

CIMAT

Centro de Investigación en Matemáticas A.C.

**Estimación de Parámetros
en el Modelo de Biot para
Propagación Ultrasónica en
Hueso Trabecular**

T E S I S

que para obtener el grado de

**Maestro en Ciencias con Especialidad en
Computación y Matemáticas Industriales**

P R E S E N T A :

José Ángel Neria Pérez

DIRECTOR DE TESIS:
Dr. Miguel Ángel Moreles Vázquez

Julio de 2016

Guanajuato, Gto. México

Agradecimientos

A mi madre Ángela por ser una guía y ejemplo a seguir a lo largo de mi vida.

A mis hermanos Mario, Patricia y Juan, quienes siempre me han cuidado y estado allí.

A mi esposa Alejandra Romero que con paciencia me ha acompañado en esta travesía.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico brindado para la realización de los estudios de maestría.

Al Centro de Investigación en Matemáticas A. C. por brindarme la oportunidad de superarme académicamente.

A mi director de tesis, Dr. Miguel Ángel Moreles Vázquez por la confianza depositada en mí y en el proyecto.

A los sinodales por las acertadas correcciones para la mejora de este trabajo.

Al proyecto El Insurgente – HPC Services por permitir el uso de sus recursos.

Índice general

1. Introducción	2
2. Nociones Básicas de Evaluación no Destructiva del Hueso para Diagnóstico de Osteoporosis	3
2.1. Descripción del Hueso	4
2.2. Osteoporosis	5
2.2.1. Diagnóstico	5
2.3. Estado del Arte en el Problema de Inversión de Parámetros	6
3. Formulación del Problema de Estimación de Parámetros en el Modelo de Biot	7
3.1. Teoría de Propagación Acústica de Biot	7
3.1.1. Parámetros del Modelo de Biot	8
3.2. Problema de Estimación de Parámetros en el Modelo de Biot	9
3.3. Estimación Bayesiana de Parámetros	10
3.3.1. Estimadores	12
3.3.2. Construcción de la Función de Verosimilitud con Ruido Aditivo	13
3.3.3. Construcción de la Densidad de Probabilidad Posterior	14
3.3.4. Cuantificación de Incertidumbre en los Parámetros Estimados	14
4. Métodos Numéricos para la Solución del Problema Acoplado	17
4.1. Ecuación de Movimiento en el Fluido	17
4.2. Condiciones de Frontera	18
4.3. Discretización del Problema Mediante Volumen Finito	19
4.3.1. Volumen Finito para el Interior de Ω^f	20
4.3.2. Volumen Finito para el Interior de Ω^b	22
4.3.3. Discretización de las Condiciones de Frontera	23
4.4. Implementación de los Métodos Numéricos para la Solución del Problema Acoplado	24
4.5. Solución al Problema Acoplado	25
5. Métodos de Optimización para Estimados Puntuales y de Intervalo	27
5.1. Problema Inverso con Distribuciones a Priori Gaussianas	28
5.1.1. Estimador MAP	29
5.1.2. Estimados CM y de Intervalo	31
5.2. Problema Inverso con Distribuciones a Priori no Informativas	34
5.2.1. Estimador MAP	36
5.2.2. Estimados CM y de Intervalo	37
5.3. Comparación de Parámetros Estimados	39
6. Correlación Entre los Parámetros del Modelo de Biot y el Correcto Diagnóstico de Osteoporosis	41
7. Conclusiones	43
7.0.1. Trabajo Futuro	43

Capítulo 1

Introducción

La fragilidad en el hueso se desarrolla comúnmente, pero no exclusivamente, debido a una enfermedad denominada osteoporosis, que se caracteriza por el deterioro de masa, material y estructural óseas, generando una creciente susceptibilidad a fracturas. La osteoporosis es más común en mujeres después de la menopausia, pero también puede ser desarrollada en hombres, y puede ocurrir en cualquiera en la presencia de desordenes hormonales particulares y otras enfermedades crónicas o como el resultado de medicaciones. La osteoporosis puede afectar significativamente la esperanza y calidad de vida ya que aproximadamente una de cada dos mujeres y uno de cada cuatro hombres mayores de 50 años presentarán fracturas relacionadas con esta enfermedad en el resto de sus vidas. Los costos se miden por millones de dólares anuales y se espera que estos números crezcan al tener una predicción de 6.3 millones de fracturas de cadera a nivel mundial para el año 2050.

A la fecha, las mediciones de masa ósea (densitometría) sirven como método para evaluar la fragilidad ósea, pero fallan en tomar en cuenta otros aspectos importantes como la fuerza del material o la micro estructura. Las ondas mecánicas como el ultrasonido cuantitativo (QUS) son intrínsecamente adecuadas para explorar las propiedades mecánicas y quizá puedan tener las mejores posibilidades de entre todos los ensayos no destructivos para obtener una estimación no invasiva y mejorada de la fragilidad ósea combinada con ventajas tales como la ausencia de radiación ionizante y un bajo costo.

En la literatura se han usado diversos enfoques para modelar la respuesta acústica del hueso trabecular mediante evaluación ultrasónica. Algunos de estos modelos se basan en técnicas de homogeneización[2] y otros, como en esta tesis se basan en los modelos de Biot[2].

Este trabajo se divide en seis partes. En el primer capítulo se describen los ensayos no destructivos haciendo énfasis en los realizados mediante ultrasonido, así como una descripción más amplia acerca de la osteoporosis y una discusión acerca del estado del arte del problema de inversión de parámetros.

En el segundo capítulo se enuncia el modelo de Biot para describir la propagación ultrasónica en medios porosos, para posteriormente enunciar el problema de estimación de parámetros en el modelo de Biot y finalmente se describen las técnicas bayesianas usadas en el presente trabajo.

En el tercer capítulo se describen los métodos numéricos para resolver el problema de propagación ultrasónica en un medio poroso.

En el cuarto capítulo se muestran los resultados obtenidos al resolver el problema directo usando las técnicas Bayesianas descritas en el capítulo segundo.

El quinto capítulo es una digresión para discutir la correlación entre los parámetros del modelo de Biot y un diagnóstico correcto del estado de osteoporosis.

El sexto capítulo abarca las conclusiones realizadas a lo largo de este trabajo de investigación, así como una propuesta de trabajo futuro para abordar el problema de estimación de parámetros por el método de la ecuación adjunta, que es una propuesta determinista.

Capítulo 2

Nociones Básicas de Evaluación no Destructiva del Hueso para Diagnóstico de Osteoporosis

Un ensayo no destructivo es el proceso de evaluación de materiales en busca de discontinuidades o propiedades del mismo sin afectar su funcionalidad ni propiedades físicas o químicas[1].

Los métodos más frecuentes son los siguientes:

- **Pruebas por partículas magnéticas (MT):**
Se usan uno o más campos magnéticos para localizar discontinuidades en la superficie y la superficie cercana de materiales ferromagnéticos. Cuando el campo magnético encuentra una discontinuidad transversal a la dirección del campo, se produce una fuga de campo magnético, como se muestra en la Fig. 2.1a. Debido a que las líneas de campo magnético no viajan bien en aire, se aplican partículas ferromagnéticas a la superficie del material, y de existir una discontinuidad, se observará que dichas partículas se suspenden en el aire, produciendo un indicador visible.
- **Pruebas radiográficas (RT):**
La radiografía involucra la exposición del objeto de estudio a radiación de tal manera que pase a través del material y llegue a un medio registrador en el lado opuesto al objeto. El principio de este método se muestra en la figura 2.1b.
- **Pruebas visuales (VT):**
Las pruebas visuales son las más comunes en la industria. Como el nombre lo indica, VT involucra la observación visual de la superficie de un objeto de prueba para evaluar la presencia de discontinuidades superficiales y puede realizarse al observar directamente o bien, mejorarse con la ayuda de lentes de aumento, sistemas asistidos por computadora, entre otros. Mal alineamiento de las partes, corrosión y daño físico son sólo algunas de las discontinuidades que se pueden detectar por los examinadores visuales.
- **Pruebas Ultrasónicas:**
En las pruebas ultrasónicas se emiten ondas con frecuencias más allá del audio humano (20 kHz) en la parte inspeccionada. La energía ultrasónica que incide a una interfaz entre dos materiales diferentes ya sea normal u oblicuamente, será parcialmente reflejada y transmitida al otro medio. Es la parte transmitida de la energía la que se usa en los trabajos de inspección.
De los diversos métodos de evaluación ultrasónica los más usados son el pulso-eco y la transmisión directa. El primero corresponde al uso de un sólo transductor para la emisión y recepción de la energía ultrasónica, como se ilustra en la figura 2.1c. En el segundo se usa un emisor separado del receptor como se muestra en la figura 2.1d.

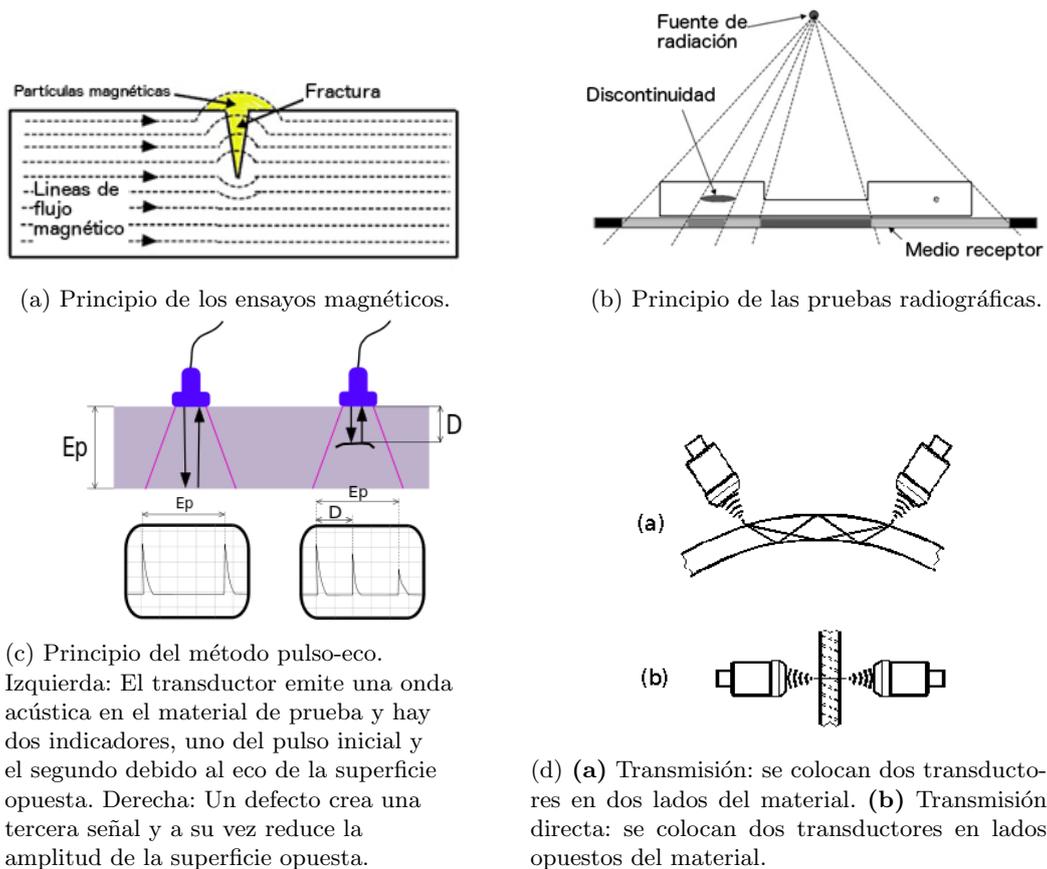


Figura 2.1: Ilustración de algunos ensayos no destructivos.

