

Modelación por el Método de los Elementos Finitos del proceso de infiltración de líquido en material poroso.

J. García de la Figal Costales, H. López Salinas. C. Alves Junior.

Departamento Mecánica Aplicada, Facultad de Ingeniería Mecánica,
ISPJAE, La Habana, Cuba, CP 19 390.
E-mail: jgarcia@mecanica.cujae.edu.cu

(Recibido el 11 de Mayo de 2006; aceptado el 13 de Julio de 2006)

Resumen.

Se modela el proceso de infiltración de un líquido en un medio sólido poroso, asumiendo un cierto patrón de los poros (tamaño, forma, % de porosidad, distribución). Se tienen en cuenta las propiedades del líquido, incluidas las propiedades de tensión superficial de su superficie libre. El material poroso es hidroxiapatita, semejante al tejido trabecular de los huesos. Todo se resuelve empleando el Método de los Elementos Finitos.

Palabras claves: Infiltración, modelación matemática, elemento finito, MEF.

1. Introducción.

El proceso de infiltración de líquidos en materiales porosos cobra especial interés en la actualidad dado el enorme desarrollo que las Ciencias Médicas y Farmacéuticas han estado adquiriendo en las últimas décadas. Es un proceso complejo pero ampliamente estudiado, con la definición y establecimiento de las diferentes ecuaciones explicativas del proceso. Sin embargo, una de las principales dificultades que persiste en el estudio y modelación de este proceso es que ocurre frecuentemente en materiales con porosidades muy diversas, tanto en el tamaño de los poros, como en sus orientaciones, grados de porosidades y orientaciones, que además, suelen presentarse de forma aleatoria. A todo esto se suma que las formas de las piezas porosas, frecuentes en los materiales biomédicos naturales o artificiales presentan configuraciones complejas, lo cual a su vez complica los procesos de infiltración de esas piezas con diferentes tipos de medicamentos líquidos.

La modelación y simulación matemáticas son técnicas que han irrumpido en múltiples esferas de las ciencias,

constituyendo en estos momentos importantes herramientas de análisis, diseño y toma de decisiones. Los procesos de infiltración de líquidos (medicamentos) en materiales porosos puede ser modelado matemáticamente por el Método de los Elementos Finitos (MEF). La simulación del proceso permite tomar en cuenta mucho de los factores y variables que realmente inciden en el mismo. El objetivo del presente trabajo es mostrar la modelación por el MEF del proceso de infiltración de un medicamento líquido en una placa de *hidroxiapatita*, material muy poroso empleado en la confección de implantes óseos y en múltiples prótesis de huesos.

En el modelo se trata una placa de hidroxiapatita porosa, de 0.4 mm de espesor con un 20 % de porosidad, con poros esféricos de diámetros entre 40 y 100 μm . Se consideran todos los poros interconectados entre sí. Las propiedades mecánicas del material poroso, así como las del líquido, que en principio es un medicamento con base polimérica, se dan a continuación en la tabla 1.

Tabla 1. Propiedades mecánicas de la placa y el medicamento.

Hidroxiapatita	Modulo de Elasticidad $\text{din} / \mu\text{m}^2$ 10 000	Coef. Poisson 0.28	Limite de rotura $\text{din} / \mu\text{m}^2$ 4000
Líquido	Viscosidad $\text{din} - \text{s} / \mu\text{m}^2$ $2 * 10^{-10}$	Densidad $\text{din} / \mu\text{m}^3$ $2 * 10^{-18}$	Coeficient. Tens. Superficial $\text{din} / \mu\text{m}$ 0.001

2. Modelo de Elementos Finitos.

Para la modelación del proceso de infiltración de un líquido en un material altamente poroso, se empleará el MEF, por medio de un programa profesional, haciendo uso de los elementos finitos que simulan y sustentan procesos de Mecánica de los Fluidos. En especial se empleará un elemento finito capaz de emplear la capacidad conocida como *volumen de fluido*, el que emplea un algoritmo de advección (VFRC), para dirigir la evolución de las superficies libres del líquido. Los valores VFRC de cada elemento finito podrán variar entre 0 y 1. Los valores nulos significan que el elemento está vacío (es decir solo con aire), mientras que el valor 1 dice que está lleno de líquido. Este algoritmo permite modelar el movimiento de una masa de líquido (con sus superficies libres), moviéndose en cualquier espacio.

