservación.

Consideremos una cierta magnitud escalar U representativa de alguna propiedad relacionada con el flujo. Consideremos un volumen de control fijo arbitrario (VC) cuya frontera denominamos superficie de control (SC). Dicho VC puede estar ubicado en cualquier lugar del dominio de flujo y ser de cualquier forma y tamaño.

En estas condiciones, la expresión más general para una ley de conservación en forma integral de esta magnitud (escalar) U es

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} U d\Omega + \int_S \vec{F} \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} Q_V d\Omega + \int_S \vec{Q}_S \cdot d\vec{S} \quad (\text{Ec. 5.1})$$

El primer término (término de acumulación) a la izquierda indica la cantidad total de magnitud U en el VC y debe leerse en su sentido físico: la variación (∂) por unidad de tiempo ($/\partial t$) de la cantidad total de U en el interior del VC .

El siguiente término de la ecuación son los términos de flujo. Ahora trataremos de dar sentido físico a la frase "...cantidad de magnitud U entrante y saliente de..." Sabemos de las leyes básicas de la física que la cantidad de U variará por efecto de los flujos que son la contribución del entorno (o alrededores) al valor local de U y que describen cómo dicha



magnitud es transportada por el flujo. Esto es, la cantidad de U que atraviesa la unidad de superficie por unidad de tiempo. Dado que será una magnitud direccional (con magnitud y sentido) será representada mediante un vector.

La ecuación de balance se acaba por establecer con las contribuciones de las fuentes volúmicas y superficiales (si las hubiera) de la magnitud U que son los dos términos a la derecha de la igualdad anterior.

Resulta conveniente destacar algunas propiedades remarcables de la ecuación establecida:

- Es válida para cualquier VC y SC.
- La variación interna de U , en ausencia de fuentes volúmicas, sólo depende de los flujos a través de la SC, no de sus valores en el interior del VC.
- Los términos de flujo no aparecen bajo operadores derivada o gradiente de manera que pueden ser discontinuos (un caso típico dentro de la mecánica de fluidos son las ondas de choque)

¿Por qué son importantes estas propiedades, en particular la segunda? Fundamentalmente porque deben permanecer siendo válidas después del proceso de discretización, esto es, las leyes de conservación deben seguir siendo válidas a nivel discreto.

Alternativamente a la forma integral podemos establecer la versión diferencial de las leyes de conservación aplicando el teorema de Gauss para transformar las integrales de flujo en integrales de volumen. La forma diferencial de la ley de conservación es

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F} = Q_V + \nabla \cdot \vec{Q}_S \quad (\text{Ec. 5.2})$$

o, alternativamente

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{F} - \vec{Q}_S) = Q_V \quad (\text{Ec. 5.3})$$

de la que debemos notar que:



$$\int_{S_c} \vec{F} \cdot d\vec{A} = \int_{V_c} \nabla \cdot \vec{F} dV \quad (\text{Ec. 5.4})$$

- Los flujos (y fuentes superficiales) aparecen exclusivamente bajo el operador gradiente el cual es el único término derivada espacial.
- Esta es la forma de reconocer una ley conservativa en forma diferencial. Si todas las derivadas espaciales pueden agruparse bajo un operador divergencia entonces la ecuación está en forma conservativa. Si no es así, se dice que está en forma no conservativa o cuasilineal.
- Esta forma diferencial es más restrictiva que la forma integral anterior ya que exige que los flujos sean diferenciables (esto es, de clase C^1 como poco) lo cual no es el caso de las onda de choque.
- Cualquiera que sea la magnitud U deben hacerse asunciones adicionales para definir los flujos y los términos fuente en función de otras variables computadas.

b) Leyes de conservación como ecuaciones de convección-difusión

Trataremos ahora de prestar atención con cierto detalle a la física del transporte de la magnitud U en un flujo. Los términos de flujo son generados de dos formas: una contribución debida al transporte convectivo del flujo y una contribución debida a la agitación molecular la cual puede estar presente incluso si el fluido está en reposo.

El término de flujo convectivo \vec{F}_C relacionado con la magnitud U en un flujo de velocidad \vec{c} representa la cantidad de U que está siendo transportada por el flujo

$$\vec{F}_C = U \vec{c} \quad (\text{Ec. 5.5})$$

La segunda contribución es el flujo difusivo \vec{F}_D definido como la contribución presente incluso en flujos en reposo debido a los efectos macroscópicos de la agitación térmica molecular. Los flujos difusivos no siempre existen. Para un fluido de una fase en reposo no hay difusión de masa pues acarrearía el desplazamiento de partículas de fluido. Esto tiene efectos ulteriores por cuanto en la ecuación de conservación de la masa veremos que no



aparecerán términos difusivos.

Naturalmente que las contribuciones difusivas son de naturaleza física completamente diferente a las convectivas. Las siguientes evidencias empíricas determinan el carácter de la difusión:

- Cualquier pico local de alguna magnitud se difunde desde donde toma valores altos hacia donde éstos son bajos, en todas direcciones.
- El proceso para en cuanto no hayan diferencias de concentraciones, esto es, cuando se alcanza la uniformidad.
- El proceso de difusión entre dos puntos es proporcional a la diferencia de concentración entre esos dos puntos y el proceso en sí tenderá a reducir esas diferencias.
- Un proceso del tipo antidifusión no se ha observado nunca.

Las propiedades de los procesos difusivos pueden resumirse en una ley tipo Fick en la que κ es el coeficiente de difusión

$$\vec{F}_D = -\kappa\rho\nabla u \quad (\text{Ec. 5.6})$$

Con lo anterior puede obtenerse

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{c}) = Q_V + \nabla \cdot \vec{Q}_S + \nabla(\kappa\rho\nabla u) \quad (\text{Ec. 5.7})$$

que es la forma conservativa general de una ecuación de transporte para la cantidad $U=\rho u$ y es la que denominamos ecuación de convección-difusión.

La estructura de esta ecuación debería ser aprendida cuidadosamente por cuanto es el núcleo de todos los modelos matemáticos relacionados con fenómenos de flujo. Dicha ecuación toma su nombre de las propiedades físicas de las contribuciones a los términos de flujo y de su específica expresión matemática la cual recoge propiedades físicas muy diferentes. De hecho las propiedades siguientes constituyen la guía básica a la hora de establecer las condiciones operativas de simulación.



- Los flujos convectivos describen el transporte pasivo de la variable. Como un tronco de madera cuando es transportado por un río.
- Los flujos convectivos describen un fenómeno que tiene propiedades direccionales y son proporcionales a la velocidad. Un flujo convectivo no da contribución en una dirección transversal a la dirección del flujo de fluido y, como veremos después, tiene propiedades muy similares a los fenómenos de propagación de ondas.
- Los términos relacionados con flujos convectivos aparecen en las ecuaciones como derivadas parciales de primer orden.
- Los términos convectivos son esencialmente no lineales pues el campo de velocidades depende generalmente de la propiedad transportada. Esta no linealidad es una propiedad esencial de la mecánica de fluidos.
- Los efectos difusivos aparecen en la ecuación de conservación como derivadas de segundo orden. En particular, para valores constantes de κ y de ρ el término difusivo está en el operador de Laplace. Esto nos da una interpretación física del operador de Laplace como descriptor de una difusión isotrópica en las tres direcciones espaciales.

Estas diferencias son cruciales para comprender la física de los flujos así como las reglas de discretización y de las propiedades esenciales de los esquemas numéricos CFD.



Tabla 5.1. Características específicas de fenómenos de convección y difusión.

convección	Difusión
Expresa el transporte de la magnitud por el flujo.	Da cuenta de los efectos de las colisiones moleculares.
No existe en un fluido en reposo.	Puede existir en un fluido en reposo.
Todas las magnitudes son transportadas por el flujo.	No todas las magnitudes están sujetas a fenómenos de difusión.
Comportamiento direccional.	Comportamiento isotrópico.
Aparece en derivadas espaciales primeras en las leyes de conservación.	Aparece en derivadas segundas en las leyes de conservación.
Es no lineal por cuanto, en general, la velocidad del flujo depende de la magnitud transportada.	En general son lineales y más cuando las propiedades del fluido son constantes.

La importancia de toda esta descripción radica en que un esquema numérico ajustado a la resolución de una ecuación difusiva (como la ecuación de Laplace o de Poisson) fracasará cuando se utilice en la resolución de un problema dominado por la convección.

Las soluciones de la ecuación de convección-difusión dependerán de las intensidades relativas de los dos fenómenos. Para valorar la influencia de uno u otro fenómeno utilizamos un número adimensional denominado número de *Peclet* (Pe) definido como

$$P_e = \frac{C_{ref} L_{ref}}{k} \quad (\text{Ec. 5.8})$$

Donde los subíndices *ref* hacen referencia a valores característicos de velocidad y longitud. Cuando esta relación es mucho mayor que uno la evolución de la magnitud U estará dominada por la convección. Valores intermedios del Pe informan de influencias convectivas y difusivas comparables mientras que valores mucho menores que uno informan de una difusión dominante.



c) Ecuación de convección 1D lineal

Conviene remarcar aún más si cabe los detalles y características de las ecuaciones de convección-difusión dejando de lado cualquier complejidad no esencial. Siguiendo estas premisas, la ecuación lineal de convección en una dimensión

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (\text{Ec. 5.9})$$

Esta ecuación describe el transporte de la magnitud u a una velocidad convectiva constante a de manera que un perfil inicial $u(x, t=0)=u_0(x)$ es trasladado sin cambios a esa velocidad a . Dicho de otras forma, después de un tiempo t , la magnitud u continua siendo el perfil inicial pero desplazado una distancia $x=at$. En otras palabras, la solución es formalmente idéntica a una ecuación de ondas de manera que

$$u(x, t) = u_0(x - at) \quad (\text{Ec. 5.10})$$

Consideremos una onda plana definida por

$$u(x, t) = \hat{u} e^{j(kx - \omega t)} \quad (\text{Ec. 5.11})$$

donde $k=2\pi/\lambda$ es el número de onda. Esta onda será solución de la ecuación original si $\omega=ak$. Esta equivalencia entre una convección pura y la propagación de ondas es crítica para comprender la física de la convección. Estos dos fenómenos son las dos caras de las mismas propiedades físicas.



d) Ecuación de difusión dependiente del tiempo 1D

En ausencia de convección podemos simplificar la ecuación de convección-difusión hasta obtener

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\text{Ec. 5.12})$$

Resultando una ecuación de difusión 1D dependiente del tiempo. Cuando esta ecuación se aplica a la temperatura resulta la ecuación de Fourier del calor. Si ensayamos una solución en forma de onda como se ha hecho en la sección anterior obtendremos que

$$j\omega = \alpha k^2 \quad (\text{Ec. 5.13})$$

que conduce a la solución

$$u(x, t) = \hat{u} e^{jkx} e^{-\alpha k^2 t} \quad (\text{Ec. 5.14})$$

Este resultado representa el comportamiento de una onda en el espacio, con número de onda k , que decrece exponencialmente en el tiempo debido al coeficiente de difusión α . Valores negativos de α conducen a fenómenos de crecimiento exponencial como son los casos de explosiones.

Lo que ahora interesa es recordar esta propiedad de los procesos difusivos: representan una amortiguación exponencial de la amplitud de una onda en el espacio siempre y cuando el coeficiente de difusión α sea positivo.

5.1.2. Ecuación de continuidad

La ley de conservación de masa es una ley general de naturaleza cinemática, esto es, independiente de la naturaleza del fluido o de las fuerzas que actúan sobre él. Establece la evidencia empírica de que, en un sistema fluido, la masa no puede desaparecer ni ser creada, sin más. Por otra parte, no existen flujos difusivos para el transporte de masa: la masa sólo puede ser transportada por convección.

La ecuación de conservación de masa o de continuidad válida para flujos no estacionarios y



compresibles es

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{c}) = 0 \quad (\text{Ec. 5.15})$$

Donde ρ es la densidad del fluido (kg/m^3) y c es la velocidad del flujo (m/s). Cuando se expande el término que incorpora la divergencia mediante la regla del producto se obtiene

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{c}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \vec{c} = 0 \quad (\text{Ec. 5.16})$$

Y cuando se identifica la derivada sustancial (material o total), ésta es

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla \rho = 0 \quad (\text{Ec. 5.17})$$

Se obtiene una forma alternativa dada por

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot \vec{c} = 0 \quad (\text{Ec. 5.18})$$

Dicha ecuación muestra que, cuando se “sigue” un elemento de fluido (partícula de fluido o elemento material) transportado por el campo de flujo, su densidad varía cuando cambia el término divergencia de la velocidad. Así las cosas, cuando el flujo es incompresible la ecuación se reduce a

$$\nabla \cdot \vec{c} = 0 \quad (\text{Ec. 5.19})$$

Físicamente significa que, conforme el campo de velocidades cambia en una región de un campo de flujo incompresible, el resto del campo de flujo se ajusta inmediatamente al cambio de manera que la ecuación 5.19 se cumple en todo momento en cualquier localización.

5.1.3. Ecuación de conservación de cantidad de movimiento

Esta ecuación vectorial que se denomina en ocasiones ecuaciones de Navier-Stokes del



movimiento, describen la física de los flujos de fluidos newtonianos. Para fluidos incompresibles, dicha ecuación toma la forma

$$\rho \frac{d\vec{c}}{dt} = \nabla \cdot [-p + \eta(\nabla\vec{c} + (\nabla\vec{c})')] + \rho\vec{f}_v \quad (\text{Ec. 5.20})$$

Donde \vec{c} es el campo de velocidades (m/s), ρ es la densidad del fluido (kg/m^3), p es la presión (Pa), η es la viscosidad dinámica ($Pa.s$) y \vec{f}_v son las fuerzas de volumen o másicas. Debe observarse que el término convectivo es *no lineal* incluso para fluidos incompresibles. Ésta es una característica importante por cuanto dicho término es el responsable de la aparición de la turbulencia.

El término de la izquierda de ecuación 5.20 es la derivada total o sustancial (o material) definida por

$$\frac{d\vec{c}}{dt} = \frac{\partial\vec{c}}{\partial t} + (\vec{c} \cdot \nabla)\vec{c} \quad (\text{Ec. 5.21})$$

Donde $\frac{\partial\vec{c}}{\partial t}$ es la aceleración local (nula en régimen estacionario) y $(\vec{c} \cdot \nabla)\vec{c}$ es la aceleración convectiva que da cuenta de que la propiedad es transportada por el campo.

El primer término que aparece a la derecha de la ecuación 5.20 éste es, $-\nabla p$, es el gradiente de presiones definido, en coordenadas cartesianas, por

$$-\nabla p = -\left(\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial z} \right) \quad (\text{Ec. 5.22})$$

El término $\nabla \cdot [\eta(\nabla\vec{c} + (\nabla\vec{c})')]]$ es el término disipativo representativo de las pérdidas por rozamiento y \vec{f}_v es la fuerza volúmica. La única contribución de interés (en el presente trabajo) a este último término es la debida a efectos gravitatorios, o sea, $\vec{f}_v = -\rho g$.

Volvemos a notar que los términos viscosos aparecen bajo derivadas segundas y que, como se ha apuntado antes, es una característica esencial de un proceso difusivo. De hecho es así, y en este caso la viscosidad dinámica hace las veces de coeficiente de difusión (de



cantidad de movimiento). Ahora podemos definir un caso particular del Pe , denominado número de *Reynolds* (Re) que valora las influencias relativas de transportes convectivo y difusivo de cantidad de movimiento

$$R_e = \frac{C_{ref} \cdot L_{ref}}{\nu} \quad (\text{Ec. 5.23})$$

5.1.4. Ecuación de conservación de la energía

Es bien sabido del análisis termodinámico del continuo que el contenido energético de un sistema se mide en términos de energía interna (por unidad de masa). Esta energía interna es una función de estado de manera que su variación durante cualquier transformación termodinámica sólo depende de los estados inicial y final.

En un fluido la cantidad conservada es la **energía total** (E) definida como la suma de su energía interna y su energía cinética específica ($c^2/2$), esto es,

$$E = e + \frac{c^2}{2} \quad (\text{Ec. 5.24})$$

La primera ley de la termodinámica establece que las fuentes de variación de la energía total son el trabajo de las fuerzas que actúan sobre el sistema y el calor transmitido.

Si consideramos la forma general de la ley de conservación de una magnitud como ρE tenemos para el flujo convectivo de energía

$$\vec{F}_c = \rho \left(e + \frac{c^2}{2} \right) \vec{c} \quad (\text{Ec. 5.25})$$

y para el flujo difusivo

$$\vec{F}_D = -\rho \gamma \kappa \nabla e \quad (\text{Ec. 5.26})$$

por definición no hay flujo difusivo asociado con el movimiento. El coeficiente κ es el coeficiente de difusividad térmica y tiene que ser determinado empíricamente junto con la viscosidad dinámica μ . El coeficiente γ es la relación de calores específicos C_p/C_v . Este flujo



difusivo escrito así describe la difusión de calor en un medio en reposo debido a la conducción térmica molecular. Generalmente sin embargo, se escribe de forma algo diferente, en términos de lo que conocemos como la ley de Fourier de la conducción de calor

$$\vec{F}_D = -k \nabla T \quad (\text{Ec. 5.27})$$

donde T es la temperatura absoluta y k es la conductividad térmica.

Aquí se dispone de la siguiente relación

$$k = \rho C_p \frac{\nu}{Pr} \quad (\text{Ec. 5.28})$$

donde Pr es el número de *Prandtl*

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\rho C_p \nu}{k} \quad (\text{Ec. 5.29})$$

El Pr es representativo de la relación entre la difusión de cantidad de movimiento respecto de la difusión molecular de calor (es el parámetro habitualmente utilizado para comparar los espesores relativos de las capas límite hidrodinámica y térmica)

Respecto de las fuentes de variación de energía en un sistema fluido debe hacerse una distinción entre las fuentes de volumen y de superficie. Las fuentes de volumen son la suma del trabajo de las fuerzas volúmicas y de fuentes de calor que no sean de conducción y que denominamos q_H . Por ejemplo, radiación o calor liberado por efecto de reacciones químicas. De manera que, por unidad de volumen tenemos

$$Q_V = \rho \vec{f}_e \cdot \vec{c} + q_H \quad (\text{Ec. 5.30})$$

Las fuentes superficiales Q_s son el resultado del trabajo realizado sobre el fluido por los esfuerzos de cizalla internos que actúan sobre la superficie del volumen considerando que no hay fuentes de calor superficiales. Esto es,

$$Q_s = -p\vec{c} + \overline{\vec{\tau}} \cdot \vec{c} = \overline{\vec{\sigma}} \cdot \vec{c} \quad (\text{Ec. 5.31})$$



Agrupando todas las contribuciones, la ecuación de la energía en forma integral es

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho E d\Omega + \int_S \rho E \vec{c} \cdot d\vec{S} = \int_S k \nabla T \cdot d\vec{S} + \int_{\Omega} (\rho \vec{f}_e \cdot \vec{c} + q_H) d\Omega + \int_S (\vec{\sigma} \cdot \vec{c}) \cdot d\vec{S} \quad (\text{Ec. 5.32})$$

Y en forma diferencial

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \vec{c}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \nabla \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{c}) + W_f + q_H \quad (\text{Ec. 5.33})$$

Wf el trabajo de las fuerzas externas

Ecuaciones de Navier-Stokes

Las leyes de conservación correspondientes a las magnitudes básicas del flujo (ρ , $\rho \vec{c}$, ρE) pueden escribirse de forma compacta como

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F} = Q$$

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{c} \\ \rho E \end{bmatrix} \quad (\text{Ec. 5.34})$$

donde U es el vector de variables conservativas, \vec{F} es el vector de flujo Q es el vector de fuentes, de fuentes de calor q_H y del trabajo realizado por las fuerzas externas

Si se desarrolla el término de la divergencia del vector de flujo se obtiene

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial g}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial z} = Q \quad (\text{Ec. 5.35})$$



$$f = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \tau_{xx} \\ \rho uv - \tau_{xy} \\ \rho uw - \tau_{xz} \\ \rho uH - (\bar{\tau} \cdot \bar{c})_x - k \frac{\partial T}{\partial x} \end{bmatrix} \dots g = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho wu - \tau_{zx} \\ \rho wv - \tau_{zy} \\ \rho w^2 + p - \tau_{zz} \\ \rho wH - (\bar{\tau} \cdot \bar{c})_z - k \frac{\partial T}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (\text{Ec. 5.36})$$

donde H es la entalpía total o de remanso (estancamiento)

donde u , v y w son las componentes cartesianas del vector velocidad y f , g y h son las componentes del vector de flujo.

Estas ecuaciones son las ecuaciones de N-S que constituyen la base de la mecánica de fluidos y que son válidas tanto para flujos laminares y turbulentos de cualquier fluido definido éste por su ecuación constitutiva la cual relaciona los esfuerzos de cizalla (o cortantes) con el resto de variables de flujo.





6. Dinámica de fluidos computacional

6.1. Introducción a los métodos numéricos

El objetivo que persiguen las disciplinas científicas es la obtención de leyes generales que permitan explicar, y así entender, los fenómenos naturales. La descripción de dichos fenómenos se plasma en ecuaciones matemáticas cuya resolución, congruente con ciertas condiciones de contorno e iniciales, permite estudiar casos particulares e incorporar dicho conocimiento a nivel tecnológico.

Sin embargo, muchas de esas ecuaciones no admiten soluciones analíticas y las ecuaciones de la mecánica de fluidos son un ejemplo de ellas. Su estudio se ha abordado desde diferentes frentes: mediante simplificaciones que permiten la obtención de soluciones analíticas, mediante técnicas de análisis dimensional que permiten la identificación de las variables de influencia (así como la combinación entre ellas) y mediante la experimentación.

Las simplificaciones, sin dejar de ser importantes, no permiten la obtención de soluciones para muchas situaciones de interés en ingeniería. El estudio de flujos complejos, debidos a la turbulencia por ejemplo, así como dominios de solución y geometrías complejas exigen niveles de detalle que obligan a dejar de lado las simplificaciones.

El análisis dimensional es una extraordinaria herramienta de análisis de la física en general y de la mecánica de fluidos en particular. La identificación de las variables de influencia, su agrupación en grupos adimensionales, la metodología idónea para optimizar los recursos experimentales así como compactar los resultados de los ensayos, son algunas de sus características más remarcables. Del análisis dimensional se establecen las relaciones de semejanza (geométrica, cinemática y dinámica) que permiten la extrapolación de los resultados obtenidos sobre modelos a escala, a prototipos a escala real aun cuando es imposible, en la práctica, asegurar las condiciones de semejanza total.

La tercera opción es la de estudiar los flujos a partir de experimentos. Claro está que la validez de los resultados (siendo éstos un conjunto limitado de observaciones) está limitado por la resolución y exactitud de los medios instrumentales disponibles y, naturalmente, de la disponibilidad de estos últimos. En cualquier caso, la programación, el diseño y la ejecución de los ensayos exigen grandes recursos de tiempo, infraestructura humana y material, y de



dinero.

Complementariamente, la evolución de los ordenadores ha permitido desde hace ya tiempo poner a disposición de la comunidad interesada de nuevas técnicas de análisis: el estudio computacional de los flujos o lo que en la actualidad se conoce como dinámica de fluidos computacional (DFC). Este método tiene por objetivo la resolución de las ecuaciones del flujo haciendo uso de herramientas numéricas discretizando el dominio de solución espacial y temporalmente [43- 46 y 47- 53].

6.2. Dinámica de fluidos computacional

Las ecuaciones que describen los flujos de fluidos son ecuaciones en derivadas parciales en su versión diferencial, o ecuaciones integro-diferenciales en su versión integral. La solución de estas ecuaciones mediante métodos numéricos necesita realizar dos discretizaciones: una espacial y otra temporal, y la calidad de la solución depende de la calidad de dicha discretización. Dichas discretizaciones aproximan las ecuaciones mediante diferentes tipos de formulaciones matemáticas (diferencias finitas, volúmenes finitos, elementos finitos etc.) que incorporan los valores de las propiedades de interés en los diferentes nodos de una malla de cálculo. De esta manera, las ecuaciones se transforman en sistemas de ecuaciones algebraicas que son las que a la postre deben resolverse y que se caracterizan por tener una dimensión muy elevada.

Es importante tener presente que la solución obtenida por un método numérico es una aproximación de mayor o menor calidad del proceso real y que existen diferentes etapas en el proceso de resolución que pueden dar lugar a diferencias entre el resultado final y las observaciones experimentales.

En la primera etapa del proceso se plantea la descripción físico-matemática del problema a resolver y se establece un modelo más o menos realístico del fenómeno real bajo estudio. A modo de ejemplo, las ecuaciones de Navier-Stokes son las ecuaciones que describen el flujo de fluidos que son de interés en el presente proyecto. La segunda etapa consiste en realizar la discretización espacial y temporal del dominio de solución, lo cual añade nuevas aproximaciones al proceso de resolución numérica. En la sección 6.3 se comentan, sucintamente, tres grandes técnicas usadas en la discretización de las ecuaciones: el método de las diferencias finitas (DF), el método de los volúmenes finitos (VF) y el método de los elementos finitos (EF).