2.1. Descripción del Hueso

El hueso tiene tres funciones principales: (1) sostener cargas externas (como la gravedad), (2) una actividad metabólica y (3) como protección a órganos vitales (este es el caso del tórax y el cráneo). Por otro lado, el hueso evoluciona a lo largo de su vida útil de acuerdo a diferentes factores tales como las actividades físicas, nutrición, hormonas, medicación, etc. Los huesos adaptan su forma y estructura a su ambiente y especialmente al ambiente biomecánico, este tipo de adaptación puede observarse fácilmente en otros tejidos biológicos. Por ejemplo, el efecto de la actividad física es más rápido y más visible en el tejido muscular.

El hueso se conforma de dos componentes principales:

- Hueso cortical (o compacto) que compone la envolvente externa de todos los huesos. El hueso cortical presenta una estructura densa de baja porosidad (la porosidad típica varía desde algunos puntos porcentuales hasta 15%) que parece compacta al nivel macroscópico.
- El hueso trabecular se halla en la parte interna del hueso. El hueso trabecular se ve como una esponja altamente porosa con una estructura 3D compuesta de varillas conectadas, denominadas trabecula. Encontrándose en el cuerpo humano las cavidades formadas por la red trabecular se encuentran saturadas con medula ósea.

Estos dos tipos de hueso se muestran en la figura 2.2.

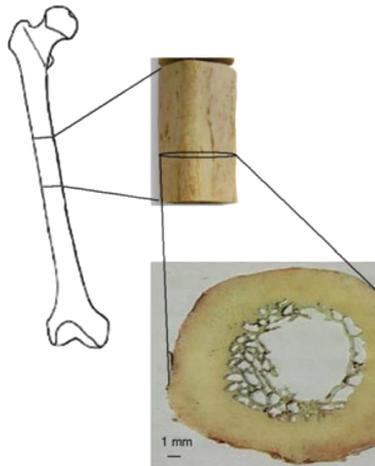


Figura 2.2: Sección transversal de un fémur mostrando la capa cortical externa y el hueso trabecular interior.

2.2. Osteoporosis

La osteoporosis es una enfermedad ósea en la que la densidad y calidad del hueso se reducen, lo que conlleva a una debilidad del esqueleto y un riesgo creciente de fractura, particularmente en la espina dorsal, muñecas, cadera, pelvis y brazos [28]. La calidad ósea engloba un número de propiedades del tejido óseo más allá de la densidad, que gobiernan la resistencia mecánica, tal como la geometría ósea, calidad del colágeno y cristales de hidroxialapatita y presencia de microfracturas, entre otras[29]. La causa principal de la osteoporosis es una deficiencia hormonal y por ende la variedad más frecuente es la osteoporosis post menopausia. La figura 2.3 ilustra la deterioración de la estructura del hueso trabecular y una reducción de masa ósea, lo que conlleva a fragilidad ósea. Se considera que la osteoporosis es un problema importante de salud pública debido al número y consecuencias de fracturas causadas. Al menos el 40 % de mujeres post menopausiales[30] y 15–17 % de los hombres mayores de 50 años [31] presentarán una o más fracturas por el resto de su vida debido a esta enfermedad.

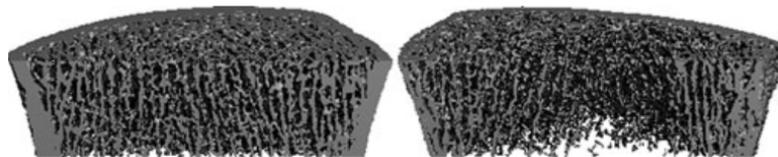


Figura 2.3: Imágenes de tomografía computarizada 3D de alta resolución de una mujer saludable pre menopausia (izquierda) y una paciente con osteoporosis post menopausia (derecha).

2.2.1. Diagnóstico

El diagnóstico de osteoporosis en la práctica clínica se basa en medir la densidad mineral ósea por unidad de área (BMD_a) en la cadera o en la espina lumbar. Este diagnóstico está basado en el concepto de puntuación T[32]. La puntuación T denota la diferencia de un valor x de un individuo y el valor de la media de una población joven de referencia (denotada por el índice Y) y esta diferencia se normaliza por la desviación estándar SD_r de la distribución de la población de referencia, i.e.

$$T = \frac{x - \bar{x}(\text{edad} = \text{edad}_Y)}{SD_r(\text{edad} = \text{edad}_Y)}. \quad (2.1)$$

La organización mundial de la salud usa a la puntuación T basada en la BMD_a ($T-BMD_a$) para categorizar a un sujeto en uno de cuatro grupos[33], mostrados en la tabla 2.1.

Sin embargo existe un traslape sustancial entre los valores de BMD_a para pacientes fracturados y no fracturados, confirmando que hay factores más allá de la BMD_a que tienen un alto impacto en el riesgo de fractura.

La definición actualmente aceptada de osteoporosis considera que no sólo la masa ósea es afectada sino que también factores de la calidad ósea son deteriorados sugiere fuertemente que se necesitan métodos complementarios para evaluar el riesgo a fractura *in vivo*.

Las tecnologías de ultrasonido cuantitativo (QUS) han aumentado el armamento de las tecnologías para evaluación ósea desde 1990 [34], pero aún no son ampliamente aceptadas, en parte debido a la inmadurez técnica y en parte por la falta estandarización entre diferentes enfoques técnicos y entre diferentes fabricantes.

A fin de mejorar la predicción *in vivo* existe una necesidad para una mejor estimación de propiedades mecánicas de hueso cortical y trabecular usando métodos no destructivos. Las investigaciones se encuentran encaminadas hacia una manera de ser capaces de evaluar de manera precisa estas características. El presente trabajo se basa en la idea de recuperar los parámetros estructurales de hueso trabecular mediante una señal obtenida al realizar un ensayo ultrasónico en configuración de transmisión transversal a una muestra ósea. La recuperación o inversión de parámetros se lleva a cabo mediante el enfoque de estimación Bayesiana bajo el supuesto que el modelo de Biot¹ describe correctamente la interacción entre el ultrasonido y el hueso trabecular.

Diagnóstico	T-BMD _a
Normal	$T-BMD_a \geq -1.0$
Baja masa ósea u osteopenia	$-1.0 > T-BMD_a > -2.5$
Osteoporosis	$-2.5 > T-BMD_a$
Osteoporosis establecida	$-2.5 > T-BMD_a$ y al menos una fractura por osteoporosis

Tabla 2.1: Puntuación T basada en BMD_a evaluada por absorción dual de rayos X.

2.3. Estado del Arte en el Problema de Inversión de Parámetros

En [10, 11, 12] se considera el problema de inversión de parámetros para una muestra bidimensional de hueso trabecular en un rango bajo de frecuencias ($f < 100$ KHz). Buchanan et al. recuperan los parámetros ϕ , α , K_b , N^2 .

Por otro lado, en [9] se caracterizan muestras de hueso trabecular al resolver el problema inverso usando señales experimentalmente adquiridas. En este caso el problema directo se resuelve mediante el modelo de Biot modificado por Johnson-Koplik-Dashen para el caso un bloque unidimensional de hueso trabecular saturado con agua. Los parámetros recuperados son ϕ , α , ν_b , E_b y Λ^3 .

En los casos mencionados anteriormente, el problema de optimización es planteado como un problema determinista de optimización de mínimos cuadrados. Por lo que se obtiene el estimador de máxima verosimilitud⁴ y, aunque presentan óptimos globales, son rígidos en el sentido que no se puede integrar de manera natural la información previa que se tiene, por ejemplo rangos físicamente aceptables, resultados de otros experimentos, etc. Sebaa et al. [9] reflexionan que resolver el problema inverso para todos los parámetros del modelo usando sólo datos de la señal transmitida es difícil, si no imposible en parte debido al alto costo computacional de la optimización de la función objetivo y en parte debido a que se necesitan mas datos experimentales para obtener una solución única.

En el presente se trabaja muestra una forma de sobreponerse a la segunda dificultad que permite resolver el problema inverso para todos los parámetros involucrados en el modelo considerado. Y por el enfoque usado se tiene una flexibilidad que permite integrar naturalmente la información previamente adquirida.

¹Ver §3.

²Ver §3.1

³Ver §3.1

⁴Ver §3.3.1.

Capítulo 3

Formulación del Problema de Estimación de Parámetros en el Modelo de Biot

3.1. Teoría de Propagación Acústica de Biot

La teoría de Biot es una forma establecida de predecir la propagación acústica en un material inhomogéneo y fue aplicada originalmente a rocas porosas saturadas con fluido para estudios geofísicos. El modelo de Biot trata el comportamiento individual y acoplado del material y el fluido contenido en los poros. Este modelo predice que la velocidad del sonido y la atenuación en un medio bifásico dependerá de la frecuencia de la onda incidente, las propiedades elásticas del material, porosidad, tortuosidad, y esfuerzos efectivos. La teoría de Biot ha sido aplicada al hueso trabecular con diferentes grados de éxito y, a su vez predice la existencia de tres ondas de propagación, una transversal y dos longitudinales denominadas onda lenta, donde el fluido y el sólido se mueven fuera de fase, y rápida donde el fluido y el sólido se mueven en de fase.

Desde su formulación original en una serie de artículos publicados en un periodo de 20 años, la teoría ha tenido pocas modificaciones las cuales incluyen la introducción de conceptos físicos tales como las longitudes características viscosa y termal así como el concepto de tortuosidad dinámica y estática, introducidos por Johnson y colaboradores[2] ; o bien los parámetros constitutivos locales que se determinan por los experimentos pensados de Biot y Willis[3].