El modelo se hará solo en el plano, para ahorrar espacio y tiempo de máquina. Deberá contar con una zona que represente la fina capa de hidroxiapatita porosa, una zona de líquido, inicialmente sobre y en contacto con la superficie superior de la placa sólida, los poros y conductos de interconexión entre ellos, los

cuales inicialmente están llenos solo de aire (es decir están "vacíos"), y una zona de aire, encima del volumen de líquido. Todo esto se representa en la Fig. 1, que es el modelo completo de elementos finitos a estudiar. Consta de un total de 8128 elementos finitos y 6652 nodos, con los siguientes elementos:

- 5092 elementos FLUID141, con 6442 nodos.
- 3028 elementos PLANE42, con 1468 nodos.

El proceso de modelación se hará en 3 etapas, cada una resolviendo un determinado problema dentro del proceso general que nos ocupa.

- **Etapas 1.** Proceso de infiltración del líquido en la capa de hidroxiapatita.
- **Etapas 2.** Efecto de las cargas (presiones) del líquido infiltrado, como cargas externas al material de hidroxiapatita.
- **Etapas 3.** Determinación de los esfuerzos, deformaciones y desplazamientos que esas cargas provocan en la hidroxiapatita.

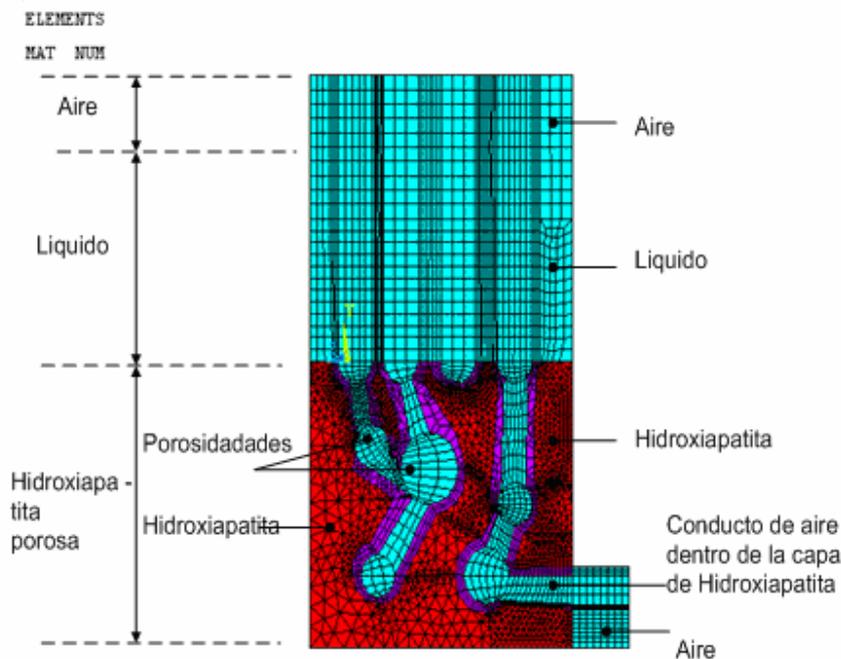


Figura 1. - Modelo completo de Elementos Finitos.