La tercera etapa consiste en la resolución de los sistemas de ecuaciones algebraicas resultantes de las discretizaciones. Este proceso depende del tipo de ecuaciones que en la mayoría de los casos son no lineales lo que obliga a la utilización de nuevas aproximaciones que permitan su linealización junto con métodos iterativos de solución.

En el momento de interpretar y verificar los datos obtenidos es de suma importancia la representación gráfica de los resultados. La cantidad de información obtenida en un proceso de simulación puede ser enorme y se necesitan herramientas de posprocesado potentes para poder analizar y manipular ágilmente los resultados y, así, llegar a sacar conclusiones del estudio. En la fase de posprocesado la experiencia del usuario es de suma importancia a la hora de detectar problemas y errores en la solución.

6.3. Métodos de discretización

En la búsqueda de una descripción cualitativa y cuantitativa de un determinado fenómeno físico el ingeniero, por lo general, plantea un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias o en derivadas parciales válidas para determinada región (o dominio), e impone sobre dicho sistema condiciones de contorno e iniciales apropiadas. En este momento el modelo matemático está completo. Es aquí donde aparece la mayor dificultad dado que solamente las formas más simples de estas ecuaciones aplicadas a dominios geoméricamente sencillos pueden ser resueltas de forma exacta con los métodos matemáticos disponibles. Las ecuaciones diferenciales ordinarias con coeficientes constantes son uno de los pocos ejemplos para los cuales se dispone de procedimientos matemáticos clásicos de solución.

Con el fin de evitar tales dificultades y lograr resolver el problema con la ayuda de computadoras, es necesario presentar el problema de una manera puramente algebraica. Mediante el proceso de discretización el conjunto infinito de números que representan la función o funciones incógnitas en el continuo es reemplazado por un número finito de parámetros incógnita y este proceso requiere alguna tipo de aproximación.

Entre las diferentes formas de discretización posibles (elementos finitos, volúmenes finitos, etc.), una de las más simples es el Método de Diferencias Finitas (MDF).

6.3.1. Diferencias finitas

Es el más antiguo y también el más sencillo de usar cuando las geometrías son sencillas. El punto de partida son las ecuaciones de conservación en forma diferencial. El dominio de la



solución es cubierto por una malla y en cada punto de la malla, la ecuación diferencial es aproximada a partir de los valores nodales de las funciones.

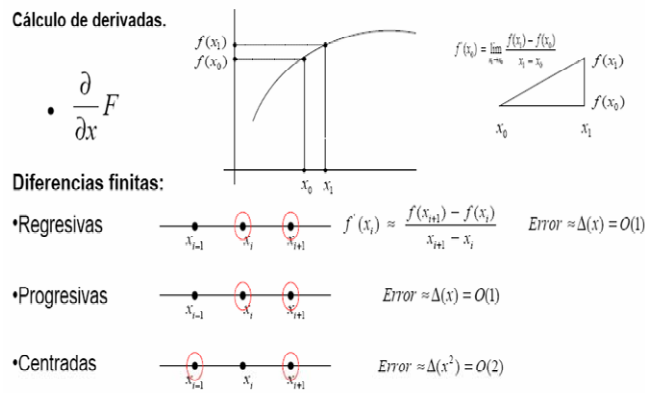


Fig. 6.1. Método de diferencias finitas: Aproximan las derivadas mediante fórmulas de diferencias. [55]

En principio es posible aplicar DF a cualquier tipo de malla pero es usual utilizarlo con mallas estructuradas con las que este método es particularmente simple y efectivo y con el que pueden obtenerse esquemas de orden superior muy fácilmente.

6.3.2. Volúmenes finitos

El método de VF utiliza la forma integral de las ecuaciones de conservación como punto de partida. El dominio es dividido en un cierto número de volúmenes de control contiguos sobre los que se aplican las ecuaciones de conservación. En el centroide de cada volumen se establece un nodo sobre el que se valoran las variables de interés.

El método de VF es adecuado para cualquier tipo de grid y, por tanto, útil para geometrías complejas. La malla define solamente las fronteras de los volúmenes de control y no necesita estar relacionado con un sistema coordenado particular.



6.3.3. Elementos finitos

El método de los EF es similar en muchos aspectos al de VF. El dominio se subdivide en un conjunto de elementos discretos generalmente no estructurados; en 2D se utilizan elementos tipo triángulo o cuadrilátero, mientras que en 3D se utilizan tetraedros y hexaedros. La característica distintiva es que las ecuaciones en el método de EF están multiplicadas por funciones de peso antes de ser integradas sobre el dominio. En su método más simple, la solución es aproximada por una función de forma lineal en cada elemento de forma que se garantice la continuidad de la solución a través de las fronteras de los elementos.

Una gran ventaja de los EF es la facilidad con la que trata geometrías complejas pues las mallas son muy fáciles de refinar. Por otra parte, el método es relativamente fácil de analizar matemáticamente y presenta algunas propiedades óptimas para cierto tipo de ecuaciones.

Su principal desventaja, la cual es compartida por todos los métodos que utilizan mallas no estructuradas, es que es más difícil encontrar métodos eficaces para la manipulación de las matrices resultantes.

a) El método de los elementos finitos

El método de los elementos finitos proviene del campo de análisis de estructuras. El concepto de elemento tiene su origen en las técnicas usadas en el cálculo de esfuerzos en los que una estructura es subdividida en pequeñas subestructuras de varias formas y reensambladas posteriormente después de que cada elemento haya sido analizado. El desarrollo de esta técnica y su elaboración formal es lo que hoy en día se conoce como método de los elementos finitos (MEF). La expresión en sí misma fue introducida por *Clough (1960)*.

Después de haber sido un método aplicado a una amplia variedad de problemas estructurales tanto lineales como no lineales, se vió pronto que el método podía ser usado para resolver problemas de medios continuos en general (*Zienkiewicz and Cheung, 1965*). Desde entonces el método EF se ha convertido en un método de aproximación de soluciones numéricas de problemas físicos descritos por ecuaciones de campo en medios continuos y en la actualidad contiene muchos de los esquemas de diferencias finitas como casos especiales. Conviene recordar las primeras referencias históricas al tratamiento de



problemas de flujo de fluidos mediante EF de *Chung (1978)*, *Bake (1983)* así como esquemas más avanzados de *Temam (1977)*, *Girault y Raviart (1979)* y *Thomasset (1981)*. La literatura reciente debe considerar el tercer volumen del texto de *Zienkiewicz y Taylor (2000)*. Recomendable el link <http://ohio.ikp.liu.se/fe> como una extensiva base de datos con la más reciente literatura relacionada.

El método de los elementos finitos tiene un par de características comunes con el método de los volúmenes finitos:

- La discretización del espacio consiste en un conjunto de volúmenes o celdas, llamadas elementos según la tradición de los EF, en contra del conjunto de puntos que es la forma en que lo hacen las DF.
- Requiere una formulación integral como punto de partida la cual puede considerarse una generalización del método de los VF.

Específicamente el método de EF se basa en las siguientes etapas:

- La discretización del espacio en elementos contiguos de formas arbitrarias típico de mallas no estructuradas. De hecho los EF son particularmente apropiados para mallas no estructuradas.
- Define en cada elemento una representación paramétrica de las variables incógnita basadas en las denominadas funciones de forma o de interpolación asociadas con cada elemento.
- Define una formulación integral de las ecuaciones que deben ser resueltas en cada elemento del espacio discretizado.

A continuación se presentan explícitamente estas etapas.

b) Funciones de interpolación

El método EF está basado en la definición de ciertos valores funcionales asociados a los nodos de la malla donde el valor numérico de las funciones incógnita (y eventualmente de



sus derivadas) deben ser determinadas. El número total de incógnitas nodales son los denominados **grados de libertad**.

El método es una adaptación de los denominados métodos variacionales. Éstos buscan la mejor aproximación de la solución de forma que las variables de campo son aproximadas por combinaciones lineales de ciertas funciones de **base** también llamadas funciones de **forma**, de **interpolación** o funciones de **prueba**.

Si \bar{u} es una aproximación numérica de las funciones incógnitas $u(x)$, se define su representación paramétrica como la superposición lineal de funciones N_I

$$\bar{u}(x) = \sum_I u_I N_I(x) = u_0 N_0(x) + \dots + u_N N_N(x) \quad (\text{Ec. 6.1})$$

donde la suma se extiende a todos los nodos. Para cada nodo I asociamos una función base N_I . Estas funciones pueden ser de muchos tipos y con grados de continuidad diferentes en las fronteras entre elementos. Por ejemplo, los métodos basados en la definición de las funciones de interpolación mediante funciones trigonométricas que conducen a series de *Fourier* son usadas por los denominados métodos de **colocación** y en métodos **espectrales** donde las $N_I(x)$ pueden ser definidas a partir de polinomios ortogonales (del tipo Legendre o Chebyshev, por ejemplo).

En cualquier caso, las propiedades del método EF están basadas en una elección específica de estas funciones de interpolación que deben cumplir siguientes propiedades:

- **Regularidad.** La solución aproximada debe ser continua y diferenciable en el elemento tantas veces como lo requiera la representación débil (*sección 6.3.3 (d)*).
- **Complejitud.** Deben ser polinomios completos hasta el grado escogido. Es decir, deben incluir todos los términos desde grado cero hasta el escogido (así se asegura la representación de soluciones constantes).
- **Continuidad.** Las funciones de forma deben ser interpolantes de las variables primarias en los nodos del elemento finito. Con esto se asegura la continuidad de las variables en los nodos que son comunes a varios elementos.



Estas condiciones definen completamente las propiedades de las funciones de interpolación locales usadas en EF y, de entre las muchas posibles elecciones, generalmente se consideran dos familias de elementos en función de sus grados de continuidad entre elementos y de sus valores nodales asociados.

Si los valores nodales están definidos por los valores de las funciones incógnitas entonces es suficiente, si el sistema está descrito por EDP's de orden no superior a dos, una continuidad tipo C^0 en las fronteras entre elementos. Estos elementos y sus funciones de forma asociadas se denominan elementos de **Lagrange**. Si, por otro lado, las derivadas parciales de primer orden de las funciones incógnitas deben ser consideradas como incógnitas adicionales (o grados de libertad) generalmente se exige la continuidad hasta el mayor de los órdenes de esas derivadas y los elementos se denominan **Hermitianos**. Cuando las condiciones de continuidad requeridas se satisfacen a lo largo de todos los puntos de las fronteras entre elementos el elemento se llama de **conforming**. Cuando esta última condición se relaja de manera que sólo se exige la continuidad en un número limitado de puntos de la frontera se denominan **no-conforming**.



c) Un ejemplo: elementos lineales 1D

El elemento más simple tiene una función de interpolación lineal a trozos y contiene dos nodos. En referencia a la figura 6.2, el elemento entre los nodos $i-1$ e i es el elemento 1 y el elemento adyacente, entre los nodos i e $i+1$ el *elemento 2*. Tienen pues un nodo en común y longitudes respectivas Δx_i y Δx_{i+1} .

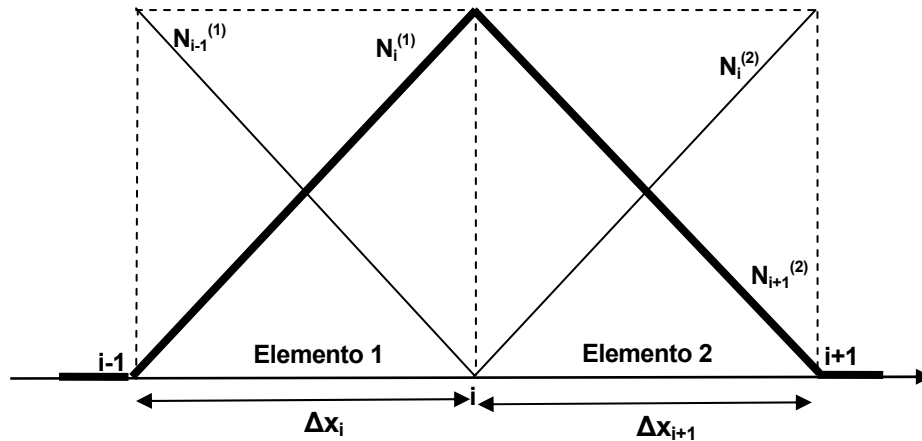


Fig. 6.2. Esquema de explicación para elementos lineales 1D.

Para cumplir (i) no tenemos más que utilizar polinomios interpoladores de Lagrange de manera que para el *elemento 1* tenemos que

$$N_i^{(1)}(x) = \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x_i} \quad N_{i-1}^{(1)}(x) = \frac{x_i - x}{\Delta x_i} \quad (\text{Ec. 6.2})$$

y para el *elemento 2*

$$N_i^{(2)}(x) = \frac{x_{i+1} - x}{\Delta x_{i+1}} \quad N_{i+1}^{(2)}(x) = \frac{x - x_i}{\Delta x_{i+1}} \quad (\text{Ec. 6.3})$$

La función de forma global N_i asociada con el nodo i se obtiene ensamblando $N_i^{(1)}$ con $N_i^{(2)}$. Está claro que el resultado es cero para valores menores que x_{i-1} y mayores que x_{i+1} .



En la expresiones que utilizamos x es la coordenada global del problema pero para fines calculísticos conviene utilizar las denominadas **variables normalizadas** definidas por

$$\xi = \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x_i} \quad (\text{Ec. 6.4})$$

que permiten que las expresiones de las funciones de forma no dependan del elemento considerado. Así las funciones de interpolación toman la forma universal

$$N_1(\xi) = 1 - \xi \quad N_2(\xi) = \xi \quad (\text{Ec. 6.5})$$

donde el nodo 1 se corresponde con el punto de malla $i-1$ con $\xi=0$ y el *nodo 2* con el punto de malla i con $\xi=1$.

Análogamente, la transformación entre el espacio (x_i, x_{i+1}) y el espacio $\xi(0,1)$ es

$$\xi = \frac{x - x_i}{\Delta x_{i+1}} \quad (\text{Ec. 6.6})$$

Que conduce a

$$N_i^{(2)}(\xi) = 1 - \xi = N_1(\xi) \quad N_{i+1}^{(2)}(\xi) = \xi = N_2(\xi) \quad (\text{Ec. 6.7})$$

La función incógnita $u(x)$ es aproximada ahora en el nodo 1 por

$$\bar{u}(x) = u_{i-1}N_{i-1}^{(1)}(x) + u_iN_i^{(1)}(x) \quad (\text{Ec. 6.8})$$

$$o \quad \bar{u}(x) = u_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{\Delta x_i} (u_i - u_{i-1}) \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \quad (\text{Ec. 6.9})$$

Y sobre el *nodo 2*, $u(x)$ es aproximada por

$$\bar{u}(x) = u_iN_i^{(2)}(x) + u_{i+1}N_{i+1}^{(2)}(x) = u_i \frac{x - x_i}{\Delta x_{i+1}} (u_{i+1} - u_i) \quad (\text{Ec. 6.10})$$



Las derivadas de $\bar{u}(x)$ según esta representación por elementos finitos es aproximada por

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = \sum_i u_i \frac{\partial N_i}{\partial x_i} \quad (\text{Ec. 6.11})$$

y en particular, en el *nodo* i se tiene para el *elemento* 1 que

$$(\bar{u}_x)_i = \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\right)_i^{(1)} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x_i} \quad (\text{Ec. 6.12})$$

que se corresponde con una diferencia finita hacia atrás con un orden de exactitud igual a uno.

Si consideramos el *elemento* 2

$$(\bar{u}_x)_i = \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\right)_i^{(2)} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x_{i+1}} \quad (\text{Ec. 6.13})$$

Expresión que es idéntica a la fórmula de diferencias finitas en adelante.

Debería notarse que las derivadas de $\bar{u}(x)$ no son continuas en la frontera de los elementos y sin embargo las funciones de interpolación son de clase C^0 . Es habitual en la técnica de EF hacer servir un promedio entre los dos elementos para definir una aproximación de la derivada $(\bar{u}_x)_i$ que ponderadas adecuadamente respecto de sus dimensiones relativas dan lugar a aproximaciones con un orden de exactitud igual a dos y válidas para cualquier malla

$$(\bar{u}_x)_i = \frac{1}{\Delta x_{i+1} - \Delta x_i} \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\right)_i^{(2)} \Delta x_{i+1} + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\right)_i^{(1)} \Delta x_i \right] \quad (\text{Ec. 6.14})$$

Esta forma de proceder se denominada **transformación isoparamétrica** e ilustra un procedimiento general en el método de EF que también se aplica en 2D y 3D.



d) Discretización de las ecuaciones: formulación integral

Este es el paso más específico y esencial del método pues requiere la formulación integral del problema físico equivalente a las ecuaciones de campo que deben ser resueltas.

Para conseguir este propósito pueden escogerse dos caminos. Uno, utilizar un principio variacional que exprese el problema físico como valores extremales de un funcional, dos, hacer servir una **formulación débil** (también llamada **método de residuos ponderados**).

A pesar de que muchos problemas físicos pueden ser formulados como principios variacionales (el modelo de flujo potencial es un ejemplo) no es cierto en el caso general de las ecuaciones de NS. La formulación débil es la técnica más general que permite disponer para todos los casos de una formulación integral equivalente. Incluso cuando aparecen discontinuidades (como ondas de choque, por ejemplo) la formulación integral es la única que asegura significado físico aun cuando las derivadas de las variables de flujo no estén bien definidas por problemas de discontinuidad.

Para ilustrar cómo trabaja este método consideramos la ecuación:

$$\nabla \cdot (k \nabla \bar{u}) = q \quad (\text{Ec. 6.15})$$

Que escrita con forma compacta es $L(u) = q$, donde L representa cierto operador diferencial. Si $\bar{u}(x,y)$ es una aproximación a la solución $u(x,y)$, denominamos residuo R a

$$R(\bar{u}) = L(\bar{u}) - q \quad (\text{Ec. 6.16})$$

que es diferente de cero sino \bar{u} sería la solución analítica. Cualquier algoritmo de resolución convergerá si consigue hacer tender R hacia cero a pesar de que el valor cero no pueda alcanzarse en un número finito de operaciones. Así pues el residuo aparece como una medida de la exactitud o del error de aproximación. Debido a que este error no puede hacerse cero simultáneamente en todos los puntos del dominio discretizado, la *mejor* solución puede obtenerse requiriendo que algún promedio ponderado de los residuos sobre el dominio sea idénticamente cero.

Si $W(x)$ es alguna función de peso con ciertas propiedades de suavidad, el método de



residuos ponderados o formulación débil requiere que

$$\int_{\Omega} WR(\bar{u})d\Omega = 0 \quad (\text{Ec. 6.17})$$

Esto es, técnicamente se establece la ortogonalidad entre el residuo y las funciones de prueba (en realidad con el subespacio que constituyen). Así que aplicando a la ecuación 6.15:

$$\int_{\Omega} W\nabla \cdot (k\nabla\bar{u})d\Omega = \int_{\Omega} Wqd\Omega \quad (\text{Ec. 6.18})$$

Un paso esencial de esta aproximación es la integración por partes del término derivada segunda mediante el teorema de Green

$$-\int_{\Omega} (k \nabla\bar{u} \cdot \nabla W)d\Omega + \int_{\Gamma} k \frac{\partial\bar{u}}{\partial n} Wd\Gamma = \int_{\Omega} Wqd\Omega \quad (\text{Ec. 6.19})$$

donde la derivada normal a lo largo de la frontera Γ del dominio aparece en el lado derecho. Así pues la ecuación 6.18 se transforma en

$$\int_{\Omega} W\nabla \cdot (k\nabla\bar{u})d\Omega = -\int_{\Omega} (k \nabla\bar{u} \cdot \nabla W)d\Omega + \int_{\Gamma} k \frac{\partial\bar{u}}{\partial n} Wd\Gamma \quad (\text{Ec. 6.20})$$

Dicha ecuación es la formulación matemática del método de los residuos ponderados y también se denomina formulación débil del problema. En función de la elección de las funciones W denominadas funciones de **test** o **prueba**, se obtienen diferentes métodos con nombres propios.

Está claro que una forma sencilla de disminuir el residuo es disminuir el tamaño de los elementos utilizados. La alternativa es incrementar el **orden del elemento**. El orden del elemento está relacionado con el grado del polinomio interpolador utilizado. Así, en la sección “*Un ejemplo: elementos lineales 1D*” hemos ejemplificado el método EF mediante



elementos finitos de primer orden o lineales. Si utilizásemos polinomios de grado dos necesitaríamos tres nodos en cada elemento para asegurar la unicidad en la interpolación. En este caso hablaríamos de elementos de segundo orden o cuadráticos.

e) El método de Galerkin

El método más ampliamente utilizado es el método de **Galerkin** en el que las funciones de peso son iguales a las funciones de forma o interpolación $N_I(x)$. También se denomina método de **Bubnow-Galerkin** para distinguirlo del método de **Petrov-Galerkin** el cual utiliza funciones de test diferentes a las de interpolación.

Para cada uno de los M grados de libertad

$$\bar{u}(x, t) = \sum_I u_I(t) N_I(x) \quad (I = 1, 2, \dots, M) \quad (\text{Ec. 6.21})$$

y con la selección de $W = N_J(x)$ para obtener la ecuación discretizada para el nodo J se obtiene con ayuda de la ecuación (6.19)

$$-\sum_I u_I \int_{\Omega_I} (k \nabla N_I \cdot \nabla N_I) d\Omega + \oint_{\Gamma} k \frac{\partial \bar{u}}{\partial n} N_I d\Gamma = \int_{\Omega_J} q N_I d\Omega \quad (\text{Ec. 6.22})$$

donde Ω_J es el subdominio de todos los elementos que contienen el nodo J y la suma sobre I cubre todos los nodos de Ω_J . La matriz

$$K_{IJ} = \int_{\Omega_I} (k \nabla N_I \cdot \nabla N_J) d\Omega \quad (\text{Ec. 6.23})$$

es la denominada **matriz de rigidez** (stiffness matrix). Para problemas lineales en los que k sea independiente de u dependerá únicamente de la geometría de la malla y de los elementos escogidos.



f) El método de Galerkin para leyes de conservación

Consideremos la ley de conservación siguiente

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \vec{F} = Q \quad (\text{Ec. 6.23})$$

donde \vec{F} es el vector flujo que se considerará que sólo contiene contribuciones convectivas. Consideraremos las siguientes condiciones de contorno e iniciales sobre el dominio Ω cuyo contorno o frontera es $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$

$$\begin{aligned} U(x,0) &= U_0(x) \quad \text{para } t \geq 0 \quad x \in \Omega \\ U(x,t) &= U_1(x) \quad \text{para } t \geq t_0 \quad x \in \Gamma^0 \\ \vec{F} \cdot \hat{n} &= F_n = g \quad \text{para } t \geq 0 \quad x \in \Gamma^1 \end{aligned} \quad (\text{Ec. 6.24})$$

Definimos una formulación débil con $W=0$ en Γ_0

$$\int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial t} W d\Omega + \int_{\Omega} (\nabla \cdot \vec{F}) W d\Omega = \int_{\Omega} Q W d\Omega \quad (\text{Ec. 6.25})$$

La integración por partes de los términos de flujo conduce a

$$\int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial t} W d\Omega - \int_{\Omega} (\vec{F} \cdot \nabla) W d\Omega + \int_{\Gamma} W \vec{F} \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} Q W d\Omega \quad (\text{Ec. 6.26})$$

La representación mediante EF es

$$U = \sum_I U_I(t) N_I(x) \quad (\text{Ec. 6.27})$$

y como el término F es generalmente una función no lineal de U, es preferible definir también una representación separada para los flujos como

$$\vec{F} = \sum_I \vec{F}_I N_I(x) \quad (\text{Ec. 6.28})$$



La ecuación discretizada para el nodo J se obtiene mediante Galerkin con $W=N_j$ y conduce a

$$\sum_I \frac{dU_I}{dt} \int_{\Omega_j} N_I N_j d\Omega - \sum_I \vec{F}_I \int_{\Omega_j} (N_I \cdot \nabla) N_j d\Omega + \int_{\Gamma} g N_I d\Gamma = \int_{\Omega_j} Q N_j d\Omega \tag{Ec. 6.29}$$

donde Ω_j es el subdominio de todos los elementos que contienen el nodo J mientras que la suma sobre I cubre todos los nodos de Ω_j (figura 6.3) La matriz resultante del término dependiente del tiempo se denomina **matriz másica** M_{IJ} .

