

**Przemysław Makowski, Waclaw Kuś**  
Instytut Mechaniki i Inżynierii Obliczeniowej  
Konarskiego 18A, 44-100 Gliwice  
email: przemyslaw.makowski@polsl.pl, waclaw.kus@polsl.pl

## **WIELOSKALOWE MODELOWANIE STRUKTUR WYTWORZONYCH Z UŻYCIEM METODY FUSED DEPOSITION MODELING (FDM) DO ZASTOSOWAŃ W MEDYCYNIE**

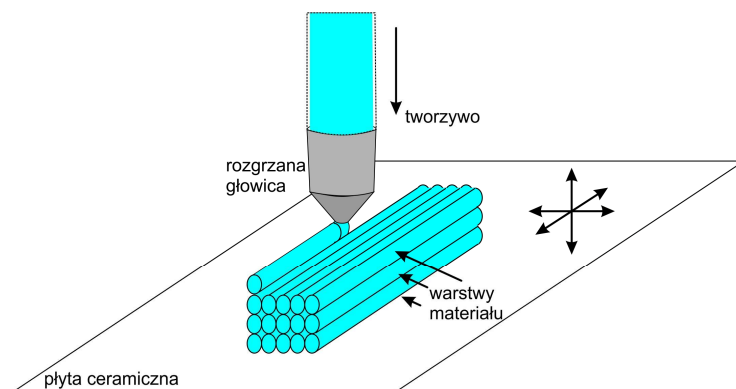
Streszczenie – W pracy przedstawiono metodę modelowania wieloskalowego struktur wytworzonych z użyciem addytywnej metody Fused Deposition Modeling (FDM). Jako przykład wykorzystano model biorusztowania kości beleczkowej. Na podstawie wytworzonego modelu wzorcowego biorusztowania, zbudowano numeryczny model trójskalowy MES uwzględniający budowę struktury w skalach mikro, meso i makro. Obliczenia wieloskalowe zrealizowano z zastosowaniem metody homogenizacji numerycznej.

Słowa kluczowe: modelowanie wieloskalowe, homogenizacja numeryczna, fused deposition modeling, biorusztowanie

### **1 Wstęp**

Biorusztowania kości beleczkowej (ang. bone scaffolds) stanowią struktury implantowane w miejscu chirurgicznie usuniętej tkanki kostnej. Tkanka kostna charakteryzuje się wysoką zdolnością do regeneracji i odbudowy. Funkcją biorusztowania jest zapewnienie mechanicznego wsparcia dla szkieletu podczas odbudowy kości. W trakcie procesu regeneracji, nowopowstała tkanka kostna wrasta w strukturę biodegradowalnego biorusztowania, aby w końcowym stadium procesu leczenia, całkowicie zastąpić zaimplantowaną strukturę. Odpowiednio zaprojektowana mikrostruktura implantu kości (stopień porowatości, struktura porów otwartych, efektywne parametry materiałowe zbliżone do zdrowej kości) wpływa na skrócenie czasu przebudowy i leczenia [1]. Ponadto zewnętrzne wymiary i geometria biorusztowania powinny być dopasowane do nieregularnego kształtu ubytku kostnego w którego miejsce struktura jest implantowana. Metodą wytwarzania zezwalającą na kontrolę zarówno topologii mikrostruktury jak i zewnętrznej geometrii implantu osobniczego (czyli zaprojektowanego dla konkretnego pacjenta i

miejsca implantacji) jest metoda Fused Deposition Modeling (FDM). W metodzie tej rozpatrywana struktura jest wytwarzana warstwa po warstwie na podstawie przygotowanego projektu CAD. Kolejne warstwy materiału budowane są poprzez osadzanie termoplastycznego tworzywa z głowicy urządzenia FDM (Rys. 1). Tworzona jest pojedyncza warstwa materiału na płycie ceramicznej, następnie płyta jest obniżana i rozpoczyna się nakładanie kolejnej warstwy materiału.



Rys. 1. Schemat wytwarzania metodą FDM

Materiałami stosowanymi do wytwarzania biorusztowań metodami FDM są biodegradowalne biopolimery takie jak poliaktyd (PLA) czy kopolimer glikolidu z laktidem (PLGA). Tak wytworzone implanty stanowią wieloskalowe struktury o budowie hierarchicznej.