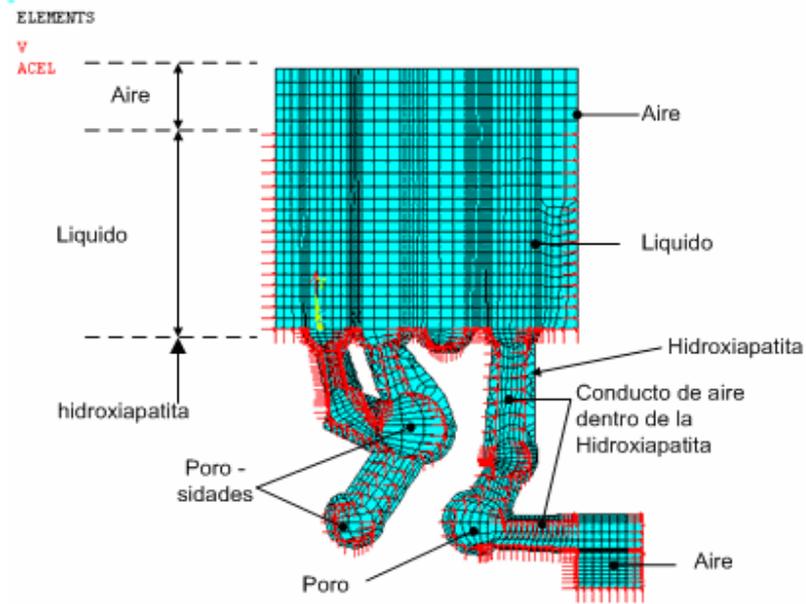


Figura 2.- Modelo para la simulación del proceso de infiltración del líquido. Etapa 1. Condiciones de bordes.

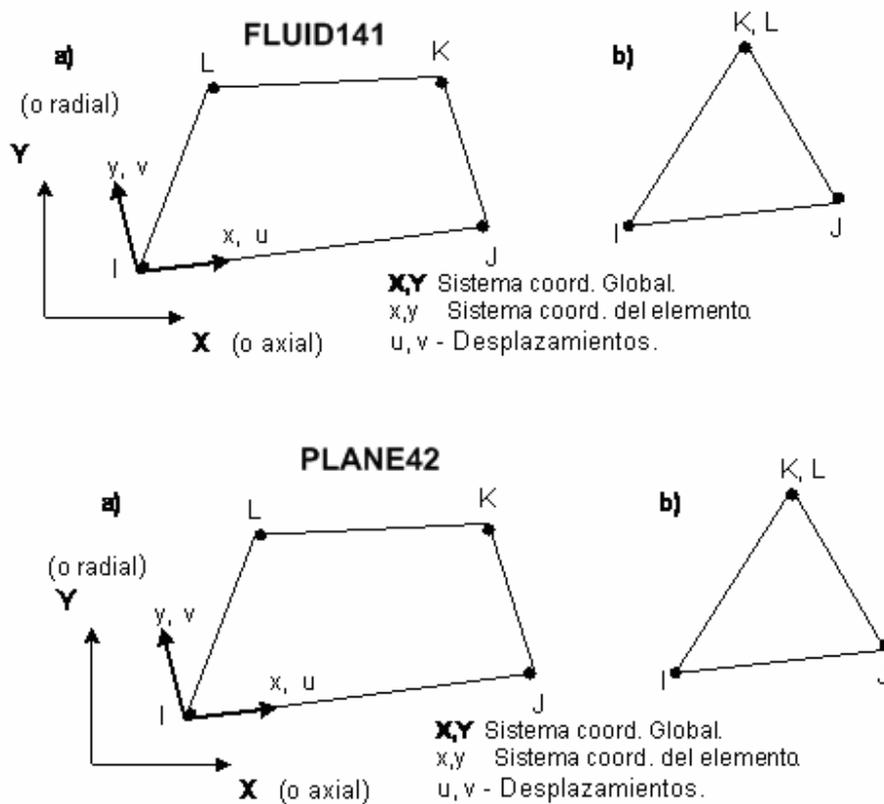


Figura 3. - Elementos finitos.

Etapa 1. Simulación de infiltración de líquido en material poroso.