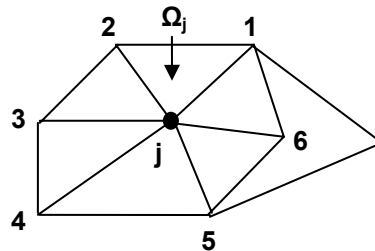


Fig. 6.3. Subdominio Ω_j de todos elementos conteniendo el nodo J.

$$M_{IJ} = \int_{\Omega_j} N_I \cdot N_j d\Omega \tag{Ec. 6.30}$$

mientras que la matriz de rigidez

$$\vec{K}_{IJ} = \int_{\Omega_j} N_I \nabla N_j d\Omega \tag{Ec. 6.31}$$

no es simétrica. De manera que la ecuación 6.29 se convierte en

$$\sum_I M_{IJ} \frac{dU_I}{dt} - \sum_I \vec{F}_I \cdot \vec{K}_{IJ} = \int_{\Omega_j} Q N_j d\Omega - \int_{\Gamma} g N_I d\Gamma \tag{Ec. 6.32}$$

En una discretización de diferencias finitas el término dependiente del tiempo generalmente se reduce a dU_j/dt correspondiente a una matriz másica diagonal mientras que la presente formulación conduce a un promedio sobre varios nodos de Ω_j . De hecho la presencia de esta matriz másica complica la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias



resultante. Una rigurosa manera de diagonalizar la matriz másica consiste en introducir funciones de interpolación ortogonales y aplicar Petrov-Galerkin con estas nuevas funciones. Actualmente se utiliza una aproximación denominada **mass lumping** consistente en reemplazar M_{IJ} por la suma sobre I de sus elementos en J fijos. Esto es

$$M_{IJ}^{(lmp)} = \left[\sum_i M_{iJ} \right] \delta_{iJ} \quad (\text{Ec. 6.33})$$

La ecuación 6.31 obtenida de esta forma es muy semejante a la formulación de volúmenes finitos.

g) Elección de elementos

Es éste posiblemente uno de los puntos más difíciles del métodos de EF y en relación con las ecuaciones de NS está lejos de ser simple ¿Qué elementos trabajan bien? ¿Por qué otros no? ¿Por qué hay tantas posibles elecciones? Lo que se presenta a continuación está más o menos contrastado con la experiencia acumulada alrededor de flujos incompresibles mientras que los esfuerzos actuales van desde sofisticados aparatos matemáticos hasta consideraciones más simples, pero no por ello menos efectivas, como son exactitud, simplicidad o coste computacional efectivo.

El campo es ciertamente rico pero en lo que se refiere al usuario sólo cabe decir que no existe el mejor elemento. Se dispone de más de dos docenas de elementos triángulo y cuadrilátero para flujos 2D pero para 3D el número es menor. Sin embargo, los investigadores del tema mantienen que el método EF estaría en la edad de piedra si los usuarios necesitados de resultados prácticos hubieran tenido que esperar a que los investigadores teóricos hubieran probado concienzudamente propiedades como consistencia, estabilidad, exactitud o convergencia.

Conviene a modo de resumen presentar algunas de las categorías que engloban los distintos tipos de elemento:

- interpolación de igual orden *versus* mixta. Hace referencia a las funciones de base



usadas para las componentes de la velocidad y para las de presión. El caso mixto quiere decir que para la velocidad se utilizan polinomios de orden superior a los que se utilizan para la presión. Debe notarse que un método estable puede conseguirse "enriqueciendo" el espacio de velocidad para un espacio de presiones fijo. Sin embargo, tal esquema podría no ser necesariamente más exacto en el sentido de escoger funciones base de mayor orden (cuadráticos por ejemplo) si la exactitud del espacio de presiones escogido es baja. Los más populares elementos de interpolación mixtos emplean funciones de base un orden menor para la presión que para la velocidad.

- Presión continua *versus* discontinua. Cuando la formulación débil de las ecuaciones de cantidad de movimiento necesita de la integración por partes del gradiente de P , la forma débil resultante no contiene derivadas de la presión y puede por tanto aproximarse por funciones (polinomios a trozos de hecho) que no son de clase C^0 . Debe notarse que los elementos de presión discontinuos no tienen presión única definida en la frontera de los elementos, son bivaluadas y en ocasiones multivaluadas en ciertos nodos.
- *Conforming versus no-conforming*. Los elementos de velocidad tipo conforming son aquellos cuyas funciones base son tales que sus primeras derivadas así como sus cuadrados son integrables en el dominio. El elemento más simple no-conforming es un triángulo lineal con los nodos emplazados en los puntos medios de sus lados. Se "conforma" con la velocidad en cada triángulo vecino únicamente en un punto.

Ahora se introducirá algo de terminología que permite clasificar los distintos tipos de elementos que habitualmente se utilizan.

- Para triángulos y tetrahedros la denominación $\mathbf{P}_m\mathbf{P}_n$ significa que cada componente de la velocidad es aproximada por polinomios completos y continuos a trozos de grado m mientras que para la presión son de grado n . Esto es, $\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1$ en 2D significa que para la componente u de la velocidad se toma

$$u = a_1 + a_2x + a_3y + a_4xy + a_5x^2 + a_6y^2$$

y resultados semejantes para el resto de componentes de la velocidad, mientras que

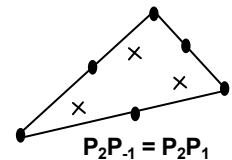


para la presión se tiene

$$P = a_1 + a_2x + a_3y$$

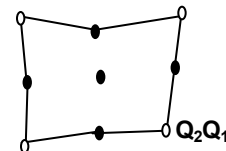
Tanto la velocidad como la presión son continuas a través de las fronteras de los elementos y cada elemento (triangular) contiene seis nodos de velocidad y tres de presión. La versión 3D (tetrahedros) contiene 10 nodos de velocidad y cuatro nodos de presión.

- Para la familia $P_m P_n$ vale lo mismo que antes excepto que la presión es aproximada mediante polinomios discontinuos a trozos (de clase C^{-1}) de grado n . Esto es, $P_2 P_{-1}$ es lo mismo que $P_2 P_1$ sólo que ahora la presión es una función lineal independiente en cada elemento y discontinua en las fronteras entre elementos.



- Para cuadriláteros/hexahedros la denominación $Q_m Q_n$ significa que cada componente de la velocidad es aproximada por un polinomio continuo a trozos de grado m en cada dirección del cuadrilátero mientras que para la presión es de grado n . Por ejemplo, $Q_2 Q_1$ es lo mismo que $P_2 P_1$ con la adición por ejemplo a la componente u de

$$a_7x^2y + a_8xy^2 + a_9x^2y^2 \quad \text{y de} \quad a_4xy \quad \text{a} \quad P.$$



Cada elemento contiene nueve nodos de velocidad (3^2) y cuatro de presión (2^2). La versión 3D (ladrillo o brik) tiene 27 nodos para la velocidad (3^3) y ocho (2^3) para la presión.

- La familia del tipo $Q_m Q_n$ es como antes pero la aproximación sobre la presión no es continua en las fronteras entre elementos.
- También la denominación $Q_m P_n$ indica la misma aproximación para la velocidad que el caso anterior pero con una aproximación para la presión que es un polinomio completo discontinuo de grado n (es como si la presión estuviera representada sobre un triángulo en el interior de un cuadrilátero)
- La denominación P_m^+ o Q_m^+ significa que utilizan elementos *bubble* como aproximación para la velocidad. Estos elementos tienen funciones de forma que son

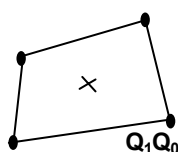


cero en las fronteras de los elementos de malla y toman su valor máximo en el medio del elemento. La función de forma (sólo hay una para elemento de malla) se define como el polinomio de orden más pequeño que es cero en la frontera del elemento.

- Finalmente cuando $n=0$ se considera que la presión es constante a trozos y se omite el signo menos por simplicidad.

Consideraciones adicionales finales:

- La interpolación mixta mejora la estabilidad y la exactitud pero requiere esfuerzos adicionales tanto durante la resolución como en la etapa de post-procesado.
- La interpolación de igual orden sólo consigue estabilidad y buena exactitud si la condición $\nabla u = 0$ se modifica o debilita a $\nabla u = \varepsilon$. Si no se estabiliza aparecen modos de presión espúreos.
- Aproximaciones continuas de la presión no pueden asegurar balances de masa a nivel de elemento mientras que las discontinuas pueden evitar esta desventaja.
- Los elementos cuadriláteros son usualmente más exactos que los triangulares pues estos últimos presentan efectos de orientación de la malla. El generador de malla es el que debería disminuir dicho error de orientación.
- Los elementos triangulares son más útiles a la hora de describir geometrías complejas. Una buena política es usar triángulos sólo cuando sea necesario y cuadriláteros donde sea posible. Esto es un verdadero reto para el generador de malla y no está resuelto en el caso de 3D.
- Hay opiniones que abogan que se añadan elementos tipo *bubble* (y otros elementos con nodos internos) deberían añadirse para mejorar la estabilidad incluso si el orden de la convergencia no se incrementa.
- El elemento Q_1Q_0 es posiblemente el más controvertido y el menos conocido de todos los elementos. Paradójicamente, en 3D es el más utilizado. Con esto suele querer decirse que no hay nada como la experiencia acumulada después de años.



- El hexahedro, elemento con seis caras cuadriláteras, es en general mejor elemento en 3D que el tetrahedro. Así lo señalan *Wait y Mitchell (1985)* aunque no explícitamente para las ecuaciones de NS.
- Para todos los elementos, el método *Galerkin* de elementos finitos genera básicamente aproximaciones de diferencias finitas centradas a la ecuación (*no lineal*) de advección y para AD pero pueden presentar problemas de oscilaciones (*wiggles*), fenomenología numérica que trataremos más adelante.
- En 2D los elementos triangulares $P_{+2}P_1$ y $P_{+2}P_{-1}$ son muy buenos como lo son los cuadriláteros isoparamétricos como el Q_2P_{-1} el cual es, posiblemente, el elemento más exacto en 2D.
- Si no se desea utilizar funciones *bubbles* sobre elementos triangulares, P_2P_1 no es malo y $P_2(P_1+P_0)$ es incluso mejor a pesar de ser algo más complicado.
- En 3D el tema es menos claro en parte porque no se han realizado suficientes simulaciones destinadas a valorar los distintos tipos de elementos.

h) El mallado

La generación del mallado es un paso crucial en cualquier simulación computacional. Posiblemente el más importante y la elección de la malla tiene una importancia enorme sobre el resultado y sobre el tiempo de cálculo. El software permite elegir diferente tipos de elementos de malla y éstos pueden ensamblarse para constituir mallas uniformes o no uniformes. La mayor diferencia entre los dos es que el mallado no uniforme tiene un gradiente en el tamaño de las células. En general encontramos elementos de malla pequeños cerca de geometrías complejas y elementos mayores a medida que nos alejamos.

[43]

Conviene no perder de vista algunas recomendaciones para obtener una malla de calidad:

- Evitar discontinuidades en el tamaño de los elementos de malla. Cualquier variación



súbita en el tamaño de la malla puede reducir a cero la exactitud local.

- Asegurar en lo posible que los tamaños de los elementos varían de manera continua en todas las direcciones.
- Minimizar las distorsiones de la malla, evitando elementos cóncavos o células o elementos que formen ángulos entre bordes adyacentes lejos de ser perpendiculares.
- Evitar elementos de malla con uno o varios bordes excesivamente cortos, excepto en capas límite donde se permite altas relaciones de aspecto asegurándose así que los elementos son prácticamente ortogonales a la superficie sólida.

La importancia de estas recomendaciones es particularmente crítica en regiones de flujo donde se manifiestan grandes gradientes, es decir, regiones en las que las variables de flujo varían rápidamente. En caso contrario, en aquellas regiones en las que el flujo es casi uniforme estas recomendaciones no son tan exigentes.

En cualquier caso, conviene recordar lo siguiente:

- Las mallas estructuradas, en general, son la mejor garantía para obtener la mejor exactitud.
- Las mallas no estructuradas son las mejores, debido a su flexibilidad, cuando se trabaja con geometrías complejas.
- Debe tenerse mucho cuidado con la calidad del mallado evitándose discontinuidades y distorsiones del mismo especialmente en aquellas regiones en las que se esperan variaciones importantes de los valores de las variables de flujo.



i) Mallas adaptativas

Durante la modelización es importante seleccionar una malla que minimice el error en las cantidades de interés. Es posible hacerlo manualmente pero no es fácil hacerlo a priori. En muchas aplicaciones el algoritmo debe resolver la solución sólo en regiones muy específicas como capas límite, ondas de choque, cargas localizadas o pequeños detalles geométricos. La generación de mallas adaptativas identifica las regiones que requieren una mayor resolución y refina la malla en esa región.

Los errores se valoran en términos de residuos, uno por cada elemento de malla. En COMSOL tenemos dos formas de hacerlo. Mediante las metodologías que dicho entorno denomina Débil y de Coeficiente.

El último evalúa el residuo de la EDP en el centro de cada elemento y tiene en cuenta los saltos de flujo a elementos vecinos. Sin embargo no es posible hacer esto con ecuaciones formuladas en su forma débil.

El método débil utiliza una malla auxiliar para estimar el residuo. Este método genera automáticamente la malla incrementando el orden (en uno) de las funciones de forma usadas haciendo uso de la misma malla. Debido a este trabajo extra de ensamblado, este método es más lento que el anterior pero es más general. Este método utiliza elementos tipo vector de manera que tiene en cuenta los flujos en las fronteras.

El solver adaptativo lleva a cabo la siguiente secuencia iterativa:

1. Resuelve el problema sobre la malla existente mediante algún solver estacionario.
2. Evalúa el residuo de la EDP en todos los elementos de malla.
3. Estima el error en la solución sobre todos los elementos de malla.
4. Termina la ejecución si ha hecho el número requerido de refinamientos o si ha excedido el máximo número de elementos.
5. Refina un subconjunto de elementos basado en el tamaño de los indicadores de error locales.
6. Repite desde 1.



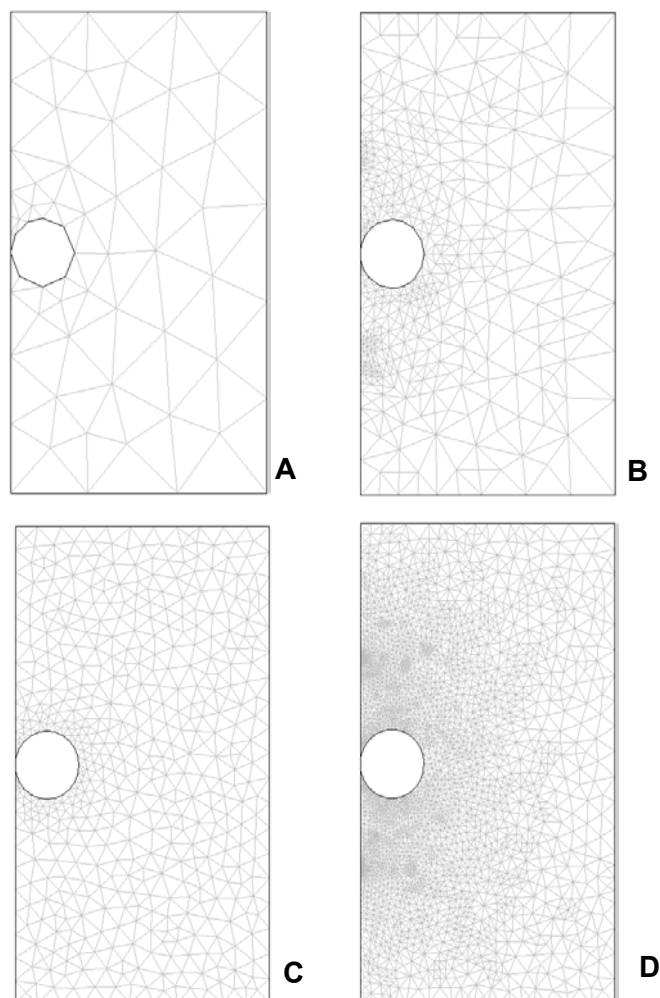


Fig. 6.3. Ejemplo de calidad de mallas. (A) Coarse, (B) Normal, (C) Fine, (D) Extra fine.

j) Puesta a prueba (benchmarking) de algunos resolvedores (solvers) de COMSOL

Resulta conveniente realizar alguna prueba de las prestaciones de los resolvedores (directos y lineales) que incorpora COMSOL. Con ello se persigue poder valorar objetivamente cómo pueden mejorarse las simulaciones mediante la elección adecuada de ciertos parámetros de los resolvedores. La tarea es optimizar las especificaciones de éstos de manera que el problema sea resuelto con una exactitud y una eficiencia tan buena como sea posible. La cuestión es, dado un PC estándar de 32 bits y 3 GB de memoria RAM, para cuantos grados de libertad podemos resolver el problema en unos pocos minutos. El problema físico que resolveremos es un problema de difusión relacionado con una conducción de calor de



manera que podamos pensar que todos los solvers funcionarán relativamente bien con este problema. [54]

Para ello lo primero que haremos es visualizar en el administrador de tareas de Windows el uso de memoria como estimador de la cantidad de memoria utilizada durante la simulación.

Tabla 6.1. Tabla de tiempo de cálculo en función de diferentes parámetros.

Solver	Mesh	Orden elemento	Tamaño mesh	Dofs	Memoria	Tiempo
Umfpack	Coarse	1°	168	365	132	0'031
Umfpack	Coarse	1°	245	524	133	0'047
umfpack	Normal	1°	560	1171	134	0'063
umfpack	Fine	1°	849	1760	135	0'062
umfpack	Fine	1°	1840	3769	136	0'093
umfpack	Extra fine	1°	6112	12385	142	0'266
umfpack	Extremely fine	1°	49266	49266	224	1'031



Ahora haremos algo parecido con el solver Multigrid con tres casos diferentes de mallas (anidadas). Para ello haremos lo siguiente:

1. Seleccionaremos **Physics>Subdomains Settings** y desde aquí **Element Page** desde donde seleccionaremos **Lagrange linear element** para todos los subdominios. Pulsaremos **OK**.
2. Seleccionaremos **Mesh>Free Parameters** y posteriormente **Finer** como tamaño de malla predefinido. Clicaremos **Remesh** y **OK**. Aquí se habrá creado el caso **0**.
3. Seleccionaremos **Mesh>Cases Mesh**. Clicaremos sobre **New** y chequearemos **Use same elements as mesh case: 0**. Después **OK**.
4. Haremos un refinado regular mediante **Refine Mesh** que definirá el caso **1**. Abriremos ahora la ventana de diálogo **Mesh Cases** y clicaremos **New** para crear el caso **2**. Chequearemos **Use same mesh as mesh case: 1**. Clicaremos **OK** y abriremos **Subdomain Settings** donde verificaremos que usaremos elementos de Lagrange de segundo orden para el caso **2**.
5. Abriremos el **Solver Parameters** y seleccionaremos **Geometric multigrid** como solver lineal.
6. Clicaremos en **Settings** y cambiaremos **Multigrid cycle** a **F-cycle**, **Hierachy generation method** a **Manual** y no chequearemos **Assemble** en los casos **1** y **2**.
7. Clicaremos **OK** y **OK** para cerrar **Solver Parameters**. Y resolvemos.

Tabla 6.2. Tabla de tiempo de cálculo en función de diferentes parámetros haciendo uso de Geometric multigrid.

Solver iterativo	Dofs	Memoria	Tiempo
Geometric multigrid	14897	174 MB	0,375



7. Entorno de programación y simulación: COMSOL

Es bien sabido que mediante ecuaciones diferenciales en derivadas parciales se pueden describir una gran variedad de sistemas y fenómenos físicos. Dichas ecuaciones describen las variaciones de las propiedades en el espacio y a lo largo del tiempo y necesitan de ciertas condiciones (iniciales y de contorno) para su resolución. Se ha comentado con anterioridad que las soluciones analíticas sólo son posibles en casos muy determinados pero no a nivel general. Es en este punto en el que la resolución numérica se constituye en una herramienta de gran ayuda. [43]

El programa que se ha utilizado como entorno de simulación computacional es COMSOL Multiphysics. Se trata de un entorno de simulación destinado a la resolución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales utilizando el método de los elementos finitos. A través de su entorno de trabajo el usuario dispone, además de las herramientas necesarias para el establecimiento de las ecuaciones que describen su modelo, de un importante número de fenomenologías predefinidas con sus ecuaciones (modelos) agrupados en áreas temáticas (módulos) junto con librerías de materiales con un buen número de propiedades físicas relevantes.

Otro aspecto de gran importancia es la posibilidad que brinda de valorar el acoplamiento de diferentes físicas en un mismo problema de una forma muy sencilla. Esto es, valorar la acción simultánea de solicitaciones de distinta naturaleza sobre el mismo sistema.

Se presentan a continuación las cinco fases fundamentales que deberían tenerse presentes en cualquier simulación numérica computacional. Pero, ¿cuáles son las etapas necesarias en toda simulación computacional? Naturalmente, todo programa es el resultado de algún algoritmo previo que obliga a saber qué hacer, por qué hacerlo y en qué momento de la simulación. Las etapas que se presentan son:

Etapas 1: Selección del modelo matemático que determina el nivel de aproximación de la realidad que se simula y definición de la geometría.

Etapas 2: Fase de discretización compuesta de dos partes. Una discretización del espacio definida con la generación de malla y, a continuación, la discretización de las ecuaciones que



constituye lo que se denomina el esquema numérico.

Etapa 3: El esquema numérico tiene que ser analizado de forma que sus propiedades de estabilidad y exactitud puedan ser valoradas.

Etapa 4: Resolución del esquema numérico.

Etapa 5: Valoración e interpretación de los resultados (etapa de postprocesado).

7.1. Etapa 1: definición del modelo matemático

La definición del problema se inicia seleccionando los modelos físicos a utilizar e introduciendo la geometría. Aunque conocemos las ecuaciones de la mecánica de fluidos desde la segunda parte del siglo diecinueve gracias a los trabajos de Navier y Stokes, estas ecuaciones son muy complejas. Constituyen en su forma general un sistema no lineal de ecuaciones en derivadas parciales que pueden llegar a presentar soluciones múltiples y que, por otro lado, describen fenomenologías físicas intensamente estudiadas pero no bien conocidas como la turbulencia.

Por lo tanto, un buen conocimiento de las propiedades físicas y del límite de aceptación del modelo son muy importantes y aún así es habitual encontrar diferencias entre los resultados de simulación y las experiencias debido a errores numérico-computacionales.

7.2. Etapa 2: proceso de discretización

Una vez seleccionado el modelo matemático puede comenzarse con la etapa principal de una simulación: el proceso de discretización. Dado que el ordenador sólo reconoce números, debemos traducir nuestro modelo matemático y nuestra geometría en números. Este proceso es lo que se denomina discretización.

La primera acción consiste en discretizar el espacio, incluyendo geometrías y cuerpos sólidos inmersos en el flujo o paredes que pudieran confinarlo. Las superficies sólidas cabe pensar que están disponibles a partir de algún sistema CAD en formato digital apropiado a partir del cual se comienza el proceso de distribuir puntos en el dominio de flujo y en las superficies sólidas. Este conjunto de puntos que reemplaza la continuidad del espacio real por



un número finito de puntos en el espacio es los que se denomina malla (grid o mesh).

En general, el proceso de mallado o de generación de malla es extraordinariamente complejo y se necesitan herramientas específicas que ayuden a adaptarlo adecuadamente a la geometría del problema. La generación de la malla pasa por ser una de los aspectos cruciales de cualquier propuesta de simulación por cuanto la exactitud de éstas, en general, depende extraordinariamente de las propiedades y calidad de la malla. De hecho, no puede olvidarse que el objetivo final es determinar los valores numéricos de todas las variables relevantes del flujo (velocidad, presión, temperatura...) en los puntos de la malla. Detalles adicionales se presentan en la sección 7.4.

Una vez se dispone de un grid, puede iniciarse la segunda parte del proceso de discretización, ésta es, la discretización de las ecuaciones del modelo matemático. Dado que las únicas cantidades disponibles son los valores en los puntos de malla, todos los operadores matemáticos (como las derivadas parciales de las magnitudes de interés) deben ser transformados, mediante un proceso de discretización, en operaciones aritméticas con los valores de los puntos de malla. El método de las diferencias finitas, de los volúmenes finitos o el de los elementos finitos son algunos ejemplos de métodos ampliamente utilizados para realizar esta tarea.

7.3. Etapa 3: fase de análisis

Después de la fase de discretización se dispone de un conjunto de relaciones algebraicas entre puntos de malla vecinos, una relación por cada nodo. Estas relaciones se denominan esquema numérico.

El esquema numérico debe satisfacer ciertas reglas que aseguren unos mínimos de exactitud dado que todo proceso de discretización del continuo generará errores. La importancia de esta etapa radica en que debiera ayudar en la selección del mejor esquema para la aplicación prevista mientras reduce al mínimo los errores numéricos.

7.4. Etapa 4: fase de resolución

El último paso en el proceso de discretización es la resolución del esquema numérico para



obtener los valores de malla de las variables de flujo. Los algoritmos de solución dependen del tipo de problema que se simula, es decir, si es estacionario o dependiente del tiempo de manera que se requieran técnicas para la resolución de conjuntos de ecuaciones diferenciales ordinarias o bien para resolver sistemas algébricos.