Na rynku istnieją biorusztowania wytwarzane metodami przyrostowymi, jednak nie są one projektowane z użyciem metod wieloskalowych pozwalających na uwzględnienie m.in. niejednorodności materiału biorusztowania.

Danymi wejściowymi do budowy biorusztowania są parametry materiałowe kości w skali makro. W celu dopasowania parametrów biorusztowania do parametrów kości, konieczne jest określenie geometrii biorusztowania (skala meso) jak również materiałowych parametrów mikrostruktury tworzywa z którego wykonana jest konstrukcja. Proces wytwarzania metodą FDM prowadzi do powstania materiału niejednorodnego, zazwyczaj transwersalnie izotropowego. W artykule zaproponowano trójskalowy model biorusztowania, w którym zastosowano metodę homogenizacji numerycznej w skali mikro i meso co pozwoliło na uzyskanie modelu w skali makro o parametrach materiałowych zbliżonych do parametrów kości. W celu zaprojektowania implantu dla konkretnego pacjenta konieczne jest użycie dodatkowej procedury optymalizacji, która poprzez zmiany cech geometrycznych (skala meso) lub parame-

trów procesu wytwarzania (skala mikro) pozwoliłaby na uzyskanie odpowiednich własności materiałowych biorąc pod uwagę w skali makro.

## 2 Algorytm homogenizacji numerycznej

Metody wieloskalowe [3,5] umożliwiają modelowanie struktur lub materiałów z uwzględnieniem ich budowy na poziomie więcej niż jednej skali. Proces homogenizacji polega na zastąpieniu ośrodka niejednorodnego, ekwiwalentnym ośrodkiem jednorodnym o efektywnych parametrach materiałowych. Stosując algorytm homogenizacji numerycznej, dla każdej z rozpatrywanych skali obserwacji budowany jest osobny model numeryczny. Model RVE (Representative Volume Element) stanowi objętość zawierającą dostatecznie dużo informacji o topologii struktury, jej niejednorodności i elementach składowych obserwowanych w danej skali, aby w sposób wystarczający opisać parametry całej struktury. Dla struktur periodycznych o powtarzalnej mikrostrukturze, najbardziej efektywne są periodyczne warunki brzegowe stosowane w modelach RVE rozpatrywanej mikrostruktury. W przypadku liniowo-sprężystego modelu materiału, wystarczające jest jednokrotne przeprowadzenie sześciu analiz modelu RVE dla sześciu składowych tensora odkształcenia. W trakcie każdej z analiz uśredniane są naprężenia (1) oraz odkształcenia (2) w modelu RVE.

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \sigma_{ij} dV_{RVE} \quad (1)$$

gdzie  $\langle \sigma_{ij} \rangle$  – uśrednione naprężenie dla skali wyższej  
 $\sigma_{ij}$  – naprężenie w skali niższej (RVE)  
 $V_{RVE}$  – objętość RVE

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V_{RVE}} \int_{V_{RVE}} \varepsilon_{ij} dV_{RVE} \quad (2)$$

gdzie  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  – uśrednione odkształcenie dla skali makro  
 $\varepsilon_{ij}$  – odkształcenie w skali mikro (RVE)  
 $V_{RVE}$  – objętość RVE

Na podstawie uśrednionych wartości naprężeń i odkształceń z modelu RVE, formułowany jest związek konstytutywny dla liniowo-sprężystego materiału ortotropowego (3)(4).

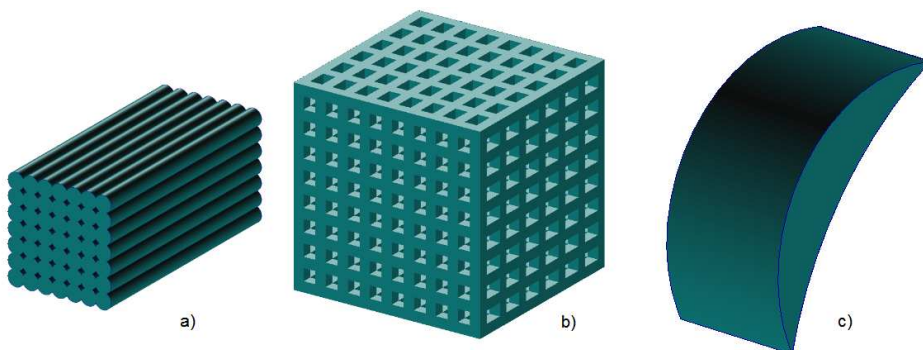
$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \mathbf{C} \langle \varepsilon_{ij} \rangle \quad (3)$$