El modelo para simular esta etapa del proceso se muestra en la Fig. 2. Esta compuesto principalmente por los elementos FLUID141, que modelan procesos de fluidos, siendo de especial interés en este caso su capacidad de modelar el *volumen de fluido* o VFRC. Para poder pasar posteriormente a la **Etapa 2**, es necesario colocar alrededor de toda la parte de aire del material sólido, una pequeña capa de elementos PLANE42 que simulen la parte de ese material en contacto con el aire inicial dentro de ella. Esa zona se muestra en la Fig. 2. En la Fig. 3 se muestran estos 2 tipos de elementos básicos empleados.

Etapa 2. Aplicación de las presiones del líquido al material sólido.

En el análisis se considera un volumen de líquido colocado en la parte superior de la placa de sólido, sometido a una presión debido a una aceleración de $a = 6\,000\text{ cm/s}^2$, (6 g) que constituye la carga de todo el modelo. Se simularon las condiciones de borde necesarias para los conductos y poros de la placa sólida, como se muestra en la Fig. 2. Una vez conformado el modelo correspondiente a esta etapa, se procedió a ejecutar su solución. Los resultados se muestran en las Fig. 5, 6 y 7.

En la modelación por elementos finitos ese tipo de problema se conoce como Campos Acoplados (*Coupled*

Fields) y constituye una importante etapa en la cual se transportan las cargas obtenidas del proceso de fluido (en este caso las presiones) hacia el modelo sólido. Para ello, es necesario colocar elementos FLUID141 alrededor de las zonas del fluido que están en contacto con las partes sólidas del modelo a pesar de tratarse de partes sólidas. Véase la Fig. 8. Estos elementos serán declarados como elementos nulos durante la ejecución del modelo en la **Etapa 1**, es decir la simulación como fluido. Una vez terminada esta solución, estos elementos deberán convertirse en sólidos (PLANE42), a los cuales podrán colocarse las presiones calculadas del líquido, como acciones en las superficies del sólido. De este modo queda preparado el modelo sólido de la **Etapa 3**.

Etapa 3. Comportamiento mecánico de la capa sólida.

Una vez determinadas las presiones que el movimiento del líquido provoca en las paredes interiores de los conductos y poros de la hidroxiapatita, puede procederse a conformar el modelo de esta capa sólida. Lo primero es convertir los elementos nulos en elementos sólidos PLANE42, que son los empleados en el resto de la placa sólida. El modelo obtenido se muestra en la Fig. 9. El modelo con las cargas aplicadas (presiones) y las condiciones de borde se muestran en la figura 10. A continuación se procede a obtener la solución, obteniéndose los resultados correspondientes, algunos de los principales se muestran en las Fig. 11 y 12.

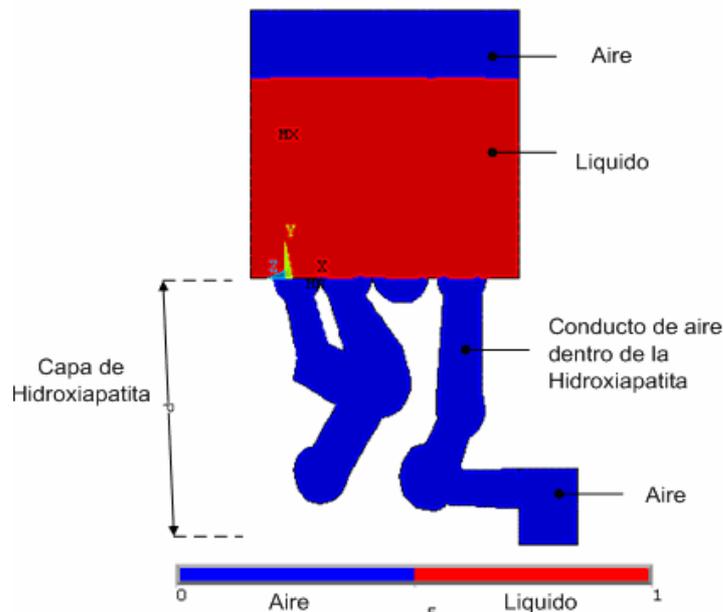


Fig. 4. - Modelo de elementos finitos con la definición inicial de que partes (elementos) son aire o líquido.