Para formulaciones numéricas dependientes del tiempo debe prestarse especial atención al tiempo de integración dado que, para una discretización espacial dada, no todos los esquemas de integración en el tiempo son aceptables. En realidad, al final del proceso todos los esquemas deben resolver algún sistema de ecuaciones algebraico que pueden llegar a ser de tamaños considerables.

7.5. Etapa 5: Estudio de resultados

En el momento de interpretar y verificar los datos obtenidos es de suma importancia la representación gráfica de los resultados. La cantidad de información obtenida en un proceso de simulación puede ser enorme y se necesitan herramientas de postprocesado potentes para poder analizar y manipular ágilmente los resultados y, así, llegar a sacar conclusiones del estudio. En la fase de postprocesado la experiencia del usuario es de suma importancia a la hora de detectar problemas y errores en la solución.



8. Descripción de la progresión del flujo y su aplicación en la cifoplastia. Método de Level Set

8.1. ¿Qué es Level Set?

Los problemas simulados en trabajo y proyectos previos responden al interés de poder describir las condiciones de flujo en las cavidades de un sistema de inyección de cementos óseos. En todos los casos se había considerado que el fluido llena toda la conducción. Sin embargo, está claro que hay un tiempo finito inicial durante el cual la corriente debe establecerse. Este hecho no supone ningún problema adicional que obligue al replanteamiento de los casos resueltos hasta ahora, excepto cuando se desea simular el relleno de las oquedades vertebrales y así valorar, si el fluido rellena correctamente las mismas así como los intersticios porosos característicos de un tejido óseo. En este sentido, el método de *Level Set* (LS en adelante) aquí utilizado permite describir la progresión del flujo, tanto a la hora de establecer la corriente en una cánula, por ejemplo, como para la simulación del proceso de relleno antes mencionado.

De forma sucinta, las técnicas de LS constituyen un conjunto de técnicas numéricas que permiten aproximar las ecuaciones del movimiento de un frente de propagación (en su propuesta inicial era un frente de llama) en un problema de valor inicial en términos de una ecuación en derivadas parciales y cuya solución sólo informa de las nuevas posiciones del frente de avance. Este detalle es particularmente útil para simular las situaciones señaladas en el apartado anterior.

Los ámbitos en los que las técnicas LS encuentran aplicaciones destacables van desde el procesado de imágenes hasta la física computacional y, en el caso que interesa al presente trabajo, aquellos flujos que afectan a varios fluidos, y en particular aquellos que sin llegar a mezclarse mantienen una interfase de separación, esto es, una superficie libre. Estas situaciones engloban desde la inyección de un fluido en el seno de otro, la descripción de la dinámica de burbujas inmersas en otro fluido, así como la simulación de patrones de flujos complejos debidos, por ejemplo, a inestabilidades en los mismos. En lo que a este trabajo concierne, el método LS utiliza la información del flujo para localizar la ubicación de la superficie de separación de ambos fluidos a medida que es transportado (por convección) por el campo de flujo.



Para conseguir esto, el método LS hace servir una *función distancia con signo* (denominada función level set, ϕ) que etiqueta cada punto del dominio de flujo con un signo a partir del que se deduce si el punto pertenece a un fluido o a otro, y con un número que representa la distancia más corta a la superficie de separación (véase la figura 8.1). El valor cero identifica la interfase.

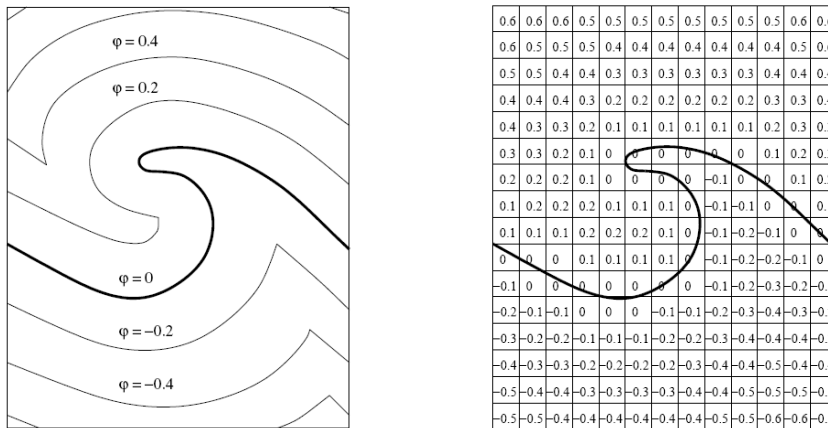


Fig. 8.1. El método LS etiqueta cada elemento del dominio con un número con signo. El cero representa la interfase. Los números negativos identifican la región de uno de los fluidos y los positivos la del otro (de referencia [55]).

El método sigue la localización de la interfase como consecuencia del transporte (convectivo) que sufre por parte del campo local de velocidades. Así pues, la ecuación de evolución de ϕ tiene la forma

$$\phi_t + \vec{c} \cdot \nabla \phi = 0 \tag{Ec. 8.1}$$

Por otra parte, este seguimiento de la interfase está casi completamente desacoplado de las ecuaciones de flujo. Los únicos acoplamientos son los relacionados con la distinta naturaleza de los fluidos y la localización de la interfase, y el establecido entre el campo de velocidades y la evolución (convectiva) de la interfase. La ventaja de esto es que pueden establecerse estrategias numéricas distintas para las ecuaciones de flujo y las ecuaciones de evolución LS.

El tratamiento de la interfase merece algún comentario adicional para clarificar un par de cuestiones. La primera se refiere a la gestión numérica de las discontinuidades de las propiedades de los fluidos y del flujo a través de la interfase de separación. Por ejemplo, ¿cuál es la densidad o la viscosidad en la interfase donde $\phi=0$? La segunda es inherente a todo proceso de discretización del continuo. A medida que la interfase avance atravesará



celdas (de discretización) sin coincidir exactamente con sus contornos. Esto provoca que pueda darse el caso que una misma celda contenga porciones de ambos fluidos pero como el *solver* numérico sólo utilizará las variables de un solo fluido, la interfase es *empujada* hacia las caras de las celdas (véase la figura 8.2). Esto es lo que se conoce como recubrimiento en escalera (*staircasing*) y puede dar lugar a errores en la localización de la interfase y, por ende, a errores numéricos.

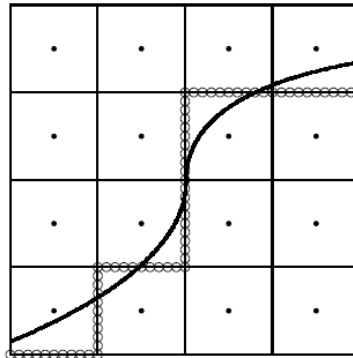


Fig. 8.2. La interfase es empujada hacia las caras de las celdas (línea a puntos) lo que conduce al encasillado en escalera (de referencia [56]).

Para evitar esto, la interfase es considerada no una línea nítida, sino una línea de cierto grosor que abarque varias celdas (*smearred-out*). Así, en lugar de utilizar una función unitaria de Heaviside para tratar la discontinuidad se hace servir una función escalón suavizada (véase la figura 8.3) dada por

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & \phi < -\varepsilon \\ \frac{1}{2} + \frac{\phi}{2\varepsilon} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\varepsilon}\right) & -\varepsilon < \phi < \varepsilon \\ 1 & \varepsilon < \phi \end{cases} \quad (\text{Ec. 8.2})$$

Donde ε es un parámetro ajustable que permite determinar el *grosor numérico* de la interfase.



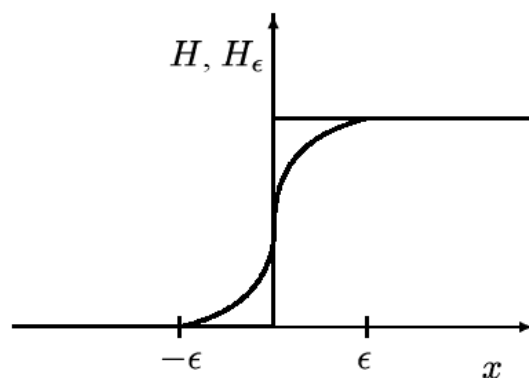


Fig. 8.3. La función unitaria de Heaviside, H , es suavizada a partir de $H_\epsilon(\phi)$ para evitar oscilaciones espúreas debido al encasillado en escalera (de referencia [56]).

Ahora ya se dispone de herramientas para soslayar el problema de discontinuidad en la densidad o la viscosidad apuntado más arriba. Éstas se escogen como

$$\begin{aligned}\rho(\phi) &= \rho^- + (\rho^+ - \rho^-)H_\epsilon(\phi) \\ \mu(\phi) &= \mu^- + (\mu^+ - \mu^-)H_\epsilon(\phi)\end{aligned}\tag{Ec. 8.3}$$

Esto evita todas las discontinuidades a través de la interfase excepto, el salto en la presión debido a la tensión superficial (caso de que sus efectos fueran de interés), $p = \sigma\kappa$, donde σ es la tensión superficial y κ es la curvatura de la interfase. La solución a esta última situación consiste en modificar el término correspondiente a los efectos de la tensión superficial en las ecuaciones del movimiento y utilizar la expresión siguiente en la que $\delta(\phi)$ hace el mismo papel que antes asignábamos a $H_\epsilon(\phi)$.

$$\frac{\delta(\phi)\sigma\kappa}{\rho}\vec{n}\tag{Ec. 8.4}$$



8.2. El módulo Level Set de Comsol

En esta sección se ejemplifica, paso a paso, una aplicación resuelta haciendo uso del módulo Level Set de Comsol Multiphysics. Cada una de las etapas puede visualizarse a través de figuras en las que se presentan las distintas ventanas de diálogo que el programa pone a disposición del usuario para conseguir las especificaciones necesarias en la resolución de un problema a partir de Level Set.

Primer paso

El primer paso consiste en elegir el modelo a través de la ventana **Model Navigator** (véase la figura 8.4). Debe seleccionarse las dimensiones del dominio computacional y después las ecuaciones del modelo.

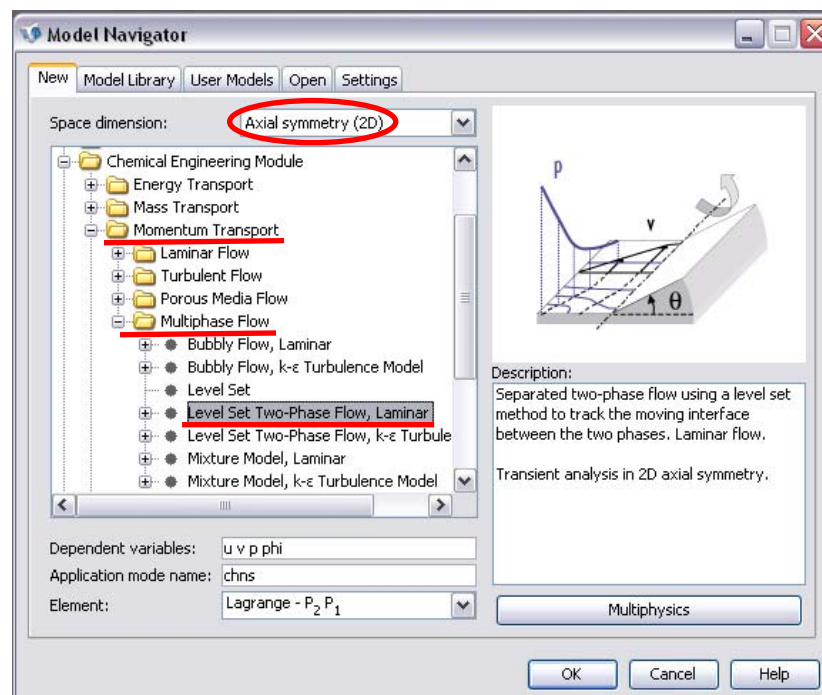


Fig. 8.4. Ventana **Model Navigator** de Comsol: elección del modelo.



Segundo paso

Durante esta segunda etapa se realizará el dibujo de la geometría. Mediante **Specify Objects** podemos crear objetos geométricos con facilidad (figura 8.5).

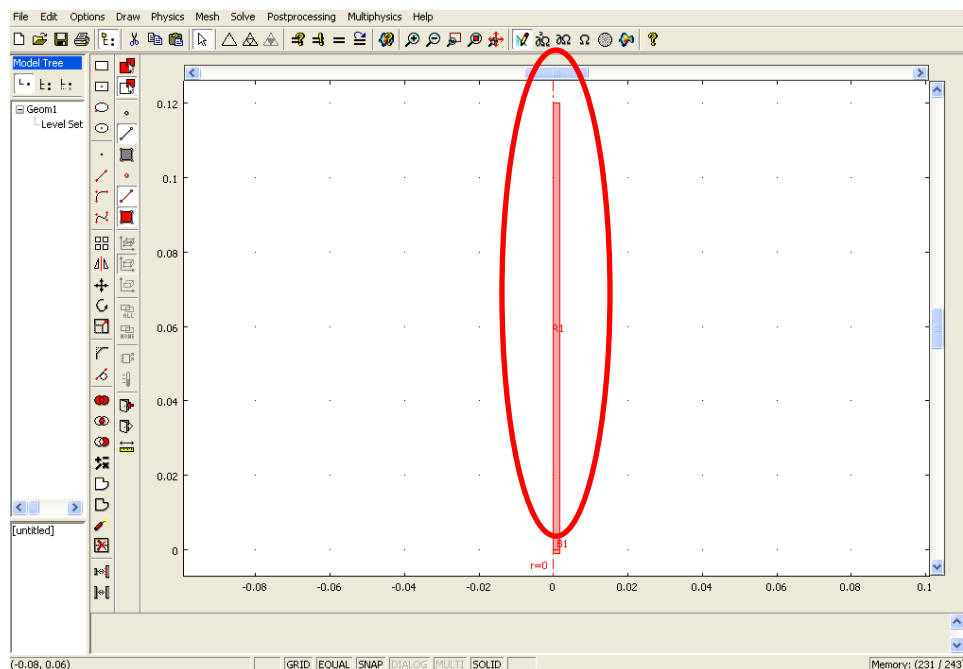


Fig. 8.5. Área de dibujo de COMSOL: dibujo de la cánula de inyección.

Tercero paso

En esta tercera etapa se definirán las propiedades físicas del fluido (viscosidad o densidad, por ejemplo) en cada uno de los subdominios definidos mediante la selección de menú **Subdomain Setting** (figura 8.6).



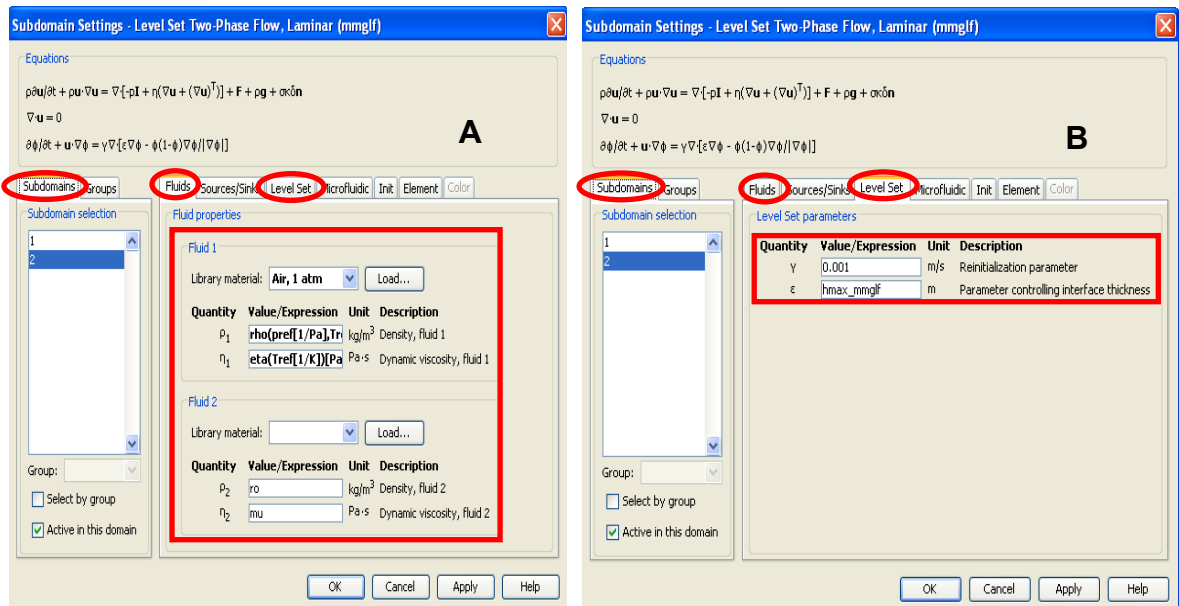


Fig. 8.6. Ventana de diálogo **Subdomain Setting**: (A) Pestaña **Fluids** en la que se especifican parámetro del fluido. (B) Pestaña **Level Set** en la que se especifican parámetros específicos del método Level Set.

Hay dos pestañas que necesitan especificaciones importantes. La pestaña **Fluids** y la pestaña **Level Set**. En la pestaña **Fluids** es donde se deben elegir el tipo de fluido y sus propiedades, densidad y viscosidad, o hacer uso de las librerías materiales que COMSOL incorpora con propiedades de un gran número de sustancias de interés en ciencia y tecnología. En la pestaña **Level Set** se pueden ajustar dos parámetros, a saber, gamma y ypsilon. Estos dos parámetros y su influencia en la calidad de las simulaciones serán explicados posteriormente.

Cuarto paso

A través de la selección del menú **Boundary Settings** se pueden identificar los contornos de la geometría y especificar las condiciones de frontera en los mismos (figura 8.7). En esta ventana de diálogo se ve que hay que elegir el número del contorno, especificar el tipo de contorno y al final la condición de contorno. Eso hay que hacerlo para todos los contornos de la geometría. En el presente ejemplo se dispone de una entrada, una salida, el contorno de simetría y el contorno que identifica las paredes que confinan el flujo.



Tabla 8.1. Características del flujo, propiedades del fluido para la cánula.

Velocidad de entrada	Viscosidad Dinámica	Densidad	Diámetro	Longitud
$1 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$	10 Pa.s	2200 kg/m ³	3,175 mm	12 cm

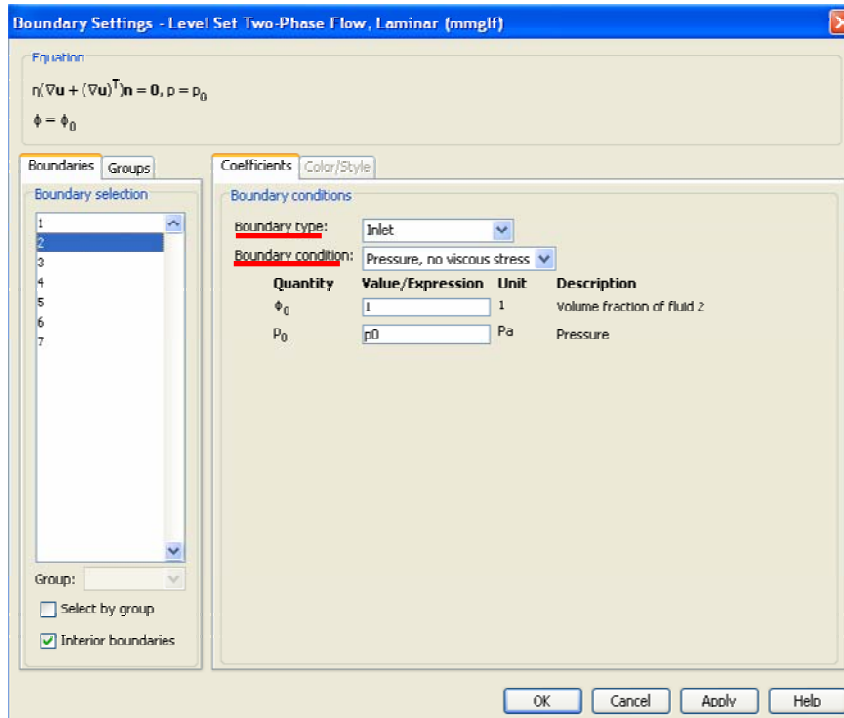


Fig. 8.7. Ventana de diálogo **Boundary Settings** de Comsol: selección de los contornos del dominio y especificaciones de las condiciones de frontera.

Quinto paso

En este paso estamos en disposición de aplicar lo sugerido en la sección 7.2 relacionado con el mallado. Se dispone de varias maneras de hacerlo dependiendo del grado de control deseado sobre la densidad y refinado del grid. Dado el grado de dificultad geométrico del dominio en este caso es suficiente, a modo de ejemplo, recurrir a los botones del menú **Initialize Mesh**, **Refine Mesh** y **Refine selection**. El tercero de estos botones permite de una forma extraordinariamente sencilla refinar, mediante el ratón, la malla y obtener resultados más precisos en lugares específicos.

Cuando lo que se desea es tener cierto control sobre la densidad de la malla debe seleccionarse **Free Mesh Parameters** del menú **Mesh** desde donde pueden controlarse los



detalles del grid a distintos niveles: a nivel global, a nivel de subdominio, a nivel de contorno o a nivel de puntos (figura 8.8). La pestaña **Advanced** permite escalar la geometría antes del mallado.

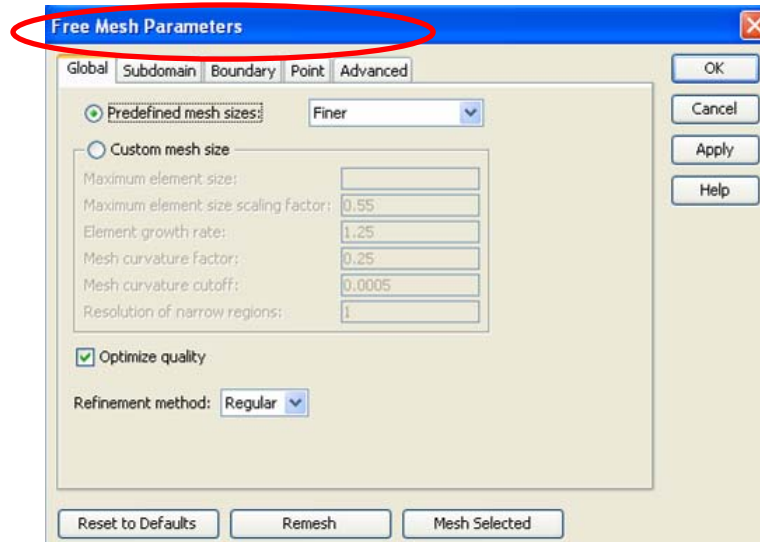


Fig. 8.8. Ventana de diálogo **Free Mesh Parameters**: selección y parámetros de malla.

En la figura 8.9 se muestra otra alternativa para controlar más aún si caben las especificaciones de la malla. A través de **Boundary Layer Mesh** se puede, modificando adecuadamente las variables **scaling factor**, **stretching factor** y **Number of layers**, obtener un control completo del refinado en los contornos.

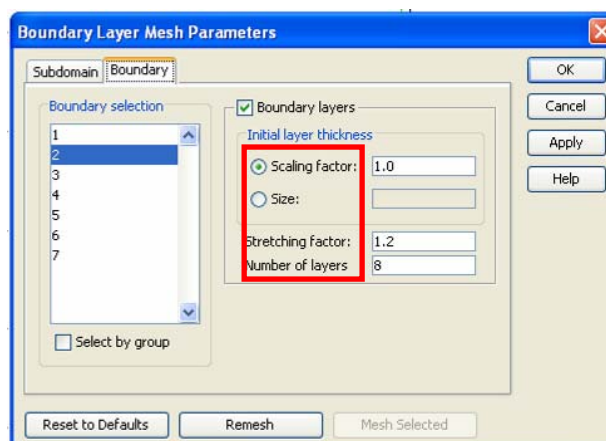
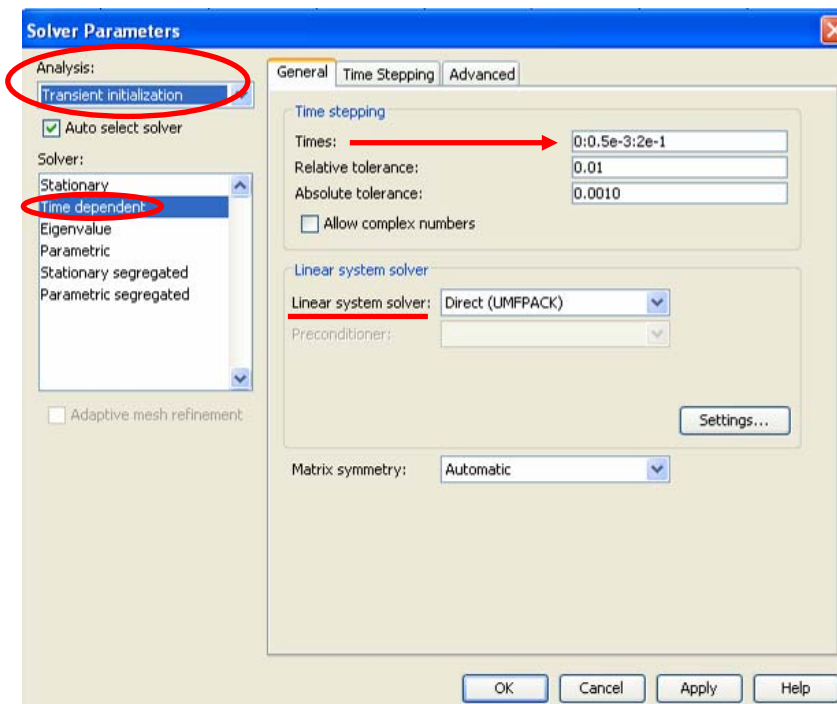


Fig. 8.9. Ventana de diálogo **Boundary Layer Mesh Parameters**: procedimiento para la obtención de una malla selectiva cerca de los contornos.