$$\begin{bmatrix} \langle \sigma_{11} \rangle \\ \langle \sigma_{22} \rangle \\ \langle \sigma_{33} \rangle \\ \langle \sigma_{12} \rangle \\ \langle \sigma_{23} \rangle \\ \langle \sigma_{31} \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{55} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle \varepsilon_{11} \rangle \\ \langle \varepsilon_{22} \rangle \\ \langle \varepsilon_{33} \rangle \\ \langle \varepsilon_{12} \rangle \\ \langle \varepsilon_{23} \rangle \\ \langle \varepsilon_{31} \rangle \end{bmatrix} \quad (4)$$

Macierz  $\mathbf{C}$  stanowi macierz sprężystości ekwiwalentnego materiału jednorodnego, czyli efektywne parametry materiałowe obliczone na podstawie analiz modelu RVE. Metodę homogenizacji numerycznej zaimplementowano w komercyjnym oprogramowaniu obliczeń metodą elementów skończonych MSC.Marc w postaci autorskiego podprogramu (user subroutine) opracowanego w języku Fortran [4]. W celu obliczenia stanu naprężenia w mikrostrukturze, należy przeprowadzić procedurę lokalizacji – stan odkształcenia dla danego punktu modelu makro, zadać jako warunek brzegowy w modelu mikro (RVE).

### 3 Trójskalowy model biorusztowania.

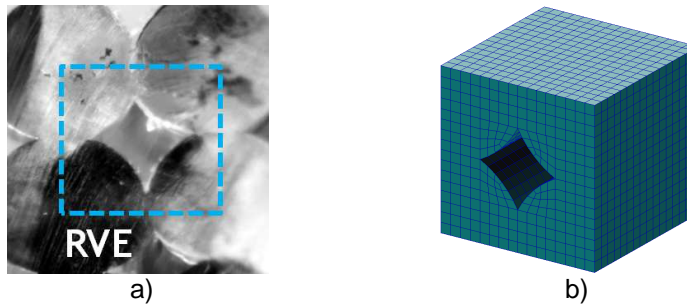
Biorusztowanie wytworzone z użyciem metod FDM jest wieloskalową strukturą hierarchiczną, w której wyróżnić możemy trzy skale (Rys. 2): mikro (ścieżki osadzonego tworzywa sztucznego), meso (porowata struktura zbudowana z beleczek) oraz makro (struktura o efektywnych parametrach materiałowych, w kształcie ubytku kostnego).



Rys. 2. Wieloskalowa struktura biorusztowania: a) skala mikro, b) skala meso, c) skala makro

Na podstawie pomiarów mikroskopowych (Rys. 3a) typowych zglądów przekrojów poprzecznych beleczek wykonanych metodą FDM,

z których zbudowana jest porowata struktura biorusztowania, wyodrębniono i zbudowano numeryczny model RVE mikrostruktury (Rys. 3b).



Rys. 3. Mikrostruktura biorusztowania: a) zgląd, b) model numeryczny RVE

W modelu RVE zastosowano periodyczne warunki brzegowe i z użyciem algorytmu homogenizacji numerycznej obliczono efektywne parametry materiałowe dla skali meso (parametry beleczek tworzących strukturę porowatą). Do budowy modelu wykorzystano materiał PLGA z 5% dodatkiem hydroksyapatytu [2]. Parametry materiałowe dla materiału tworzywa przedstawiono w Tab. 1.

Tabela. 1. Parametry materiałowe materiału w skali mikro

Moduł Younga	Wsp. Poissona
GPa	
12.56	0.35

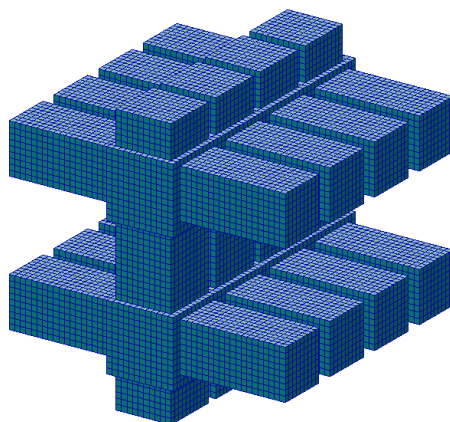
Składowe macierze sprężystości uzyskane dla modelu w skali meso z użyciem homogenizacji numerycznej przedstawiono w Tab. 2.