3. Análisis de los Resultados.

De los resultados pueden observarse algunos puntos de interés. Del modelo de fluido, cuyos resultados se muestran en las Fig. 5, 6 y 7, se observa que las presiones obtenidas al final del proceso de infiltración, tienen valores máximos de, $p_{max} = 10^{-5}$ Pa, en cambio las velocidades de infiltración máximas alcanzadas llegan hasta 3.017×10^{-3} m/s. Esto garantiza un proceso de infiltración del líquido rápido. De la Fig. 5 se concluye que el líquido logra, llenar todos los poros y conductos de la capa sólida porosa.

Las presiones del líquido actuando en las paredes de los conductos y poros (Fig. 10), provocan los correspondientes esfuerzos, deformaciones y desplazamientos que se muestran en las Fig. 11 y 12. Los desplazamientos máximos alcanzados son muy pequeños, del orden de $1.09 \mu\text{m}$ y también los esfuerzos equivalentes (según el criterio de Huber – Mises), cuyo valor máximo es de 0.555×10^{-15} Pa.

Al comparar los esfuerzos equivalentes en el proceso de infiltración con el esfuerzo de rotura de la hidroxiapatita, que a pesar de ser un material biomédico, es muy rígido y sumamente resistente, con un esfuerzo de rotura de promedio $\sigma_{Rot} = 4\ 000 \text{ din} / \mu\text{m}^2$

Se tiene, $0.555 \times 10^{-11} \ll 4\ 000$ Resiste ampliamente.

Puede afirmarse que los esfuerzos en el proceso de infiltración son prácticamente despreciables. Estos resultados están en correspondencia con los bajos valores de las presiones actuantes.

4. Conclusiones.

Con este trabajo se demuestra la factibilidad de la simulación de la infiltración de líquidos en materiales porosos, por medio del método de los Elementos Finitos.

En el caso específico de los modelos analizados, se observa que una aceleración media del líquido del orden 60 m/s^2 , se logran altas velocidades durante el proceso de infiltración y ocupar completamente todos los poros y conductos del material poroso. Las presiones alcanzadas son muy pequeñas, así como los esfuerzos, deformaciones y desplazamientos que se producen en la capa porosa. Puede concluirse, por tanto, que la hidroxiapatita con su elevada resistencia y rigidez no es prácticamente afectada por el proceso de infiltración de un líquido.

Queda así establecida la metodología para la modelación de estos procesos y el análisis del material poroso por medio del método de los Elementos Finitos.