Sexto paso

Ahora es el momento de la resolución. Para ello debemos seleccionar **Solver Parameters** del menú **Solver** (o el botón de la barra de herramientas destinado al mismo fin). Lo primero que debe hacerse es un análisis preliminar a partir del cual el método Level Set identificará adecuadamente la interfase mediante el análisis **Transient initialization** y escoger como resolvidor **Time dependent**. En la pestaña **General** debe especificarse el vector de tiempos a partir de los cuales se computará la solución. En la figura 8.10 se muestra el uso de Direct (UMFPACK) como **Linear system solver**.



*Fig. 8.10. Ventana de diálogo **Solver Parameters**: análisis previo mediante **Transient initialization** para la identificación inicial de la interfase.*

Finalizada esta etapa previa de inicialización se pulsa **OK** y se resuelve mediante **Solve**. A continuación debe cambiarse el análisis en **Solver Parameters** a **Transient** y pulsar **Ok** para cerrar la ventana de diálogo.



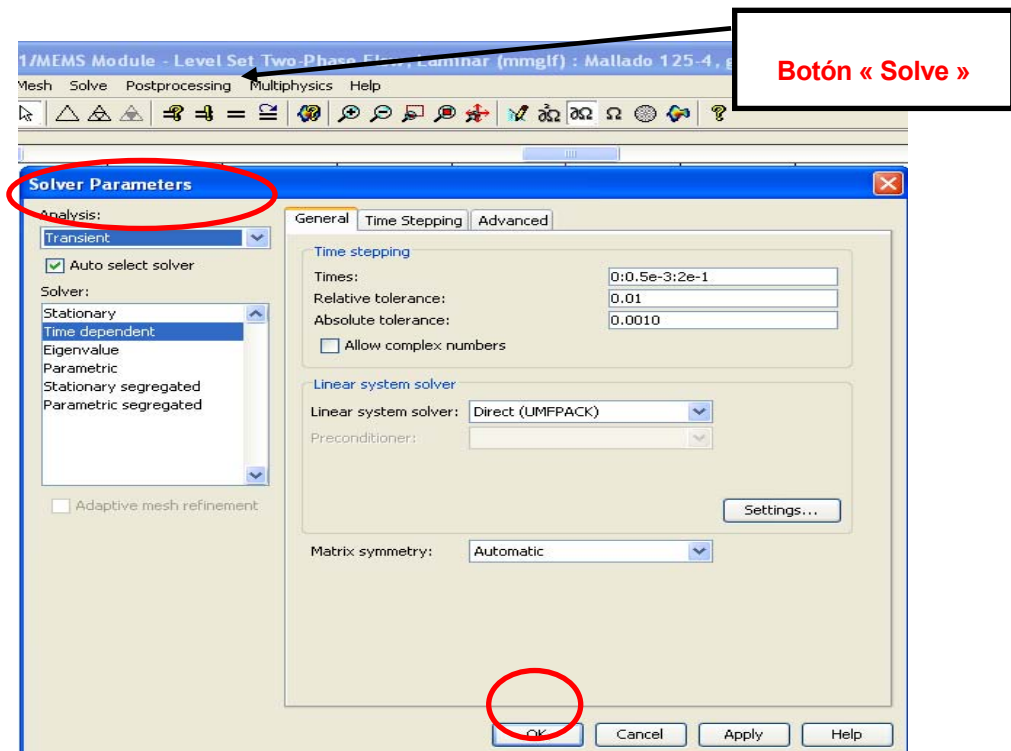


Fig. 8.11. Ventana de diálogo **Solver Parameters**: una vez identificado la interfase debe seleccionarse **Transient** en el desplegable **Analysis**.

Queda una última configuración antes de lanzar el proceso. Abriremos la ventana de diálogo **Solver Manager**. Pulsaremos el botón **Store Solution...** y seleccionaremos el último instante de tiempo de cálculo escogido anteriormente, es decir, 0,02. Posteriormente, en las secciones **Initial value** y **Values of variables not solved for and linearization point** debe seleccionarse **Stored solution** y especificar el mismo instante de tiempo final (o sea, 0,02). Pulsando el botón **Solve** lanzaremos el proceso de cálculo.



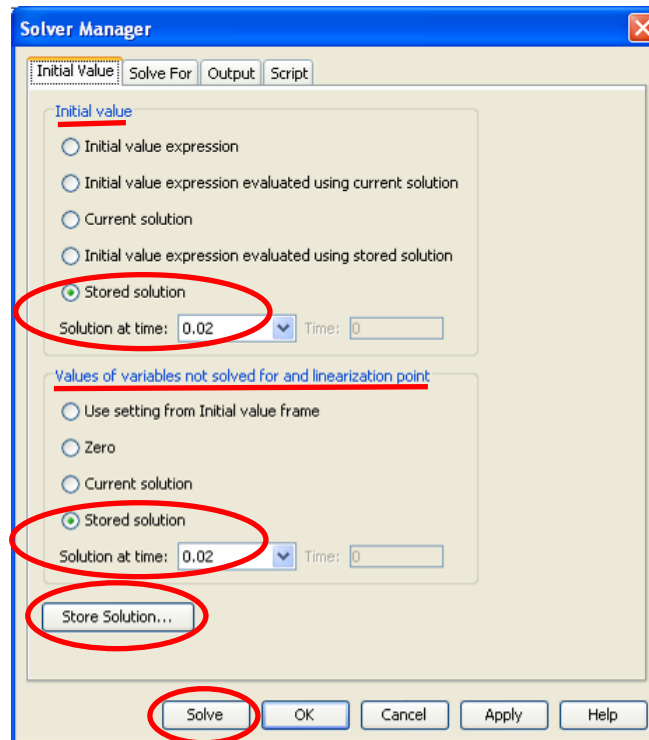


Fig. 8.12. Ventana de diálogo **Solver Manager**: elección del instante final de tiempo de la inicialización como valor inicial del proceso de cálculo final.



8.3. Resumen de resultados anteriores (Level Set)

8.3.1. Progresión de un flujo newtoniano en una cánula

Se desea estudiar mediante simulación las condiciones de inyección de cementos de fosfato de calcio modificados con óxido de hierro destinados a la cifoplastia. En este estudio se realiza un análisis paramétrico pues se han considerado tres valores distintos para la viscosidad (i.e. 10, 100 y 1000 Pa.s).

Tabla 8.2. Características del flujo, propiedades del fluido para la cánula.

Velocidad de entrada	Viscosidad Dinámica	Densidad	Diámetro	Longitud
$1 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$	10-100-1000 Pa.s	2200 kg/m ³	3,175 mm	12 cm

Resultados y conclusiones:

- La figura 8.13 muestra a medida que transcurre el tiempo la evolución de la presión en el centro de la cánula para una viscosidad de 10 Pa.s. La cánula tiene una longitud de 120 mm y la velocidad del flujo se establece en 1 cm/s de manera que pasados 12 segundos puede estimarse la presión de entrada necesaria y, por ende, la presión en el punto de inyección. Las distintas curvas informan del incremento en la resistencia al flujo a medida que éste avanza en la cánula.



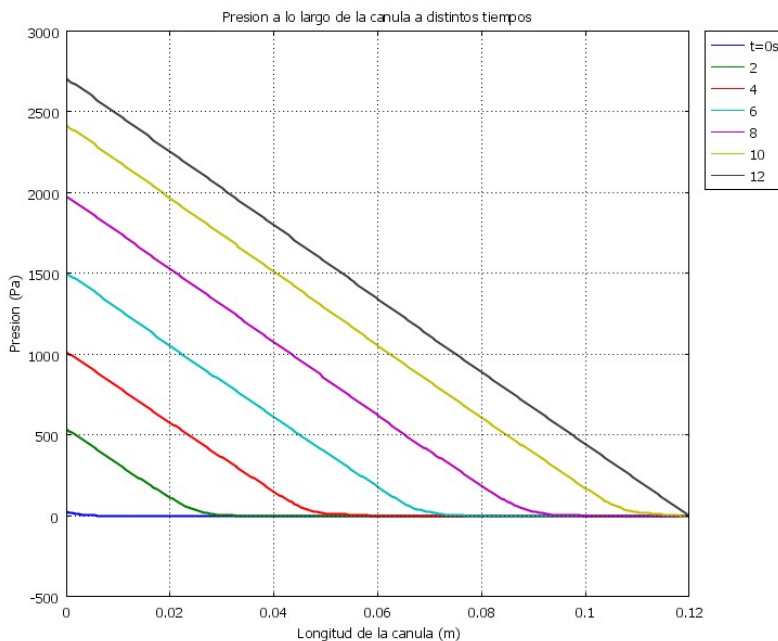


Fig. 8.13. Evolución de la presión a lo largo de la cánula para distintos tiempos.

Para esos tres valores de viscosidad se han determinado las presiones de inyección (ver tabla 8.3) que demuestran la dificultad experimental observada al inyectar manualmente cementos de fosfatos de calcio.

Tabla 8.3. Valores de presión en función de la viscosidad.

	$\eta = 10 \text{ Pa}\cdot\text{s}$	$\eta = 100 \text{ Pa}\cdot\text{s}$	$\eta = 1000 \text{ Pa}\cdot\text{s}$
Presión (Pa)	2 700	27 000	270 000

8.3.2. Progresión del flujo en presencia de obstáculos

En esta sección se propone el estudio de la progresión del flujo en presencia de obstáculos que permitieran identificar los mejores parámetros de simulación.

Tabla 8.4. Características del flujo y propiedades del fluido.

Velocidad de entrada	Viscosidad Dinámica	Densidad	Diámetro	Longitud
$1 \cdot 10^{-2} \text{ m/s}$	10 Pa.s	2200 kg/m ³	3,175 mm	12 mm



Resultados y conclusiones

Los resultados se muestran en la figura 8.14 y la conclusión más importante fue que debía mejorarse la sistematización de los parámetros de la simulación que, por otra parte, es uno de los objetivos del presente trabajo.

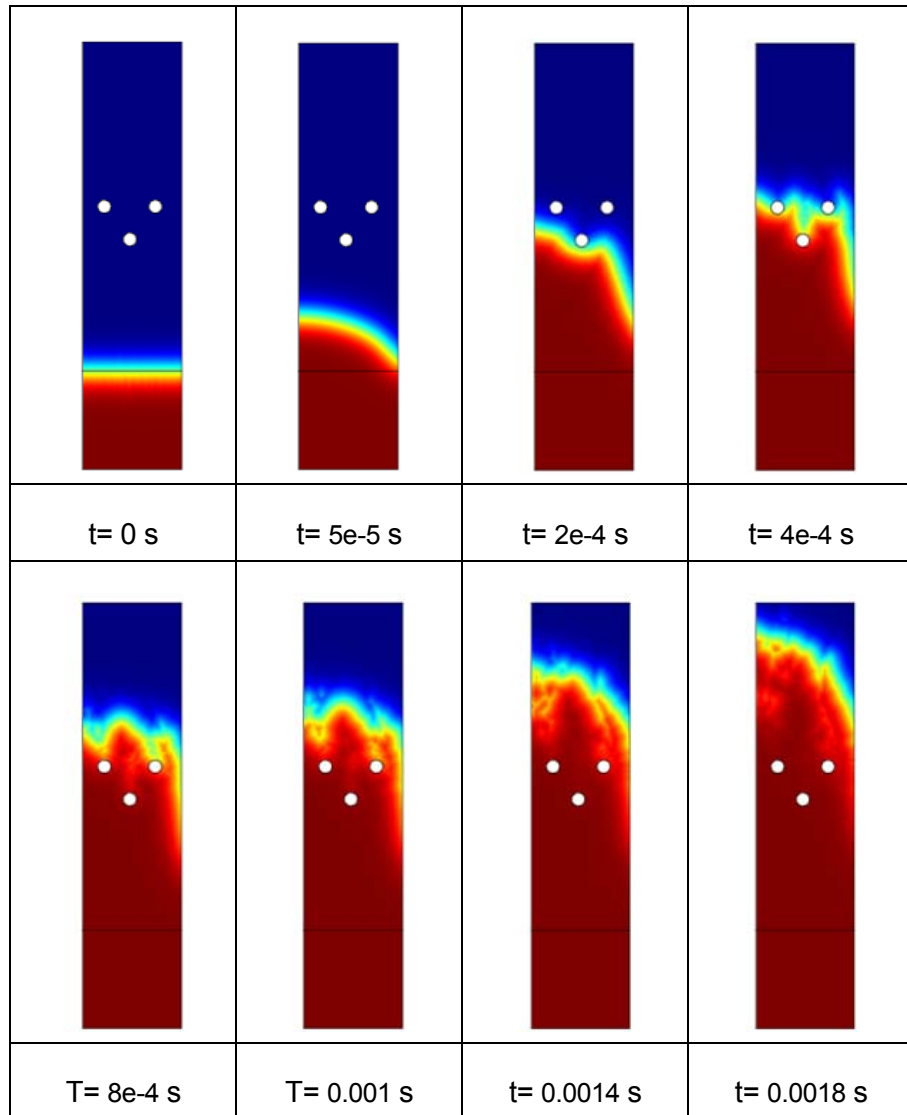


Fig. 8.14. Frente de avance de la corriente en presencia de obstáculos para distintos tiempos.



8.3.3. Progresión del flujo newtoniano en la técnica de cifoplastia

Los resultados de esta sección modelizan el llenado de una cavidad previamente creada en una hipotética estructura porosa (cifoplastia), así como su nivel de infiltración en la estructura porosa circundante. La cavidad creada por el globo de cifoplastia se considera vacía. También se ha considerado que el medio poroso circundante está vacío (en una situación real estas cavidades están rellenas por la médula ósea). Esta aproximación está justificada ya que según datos publicados [20] la presión necesaria para inyectar un cemento depende en un 95% de la presión necesaria para superar el fenómeno de fricción en la cánula; tan sólo el 5% restante se utiliza para desplazar a la médula ósea.

El estudio considera que el cemento presenta una viscosidad prácticamente constante durante todo el proceso de inyección. Sin embargo, dada la complejidad de este caso en su momento, en lo que se refiere a su geometría, y por necesidad de tiempo, no se realizaron las simulaciones para los tres valores de viscosidad analizados en el caso de la cánula (ver sección 8.3.1). Como condición inicial de entrada se ha escogido la presión y no la velocidad.

Tabla 8.5. Características del flujo y propiedades del fluido.

Presión de entrada	Viscosidad Dinámica	Densidad	Diámetro
100 kPa	100 Pa.s	2200 kg/m ³	18 mm



Resultados y conclusiones

- Según la figura 8.15 se puede apreciar la evolución del frente de avance del flujo, para una viscosidad de 100 Pa.s durante el llenado de la cavidad y de la estructura porosa circundante.

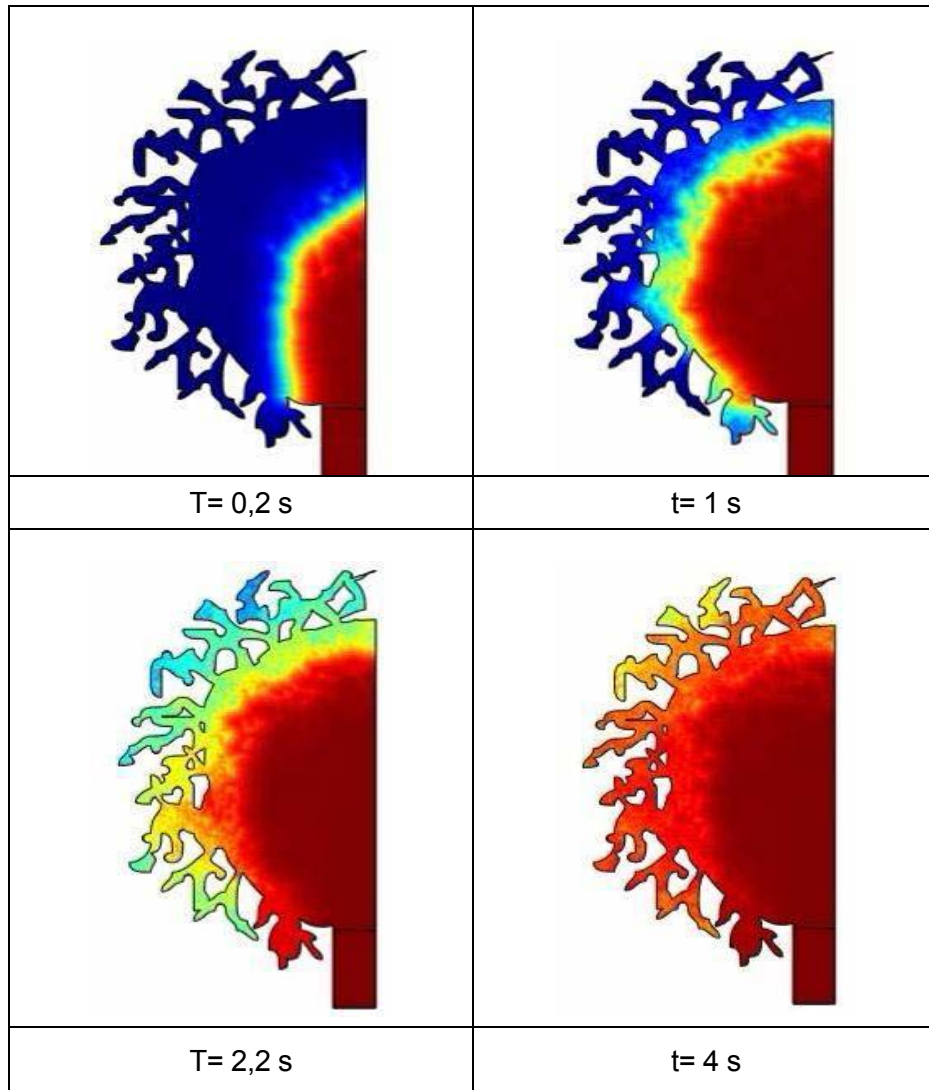


Fig. 8.15. Frente de avance de la corriente para la cifoplastia.

- Se ha valorado la presión de entrada en la cánula para una buena inyección en el caso de la cifoplastia, para un cemento de viscosidad igual a 100 Pa.s y un material utilizado clínicamente. Además se ha encontrado un valor bastante cerca de los encontrados en la literatura para los cementos acrílicos, sin superar la presión máxima que puede ejercer manualmente el cirujano.





9. Mejora de los parámetros computacionales

9.1. Introducción

Como se ha visto, se dispone de resultados realmente significativos sobre cómo el flujo del cemento avanza en un hueso esponjoso y cómo se establece la corriente en una cánula. Lo que también puede observarse de los resultados previos es la excesiva dispersión de la interfase que identifica la superficie libre del fluido. Esto se puede explicar porque ciertos parámetros del módulo Level Set (véase 8.1) no estaban correctamente sintonizados.

En este estudio se trata de mejorar los resultados mediante la identificación de los parámetros que controlan el espesor de la interfase y por ende, que controlan la calidad de la simulación frente de avance del flujo. Debe recordarse (sección 8.2) la existencia de dos parámetros fundamentales que debían especificarse en la ventana de diálogo *Subdomain Setting*: gama y epsilon.

Lo que sigue es un estudio sistemático sobre la influencia que sobre la calidad de las simulaciones tienen el parámetro gama, el tipo de malla y ciertas características de la geometría que confina el flujo.

9.2. Influencia de gamma con la malla según el tipo de entrada

9.2.1. Mallado estructurado y condición de presión de entrada especificada

Utilizando la guía del párrafo “8.2.” y siguiendo las etapas paso a paso se ha estudiado la influencia que tiene el parámetro gama sobre la simulación cuando mallamos estructuradamente la cánula y con una entrada de presión especificada de 120 000 Pa.

Se especifica una malla cuadrada (125 – 4: 125 divisiones horizontales y 4 verticales) así como los parámetros de contornos y el paso de tiempo de tiempo de resolución y se varía únicamente el parámetro gamma para ver cómo influye sobre el frente de avance. Este frente puede visualizarse monitorizando la densidad a lo largo de la cánula para distintos instantes de tiempo.



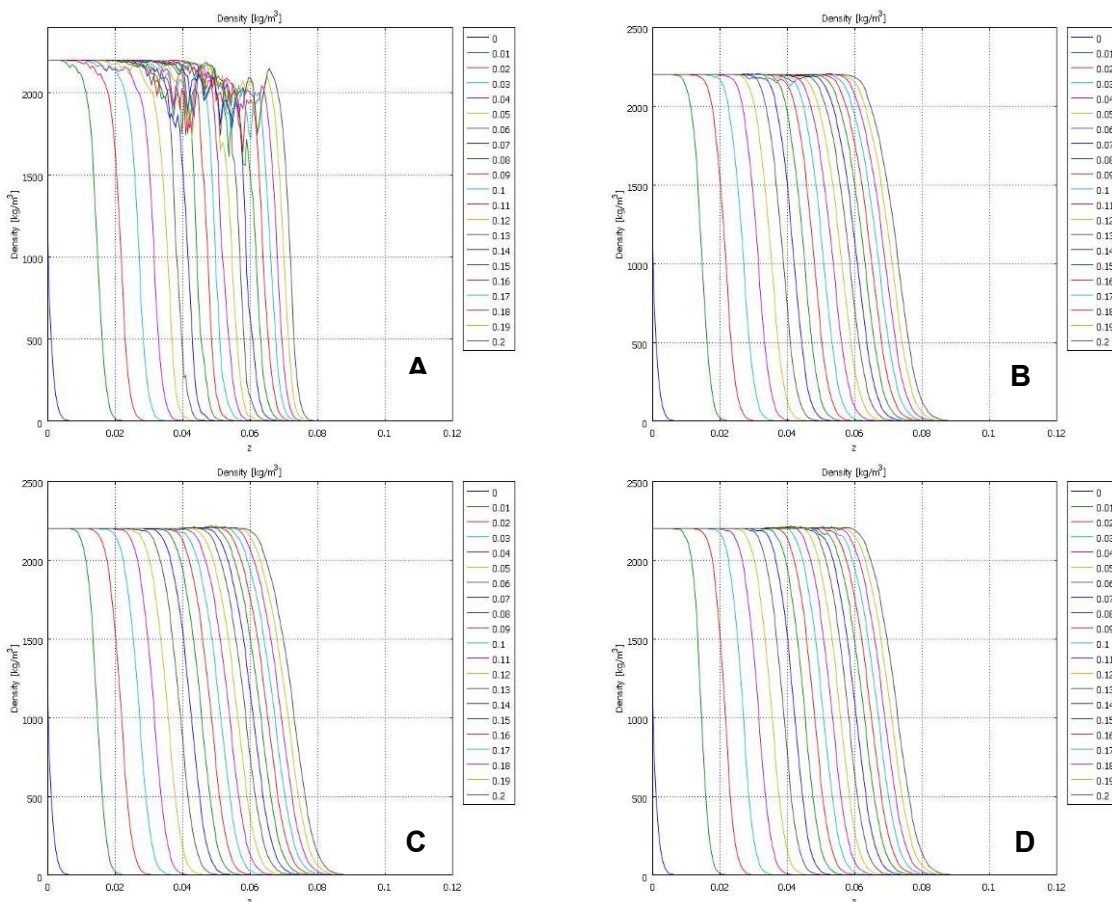


Fig. 9.1. Curvas de densidad en función de z a lo largo del centro de la cánula, para un mallado rectangular (125-4) y una presión de entrada de 120 000 Pa. (A) $\gamma=5$, (B) $\gamma=1$, (C) $\gamma=0.8$, (D) $\gamma=0.7$

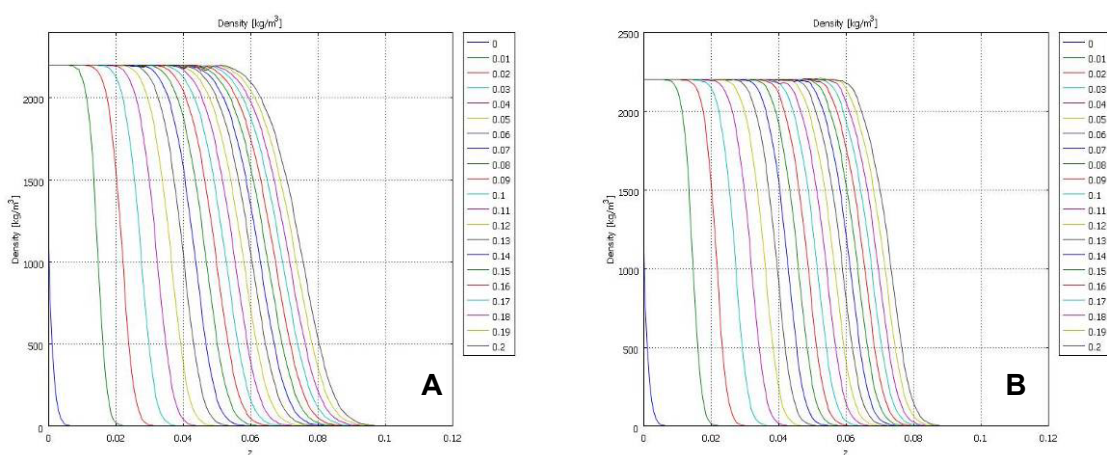


Fig. 9.2. Curvas de densidad en función de z a lo largo del centro de la cánula, para un mallado rectangular (125-4), una presión de entrada de 120 000 Pa y $\gamma=1$, (A) paso de tiempo corto, (B) paso de tiempo largo



A comparación se valora si el refinado de la malla a una malla 250-8 modifica los valores de gamma escogidos.