El modelo de Biot se resume en las siguientes ecuaciones de movimiento

$$\rho_{11} \frac{\partial^2 \vec{U}^s}{\partial t^2} + \rho_{12} \frac{\partial^2 \vec{U}^f}{\partial t^2} = \nabla \cdot \sigma - b \frac{\partial}{\partial t} (\vec{U}^s - \vec{U}^f). \quad (3.1a)$$

$$\rho_{12} \frac{\partial^2 \vec{U}^s}{\partial t^2} + \rho_{22} \frac{\partial^2 \vec{U}^f}{\partial t^2} = \nabla s + b \frac{\partial}{\partial t} (\vec{U}^s - \vec{U}^f). \quad (3.1b)$$

$$\sigma = [(P - 2N)e + Q\varepsilon]I + 2N\bar{e}. \quad (3.1c)$$

$$s = Qe + R\varepsilon. \quad (3.1d)$$

donde \vec{U}^s y \vec{U}^f representan los desplazamientos del sólido y el fluido, respectivamente; y

$$\begin{aligned}
e &= \nabla \cdot \vec{U}^s, \\
\varepsilon &= \nabla \cdot \vec{U}^f, \\
\bar{e}_{i,j} &= \frac{2-\delta_{i,j}}{2} \left(\frac{\partial \bar{U}_i^s}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j^s}{\partial x_i} \right), \\
I_{ij} &= \delta_{ij}, \\
\delta_{i,j} &= \begin{cases} 0. & \text{si } i \neq j \\ 1. & \text{si } i = j \end{cases}
\end{aligned}$$

Mientras que P , Q , R son constantes elásticas generalizadas dadas como.

$$P = \frac{(1 - \phi) \left(1 - \phi - \frac{K_b}{K_s}\right) K_s + \phi \frac{K_f}{K_f} K_b}{\Delta} + \frac{4N}{3}. \quad (3.2a)$$

$$Q = \frac{\left(1 - \phi - \frac{K_b}{K_s}\right) \phi K_s}{\Delta}. \quad (3.2b)$$

$$R = \frac{\phi^2 K_s}{\Delta}. \quad (3.2c)$$

$$\Delta = 1 - \phi - \frac{K_b}{K_s} + \phi \frac{K_s}{f}. \quad (3.2d)$$

donde ϕ , K_f , K_s and K_b son la porosidad del sólido, módulo de volumen del fluido, módulo de volumen del sólido y el módulo de volumen del marco esquelético, respectivamente; por otro lado N es el módulo de corte del sólido.

Los otros tres parámetros, conocidos como coeficientes másicos están dados por

$$\rho_{11} + \rho_{12} = (1 - \phi) \rho_s. \quad (3.3a)$$

$$\rho_{22} + \rho_{12} = \phi \rho_f. \quad (3.3b)$$

$$\rho_{12} = -(\alpha - 1) \phi \rho_f. \quad (3.3c)$$

donde ρ_s , ρ_f son las densidades del sólido y el fluido, respectivamente. ρ_{11} es la densidad efectiva del sólido moviéndose a través del fluido, ρ_{22} es la densidad efectiva del líquido moviéndose a través del sólido, ρ_{12} es el arrastre inercial que el sólido ejerce en el fluido; α es la tortuosidad del sólido y finalmente b es un parámetro que depende de la frecuencia de la onda incidente y permite tomar en cuenta las pérdidas de energía en el sistema fluido-sólido.

3.1.1. Parámetros del Modelo de Biot

Uno de los puntos críticos para el uso de los modelos de Biot es la obtención de valores reales de los parámetros que describen las características del medio de propagación. Estos parámetros pueden ser medidos. Sin embargo, debido a la complejidad de tales mediciones, el modelo se ha aplicado muchas veces usando valores de los parámetros hallados en la literatura (a veces de diferentes materiales), o estimados de datos experimentales mediante procedimientos de optimización. La tabla 3.1 reporta valores de parámetros usados por diferentes autores para calcular predicciones del modelo.

La porosidad puede ser calculada por micro tomografía 3-D (μ CT) [8, 13] o medida usando el principio de Arquímedes [4, 8]. Los valores típicos de porosidad para hueso trabecular humano varían entre 55 % y 95 %, dependiendo de sitio anatómico y estado del hueso.

Solo en algunos trabajos se han reportado valores de tortuosidad para hueso trabecular humano. Se ha podido medir mediante espectroscopía eléctrica, reflectometría de ondas o estimada de la porosidad [4, 5]. Los valores reportados se encuentran en el intervalo [1.01, 1.5][2].

Las propiedades elásticas del tejido óseo, que son requeridas para estimar las propiedades elásticas macroscópicas del marco poroso saturado, pueden ser medidas usando microscopía de fuerza atómica, nanoindentación o microscopía acústica. Con lo anterior se pueden usar modelos micromecánicos para calcular los valores de los

Parámetro		Hosokawa y Otani [4] b.f.	Fellah et al. [7] h.f.	Wear et al. [8] h.c.	Sebaa et al. [9] h.f.	Pakula et al. [13] h.f.
Módulo de Volumen del fluido (GPa)	K_f	$2^{(m)}$	$2.28^{(w)}$	$2.2^{(w)}$	$2.28^{(w)}$	$2.25^{(w)}$
Módulo de Young de la fase sólida (GPa)	E_s	22	–	8.3	13	13
Radio de Poisson de la fase sólida	ν_s	0.32	–	0.3	0.3	0.3
Módulo de Volumen de la fase sólida (GPa)	K_s	$20.37^{(1)}$	20	$6.9^{(1)}$	$10.8^{(1)}$	$10.8^{(1)}$
Porosidad	ϕ	0.79	0.77	0.79	0.79	0.79
Módulo de Young de el marco trabecular	E_b	$2.25^{(2)}$	–	$0.54^{(2)}$	$2.47^{(Opt.)}$	–
Radio de Poisson de el marco trabecular	ν_b	0.32	–	0.23	$0.25^{(Opt.)}$	0.24
Módulo de Volumen del marco sólido (GPa)	K_b	$2.08^{(3)}$	4	$3.3^{(3)}$	$1.64^{(3)}$	0.67
Módulo de corte del sólido (GPa)	N	0.85	1.7	0.22	0.99	0.42
Tortuosidad	α	1.06	1.01	1.06	1.05	1.5
Densidad del fluido (Kg/m^3)	ρ_f	930	1000	1000	1000	1000
Densidad del sólido (Kg/m^3)	ρ_s	1960	1960	1800	1990	1800

Tabla 3.1: Parámetros del modelo de Biot. En el caso de Fellah et al.[7] se toman los datos de la muestra $M2$. Opt.: Valor obtenido mediante optimización; m: médula; w: agua; b.f.: femur bovino; h.f.: femur humano; h.c.: calcáneo humano

(1) Calculado usando la fórmula $K_s = E_s / (3(1 - 2\nu_s))$;

(2) Calculado usando la fórmula $E_b = E_s(1 - \phi)^n$;

(3) Calculado usando la fórmula $K_b = E_b / (3(1 - 2\nu_b))$;

módulos de volumen y de corte del marco sólido.

Finalmente, las características de la médula, una mezcla de médulas roja (hematopoyética) y amarilla (grasa) [6], cuyas características (densidad y viscosidad) se toman de la literatura. La mayoría de los estudios se han realizado con hueso trabecular saturado de agua. El uso de especímenes saturados de agua esta motivado por razonamientos prácticos, tales como la preservación, manipulación del espécimen, y facilidad de experimentación. Pocos estudios han tratado el caso de especímenes saturados con medula.

3.2. Problema de Estimación de Parámetros en el Modelo de Biot

Suponer que se tiene un arreglo de transmisión directa entre una muestra de material poroso, como se muestra en la figura 3.1; el transductor receptor obtendrá una señal como la mostrada en la figura 3.2. El problema de optimización consiste en minimizar la discrepancia entre dicha señal y una obtenida por el modelo de Biot. Lo anterior, se logra al determinar las propiedades mecánicas del medio poroso que las generó. De manera más informal:

“Dada una señal de ultrasonido propagado en un medio poroso, determinar las propiedades del material que la generó.”

Al suponer conocido el fluido que satura al medio poroso, entonces las propiedades que se deben determinar

son:

$$u = (\phi, \alpha, K_s, K_f, K_b, N, \rho_s,) \quad (3.4)$$

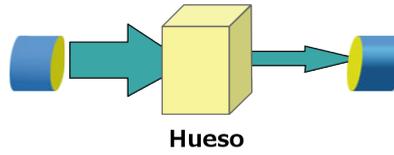


Figura 3.1: Transmisión directa en un medio poroso.

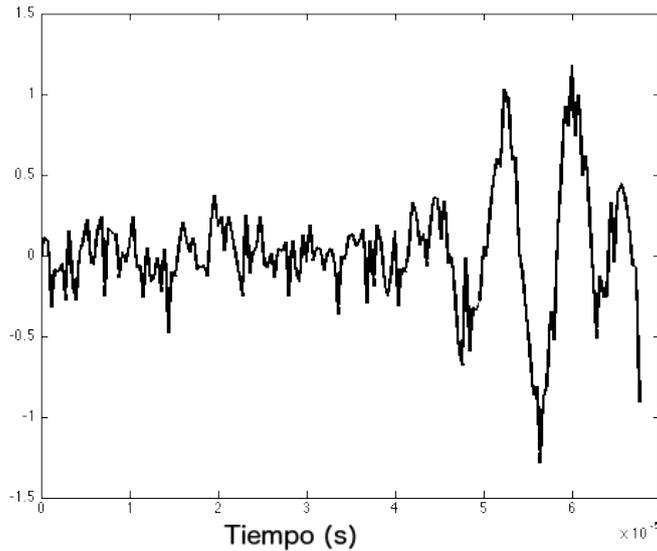


Figura 3.2: Señal ruidosa obtenida en el receptor.

En el presente trabajo se considerará el enfoque Bayesiano para resolver el problema de optimización.

3.3. Estimación Bayesiana de Parámetros

En aplicaciones es frecuente el interés en resolver problemas inversos: hallar u , una entrada a un modelo matemático, dada y una observación de (algunas componentes de, o funciones de) la solución al modelo. Se tiene una ecuación de la forma

$$y = \mathcal{G}(u) \quad (3.5)$$

y resolver para $u \in \mathbb{R}^p$ al suponer conocido $y \in \mathbb{R}^d$. Donde \mathcal{G} se denomina como el *operador de observación*; mientras que a y se le denota como los *datos*.

Es común que los problemas inversos sean mal planteados: puede no haber una solución o la solución puede no ser única y depender sensiblemente de y . Una forma de abordar el problema en esta situación es resolverlo mediante el problema de optimización de mínimos cuadrados, para la norma $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^d}$ en \mathbb{R}^d ,

$$\arg \min_{u \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{2} \|y - \mathcal{G}(u)\|_{\mathbb{R}^d}^2. \quad (3.6)$$

En dimensión infinita este problema puede resultar ser difícil de resolver, ya que puede poseer sucesiones minimizadoras $u^{(n)}$ que no convergen a un límite en \mathbb{R}^p , o puede poseer diversos mínimos y depender sensiblemente de los datos y . Mientras que en dimensión finita si se minimiza en un hiperrectángulo cerrado, y la función

objetivo es continua, siempre se alcanza el mínimo y el máximo aunque puede no ser único. Estos problemas se pueden mejorar al resolver el siguiente problema de minimización regularizada

$$\arg \min_{u \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{2} \|y - \mathcal{G}(u)\|_{\mathbb{R}^d}^2 + \frac{1}{2} \|u - m_0\|_{\mathbb{R}^p}^2. \quad (3.7)$$

donde $m_0 \in \mathbb{R}^p$.