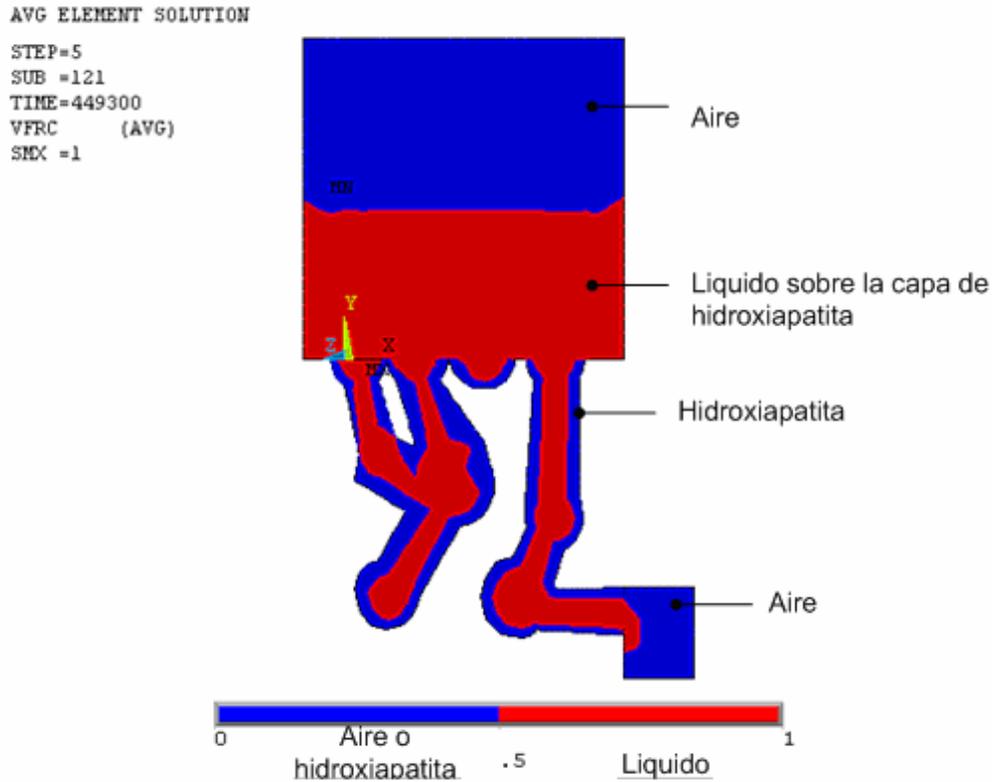


Fig. 5 . - Resultados del *Volume fraction* al final de la solución.

5. Referencias.

1 -Nakamura, T., et al. "Effects of porous on mechanical properties of plasma-spraying on ceramic coating". Journal American of Ceramic Society. 678 – 84. 2000.

2 -García de la Figal, J. "Propiedades Mecánicas de Materiales Porosos". Conferencia impartida en el Dpto. Mec. Aplicada. Fac. Ing. Mecánica. CUJAE. La Habana, Cuba. 2005.

3 - Guía del Manual del Usuario. ANSYS Corp. 2000.

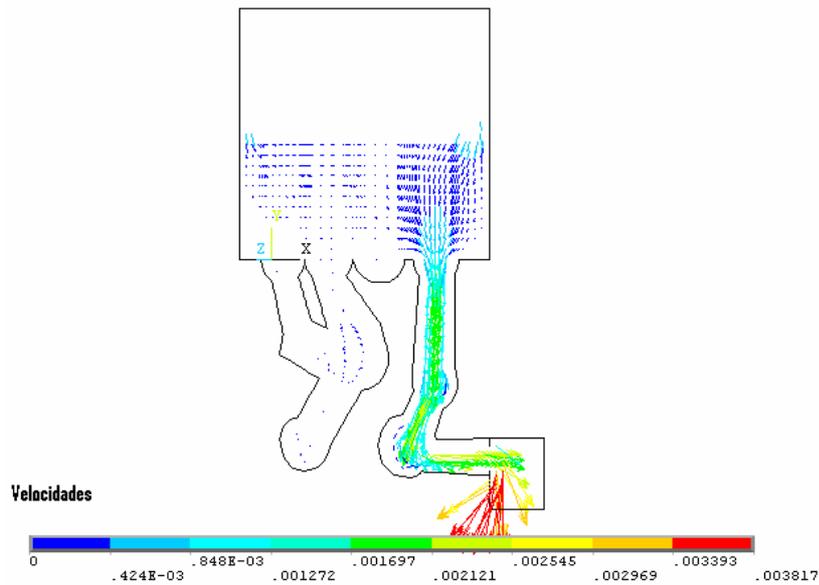


Fig. 6 . - Diagrama de las velocidades del líquido, al final de la solución. ($\mu\text{m} / \text{s}$).