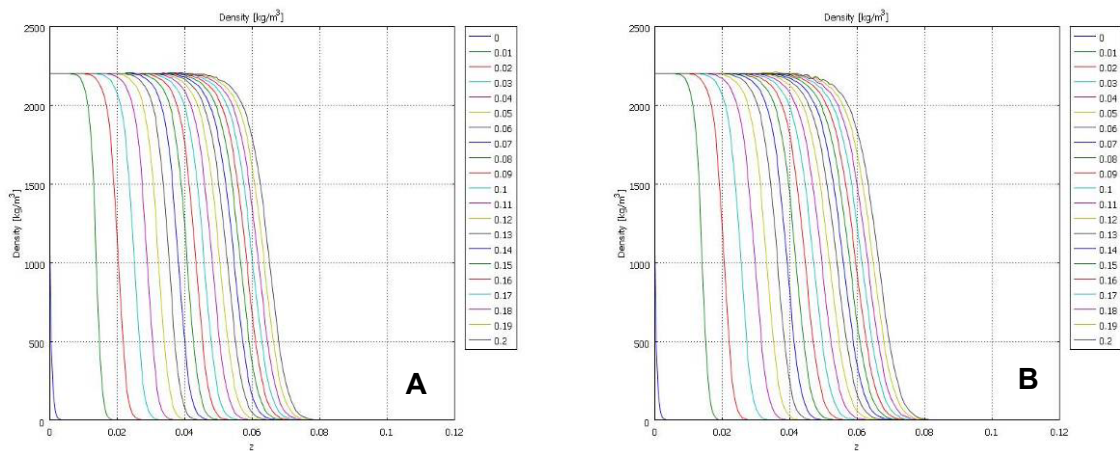


Fig. 9.3. Curvas de densidad en función de z a lo largo del centro de la cánula, para un mallado rectangular (250-8) y una presión de entrada de 120 000 Pa. (A) $\gamma=0.7$, (B) $\gamma=0.8$

Observaciones:

Puede observarse que el parámetro gamma tiene una fuerte influencia en la calidad de las curvas y que, para cada caso de estudio, debe hacerse una elección de una gamma específica. Menores valores del parámetro gamma requieren menores esfuerzos computacionales.

Por otra parte, merece especial atención que contra mayor es el parámetro gamma menor es el recorrido del flujo.

Por otra parte se puede observar la aparición de un fenómeno de oscilaciones (wiggles) que requiere ser explicado pues distorsiona extraordinariamente los resultados de la simulación.

Conclusiones:

La primera conclusión que se puede sacar es que para una malla de tipo 125-4 cuadrada y para una entrada de presión especificada, la gamma que parece dar mejores resultados es la de 0.8. Por el contrario, para una malla 250-8 la gama 0.7 parece mejor. Se puede concluir que cada estudio y cada mallado requieren la elección de un parámetro gamma particular para obtener resultados de calidad.



9.2.2. Malla no estructurada y presión de entrada especificada

Se plantea ahora un nuevo estudio pero con una malla triangular con distintos niveles de refinado. Se especifica un presión de entrada de 120 000 Pa.

El estudio sistemático consiste en establecer una malla triangular (pulsando una vez sobre el botón “**Initialize Mesh**” y una vez sobre “**Refine Mesh**”), fijar los parámetros de contornos y el paso de tiempo de resolución y se varía evaluar la influencia de los distintos valores de gamma sobre la calidad de la simulación.

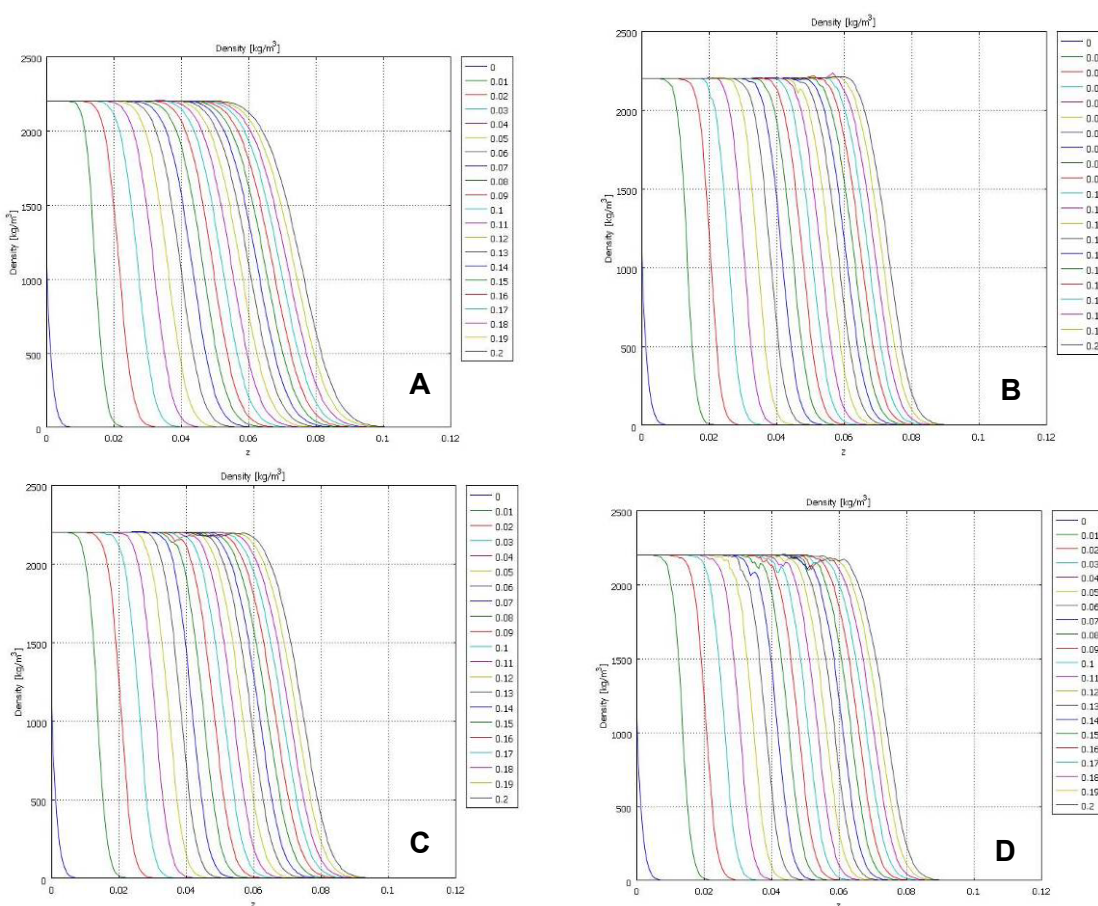


Fig. 9.4. Curvas de densidad en función de z a lo largo del centro de la cánula, para un mallado triangular (fino) y una presión de entrada de 120 000Pa. (A) $\gamma=0.05$, (B) $\gamma=0.5$, (C) $\gamma=0.7$, (D) $\gamma=0.8$



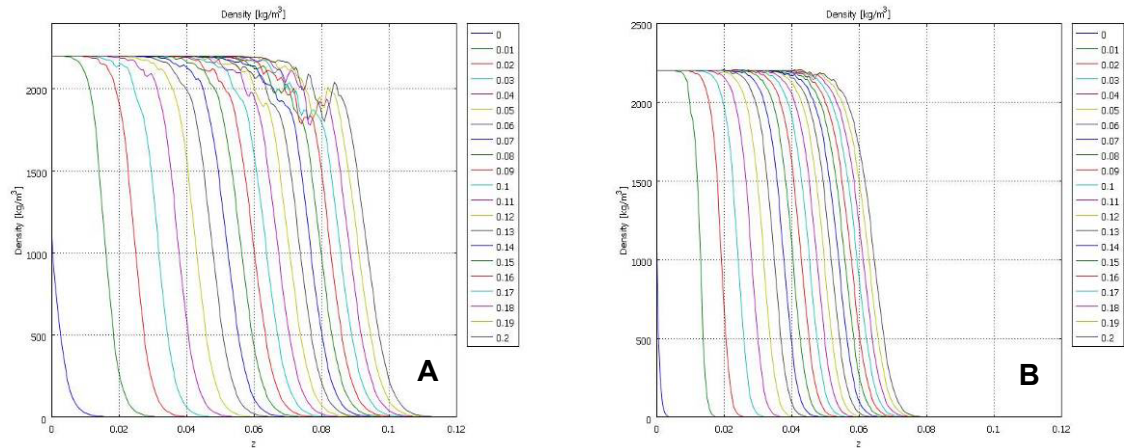


Fig. 9.5. Curvas de densidad en función de z a lo largo del centro de la cánula, para un mallado triangular, una presión de entrada especificada de 120 000Pa y una gama de 0.8. (A) mallado normal, (B) mallado muy fino.

Observaciones:

Nuevamente la influencia de gamma es enorme y cada caso de estudio aparentemente requiere una elección específica del mismo. Nuevamente, el esfuerzo computacional es menor cuanto menor es el valor de gamma. Por otra parte, y de manera semejante al caso anterior, valores grandes de gamma hacen que la distancia recorrida por el frente de avance sea menor.

Así mismo, si la gamma no es escogida adecuadamente aparecen nuevamente oscilaciones. Naturalmente que el refinado de la malla provee resultados de mejor calidad pero más tiempo de cálculo.

Conclusiones:

Se puede observar de los resultados que un valor de 0.05 es la mejor elección para obtener mejores frentes de avance.

Se puede concluir una vez más que cada estudio y cada mallado tiene una gamma particular para obtener el resultado más suave.

Aparentemente cuando se especifica la presión de entrada la malla triangular con un valor de gamma pequeño da mejores resultados que con una malla estructurada.



9.2.3. Malla triangular y velocidad de entrada especificada

En esta sección se realiza el mismo estudio que en la sección anterior pero para dos mallas triangulares más o menos refinadas y una velocidad de entrada especificada 0,01 m/s.

En primer lugar se realiza un estudio sistemático fijando la malla, los parámetros de contorno y el paso de tiempo de resolución y se varía solamente la gamma para valorar su influencia.

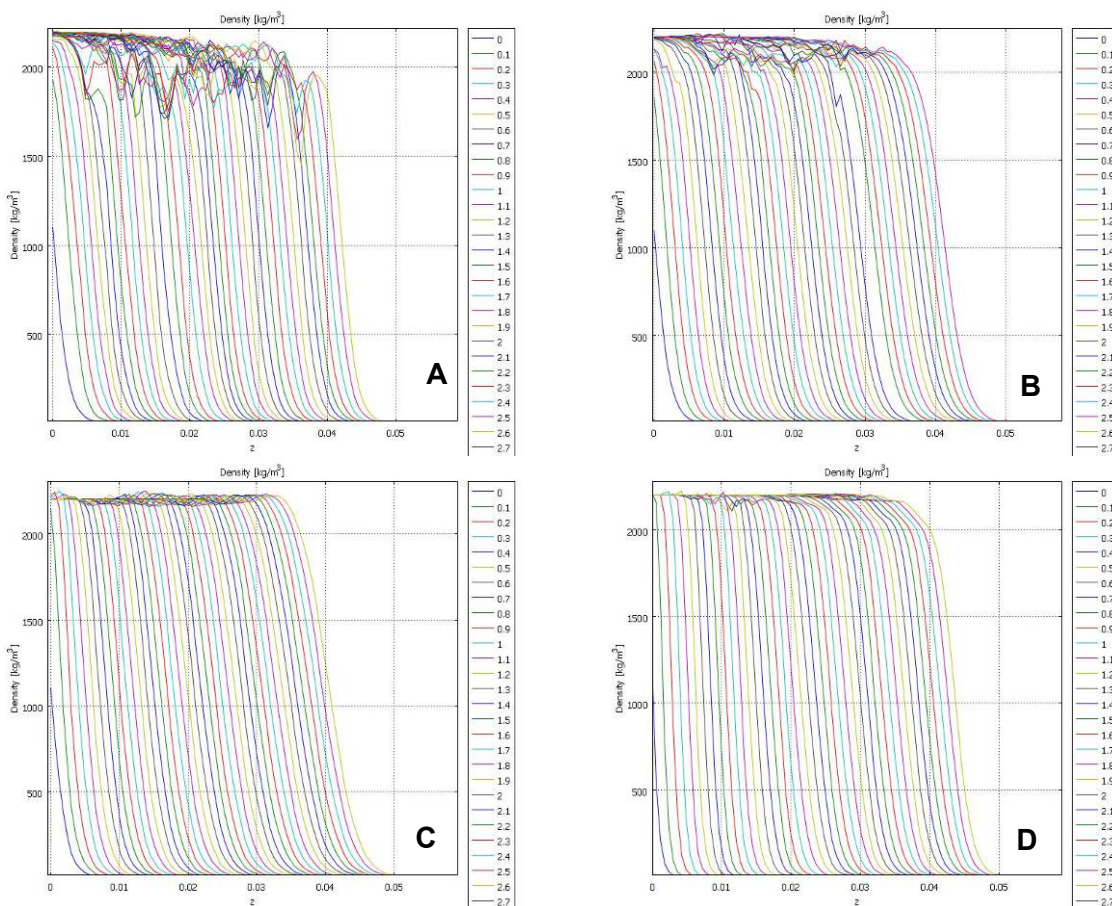


Fig. 9.6. Curvas de densidad en función de z a lo largo del centro de la cánula, para un mallado triangular refinado y una velocidad de entrada de 0,01m/s (A) $\gamma = 0.03$, (B) $\gamma = 0.05$, (C) $\gamma = 0.001$, (D) $\gamma = 0.001$.



Observaciones:

Las observaciones son formalmente idénticas a los estudios anteriores.

Conclusiones:

Podemos ver que un valor de gamma de 0.001 es la mejor elección para obtener curvas de densidad muy finas por este estudio.

Se puede concluir una vez más que cada estudio y cada mallado necesita de la elección de un valor de gamma particular para obtener buenos resultados.

Puede concluirse que para una velocidad de entrada especificada, una malla triangular con una gamma de 0.001 fina da buenos resultados.

En adelante, realizaremos los siguientes estudios haciendo uso de una malla triangular fina y una gamma de 0.001 para obtener resultados significativos.



9.3. Presencia de obstáculos

9.3.1. Influencia de la posición y del tamaño

Antes de establecer las condiciones finales de simulación del frente de avance en una kifoplastia valoraremos la influencia del tamaño y de la posición de obstáculos sobre el avance del flujo.

Para valorar estos casos repararemos en calcular el caudal circulante como magnitud que informará de algún posible “desajuste” en la progresión del flujo debido a la presencia de los obstáculos. En otras palabras, está claro que los obstáculos romperán el frente de avance pero esto no debe ser óbice como para que ciertas magnitudes no mantengan los valores que les atañen. Por otra parte, verificaremos que el flujo se reestablece correctamente suficientemente lejos del obstáculo aguas abajo del mismo.

Primera experiencia:

En este caso se fijan las condiciones de entrada, los parámetros Level Set relevantes, el tipo de malla y colocamos un obstáculo redondo en el centro de la mitad de la cánula como se muestra en los dibujos siguientes. Los distintos obstáculos ocupan tiene el mismo lugar, tienen la misma forma pero su tamaño varía.



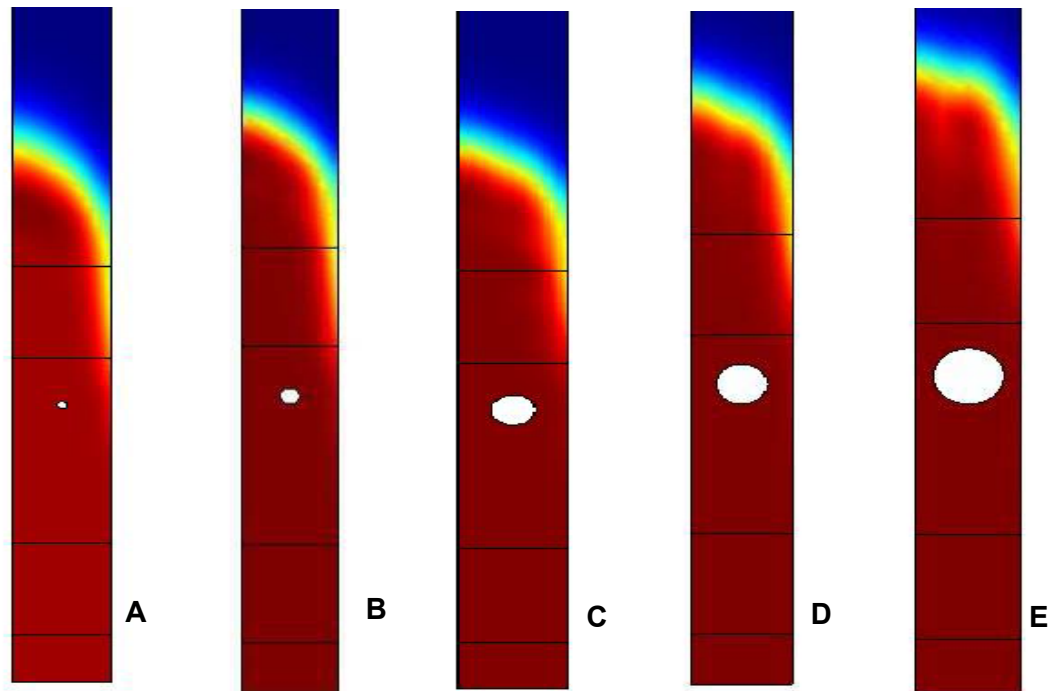


Fig. 9.7. Cánulas con un obstáculo de diferentes tamaños. (A) $r = R/20$
 (B) $r = R/10$ (C) $r = R/5$ (D) $r = R/4$ (E) $r = R/3$. R es el radio de la cánula.

Se observa que el flujo se reestablece completamente una vez alejados del obstáculo. Las líneas negras horizontales son utilizadas como secciones específicas en las que el caudal es evaluado. Comsol permite determinar fácilmente el caudal y verificar entonces que el caudal no sufre ningún “percepción” y que la simulación explica correctamente la progresión del flujo por cuanto las leyes de conservación relacionadas se cumplen escrupulosamente

Segunda experiencia:

Se fijan nuevamente como en los casos anteriores todos los parámetros de interés: condiciones de entrada, parámetro gamma, tipo de malla y se coloca un obstáculo de tamaño fijo $r=R/10$. El obstáculo se coloca esta vez en cuatro lugares diferentes como muestran las figuras siguientes. Este obstáculo tiene el mismo tamaño y la misma forma durante el estudio pero cambia su ubicación.



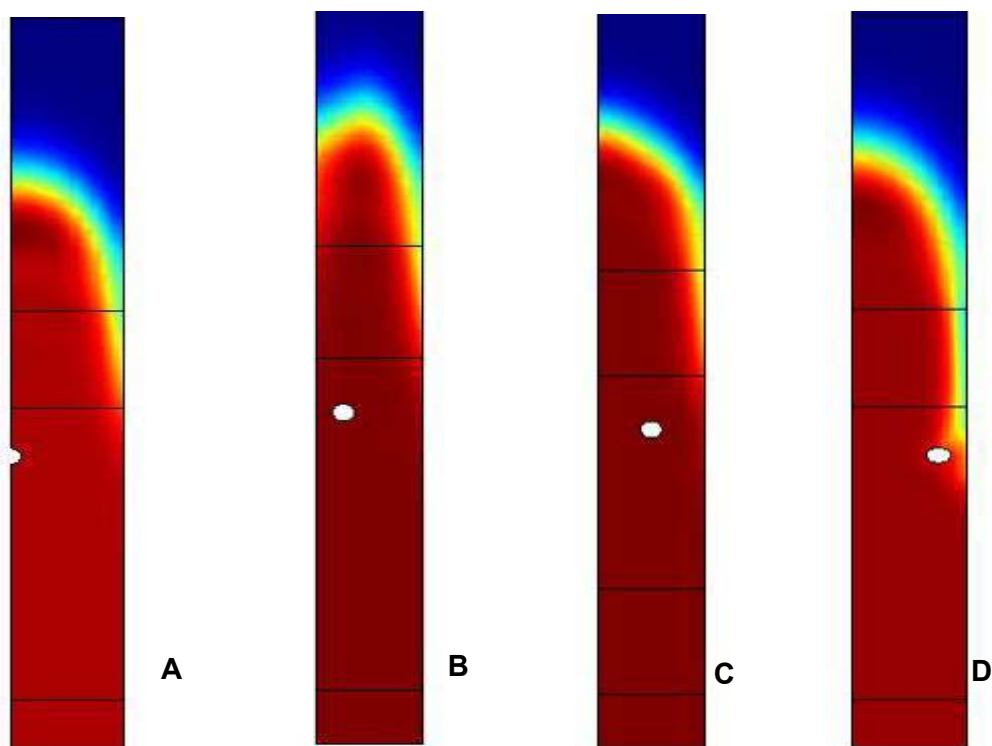


Fig. 9.8. Cánulas con un obstáculo de tamaño $r = R/10$. Ubicación del obstáculo: (A) en el centro (B) $3/8$ del borde derecho (C) $1/4$ del borde derecho (D) $1/8$ del borde derecho.

Como en el primero estudio, aquí también se reestablece el flujo sin ningún problema y el caudal encontrado es el mismo a través de cualquier sección recta de la cánula. Se concluye que las especificaciones establecidas de simulación explican correctamente el avance del flujo también en este caso.



9.3.2. Influencia de la forma del obstáculo

En esta parte se desea valorar si las especificaciones también solventan correctamente el avance del flujo para las tres geometrías seleccionadas para hacer el estudio.

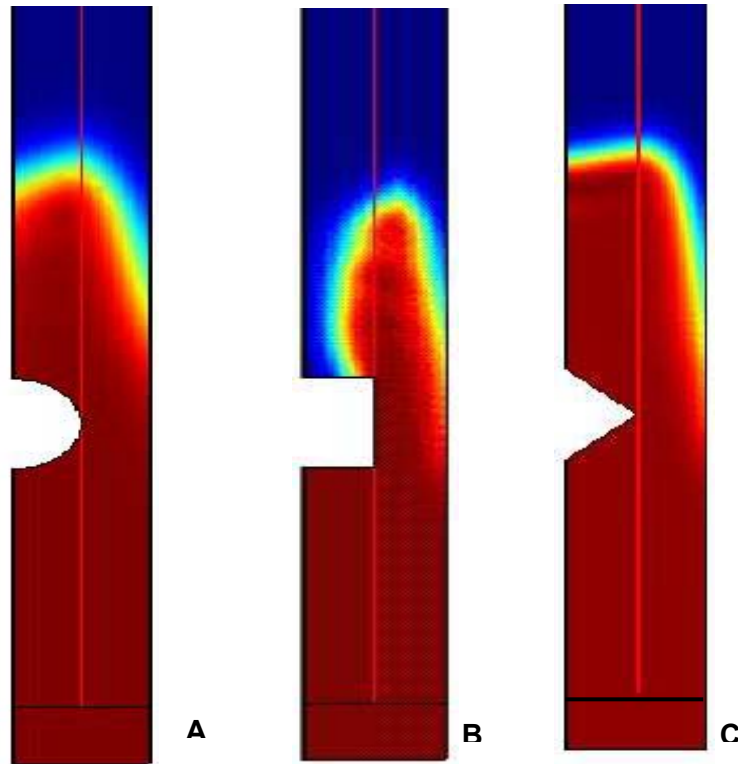


Fig. 9.9. Evolución del frente de avance para obstáculos de dimensiones $r = R/2$. Tipo de obstáculo: (A) redondo (B) rectangular (C) triangular.