Sin embargo la elección de el punto m_0 es arbitraria si no se realiza ninguna suposición adicional del modelo. En el presente trabajo se usa el enfoque estadístico para resolver el problema inverso, en el que los problemas anteriormente mencionados pueden expresarse y abordarse de manera explícita.

La filosofía detrás de los métodos estadísticos de inversión consiste en reescribir el problema inverso en una búsqueda estadística de información. Se tienen cantidades directamente observables y otras que no se pueden observar. En los problemas inversos, algunas de las cantidades no observables son de interés primario y estas cantidades dependen de las observables mediante modelos. El objetivo de la teoría de inversión es extraer información y evaluar la incertidumbre acerca de las variables basándose en todo el conocimiento disponible del proceso de medición así como como información y modelos de las incógnitas que se encuentran disponibles antes de las mediciones.

El enfoque de inversión estadística se basa en los siguientes principios

- Todas las variables incluidas en el modelo se modelan como variables aleatorias.
- La aleatoriedad describe el grado de información concierne a las realizaciones de las variables aleatorias.
- El grado de información concierne a estos valores se codifica en distribuciones de probabilidad.
- La solución al problema inverso es la distribución de probabilidad posterior.

El último punto, en particular, hace que el enfoque estadístico sea diferente del tradicional ya que los métodos de regularización como (3.7) producen estimados individuales de las incógnitas, mientras que el método estadístico produce una distribución que puede ser usada para obtener estimados que tienen diferentes probabilidades. Entonces la pregunta correcta para formular no es '¿Cuál es el valor de la variable?', sino '¿Que información se tiene acerca de la variable?'.
 Los métodos clásicos de regularización producen estimados individuales al remover a propósito el mal planteamiento del problema, mientras que el método estadístico no sólo produce estimados individuales, sino que es un intento para remover el mal planteamiento al replantear el problema inverso como una extensión bien planteada en un espacio de distribuciones de probabilidad. Al mismo tiempo permite ser explícito acerca de la información inicial, que comúnmente se encuentra escondida en los esquemas de regularización. Para una discusión más profunda de las similitudes y diferencias entre el método estadístico y el clásico consultar [22].

Como ya se mencionó, en los problemas inversos estadísticos, todos los parámetros se modelan como variables aleatorias. Siguiendo la notación usual [22, 23], se denotan las variables aleatorias con letras mayúsculas y sus realizaciones por letras minúsculas. Entonces, el modelo (3.5) lleva a la relación

$$Y = \mathcal{G}(U). \quad (3.8)$$

Esta es una relación entre dos variables aleatorias U y Y , y consecuentemente las distribuciones de probabilidad dependen una de la otra. Sin embargo, la teoría de inversión estadística puede prescindir de un modelo como (3.8), ya que se basa en relaciones entre distribuciones de probabilidad[22]. Antes de proseguir, se introducirá un poco de la nomenclatura encontrada en la literatura.

Se denota a la variable aleatoria observable directamente Y como la *medición*. Mientras que a la variable aleatoria no observable U que es de interés primario como *incógnita*.

Suponer que antes de realizar la medición Y , se tiene alguna información de la variable U . En la teoría Bayesiana se supone que esta información se puede codificar en una densidad de probabilidad $u \mapsto \pi_0(u)$, denotada como la densidad a priori. El nombre se refiere a que expresa lo que se sabe acerca de las incógnitas antes de la medición.

Por otro lado, supóngase que, después de analizar las configuraciones de la medición así como toda la información disponible acerca de las variables, se ha encontrado la densidad conjunta de U y Y , que se denotará como $\pi(u,y)$. Entonces, la densidad marginal de la incógnita U debe ser[23]

$$\pi_0(u) = \int_{\mathbb{R}^d} \pi(u,y) dy. \quad (3.9)$$

Si, por otro lado, se conociera el valor de la incógnita, esto es $U = u$, la densidad de probabilidad condicional de Y dada esta información sería

$$\pi(y|u) = \frac{\pi(u,y)}{\pi_0(u)}, \text{ si } \pi_0(u) \neq 0. \quad (3.10)$$

La probabilidad condicional de Y se denomina la *función de verosimilitud*, y expresa la posibilidad de diferentes resultados en la medición con $U = u$.

Finalmente, suponer que los datos medidos $Y = y$ son dados. La distribución de probabilidad condicional

$$\pi(u|y) = \frac{\pi(u,y)}{\pi(y)}, \text{ si } \pi(y) = \int_{\mathbb{R}^p} \pi(u,y) du \neq 0. \quad (3.11)$$

se denomina la *distribución posterior* de U . Esta distribución expresa lo que se conoce acerca de U después de haber realizado la observación $Y = y$.

En el enfoque Bayesiano, el problema inverso se expresa de la siguiente manera: *Dados los datos $Y = y$, hallar la distribución de probabilidad condicional $\pi(u|y)$ de la variable U .*

Las notaciones anteriores y algunos resultados que se encuentran en la literatura[24] se resumen en el siguiente teorema que se denomina el *Teorema de Bayes para problemas inversos*.

Teorema 3.3.1. (Teorema de Bayes para problemas inversos) *Suponer que la variable aleatoria $U \in \mathbb{R}^p$ tiene una densidad de probabilidad conocida $\pi_0(u)$ y que los datos consisten en los valores observados y de una variable aleatoria observable $Y \in \mathbb{R}^d$ tal que $\pi(y) > 0$. Entonces la distribución de probabilidad posterior de U , dados los datos y es*

$$\pi_{\text{post}}(u) = \pi(u|y) = \frac{\pi(y|u)\pi_0(u)}{\pi(y)}. \quad (3.12)$$

En (3.12), la densidad marginal

$$\pi(y) = \int_{\mathbb{R}^p} \pi(u, y) du = \int_{\mathbb{R}^p} \pi(y|u)\pi_0(u) du \quad (3.13)$$

hace las veces de una constante de normalización y usualmente es de poca importancia. Y, aunque en principio es posible que $\pi(y) = 0$, esto es, se tienen datos con probabilidad cero, esto implicaría que los modelos subyacentes no son consistentes con la realidad.

En resumen, al observar la fórmula de Bayes (3.12), se puede decir que la solución de un problema inverso se puede dividir en tres tareas:

- Basados en toda la información a priori de las incógnitas¹ U , hallar una densidad de probabilidad a priori π_0 que refleje esta información.
- Hallar la función de verosimilitud $\pi(y|u)$ que describe la relación interna entre las variables y las incógnitas.
- Desarrollar métodos para explorar la densidad de probabilidad posterior.

Cada una de estas tareas puede representar un problema difícil por sí misma.

3.3.1. Estimadores

En la sección anterior, la solución a el problema inverso se definió como la distribución posterior. Y con una distribución posterior conocida se pueden calcular *estimados puntuales* y *propagación* o *estimados de intervalo*. Los estimados puntuales responden a preguntas del tipo “*Dados los datos y y la información a priori, ¿Cuál es el valor más probable de las incógnitas U ?*.” Mientras que los estimados de intervalo responden preguntas como ‘*Dadas la información a priori y los datos ¿En que intervalos se encuentran los valores de las incógnitas con el 90% de probabilidad?*.’

Uno de los estimados estadísticos más populares es el estimador máximo a posteriori (MAP). Dada la densidad de distribución posterior $\pi(u|y)$ de las incógnitas $U \in \mathbb{R}^p$, el estimador MAP u_{MAP} satisface

$$u_{\text{MAP}} = \arg \max_{u \in \mathbb{R}^p} \pi(u|y). \quad (3.14)$$

¹Por ejemplo resultados de otros experimentos, rangos físicamente aceptables, etc.

siempre que tal maximizador exista. Nótese que aún cuando exista, puede no ser único. La posible no existencia y no unicidad indica que el enfoque clásico para obtener un estimador individual puede ser no satisfactorio.

Por otro lado, el problema de hallar un estimador MAP requiere resolver un problema de optimización y se ha encontrado que en algunos casos esto conlleva al mismo problema computacional que con los métodos clásicos de regularización. Sin embargo, es importante no mezclar estos dos enfoques, ya que con el enfoque estadístico el estimador puntual representa solo parte de la información acerca de las incógnitas.

Otro estimador puntual común es la *media condicional* (CM) de las incógnitas U condicionadas a los datos y , definida como

$$u_{\text{CM}} = E\{u|y\} = \int_{\mathfrak{R}^p} u\pi(u|y)du. \quad (3.15)$$

siempre que la integral converja. Hallar la CM generalmente implica resolver un problema de integración, pero presenta la ventaja técnica de que las propiedades de suavidad de la distribución posterior no son tan cruciales como en el problema de estimación del MAP. Mientras que el principal problema técnico de estimar CM es que la integración se lleva a cabo en un espacio que típicamente es de alta dimensión, en el que los métodos comunes de cuadratura no son aplicables. En secciones posteriores se discutirá una forma alternativa para realizar dicha integración.

Antes de pasar a los estimados de intervalo, se menciona el que quizá es el más popular en estadística, el de *máxima verosimilitud*. Este estimador u_{ML} responde a la pregunta '¿Que valor de las incógnitas hace que sea posible producir los datos medidos y?', y se define como

$$u_{\text{ML}} = \arg \max_{u \in \mathfrak{R}^p} \pi(y|u). \quad (3.16)$$

siempre que tal maximizador exista. Este es un estimador no Bayesiano, y desde el punto de vista de los problemas inversos mal planteados, poco útil: Comúnmente corresponde a resolver un problema inverso clásico sin regularización.

Un ejemplo de estimador de intervalo es el *conjunto de credibilidad Bayesiana*.

Dada P , $0 < P < 100$, el conjunto de credibilidad D_P de $P\%$ se define mediante las condiciones

$$\mu(D_P|y) = \int_{D_P} \pi(u|y)du = P/100, \quad \pi(u|y)|_{u \in \partial D_P} = \text{cte}. \quad (3.17)$$

Entonces, la frontera de D_P es una hiper superficie de equiprobabilidad que encierra $P\%$ de la masa de la distribución posterior.

También son de interés los intervalos simétricos de una credibilidad dada con respecto a componentes individuales de las incógnitas. Al definir la densidad marginal de la k -ésima componente U_k de U ,

$$\pi(u_k|y) = \int_{\mathfrak{R}^p} \pi(u_1, \dots, u_p|y)du_1 \dots du_{k-1}du_{k+1} \dots du_p. \quad (3.18)$$

para una P dada, $0 < P < 100$, se define $I_k(P) = [a, b] \subset \mathfrak{R}$, donde los puntos finales a y b se determinan de las condiciones

$$\int_{-\infty}^a \pi(u_k)du_k = \int_b^{\infty} \pi(u_k)du_k = P/200. \quad (3.19)$$

Entonces, $I_k(P)$ es el intervalo que contiene $P\%$ de la masa de la densidad marginal de U_k con la misma masa de probabilidad en las dos colas de la función de densidad.