Tabela. 2. Parametry materiałowe materiału w skali meso

C <sub>11</sub>	C <sub>22</sub>	C <sub>33</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>23</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>55</sub>	C <sub>55</sub>
GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa
14.07	14.07	17.61	6.5	7.2	7.2	4.1	4.6	4.6

Przy tworzeniu geometrii modelu w skali meso wykorzystano periodyczną strukturę przedstawioną na Rys. 4. W modelu w skali meso zastosowano periodyczne warunki brzegowe oraz parametry materiałowe z Tab. 2. Ponownie zastosowano algorytm homogenizacji numerycznej i otrzymano efektywne parametry materiałowe dla skali makro (Tab. 3). W celu analizy biorusztowania w skali marko, należy przyjąć parametry materiałowe uzyskane w trakcie homogenizacji

numerycznej i zastosować je w modelu, w którym biorusztowanie modelowane jest jako ośrodek jednorodny.



Rys. 4. Model RVE biorusztowania w skali meso

Otrzymane parametry w skali makro powinny być zbliżone do parametrów tkanki kostnej pacjenta. Opracowana metoda modelowania trójskalowego może zostać użyta w procedurze doboru odpowiedniego biorusztowania. W tym celu należałoby określić zmienne projektowe (np. parametry materiału w skali mikro, topologii w skali meso) oraz funkcję celu związaną z normą różnicy parametrów materiałowych w skali makro oraz tkanki pacjenta.

Tabela. 3. Parametry materiałowe materiału w skali makro

C <sub>11</sub>	C <sub>22</sub>	C <sub>33</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>23</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>55</sub>	C <sub>55</sub>
GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa	GPa
1.5	1.9	3.6	0.4	0.3	0.3	0.2	0.2	0.2

#### 4 Podsumowanie

Obliczono ortotropowe parametry efektywne struktury biorusztowania z uwzględnieniem jego budowy w skalach mikro, meso i makro. Opracowana metoda prowadzenia badań eksperymentalnych i symulacji numerycznych wraz z modelem trójskalowym struktury biorusztowania, pozwoli na dalszą optymalizację struktury biorusztowań. Parametry materiałowe struktury w skali mikro (osadzony filament) są zależne od parametrów procesu wytwarzania, takich jak temperatura elementu podgrzewającego materiał termoplastyczny i prędkość nakładania warstwy tworzywa. Parametry materiałowe w skali meso wynikają z głębokości wtopienia kolejnych osadzanych warstw oraz zastosowanej

orientacji rastra. Sterując tymi parametrami możliwe będzie uzyskanie biorusztowań o zadanych własnościach.

## 5 Literatura

- [1] S. Hollister, R. Maddox, J. Taboas, *Optimal design and fabrication of scaffolds to mimic tissue properties and satisfy biological constraints*. Biomaterials, nr 23, 4095-4103, 2002
- [2] J. B. Lee, S. H. Lee, S. M. Yu, J.-C. Park, J. B. Choi, J. K. Kim, *PLGA scaffold incorporated with hydroxyapatite for cartilage regeneration*, Surface & Coatings Technology, nr 202, 5757–5761, 2008
- [3] Ł. Madej, A. Mrozek, W. Kuś, T. Burczyński, M. Pietrzyk, *Concurrent and upscaling methods in multi scale modelling - case studies*, Computer Methods in Material Science, nr 8, 1-15, 2008
- [4] P. Makowski, *Trabecular bone homogenization with use of MSC.Marc user subroutines*, International Conference on Computer Methods in Mechanics CMM 2013 Proceedings, Poznań, 2013
- [5] K. Tearda, N. Kikuchi, *A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, nr 190 (40-41), 5427-5464, 2001

# MULTISCALE MODELING OF STRUCTURES MANUFACTURED USING FUSED DEPOSITION MODELING (FDM) METHOD FOR APPLICATIONS IN MEDICINE

Summary – The paper presents a method for multiscale modeling of structures manufactured using Fused Deposition Modeling (FDM) additive method, on the example of trabecular bone scaffold model. On the basis of manufactured bone scaffold reference model, the FEM numerical model of the structure was build, which takes into account the structure of scaffold at micro, meso and macro scales. Multiscale calculations were performed using numerical homogenization method.

Keywords: multiscale modeling, numerical homogenization, fused deposition modeling, bone scaffold