Puede apreciarse una situación típica de obstáculos con cambios de forma abruptos como es el caso del cuadrado. Mientras el flujo “envuelve” correctamente los obstáculos redondo y triangular, el cuadrado presenta una zona muerta difícil de rellenar.

Nuevamente monitorizamos el frente de avance de la superficie libre a partir de la visualización en el tiempo de la densidad a lo largo del eje



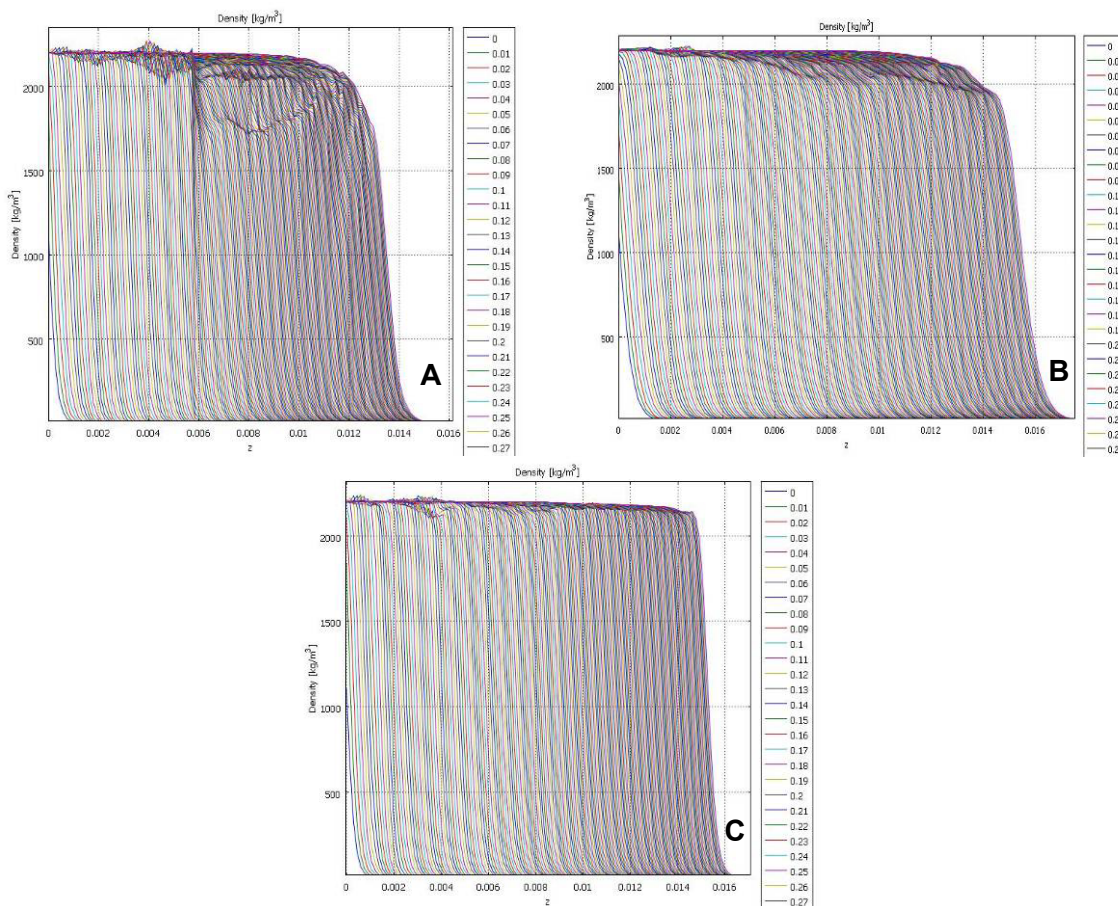


Fig. 9.10. Curvas de densidad en función de z a lo largo de las líneas rojas, para un mallado triangular (fino), una velocidad de entrada especificada de 0.01 m/s y un parámetro γ igual a 0.001. (A) Obstáculo rectangular, (B) obstáculo circular, (C) obstáculo triangular.

Puede verse de las curvas que un valor de γ de 0.001 no da resultados destacados en el caso del obstáculo rectángulo pero sí en el caso de los obstáculos circular y triangular. Esto puede explicarse a partir de las observaciones señaladas en la sección “9.2.1”. Aparentemente con obstáculos rectangulares el valor de gamma idóneo no es el más pequeño sino el correspondiente a 0.05.

Por otra parte puede verse que en el caso del obstáculo triangular las oscilaciones son prácticamente imperceptibles. Esto puede explicarse porque el valor de gamma se ha escogido correctamente y porque la malla triangular se adapta perfectamente a los detalles de la geometría de este obstáculo a diferencia de los otros dos.



Puede concluirse que la influencia de la malla es definitiva a la hora de adaptarse a los pormenores geométricos de los obstáculos y que es la causa fundamental, junto con la selección adecuada del parámetro gamma, de la bondad de los resultados

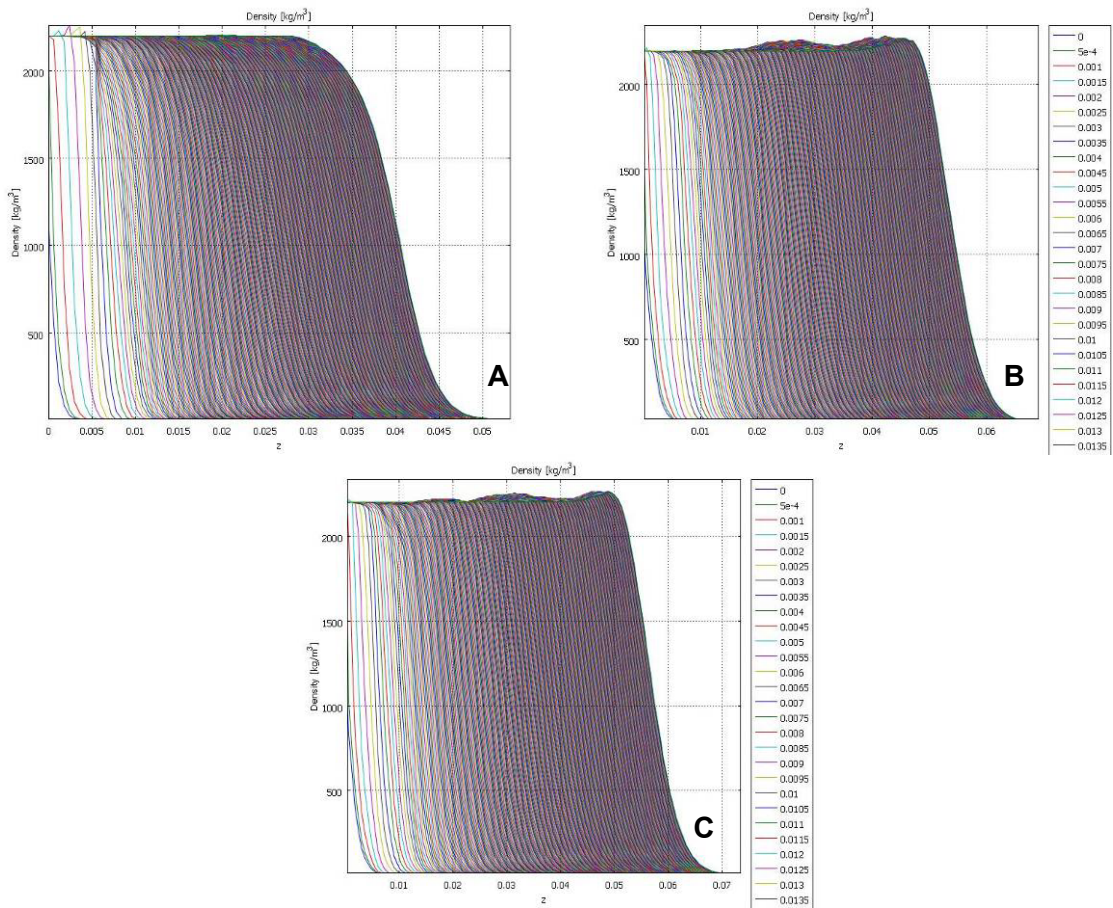


Fig. 9.11. Curvas de densidad en función de z a lo largo de las líneas rojas, para un mallado triangular (fino), una velocidad de entrada especificada de 0.01 m/s y un valor del parámetro γ igual a 0.05 . (A) Obstáculo rectangular, (B) obstáculo circular, (C) obstáculo triangular.



9.4. Presencia de obstáculos múltiples (porosidad)

En este apartado se ha realizado el estudio de la progresión del flujo en una cánula llena de obstáculos representativos de un cierto nivel de porosidad. Al contrario que en los estudios llevados a cabo en proyectos anteriores, y como se muestra en la sección 8.3.1, se han añadido más que no únicamente tres obstáculos. Las especificaciones materiales del cemento considerado son, densidad igual a 2200 kg/m³ y viscosidad dinámica de 1 Pa.s que resultan ser las mismas que la que se utilizaron en proyectos previos de forma que podrán compararse los resultados y valorar así las mejoras aportadas.

Se ha realizado el estudio en bajo dos premisas computacionales diferentes: en un primer caso se ha utilizado una gamma igual a 0.001 tal y como se ha hecho en estudios anteriores. En un segundo caso se ha utilizado un operador específico de COMSOL denominado *nojac()* que mejora las prestaciones de cálculo sobre todo cuando el esfuerzo computacional es grande y que merece alguna explicación adicional para utilizarlo correctamente.

Los resolvedores (*solvers*) trocean cada problema, sea lineal o no, en uno o varios sistemas de ecuaciones lineales como resultado de la aproximación lineal del problema propuesto. La matriz de coeficientes del problema discretizado linealizado es lo que se conoce como matriz de rigidez o matriz jacobiana. En muchos casos, especialmente cuando se utiliza la forma débil de la solución, COMSOL computa correctamente dicha matriz. En otros casos, sin embargo, el programa trata ciertos términos de la EDP y de las condiciones de contorno como si no dependieran de la solución buscada y encuentra resultados erróneos de la matriz de rigidez. Las consecuencias inmediatas son, o bien se obtienen soluciones directamente erróneas (si el resolvedor es lineal y estacionario por ejemplo) o el tiempo de convergencia cuando se utilizan resolvedores no lineales o dependientes del tiempo crece enormemente y en algunas ocasiones también falla. Aún así, si los términos ignorados tienen una débil dependencia con la solución buscada el impacto sobre la velocidad de convergencia es pequeño. El uso del operador *nojac()* puede inducir a estos problemas si no se usa con cuidado.

El operador *nojac()* asegura que la expresión de su argumento no contribuirá a la matriz de rigidez (jacobiana o *stiffness*) simplificando el cálculo pero con serias posibilidades que, no solamente tenga efectos numéricos, sino que se modifique la física del problema

Antes de presentar los resultados de este estudio se va a explicar como se utiliza el operador



nojac() en COMSOL.

1. Después de **Options>Integration Coupling Variables...** rellenaremos la ventana de diálogo **Subdomain Integration Variables** como se muestra en la figura 9.12.

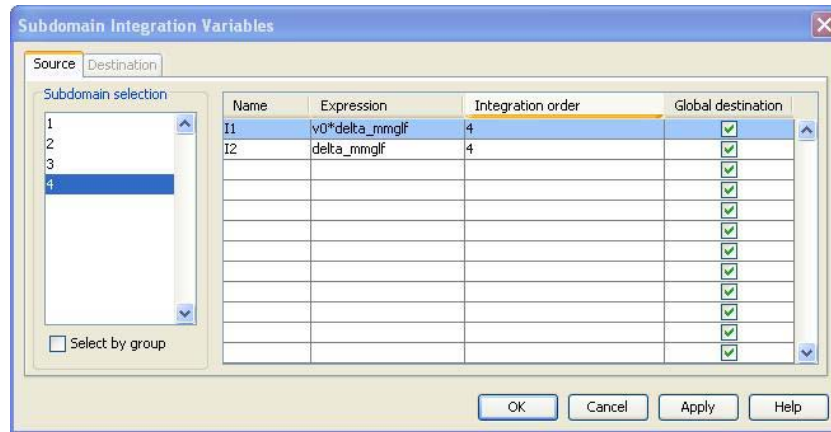


Fig. 9.12. Ventana de diálogo **Subdomain Integration Variables**.

2. Después seleccionaremos **Options>Expressions>Scalar expressions** e incluiremos la expresión mostrada en la figura 9.13.

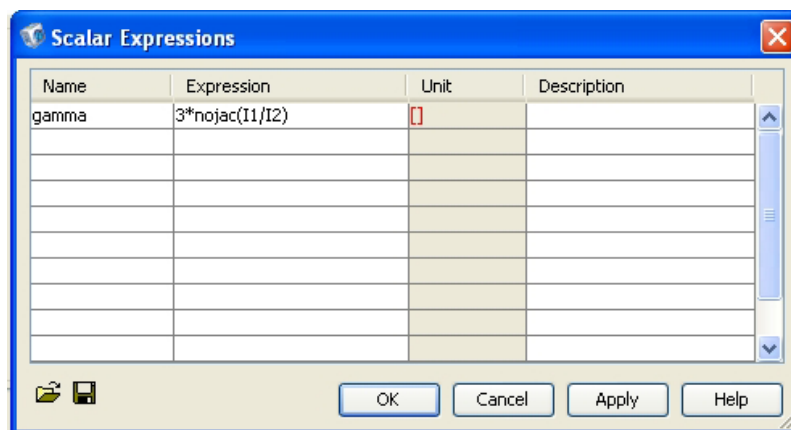


Fig. 9.12. Ventana de diálogo **Scalar Expressions**.

3. Por fin seleccionaremos **Physics>Subdomain setting>Level Set** y rellenaremos el campo de texto gamma como se muestra la figura 9.13.



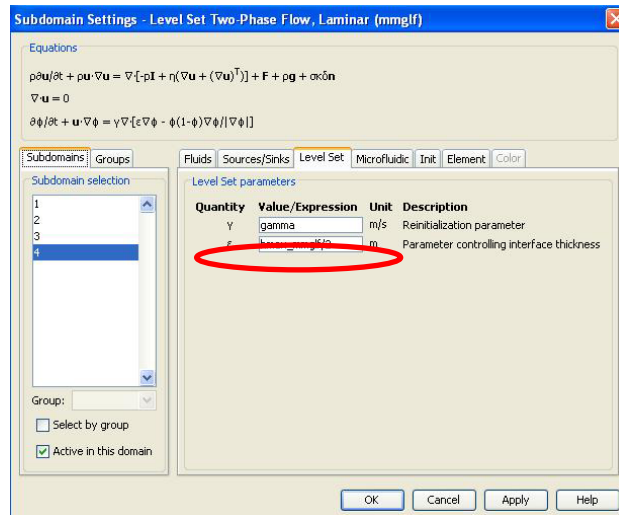


Fig. 9.13. Ventana de diálogo **Subdomain Setting**, pestaña **Level Set** en la que se especifican parámetros específicos del método Level Set.

Las figuras que siguen muestran, en diferentes instantes de tiempo, la comparación de resultados entre el uso del operador *nojac()* y el uso de un valor de gamma de 0.001.

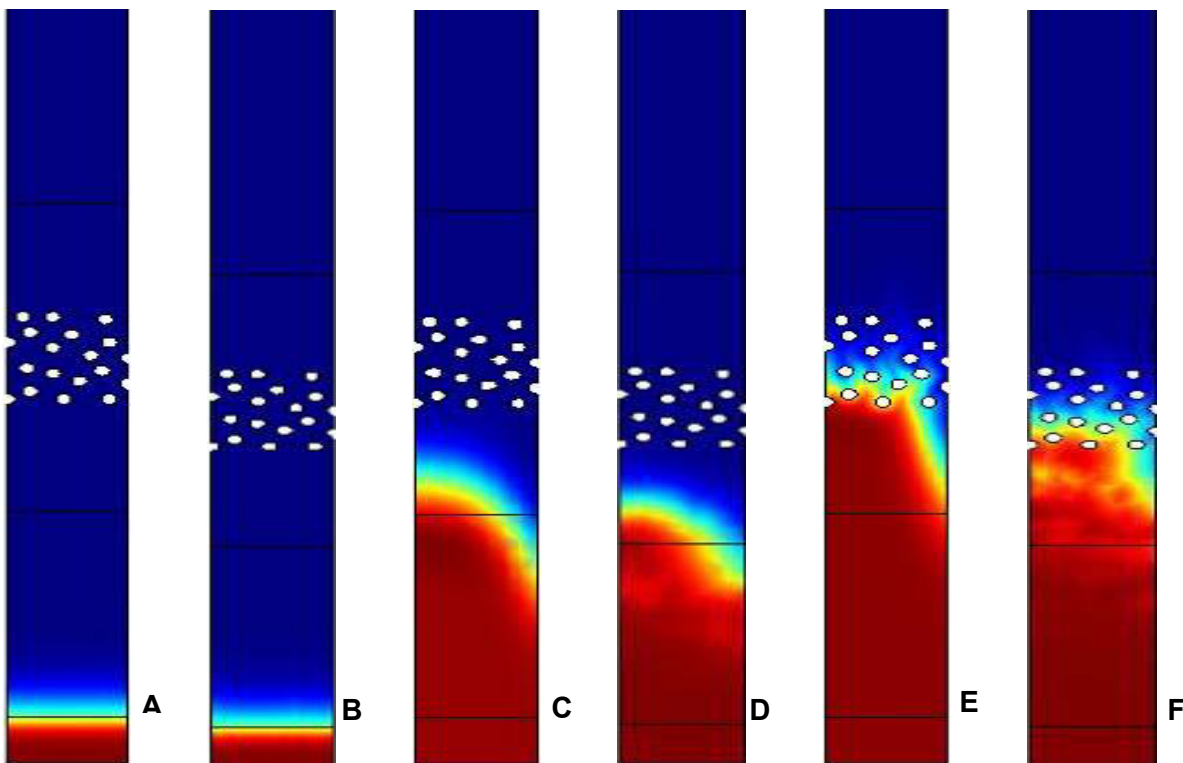


Fig. 9.15. Evolución del frente de avance en una cánula con porosidad. (A) $\gamma = 0.001$, $t=0$ (B) *nojac()*, $t=0$ (C) $\gamma = 0.001$, $t=0.4$, (D) *nojac()*, $t=0.4$ (E) $\gamma = 0.001$, $t=0.6$ (F) *nojac()*, $t=0.6$.



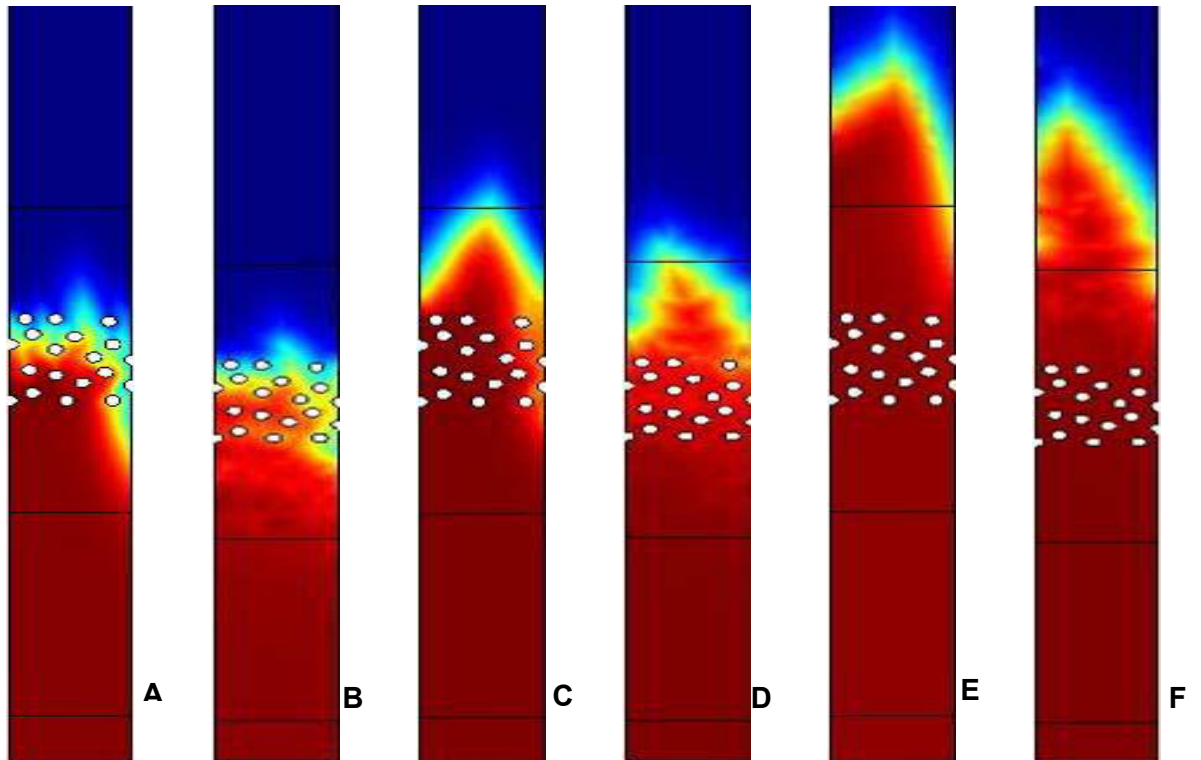


Fig. 9.16. Evolución del frente de avance en una cánula con porosidad. (A) $\gamma = 0.001$, $t = 0.7s$ (B) *nojac()*, $t = 0.7s$ (C) $\gamma = 0.001$, $t = 0.9s$, (D) *nojac()*, $t = 0.9s$ (E) $\gamma = 0.001$, $t = 1.2s$ (F) *nojac()*, $t = 1.2s$.

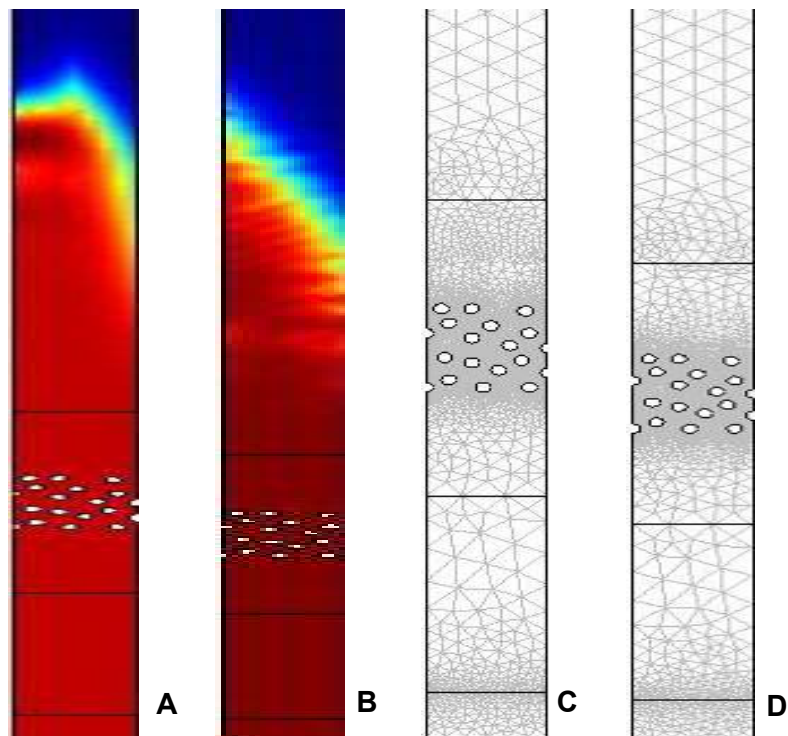


Fig. 9.17. Evolución del frente de avance a $t = 2s$ y la malla utilizada. (A) $\gamma = 0.001$ (B) *nojac()*. (C) Malla para $\gamma = 0.001$ (D) Malla para *nojac()*.



Se puede concluir que valores de γ de 0.001 dan mejores resultados que el uso del operador nojac() pues con la misma malla el flujo es más suave. Además se puede ver que el flujo avanza más con γ de 0.001.

Puede pensarse ahora que conocemos las mejores especificaciones de simulación para simular correctamente el flujo en presencia de obstáculos. Para que puedan compararse aún más, se han medido las presiones de entrada en el centro de la cánula.

Tabla 9.2. Tabla de presión de entrada durante diferente tiempo de rellenado de una cánula con obstáculos.

t (segundos)	P(Pa) $\gamma = 0.001$	P(Pa) No Jacobiano
0	40	42
0.4	58	64
0.6	767	1016
0.7	1983	2092
0.9	2924	2855
1.2	3189	3175
2	3296	3294

Se puede ver que la diferencia entre los dos métodos no esta tan grande cuando lo que se compara es la presión.