3.3.2. Construcción de la Función de Verosimilitud con Ruido Aditivo

Es común que el ruido de las mediciones se modele como aditivo y mutuamente independiente de las incógnitas U . En los métodos clásicos de regularización, la independencia usualmente se supone implícitamente. Entonces el modelo estocástico es de la forma

$$Y = \mathcal{G}(U) + E. \quad (3.20)$$

donde E es una variable aleatoria cuyas propiedades estadísticas se pueden conocer, pero cuyos valores concretos se desconocen; en la literatura E se denomina ruido de observación. Suponer que la distribución de probabilidad del ruido E se conoce, esto es,

$$\mu_E(B) = P\{E \in B\} = \int_B \pi_{\text{ruido}}(e)de. \quad (3.21)$$

Si se toma $U = u$, la suposición de independencia mutua de U y E asegura que la densidad de probabilidad de E permanece inalterada cuando se condiciona a $U = u$. Entonces se tiene que Y condicionada a $U = u$ se distribuye como E y su densidad de probabilidad se encuentra trasladada por $\mathcal{G}(u)$, esto es, la función de verosimilitud es

$$\pi(y|u) = \pi_{\text{ruido}}(y - \mathcal{G}(u)). \quad (3.22)$$

Esta función de verosimilitud se usa para construir la densidad de probabilidad posterior $\pi_{\text{post}}(u)$ en la siguiente sección.

3.3.3. Construcción de la Densidad de Probabilidad Posterior

Usando la fórmula de Bayes (3.12) se tiene

$$\pi_{\text{post}}(u) = \frac{\pi_{\text{ruido}}(y - \mathcal{G}(u))\pi_0(u)}{\int_{\mathbb{R}^p} \pi_{\text{ruido}}(y - \mathcal{G}(u))\pi_0(u)du}. \quad (3.23)$$

Entonces

$$\pi_{\text{post}}(u) \propto \rho(y - \mathcal{G}(u))\pi_0(u). \quad (3.24)$$

En las aplicaciones es común que π_0 y el ruido de observaciones se modelen mediante distribuciones gaussianas, i.e. si $\eta \sim \mathcal{N}(0, B)$ y $\pi_0 = \mathcal{N}(m_0, \Sigma_0)$, entonces de (3.24) se tiene

$$\pi_{\text{post}}(u) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}|B^{-1/2}(y - \mathcal{G}(u))|^2 - \frac{1}{2}|\Sigma_0^{-1/2}(u - m_0)|^2\right) \quad (3.25)$$

El problema (3.25) es una forma generalizada de (3.7), sin embargo vale la pena notar que en el enfoque Bayesiano el punto m_0 tiene una interpretación clara en términos de los estadísticos del ruido de observaciones y la densidad de probabilidad a priori. En contraste, este punto es algo arbitrario en el enfoque clásico.

3.3.4. Cuantificación de Incertidumbre en los Parámetros Estimados

Una vez obtenido un estimador puntual como se esbozó en §3.3.1, surge la cuestión de como obtener un estimador de intervalo para cada una de las componentes de U , i.e. marginalizar $\pi_{\text{post}}(u)$ y hallar la distribución de parámetros que es consistente con y . Esta marginalización se realiza al calcular el valor esperado, donde el valor esperado de una función $f(u)$ es dado como

$$E[f(u)|y] = \frac{\int f(u)\pi_0(u)\pi(y|u)du}{\int \pi_0(u)\pi(y|u)du}. \quad (3.26)$$

La integración analítica de esta expresión es imposible en la mayoría de las aplicaciones. Para este propósito se han propuesto diversos métodos de muestreo, una clase efectiva de ellos, conocida como técnicas Markov Chain Monte Carlo (MCMC) es la usada en el presente trabajo.

Cálculo de Valores Esperados

Para entender como resolver el problema del cálculo de valores esperados, se reescribirá el problema en términos más generales. Sea X una variable aleatoria, con distribución $\pi(\cdot)$, entonces la esperanza de $f(X)$ será

$$E[f(X)] = \frac{\int f(x)\pi(x)dx}{\int \pi(x)dx}. \quad (3.27)$$

para alguna función de interés $f(\cdot)$. En general se permite que la distribución de X se conoce hasta una constante de normalización, esto es $\int \pi(x)dx$ es desconocida.

Integración de Monte Carlo y MCMC

La integración de Monte Carlo evalúa $E[f(x)]$ al extraer muestras $\{X_t, t = 1, \dots, n\}$ de $\pi(\cdot)$ y entonces aproximar

$$E[f(X)] \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i). \quad (3.28)$$

Entonces la media poblacional de $f(X)$ se estima por una media muestral. Cuando las muestras $\{X_t\}$ son independientes, la ley de los grandes números asegura que la aproximación puede hacerse tan precisa como se desee al incrementar el tamaño de la muestra n .

En general, al extraer muestras $\{X_t\}$, independientemente de $\pi(\cdot)$ no es realizable, ya que $\pi(\cdot)$ puede no ser una distribución común. Sin embargo la muestra $\{X_t\}$ puede ser generada por cualquier proceso que aproximadamente extraiga muestras a través del soporte de $\pi(\cdot)$ en las proporciones correctas. Una forma de hacer esto es mediante una cadena de Markov que tiene a $\pi(\cdot)$ como su distribución estacionaria, esto es el método MCMC. Suponer que se genera una sucesión de variables aleatorias $\{X_0, X_1, X_2, \dots\}$, tal que para cada tiempo $t \geq 0$, el siguiente estado X_{t+1} se extrae de una distribución $P(X_{t+1}|X_t)$ que depende únicamente del estado actual de la cadena. Esto es, dado X_t , el siguiente estado X_{t+1} no dependerá de la historia de la cadena $\{X_0, X_1, X_2, \dots, X_{t-1}\}$. A esta sucesión se le denomina una cadena de Markov y $P(\cdot|\cdot)$ es el kernel de transición de la cadena.

Al observar las suposiciones de la cadena surge la pregunta: '¿Cómo afecta el estado X_0 al estado X_t ?' Esta pregunta está relacionada con la distribución de X_t dado X_0 , que se denota como $P^{(t)}(X_t|X_0)$ y bajo condiciones de regularidad, la cadena gradualmente 'olvidará' su estado inicial, por lo que $P^{(t)}(X_t|X_0)$ eventualmente convergerá a una distribución estacionaria (o invariante) única, que no dependerá de t ni de X_0 [24]. Denotando a esta distribución como $\varphi(\cdot)$, cuando t incrementa, los puntos muestreados $\{X_t\}$ se verán como muestras de $\varphi(\cdot)$. Por lo que después de m iteraciones², los puntos $\{X_t; t = m+1, \dots, n\}$ serán aproximadamente muestras de $\varphi(\cdot)$. Las primeras m muestras se descartan y se obtiene el estimador

$$\bar{f} = \frac{1}{n-m} \sum_{t=m+1}^n f(X_t). \quad (3.29)$$

Que se denomina *promedio ergódico*. La convergencia al valor esperado requerido se asegura mediante el teorema ergódico[24].

El promedio ergódico muestra como una cadena de Markov se puede usar para estimar $E[f(X)]$, donde la esperanza se toma sobre la distribución estacionario $\varphi(\cdot)$ y se puede mostrar que cualquier distribución propuesta $q(\cdot|\cdot)$ bajo un esquema MCMC tendrá como distribución estacionaria a $\pi(\cdot)$ [24].

Muestreadores Grupales con Invariancia Afín

Para realizar el muestreo del método MCMC se usó el módulo de python `emcee`[20], mismo que implementa un método MCMC que cuyo desempeño es invariante ante transformaciones afines.

La idea detrás de este módulo yace en la necesidad de extraer muestras de una variable aleatoria Y , por lo que se considera un grupo de L muestreadores MCMC (o caminantes[19]) $\vec{X} \in \mathfrak{R}^L$. Donde cada caminante $X_i \in \mathfrak{R}^p$, es decir, pertenece al espacio de los parámetros.

Cada caminante comienza en un punto arbitrario válido y a partir de ahí exploraran el espacio de parámetros siguiendo la regla de 'mover y estirar'[19] que consiste en escoger aleatoriamente a un caminante y actualizar su posición mediante MCMC. Esta nueva posición no depende sólo de la anterior, sino que también depende de la posición actual de los caminantes. Por lo que el resto de los caminantes se quedan fijos. Una representación esquemática de este movimiento se encuentra en la figura 3.3.

Para una amplia descripción del método consultar [19, 20].

²A este número se le denomina en la literatura como *burn-in*.

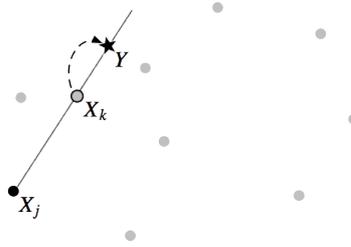


Figura 3.3: Regla de mover y estirar. Los puntos brillantes representan a los caminantes que no participan en este movimiento. La propuesta se genera al estirar a lo largo de la línea recta que conecta X_j con X_k

Capítulo 4

Métodos Numéricos para la Solución del Problema Acoplado

En el presente trabajo se emplea una configuración 2D del problema mostrado en la figura 3.1, misma que se presenta en la figura 4.1 y asume que las ondas propagadas en el fluido se propagan sin reflexiones en la frontera.

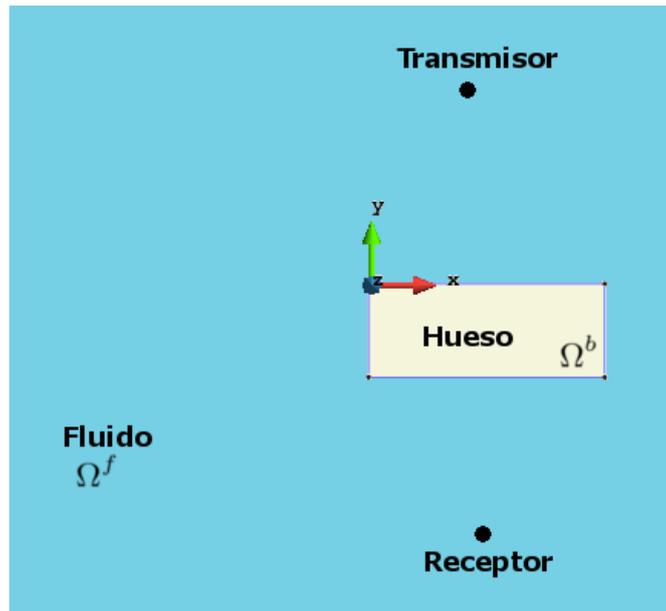


Figura 4.1: Configuración usada.

La notación de la figura 4.1 es que el dominio ocupado por el fluido se denota como Ω^f , mientras que el espacio ocupado por el medio poroso saturado con el fluido será Ω^b y las fronteras entre estos dos medios se denotan como Γ^N , Γ^S , Γ^E y Γ^W . De estas fronteras, Γ^N y Γ^S son paralelas al eje horizontal (y por ende normales al vertical), mientras que Γ^E y Γ^W son el caso contrario.