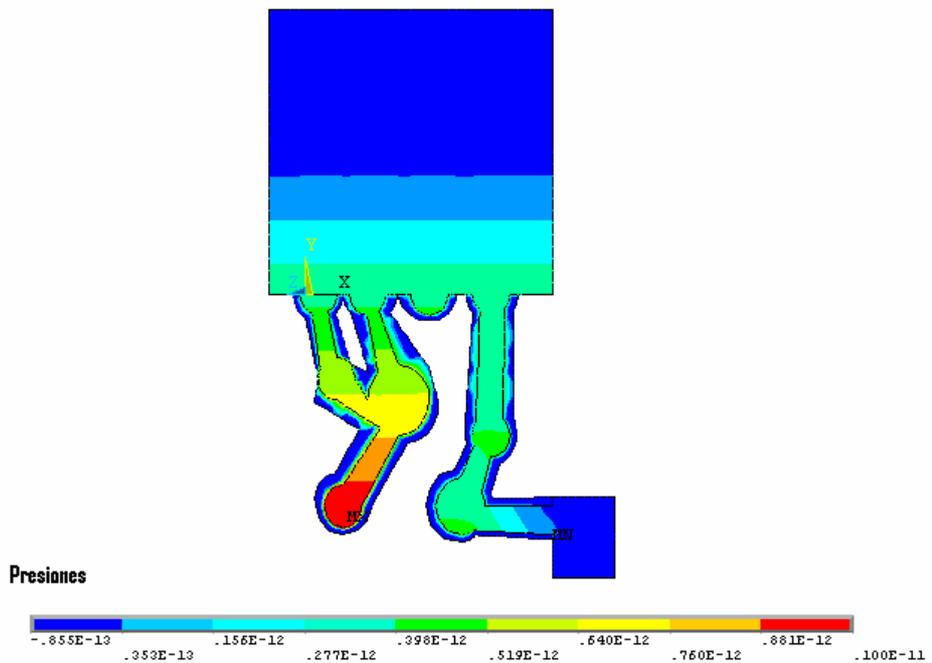


Fig. 7 . - Distribución de las presiones del líquido, al final de la solución. ($\text{din} / \mu\text{m}^2$).

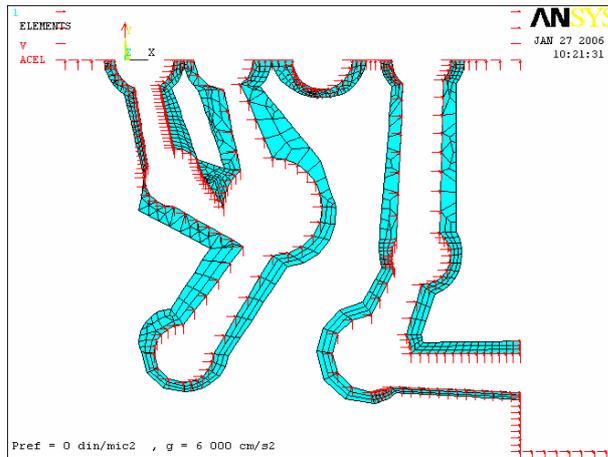


Fig. 8 . - Elementos nulos, alrededor de los conductos de fluido, en la capa sólida.

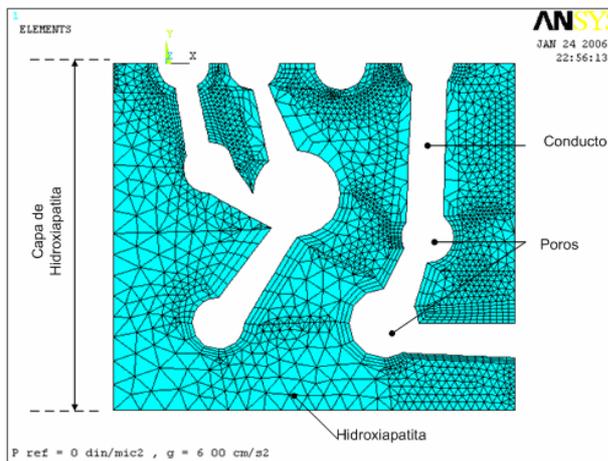


Fig. 9 . - Modelo de elementos finitos de la capa de solidó poroso (hidroxiapatita). **Etapa 3.**