9.5. Estudio de la kifoplastia

En esta parte se utilizan todos los resultados anteriores con el objetivo de simular con garantías el relleno hipotético de una cavidad vertebral. En efecto, tal y como se muestra en la sección 8.3.2, se ha intentado modelizar la inyección de un cemento de densidad 2200 kg/m³ y viscosidad dinámica 100 Pa.s en una hipotética cavidad ósea. Se mostrará la mejoría respecto de resultados de estudios previos al presente trabajo al especificar adecuadamente algunos parámetros del módulo Level Set como se ha mostrado a lo largo de toda la sección 9. La decisiva influencia del parámetro gamma se puede visualizar en la figura 9.18. En esta sección se utilizará un valor de gamma de 0.001 del que sabemos da buenos resultados. Por otra parte se ha especificado una velocidad de entrada en lugar de una presión como condición de contorno.

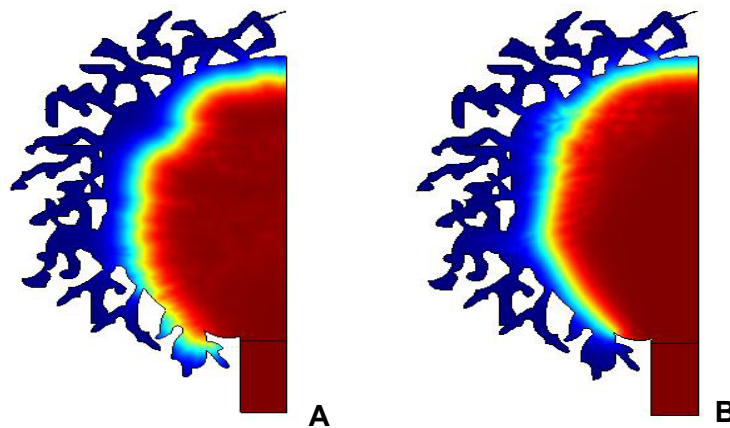


Fig. 9.18. Evolución del frente de avance en una cavidad durante la técnica de kifoplastia. Imágenes a instantes de tiempo iguales a 12s. (A) $\gamma=0.05$ (B) $\gamma=0.001$.

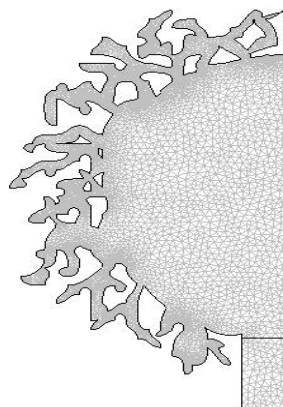


Fig. 9.19. Malla utilizada durante la evolución del frente de avance en una cavidad.



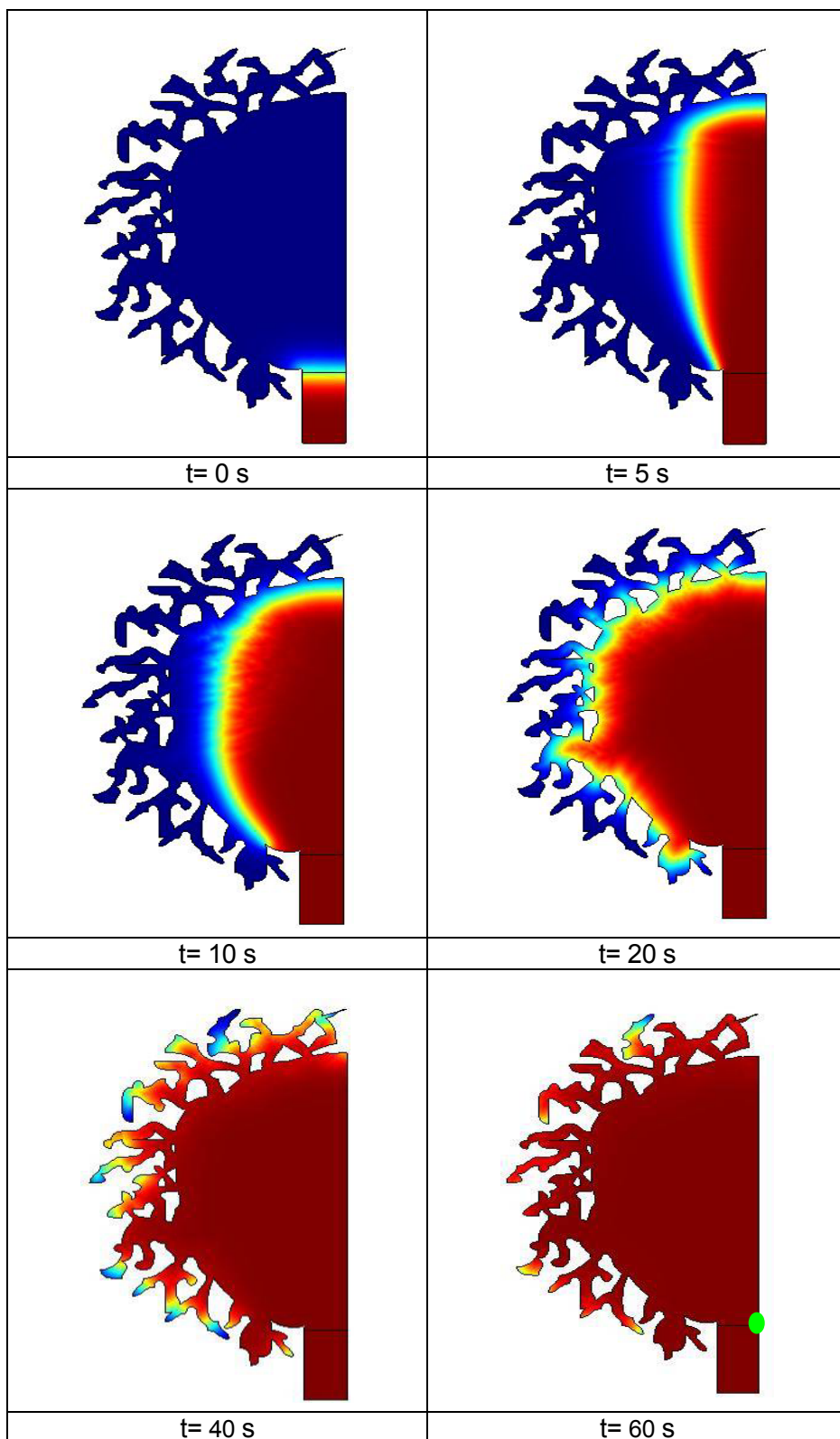


Fig. 9.20. Evolución del frente de avance en un hueso durante la técnica de cifoplastia con γ igual a 0.001. Malla utilizada, imágenes a diferentes tiempos y comparación con imagen anterior.



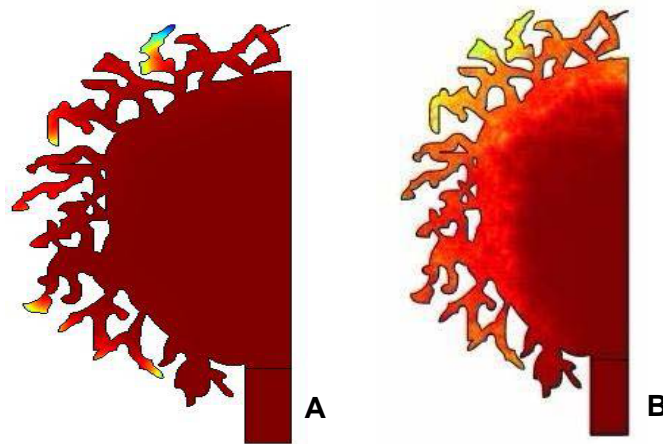


Fig. 9.21. Comparación entre los resultados (A) Nuevo resultado con $\gamma = 0.001$ (B) resultado anterior con $\gamma = 1$.

Se puede concluir que se obtienen resultados significativos que de una forma verosímil puede simular de forma solvente una cifoplastia. Además, los ajustes apropiados de los parámetros de la simulación han permitido disminuir enormemente el esfuerzo de cálculo

También ahora se han estimado las presiones necesarias de entrada a la cavidad (véase el punto verde señalado en la figura 9.20 para $t = 60$ s), éstas son, las presiones en el punto de inyección a medida que se lleva a cabo ésta.

Tabla 9.2. Tabla de presión de entrada durante el rellenado de la cavidad para diferentes instantes de tiempo

t (segundos)	P (Pa)
0	127
5	2048
10	2440
20	3076
40	4090
60	4201



Se concluye que la presión aumenta durante el rellenado del hueso hasta alcanzar una presión límite pero que queda por debajo de la presión máxima que puede ejercer el cirujano manualmente, i.e., aproximadamente 1,5 MPa.



10. Impacto ambiental

En este proyecto se han realizado principalmente simulaciones por ordenador. El impacto ambiental es el que se corresponde con el gasto de energía eléctrica utilizada para llevar a cabo las simulaciones. Por parte de este estudiante se ha minimizado el posible impacto ambiental de este proyecto reduciendo al mínimo el uso de papel antes de la publicación final de este proyecto. Por otra parte, los estudiantes de la Titulación Europea de Materiales estamos a la espera de que Ordenación de Estudios de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de Barcelona publique una guía que facilite las pautas a seguir para una correcta valoración del impacto ambiental de un Proyecto Fin de Carrera.



11. Coste del proyecto

Este proyecto se inició el 3 de septiembre 2008 y ha finalizado el 2 de febrero 2009 (o sea 5 meses), con 5 días a la semana y 6 horas al día.

Para determinar el coste del proyecto se van a considerar 3 apartados de coste:

- Sistema informático y máquinas
- Material de laboratorio y de ultrasonidos
- Recursos humanos

Para el sistema informático se han tomado en cuenta los precios iniciales del ordenador utilizados así como los costes del programa y una licencia. Se toma en consideración el tiempo de amortización y se puede deducir el precio por hora.

Concepto	Evaluación del coste horario de los recursos informáticos			
	Coste(€)	Tiempo de amort.(a)	Coste Anual(€/a)	Coste Día(€/d)
Workstation HP xw4400	1200	4	300	0,82
1 Licencias COMSOL	8000	1	8000	21,92

Concepto	Coste asociado a la utilización del equipamiento informático		
	Coste Día (€/d)	Días de utili.	Coste (€)
Workstation HP	0,82	100	82
1 Licencia COMSOL	21,92	100	2192
COSTE INFORMATICO Y DE MAQUINA			2 274 €



El material de laboratorio y de ultrasonidos es el que se corresponde con el equipamiento para hacer los ensayos de ultrasonidos:

Concepto	Coste asociado al material de laboratorio		
	Precio/Cantidad	Cantidad	Coste (€)
Tarjeta Generadora	9 000 €	1	9 000
Palpador	500 €	2	1 000
Cable BNC	30 €	3	90
Montaje de ensayo	500 €	1	500
Ordenador	800 €	1	800
Osciloscopio	2 000 €	1	2 000
COSTE DEL MATERIAL DE LABORATORIO			13 390 €

Por último, el coste asociado a personal, se ha calculado tomando como base que se ha trabajado 5 días a la semana, a 6 h/d en la universidad con la ayuda de un catedrático



universitario. El precio por hora de un ingeniero superior es de 20€/h, para un catedrático universitario es de 70€/h.

Fases del proyecto	Coste asociado al personal			
	Días	Horas / Ing	Horas/Cat.Uni	Coste (€)
Análisis preliminar	5	30	5	950
Estudio bibliográfico	5	30	-	600
Creación de modelos	30	180	20	5 000
Ajuste del programa	30	180	20	5 000
Análisis de resultados	5	30	30	2 700
Elaboración informe	30	180	50	7 100
Subtotal 1 Ing.	-	630	-	12 600
Subtotal 1 Cat. Uni.	-	-	125	8 750
SUBTOTAL 2 PERSONAS				21 350€

A continuación el coste general de este proyecto:

Conceptos	Costo asociado (€)
Equipamiento informático y maquina	2 275
Material de laboratorio y de ultrasonidos	13 390
Recursos humanos	21 350
COSTE TOTAL DEL PROYECTO	37 015 €



Conclusiones

En este proyecto se han realizado diferentes modelos numéricos con los cuales se ha podido entender el comportamiento de estos cementos y las propiedades de flujo durante su inyección en vértebra, así como entender qué parámetros se pueden utilizar para mejorar su inyectabilidad.

Así mismo se ha realizado un protocolo de utilización del programa Comsol adecuado al tema de investigación tratado, i.e. inyectabilidad de cementos en vertebroplastia, para facilitar el trabajo posterior en otros Proyectos Finales de Carrera.

Se deja en disposición todo un montaje para hacer medidas de ultrasonidos y estudiar el comportamiento de la viscosidad de un cemento durante el tiempo. Toda la cadena de medida se puede realizar con facilidad gracias al estudio previo que se ha hecho.

Por último, se pone a disposición un modelo numérico seguro para el caso de la cifoplastia que permitirá, con todos los parámetros deseados: tipo de cemento (viscosidad, densidad) dimensiones de la cánula o del globo, predecir el comportamiento de estos materiales durante su aplicación clínica.



Agradecimientos

En primer lugar quería agradecer a la *Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Industrial de Barcelona* (ETSEIB) y a la *Escola Universitària d'Enginyeria Tècnica Industrial de Barcelona* (EUETIB) y particularmente al *Grup de Recerca Interdepartamental per a la Col.laboració Científica Aplicada* (GRICCA - EUETIB) por poner a mi disposición sus laboratorios y sobretodo su conocimiento y su tiempo.

En segundo lugar quería agradecer a dos personas concretas del *Grup de Recerca Interdepartamental per a la Col.laboració Científica Aplicada* (GRICCA - EUETIB) por su ayuda, paciencia y consejo: agradezco al profesor Enrique Fernández por su ayuda para llevar a cabo este proyecto; agradezco también al profesor Ricardo Torres por su paciencia infinita y su ayuda durante todas las fases de este proyecto.



Bibliografía

Referencias bibliográficas

- [1] C. BOUZA, T. LÓPEZ, M. PALMA, J.M. AMATE. *Hospitalised osteoporotic vertebral fractures in Spain: Analysis of the national hospital discharge registry*. Osteoporosis International 2007; 18(5): 649-657
- [2] A. OLEKSIK, S. EWING, W. SHEN et al. *Impact of incident vertebral fractures on health related quality of life (HRQOL) in postmenopausal woman with prevalent vertebral fractures*. Osteoporos Int 2005; 16:861-870.
- [3] J.L. OLD, M. CLAVERT. *Vertebral Compression Fractures in the Elderly*. American Family Physician 2004; 69(1):111-116.
- [4] M.D. VLAD. Proyecto de tesis doctoral: *Desarrollo y caracterización de cementos inyectables de fosfato de calcio para aplicaciones en cirugía vertebral*. Director tesis: Prof. Dr. Enrique FERNANDEZ. Convocatoria: 3 de julio de 2007.
- [5] <http://images.google.es/imgres?imgurl=http://www.personal.psu.edu/staff/m/b/mbt102/bisci4online/bone/bonestruc.jpg&imgrefurl=http://www.personal.psu.edu/staff/m/b/mbt102/bisci4online/bone/bone4.htm&h=450&w=540&sz=30&tbnid=KrrTpuNZOzggfM:&tbnh=110&tbnw=132&prev=/images%3Fq%3Dbone%2Banatomy%26um%3D1&start=1&sa=X&oi=images&ct=image&cd=1>
- [6] <http://www.bartleby.com/107/>
- [7] S.J. FERGUSON, T. STEFFEN. *Biomechanics of the aging spine*. Eur. Spine J. 2003; 12(2): S97-S103.
- [8] N. FERNANDEZ-BAILLO. *Osteoporotic vertebral fractures in woman over 60: Prevalence and impact on quality of risk study results*. Abstract of the 20th Nacional Congreso on Spinal Surgery, Valladolid/Spain, 2-3 June 2006. Eur. Spine J. 2007; 16:137-157.
- [9] S.B. TANNER. *Back Pain, Vertebroplasty and Kyphoplasty: Treatment of Osteoporotic Vertebral Compression Fractures*. Bulletin on the Rheumatic Diseases 2003; 52(2):1-8.
- [10] H.G. BACH, R.D. LIM. *Minimally invasive spine surgery for low back pain*. Dis. Mon. 2005; 51:34-57.



- [11] A.M. BRIGGS, A.M. GREIG, J.D. WARK. *The vertebral fracture cascade in osteoporosis: a review of aetiopathogenesis*. Osteoporos Int 2007; 18:575-584.
- [12] M.C. BRUGUERAS. *La osteoporosis, una amenaza para el tercer milenio*. <http://www.sld.cu/aldia/archivos/tendencias/tend7.html>
- [13] <http://www.caducee.net/DossierSpecialises/rhumatologie/osteoporose.asp>
- [14] M. BOHNER. *Physical and chemical aspects of calcium phosphates used in spinal surgery*. Eur. Spine J. 2001; 10:S114-S121.
- [15] P. HARDOUIN, P. FAYADA, H. LECLET y D. CHOPIN. *Kyphoplasty*. Revue du Rhumatisme 2002; 69(5):478-483.
- [16] G. BAROUD, M. BOHNER. *Biomechanical impact of vertebroplasty and Postoperative biomechanics of vertebroplasty*. Joint Bone Spine 2005; 73(2):144-150.
- [17] P. HARDOUIN, P. FAYADA, H. LECLET, D. CHOPIN. *Kyphoplasty*. Joint Bone Spine 2002; 69:256-61.
- [18] <http://www.spineuniverse.com/displayarticle.php/article2923.html>
- [19] <http://osartim.chru-lille.fr/html/definitiongestes/kyphoplastie.htm>
- [20] G. BAROUD, T. STEFFEN. *A new cánula to ease cement injection during vertebroplasty*. Eur Spine J 2005, 14:474-479.
- [21] J.V. MARTINEZ-QUIÑONES y G. HERNÁNDEZ-SÁNCHEZ. *Percutaneous vertebroplasty: technique and early results in 25 procedures*. Neurocirugía 2003; 14:323-332.
- [22] I.D. BARR, M.S. BARR, T.I. LEMLEY, R.M. MCCANN. *Percutaneous vertebroplasty for pain relief and spinal stabilisation*. Spine 2000; 25:923-928.
- [23] F.J.C. ECK, S.D. HODGES, S.C. HUMPHREYS. *Vertebroplasty: a new treatment strategy for osteoporotic compression fractures*. Am Orthop 2002; 31:123-127.
- [24] D. CRANDALL, D. SLAUGHTER, P.J. HANKINS, et al. *Acute versus chronic vertebral compression fractures treated with kyphoplasty: early results*. Spine J 2004; 4:418-424.
- [25] I.H. LIEBERMAN, S. DUDENEY, M.K. REINHARDT, G. BELL. *Initial outcome and efficacy of kyphoplasty in the treatment of painful osteoporotic vertebral compression fractures*. Spine 2001; 26:1631-1638.



- [26] D.J. THEODORU, S.J. THEODORU, T.D. DUNCAN, S.R. GARFIN, W.H. WONG. *Percutaneous balloon kyphoplasty for the correction of the spinal deformity in painful vertebral body compression fractures*. Clin Imaging 2002; 26:1-5.
- [27] N.B. WATTS, S.T. HARRIS, H.K. GENANT. *Treatment of painful osteoporotic vertebral compression fractures with percutaneous vertebroplasty or kyphoplasty*. Osteoporos Int 2001; 12:429-437.
- [28] F.M. PHILIPS, E. HO, M. CAMPBELL-HUPP, T. MCNALLY, F. TODD WETZEL, P. GUPTA. *Early radiographic and clinical results of balloon kyphoplasty for the treatment of osteoporotic vertebral compression fractures*. Spine 2003; 28:2260-2265.
- [29] A. PAPAIOANNOU, N.B. WATTS, D.L. KENDLER et al. *Diagnosis and management of vertebral fractures in elderly adults*. Am. J. Med. 2002; 113:220-226.
- [30] J.S. YEOM, W.J. KIM, W.S. CHOY, C.K. LEE, B.S. CHANG, J.W. KANG. *Leakage of cement in percutaneous transpedicular vertebroplasty for painful osteoporotic compression fractures*. J Bone Joint Surg 2003; 85(1): 83-89.
- [31] U. BERLEMANN, S.J. FERGUSON, L.P. NOLE, P.F. HEINI. *Adjacent vertebral failure after vertebroplasty-A biomechanical study*. J Bone Joint Surg 2002; 84(5):748-752.
- [32] I.H. LIEBERMAN, D. TOGAWA, M.M. KAYANJA. *Vertebroplasty and kyphoplasty: filler materials*. Spine J 2005; 5:305S-316S.
- [33] P.F. HEINI, U. BERLEMANN. *Bone substitutes in vertebroplasty*. Eur. Spine J 2001; 10:S203-215.
- [34] G. LEWIS. *Properties of acrylic bone cement: State of the art review*. J. Bio. Mat. Res. 1997; 38(2):155-182.
- [35] G. LEWIS. *Relative roles of cement molecular weight and mixing method on the fatigue performance of acrylic bone cement: Simplex®P versus Osteopal®*. J. Bio. Mat. Res. 2000; 53(1):119-130.
- [36] S.M. BELKOFF, J.M. MATHIS, L.E. JASPER. *Ex Vivo Biomechanical comparison of hydroxyapatite and polymethylmetacrylate cements for use with vertebroplasty*. Am. J. Neuroradiol 2002; 23:1647-1651.
- [37] R. GARCIA CARRODEGUAS, B. VAZQUEZ LASA, J. SAN ROMAN DEL BARRIO. *Injectable acrylic bone cements for vertebroplasty with improved properties*. J. Bio. Mat. Res: Applied Biomat. 2003; 68B(1):94-104.



- [38] W.E. BROWN, L.C. CHOW. *A new calcium phosphate water setting cement*. In: P.W. Brown, Editor, *Cements research progress*, American Ceramic Society, Westerville (OH) (1986), pp. 351–379.
- [39] G. BAROUD, M. BOHNER, P. HEINI, T. STEFFEN. *Injection biomechanics of bone cements used in vertebroplasty*. *Bio. Med. Mat Eng.* 2004; 14:487-504.
- [40] G. BAROUD, M. BOHNER. *Injectability of calcium phosphate pastes*. *Biomat.* 2005; 26:1553-1563.
- [41] S. SARDA, E. FERNANDEZ, J. LLORENS, S. MARTINEZ, M. NILSSON, J.A. PLANELL. *Rheological properties of an apatitic bone cement during inicial setting*. *J. Mat. Sc. Mat. Med* 2001; 12:905-909.
- [42] G. LEWIS. *Injectable bone cements for use in vertebroplasty and kyphoplasty: State of the art review*. *J. Bio. Mat. Re. PartB: Applied Biomat.* 2005; 76B(2):456-468.
- [43] C. HIRSCH. *Numerical Computation of Interna land External Flows. Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Edition Elsevier, 2007.
- [44] PM. GRESHO, R.L. SAMI. *Incompressible Flow and the Finite Element Method: Advection – Difusion. Volume One*. Edition Wiley Professional Software, 2000.
- [45] PM. GRESHO, R.L. SAMI. *Incompressible Flow and the Finite Element Method: Advection – Difusion. Volume Two*. Edition Wiley Professional Software, 2000.
- [46] O.C. Zienkiewick, L.R. TAYLOR. *The Finite Element Method (Volume 3, Fluid Dynamics)*. Fifth Edition, 2000.
- [47] R. TORRES, J. GRAU. *Introduccion a la mecanica de fluidos y transferencia de calor con COMSOL multiphysics*. Addlink Software Científico, 2007.
- [48] J.N. REDDY, D.K. GRATLING. *The finite element method in heat transfer and fluid dynamics*. CRC Taylor-Francis, 2001.
- [49] J. WILKES. *Fluid mechanics for chemical engineers with microfluidics and CFD*. Prentice Hall, 2005.
- [50] J.H. FERZIGER, M. PERIC. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Verlag, 2002.
- [51] COMSOL Multiphysics, *User's guide. Version 3.3*, COMSOL AB, 2006.



- [52] COMSOL Multiphysics. *Chemical engineering module*, User's guide, Version 3.3, COMSOL AB, 2006.
- [53] COMSOL Multiphysics. *Heat transfer module*, User's guide, Version 3.3, COMSOL AB, 2006.
- [54] A.D. Cameron, J.A. Casey, and G.B. Simpson, NAFEMS Benchmark Tests for Thermal Analysis (Summary), NAFEMS Ltd., 1986.
- [55] M. GUILLERMO SÁNCHEZ, R. VIAL CÉSAR, B. NELSON MORAGA, *Estudio de Fluidos no Newtonianos con los Métodos de Volúmenes y Elementos Finitos*. Revista facultad de ingeniera, U.T.A (Chile), Vol 10, 2002.
- [56] S. OSHER, R.FEDKIW, *Level Set methods and dynamics implicit surfaces*, Applied Mathematical Sciences 153, Springer 2003.