4.1. Ecuación de Movimiento en el Fluido

El fluido que ocupa el dominio Ω^f se modela como uno acústico cuya densidad y módulos principales en equilibrio son ρ y K_f , respectivamente. Al usar la teoría acústica lineal y al despreciar las fuerzas externas, la ecuación de onda para el fluido en el dominio Ω^f se puede expresar en términos del campo de presiones $P(\mathbf{x}, t)$ de la forma

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - \nabla^2 P = \frac{\partial Q}{\partial t}, \quad \forall \vec{x} \in \Omega^f. \quad (4.1)$$

donde la constante c es la velocidad acústica en Ω^f y se define como $\rho c^2 = K$, por otro lado, $Q(\mathbf{x}, t)$ representa la densidad de la fuente (emisor), que es una fuente impulsiva que se coloca en el punto \mathbf{x}^s , y se define como

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \rho F(t) \delta(x - x^s) \delta(y - y^s). \quad (4.2)$$

donde $F(t)$ es una función real, escalar y $\delta(\cdot)$ es la función delta de Dirac.

En el dominio Ω^f , el vector de velocidad $\vec{v}(\mathbf{x}, t)$, está relacionado con el gradiente del campo de presión mediante la ecuación de Euler

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \nabla P = \vec{0}. \quad \forall \vec{x} \in \Omega^f. \quad (4.3)$$

4.2. Condiciones de Frontera

En un cubo unitario del medio de Biot, $\sigma_{i,j}$ y s representan las fuerzas actuando en las porciones sólida y fluida de cada lado del cubo, respectivamente. El escalar s se relaciona con la presión del fluido P de acuerdo a

$$s = -\phi P. \quad (4.4)$$

Una superficie de discontinuidad se define como una superficie donde debido a un cambio brusco de la porosidad, el fluido o ambos, ocurre una discontinuidad en los coeficientes elásticos que describen el medio.

Algunos ejemplos donde la superficie de discontinuidad está bien definida son:

- Un medio poroso que contiene dos fluidos inmiscibles.
- Un fluido que satura un medio poroso con un gran cambio de porosidad a lo largo de una superficie dada.

Siempre que la superficie de discontinuidad esté bien definida, se pueden establecer sus condiciones de frontera. Se define al vector de desplazamiento relativo \vec{w} definido como

$$\vec{w} = \phi(\vec{U}^f - \vec{U}^s) \quad (4.5)$$

El vector w representará el flujo del fluido relativo al sólido, medido en términos de volumen por unidad de área del medio volumétrico. En otras palabras, \vec{w} es la diferencia entre el desplazamiento promedio del fluido en cada cara de un cubo unitario de agregado y el desplazamiento correspondiente para un cubo unitario de material sólido.

En general se tendrán tres casos de interfaces:

- 1 Dos medios porosos en contacto.
- 2 Un medio poroso en contacto con un sólido.
- 3 Interfaz entre un fluido y un medio poroso.

Estos tres tipos de interfaz se muestran de manera genérica en la figura 4.2

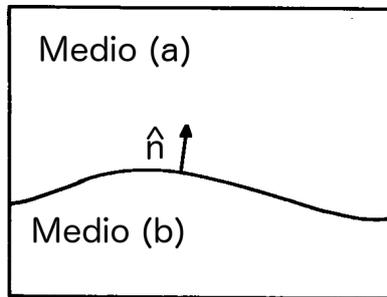


Figura 4.2: Interfaz entre dos medios (a) y (b). \hat{n} representa el vector normal a la superficie.

En [18] se obtienen las condiciones de frontera para los tres casos anteriores. Estas condiciones se obtienen al suponer que los esfuerzos totales en dos medios porosos se deben conservar, así como la presión en los fluidos, que el vector de desplazamiento en sólidos es continuo y que la componente normal del desplazamiento relativo es continua. Matemáticamente estas suposiciones son

$$\hat{n}_i \cdot (\sigma_{ij}^a + s^a \delta_{ij}) = \hat{n}_i \cdot (\sigma_{ij}^b + s^b \delta_{ij}). \quad (4.6a)$$

$$\frac{s^a}{\phi^a} = \frac{s^b}{\phi^b}. \quad (4.6b)$$

$$\vec{U}^{s,a} = \vec{U}^{s,b}. \quad (4.6c)$$

$$\hat{n}_i \cdot \vec{w}_i^a = \hat{n}_i \cdot \vec{w}_i^b. \quad (4.6d)$$

respectivamente. Donde el superíndice medio a o medio b .

Al tomar el límite $\phi \rightarrow 0$ ($\phi \rightarrow 1$) se tienen las condiciones de frontera entre un medio poroso y un sólido elástico (fluido). Estos resultados se resumen en la tabla 4.1.

Dos Medios de Biot	Medio de Biot y Sólido	Medio de Biot y Fluido
$\hat{n}_i [\sigma_{ij}^a + s^a \delta_{ij} - \sigma_{ij}^b - s^b \delta_{ij}] = 0$	$\hat{n}_i [\sigma_{ij}^a + s^a \delta_{ij} - \Sigma_{ij}^b] = 0$	$\hat{n}_i [\sigma_{ij}^a + s^a \delta_{ij} - s^b \delta_{ij}] = 0$
$s_a \phi_b = s_b \phi_a$	$s_a = \phi_a \Sigma_{ij}^b \hat{n}_i \hat{n}_j$	$s_a = \phi_a s_b$
$\vec{U}^{s,a} = \vec{U}^{s,b}$	$\vec{U}^{s,a} = \vec{U}^{s,b}$	$\hat{n}_i [\phi_a \vec{U}_i^{f,a} + (1 - \phi_a) \vec{U}_i^{s,a} - \vec{U}_i^{f,b}] = 0$
$\hat{n}_i [\vec{w}_i^a - \vec{w}_i^b] = 0$	$\hat{n}_i \cdot \vec{w}_i^a = 0$	

Tabla 4.1: Condiciones de frontera para la interfaz entre dos medios (a) y (b). Σ representa el tensor de esfuerzos en el sólido.

En el presente trabajo se usan las condiciones de frontera para un medio de Biot y un fluido, mostradas en 4.1. En las interfaces (Γ^N , Γ^S , Γ^E y Γ^W) se debe cumplir

$$\left. \begin{aligned} s &= -\phi P \\ \sigma \vec{n}^i &= -(1 - \phi) P \vec{n}^i \end{aligned} \right\} \forall \vec{x} \in \Gamma^i \ (i = N, S, E, W). \quad (4.7)$$

donde \vec{n}^i es el vector normal unitario a Γ^i que apunta desde el medio poroso Ω^b hacia el fluido.

Calculando la segunda derivada temporal de la última condición de frontera en 4.1 y reordenando se obtiene

$$\frac{\partial^2 \vec{w}}{\partial t^2} \cdot \vec{n}^i = \frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{v} - \frac{\partial \vec{U}^s}{\partial t} \right) \cdot \vec{n}^i. \quad \forall \vec{x} \in \Gamma^i \ (i = N, S, E, W). \quad (4.8)$$

donde \vec{v} se define en (4.3), y al substituir dicha ecuación en (4.8), se tiene

$$\left[\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\vec{w} + \vec{U}^s) \right] \cdot \vec{n}^i = 0. \quad \forall \vec{x} \in \Gamma^i \ (i = N, S, E, W). \quad (4.9)$$

En § 4.3.3 se muestra como discretizar (4.9) para el problema particular que se aborda.

4.3. Discretización del Problema Mediante Volumen Finito

En el presente trabajo, como muestra de hueso se usó un rectángulo con un grosor de 0.4mm y una longitud de 10mm, como se muestra en la figura 4.3, mientras que el volumen del fluido que lo satura es tal que se pueden ignorar los efectos de frontera.

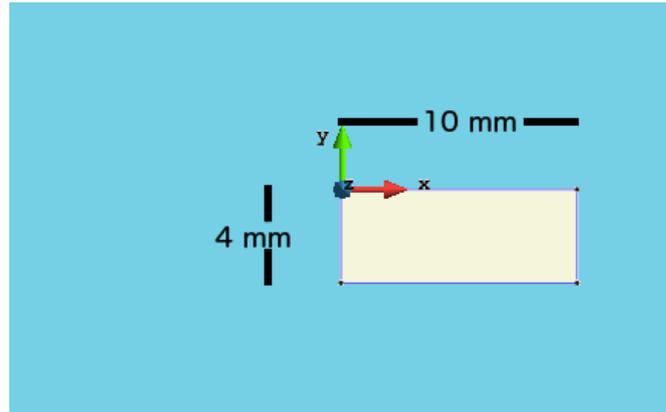


Figura 4.3: Dimensiones de la muestra de material poroso usado en el presente trabajo.

Para el uso del método de volumen finito se mallaron los dominios y un mallado representativo se muestra en la figura 4.4.

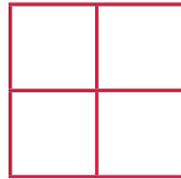


Figura 4.4: Mallado del dominio de estudio.

Alrededor de cada uno de los nodos de la malla se realiza un volumen de control como se muestra en la figura 4.5 y por conveniencia se le denomina a su vecino derecho Este, al izquierdo Oeste, al superior Norte y al inferior Sur. Finalmente, al nodo en cuestión se le denomina nodo i

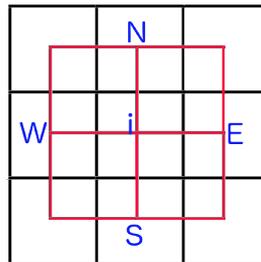


Figura 4.5: Volumen de control para un nodo particular del dominio de estudio.

4.3.1. Volumen Finito para el Interior de Ω^f

Para aplicar el método de Volumen Finito, se debe integrar cada una de estas ecuaciones en cada volumen de control V_c , en el caso de la ecuación (4.1) se tendrá

$$\frac{1}{c^2} \int_{V_c} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} dV - \int_{V_c} \nabla^2 P dV = \int_{V_c} \frac{\partial Q}{\partial t} dV. \forall \vec{x} \in \Omega^f. \quad (4.10)$$

El lado derecho de (4.10) se puede calcular inmediatamente al usar las propiedades de la función delta de Dirac, obteniéndose

$$\int_{V_c} \frac{\partial Q}{\partial t} = g(t) = \begin{cases} 0. & \text{si } \vec{x}^s \notin V_c \\ \rho F(t). & \text{si } \vec{x}^s \in V_c \end{cases} \quad (4.11)$$

Por otro lado, del teorema de la divergencia se tiene

$$\int_{V_c} \nabla^2 P \, dV = \int_{\partial V_c} \nabla P \cdot \vec{n} \, dS \quad (4.12)$$

Denotando como P^k al valor de la presión en posición \vec{x}^k y tiempo t , i.e. $P(\vec{x}^k, t)$ y ∂V_c^i a la i -ésima cara del volumen de control ($i = N, S, E, W$). Finalmente, notando que en las caras N y S , se tiene $\vec{n}^N = -\vec{n}^S = (0, 1)^T$, mientras que en las caras E y W se tendrá $\vec{n}^E = -\vec{n}^W = (1, 0)^T$; por lo que la versión discreta de (4.12) es

$$\int_{\partial V_c} \nabla P \cdot \vec{n} \, dS = \int_{\partial V_c^N} \frac{\partial P}{\partial y} \, dS - \int_{\partial V_c^S} \frac{\partial P}{\partial y} \, dS + \int_{\partial V_c^E} \frac{\partial P}{\partial x} \, dS - \int_{\partial V_c^W} \frac{\partial P}{\partial x} \, dS. \quad (4.13)$$