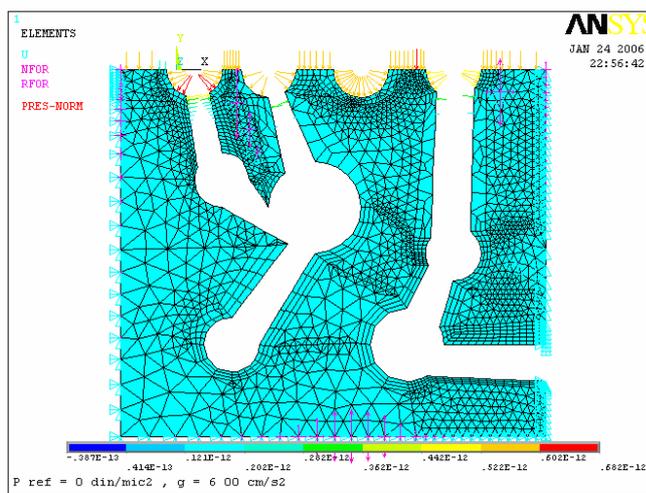


Fig. 10 . - Cargas y condiciones de borde del modelo de la capa sólida. **Etapa 3.**

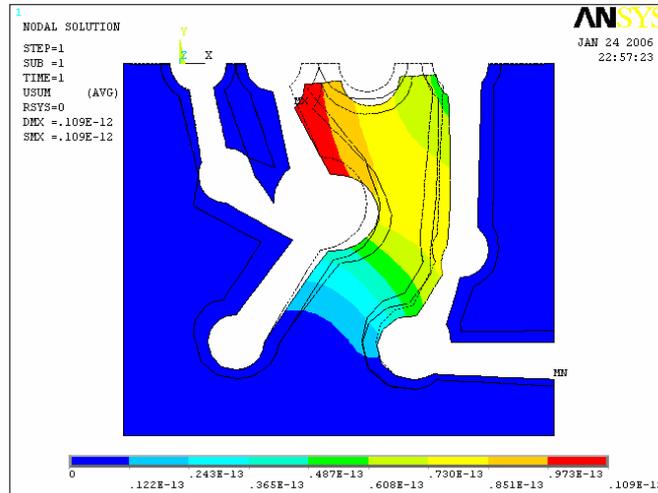
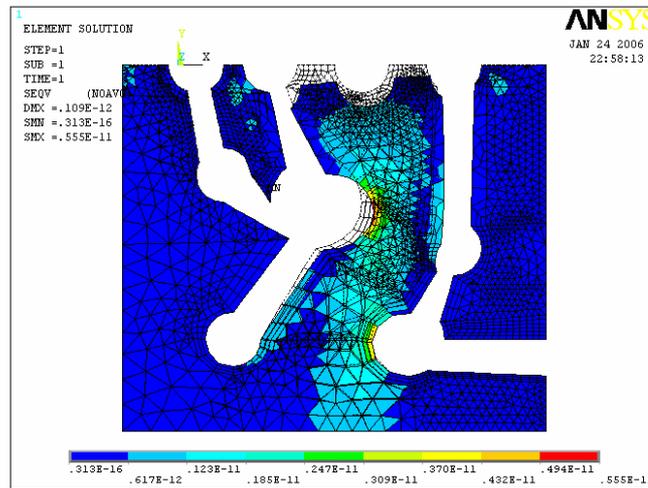


Fig. 11 . - Diagrama de los desplazamientos en la capa solida. (m).

Fig. 12 . - Esfuerzos equivalentes en la capa sólida. ($\text{din} / \mu\text{m}^2$).

Modelling by Finite Element Method of liquid infiltration process in porous material.

Abstract:

The infiltration process of a liquid in a solid porous medium is modeled, assuming a certain pattern of the pores (size, forms, porosity%, distribution). The liquid properties, included the properties of superficial tension of their free surface, are considered. The porous material is hidroxiapatita, similar to trabecular tissue of bones. Everything is solved using the Finite Elements Method (FEM).

Key Words: Mathematical modelation, infiltration, bone model, FEM, hidroxiapatite.