Denotando como Δx el tamaño de las caras N y S , mientras que Δy denotará el tamaño de las caras E y W , al aplicar la regla del punto medio a las integrales en (4.13) se obtendrá

$$\int_{\partial V_c^N} \frac{\partial P}{\partial y} \, dS \approx \Delta x \frac{\partial P}{\partial y} \Big|_{P=P^{(N+i)/2}}. \quad (4.14a)$$

$$\int_{\partial V_c^S} \frac{\partial P}{\partial y} \, dS \approx \Delta x \frac{\partial P}{\partial y} \Big|_{P=P^{(S+i)/2}}. \quad (4.14b)$$

$$\int_{\partial V_c^E} \frac{\partial P}{\partial x} \, dS \approx \Delta y \frac{\partial P}{\partial x} \Big|_{P=P^{(E+i)/2}}. \quad (4.14c)$$

$$\int_{\partial V_c^W} \frac{\partial P}{\partial x} \, dS \approx \Delta y \frac{\partial P}{\partial x} \Big|_{P=P^{(W+i)/2}}. \quad (4.14d)$$

Finalmente, al aproximar las derivadas parciales en 4.14a – 4.14d mediante diferencias centrales, se obtendrá

$$\int_{\partial V_c^N} \frac{\partial P}{\partial y} \, dS \approx \Delta x \frac{P^N - P^i}{\Delta y} + \Delta x \mathcal{O}(\Delta y^2). \quad (4.15a)$$

$$\int_{\partial V_c^S} \frac{\partial P}{\partial y} \, dS \approx \Delta x \frac{P^i - P^S}{\Delta y} + \Delta x \mathcal{O}(\Delta y^2). \quad (4.15b)$$

$$\int_{\partial V_c^E} \frac{\partial P}{\partial x} \, dS \approx \Delta y \frac{P^E - P^i}{\Delta x} + \Delta y \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (4.15c)$$

$$\int_{\partial V_c^W} \frac{\partial P}{\partial x} \, dS \approx \Delta y \frac{P^i - P^W}{\Delta x} + \Delta y \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (4.15d)$$

Por tanto

$$\int_{\partial V_c} \nabla P \cdot \vec{n} \, dS = \Delta x \left(\frac{P^N - 2P^i + P^S}{\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y^2) \right) + \Delta y \left(\frac{P^E - 2P^i + P^W}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \right). \quad (4.16)$$

Por otro lado, si P es una función lo suficientemente suave

$$\frac{1}{c^2} \int_{V_c} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} \, dV = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int_{V_c} P \, dV. \quad (4.17)$$

Aplicando la regla del punto medio a 4.17 y notando que $V_c = \Delta x \Delta y$

$$\frac{1}{c^2} \int_{V_c} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} \, dV_c \approx \frac{\Delta x \Delta y}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} \Big|_{P=P^i}. \quad (4.18)$$

Denotando como P_k^i el valor de la presión en posición \vec{x}^i y tiempo t_k , es decir $P_k^i = P(\vec{x}^i, t_k)$ y aplicando un esquema de diferencias finitas en el tiempo, (4.18) se escribe como

$$\frac{\Delta x \Delta y}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} \Big|_{P=P^i} \approx \frac{\Delta x \Delta y}{c^2} \left(\frac{P_{k+1}^i - 2P_k^i + P_{k-1}^i}{\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right). \quad (4.19)$$

Reuniendo estos resultados, la versión de volumen finito de (4.1) se escribe como

$$\frac{1}{c^2} \frac{P_{k+1}^i - 2P_k^i + P_{k-1}^i}{\Delta t^2} = \frac{P_k^N - 2P_k^i + P_k^S}{\Delta y^2} + \frac{P_k^E - 2P_k^i + P_k^W}{\Delta x^2} + g(t) + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta y^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (4.20)$$

que debe ser resuelta para P_{k+1}^i .

4.3.2. Volumen Finito para el Interior de Ω^b

Sean $\vec{F}(\vec{x},t)$, $\vec{G}(\vec{x},t)$ y $S(\vec{x},t)$ dadas como

$$\vec{F}(\vec{x},t) = \rho_{11}\vec{U}^s + \rho_{12}\vec{U}^f. \quad (4.21a)$$

$$\vec{G}(\vec{x},t) = \rho_{12}\vec{U}^s + \rho_{22}\vec{U}^f. \quad (4.21b)$$

$$S(\vec{x},t) = sI \quad (4.21c)$$

entonces (3.1a – 3.1b) se reescriben

$$\frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \sigma + \frac{1}{\phi} \frac{\partial \vec{w}}{\partial t}. \quad (4.22a)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{G}}{\partial t^2} = \nabla \cdot S - \frac{1}{\phi} \frac{\partial \vec{w}}{\partial t} \quad (4.22b)$$

De (4.22a, 4.22b) se aprecia que (3.1a – 3.1b) tienen la misma estructura, por lo que se aplicará el método de volumen finito a 4.22a e inmediatamente se tendrá la discretización de volumen finito de 4.22b.

Integrando sobre un volumen de control dentro del medio poroso se tiene

$$\int_{V_c} \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial t^2} dV = \int_{V_c} \nabla \cdot \sigma dV + \frac{1}{\phi} \int_{V_c} \frac{\partial \vec{w}}{\partial t} dV. \quad (4.23)$$

Por el teorema de la divergencia

$$\int_{V_c} \nabla \cdot \sigma dV = \int_{\partial V_c} \sigma \vec{n} dS = \int_{\partial V_c} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} dS \quad (4.24)$$

Usando el volumen de control mostrado en 4.5

$$\begin{aligned} \int_{\partial V_c} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} dS &= \int_{\partial V_c^N} \begin{pmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix} dS - \int_{\partial V_c^S} \begin{pmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix} dS + \dots \\ &\quad \int_{\partial V_c^E} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} dS - \int_{\partial V_c^W} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} dS. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Aplicando la regla del punto medio a cada término de 4.25

$$\int_{\partial V_c^N} \begin{pmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix} dS \approx \Delta x \begin{pmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix} \Big|_{\vec{x}=(N+i)/2} \approx \frac{\Delta x}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{xy}^N + \sigma_{xy}^i \\ \sigma_{yy}^N + \sigma_{yy}^i \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\Delta x^3). \quad (4.26a)$$

$$\int_{\partial V_c^S} \begin{pmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix} dS \approx \Delta x \begin{pmatrix} \sigma_{xy} \\ \sigma_{yy} \end{pmatrix} \Big|_{\vec{x}=(i+S)/2} \approx \frac{\Delta x}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{xy}^i + \sigma_{xy}^S \\ \sigma_{yy}^i + \sigma_{yy}^S \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\Delta x^3). \quad (4.26b)$$

$$\int_{\partial V_c^E} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} dS \approx \Delta y \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} \Big|_{\vec{x}=(i+E)/2} \approx \frac{\Delta y}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^i + \sigma_{xx}^E \\ \sigma_{xy}^i + \sigma_{xy}^E \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\Delta y^3). \quad (4.26c)$$

$$\int_{\partial V_c^W} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} dS \approx \Delta y \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} \Big|_{\vec{x}=(W+i)/2} \approx \frac{\Delta y}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^W + \sigma_{xx}^i \\ \sigma_{xy}^W + \sigma_{xy}^i \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\Delta y^3). \quad (4.26d)$$

por lo que (4.25) queda como

$$\int_{\partial V_c} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \end{pmatrix} dS \approx \frac{\Delta x}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{xy}^N - \sigma_{xy}^S \\ \sigma_{yy}^N - \sigma_{yy}^S \end{pmatrix} + \frac{\Delta y}{2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^E - \sigma_{xx}^W \\ \sigma_{xy}^E - \sigma_{xy}^W \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\max\{\Delta x, \Delta y\}^3). \quad (4.27)$$

Por otro lado, suponiendo que $\vec{F}(\vec{x},t)$ es lo suficientemente suave,

$$\int_{V_c} \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial t^2} dV = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int_{V_c} \vec{F} dV. \quad (4.28)$$

Usando la regla del punto medio y aplicando diferencias finitas centrales en la integración espacial y el tiempo, respectivamente

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \int_{V_c} \vec{F} dV \approx \Delta x \Delta y \left(\frac{\vec{F}_{k+1}^i - 2\vec{F}_k^i + \vec{F}_{k-1}^i}{\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right) + \mathcal{O}(\max\{\Delta x, \Delta y\}^3). \quad (4.29)$$

Finalmente

$$\frac{1}{\phi} \int_{V_c} \frac{\partial \vec{w}}{\partial t} dV = \frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_c} \vec{w} dV. \quad (4.30)$$

y al aproximar mediante la regla del punto medio y diferencias centradas en el tiempo t_k ,

$$\frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_c} \vec{w} dV \approx \frac{1}{\phi} \frac{\Delta x \Delta y}{2\Delta t} (\vec{w}_{k+1}^i - \vec{w}_{k-1}^i + \Delta t \mathcal{O}(\Delta t^2)) + \mathcal{O}(\max\{\Delta x, \Delta y\}^3). \quad (4.31)$$

Por lo que el esquema de volumen finito para (4.22a) es

$$\begin{aligned} \frac{\vec{F}_{k+1}^i - 2\vec{F}_k^i + \vec{F}_{k-1}^i}{\Delta t^2} &= \frac{1}{2\Delta y} \begin{pmatrix} \sigma_{xy}^N - \sigma_{xy}^S \\ \sigma_{yy}^N - \sigma_{yy}^S \end{pmatrix} + \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^N - \sigma_{xx}^S \\ \sigma_{xy}^N - \sigma_{xy}^S \end{pmatrix} + \dots \\ &\frac{1}{\phi} \frac{1}{2\Delta t} (\vec{w}_{k+1}^i - \vec{w}_{k-1}^i) + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta y^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Por tanto, el esquema de volumen finito para (4.22b) será

$$\begin{aligned} \frac{\vec{G}_{k+1}^i - 2\vec{G}_k^i + \vec{G}_{k-1}^i}{\Delta t^2} &= \frac{1}{2\Delta y} \begin{pmatrix} 0 \\ s^N - s^S \end{pmatrix} + \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} s^E - s^W \\ 0 \end{pmatrix} - \dots \\ &\frac{1}{\phi} \frac{1}{2\Delta t} (\vec{w}_{k+1}^i - \vec{w}_{k-1}^i) + \mathcal{O}(\Delta x^2) + \mathcal{O}(\Delta y^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (4.33)$$

4.3.3. Discretización de las Condiciones de Frontera

Para la presente configuración, los vectores unitarios en las fronteras Γ^N y Γ^S son definidos como $\vec{n}^N = -\vec{n}^S = (0.1)^T$; mientras que para las fronteras Γ^E y Γ^W se tiene $\vec{n}^E = -\vec{n}^W = (1.0)^T$, por lo que las condiciones de frontera (4.7) se pueden aplicar inmediatamente en los nodos frontera, a saber

$$\sigma_{xx}^i = -(1 - \phi)P^i. \quad \forall \vec{x}^i \in \Gamma^j \quad (j = E, W). \quad (4.34a)$$

$$\sigma_{yy}^i = -(1 - \phi)P^i. \quad \forall \vec{x}^i \in \Gamma^j \quad (j = N, S). \quad (4.34b)$$

$$s^i = -\phi P^i. \quad \forall \vec{x}^i \in \Gamma^j \quad (j = N, S, E, W). \quad (4.34c)$$

$$\sigma_{xy} = 0. \quad \forall \vec{x}^i \in \Gamma^j \quad (j = N, S, E, W). \quad (4.34d)$$

mientras que (4.9) se reescribe como

$$\sum_{j=1} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\vec{w}_j + \vec{U}_j^s) \right] \vec{n}_j = 0. \quad (4.35)$$

Como en las fronteras $\vec{n}_j = 0$, excepto para una componente, sea k esta componente, con $\vec{n}_j = 1$, entonces (4.35) se reduce a

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_k} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\vec{w}_k + \vec{U}_k^s) = 0. \quad (4.36)$$

Aplicando un esquema de diferencias finitas hacia atrás al término $\frac{\partial P}{\partial x_k}$ en el nodo i se tiene

$$P^i = \frac{4}{3}P^{i-1} - \frac{1}{3}P^{i-2} + \frac{2\rho\Delta x_k}{3} \frac{\partial^2 \alpha_k^i}{\partial t^2} + \mathcal{O}(\Delta x_k^2). \quad (4.37)$$

donde $\alpha_k^i = \vec{w}_k^i + \vec{U}_k^{s,i}$.

Por otro lado, aplicando diferencias finitas hacia atrás en tiempo para el término α_k^i al tiempo t_l se obtiene

$$P_l^i = \frac{4}{3}P_l^{i-1} - \frac{1}{3}P_l^{i-2} + \frac{2\rho\Delta x_k}{3\Delta t^2} (2\alpha_{k,l}^i - 5\alpha_{k,l-1}^i + 4\alpha_{k,l-2}^i - \alpha_{k,l-3}^i) + \mathcal{O}(\Delta x_k^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (4.38)$$

Finalmente, como los nodos $i-1, i-2$ representan nodos internos del medio poroso, al usar (4.4) se tienen las condiciones de frontera

$$P_l^i = -\frac{4}{3\phi}s_l^{i-1} + \frac{1}{3\phi}s_l^{i-2} + \frac{2\rho\Delta x_k}{3\Delta t^2} (2\alpha_{k,l}^i - 5\alpha_{k,l-1}^i + \dots + 4\alpha_{k,l-2}^i - \alpha_{k,l-3}^i) + \mathcal{O}(\Delta x_k^2) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad \forall \vec{x}^i \in \Gamma^j. (j = N, S, E, W). \quad (4.39)$$

4.4. Implementación de los Métodos Numéricos para la Solución del Problema Acoplado

Una vez discretizada la configuración 2D del problema de transmisión transversal mediante un mallado, la implementación de los métodos numéricos para la solución del problema acoplado se resume en el algoritmo 1, donde θ engloba las siguientes variables: Posición del transductor emisor, Posición del transductor receptor, t_f y t_f representa el tiempo de la simulación.

Algorithm 1 Algoritmo de solución al problema acoplado

```

1: procedure SOLVER ACOPLADO( $\phi, \alpha, K_b, K_s, N, \rho_s, \rho_f, K, \Delta t, \Delta x, \Delta y, f_0, \theta$ )
2:   Calcular  $P, R, Q$ , mediante 3.2(a-d)
3:   Calcular  $\rho_{11}, \rho_{12}, \rho_{22}$  mediante 3.3(a-c)
4:   Definir  $n = \frac{t_f}{\Delta t}$ 
5:   Definir el arreglo signal de tamaño  $n$ 
6:   for  $k = 0$  to  $k + 1 = n$  do ▷ Iterar hasta el tiempo final de la simulación
7:     Aplicar la fuente puntual en la posición del emisor.
8:     for todos los nodos  $i$  tales que  $i \in \Omega^f$  do
9:       | Calcular  $P_{k+1}^i$  de (4.20)
10:    end for
11:    for todos los nodos  $i$  tales que  $i \in \Gamma^j, j = N, S, E, W$  do
12:      |  $s_k^i \leftarrow -\phi P_{k+1}^i$  ▷ Aplicar las condiciones de frontera (4.34c)
13:      |  $\sigma_{xy,k}^i \leftarrow 0$  ▷ Aplicar las condiciones de frontera (4.34d)
14:    end for
15:    for todos los nodos  $i$  tales que  $i \in \Gamma^j, j = N, S$  do
16:      |  $\sigma_{xx,k}^i \leftarrow -(1 - \phi)P_{k+1}^i$  ▷ Aplicación de las condiciones de frontera (4.34a)
17:    end for
18:    for todos los nodos  $i$  tales que  $i \in \Gamma^j, j = E, W$  do
19:      |  $\sigma_{xx,k}^i \leftarrow -(1 - \phi)P_{k+1}^i$  ▷ Aplicación de las condiciones de frontera (4.34a)
20:    end for
21:    for todos los nodos  $i$  tales que  $i \in \Gamma^j, j = N, S$  do
22:      |  $\sigma_{yy,k}^i \leftarrow -(1 - \phi)P_{k+1}^i$  ▷ Aplicación de las condiciones de frontera (4.34b)
23:    end for
24:    for todos los nodos  $i$  tales que  $i \in \Omega^b$  do
25:      | Calcular  $\vec{U}_{k+1}^{s,i}, \vec{U}_{k+1}^{f,i}$  y  $s_{k+1}^i$  de (4.32), (4.33) y (3.1), respectivamente
26:    end for
27:    for todos los nodos  $i$  tales que  $i \in \Gamma^j, j = N, S, E, W$  do
28:      | Calcular  $P_{k+1}^i$  mediante (4.39)
29:    end for
30:    signal[ $k + 1$ ]  $\leftarrow P_{k+1}^i$ , donde  $i$  es la posición del transductor receptor.
31:  end for
32:  return signal/máx{signal[ $i$ ]}

```

4.5. Solución al Problema Acoplado

Se implementaron las ecuaciones de Biot en un medio poroso saturado con agua y rodeado por el mismo material. La geometría usada es la mostrada en la figura 4.3. El medio poroso tiene un tamaño de $(10 \times 4 \text{mm}^2)$, mientras que el fluido que lo rodea posee dimensiones tales que no existen reflexiones debido a la frontera. Finalmente el fluido saturador es agua ($\rho = 1000 \text{Kg/m}^3$, $K = 2.2 \times 10^9 \text{Pa}$).

El problema directo se discretizó usando $\Delta t = 0.4 \mu\text{s}$ y $\Delta x = \Delta y = 7 \times 10^{-5} \text{m}$ y la fuente emisora dada como

$$F(t) = F_0 e^{-4(f_c t - 1)^2} \sin(2\pi f_c t). \quad (4.40)$$

donde $f_c = 1 \text{MHz}$ y $F_0 = 1 \text{ m/s}^2$; el emisor se colocó 2mm alejado de la muestra y el receptor se colocó opuesto al emisor. Para todos los experimentos presentados, la duración total es $T = 7 \times 10^{-5} \text{s}$. En las figuras 4.6a – 4.6d se muestra el campo de presiones a diferentes tiempos con los datos mostrados en la tabla 4.2. Finalmente, en las figuras 4.7a – 4.7f se muestran algunas señales obtenidas al variar la porosidad.

Propiedad	Valor
Porosidad (ϕ)	0.5 %
Tortuosidad (α)	1.4
Módulo de volumen del sólido (K_s)	$20 \times 10^9 \text{Pa}$
Módulo de volumen de est. porosa (K_b)	$3.3 \times 10^9 \text{Pa}$
Módulo de corte (N)	$2.6 \times 10^9 \text{Pa}$
Densidad del sólido (ρ_s)	1960Kg/m^3

Tabla 4.2: Propiedades del medio poroso.

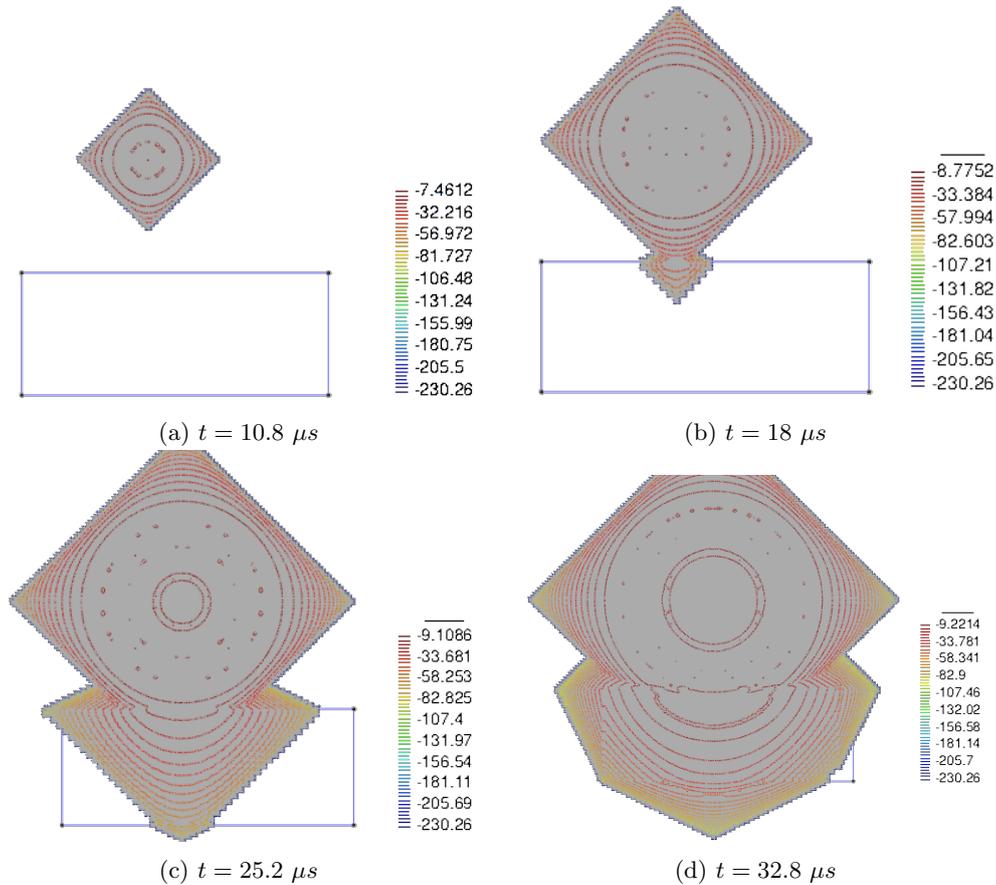


Figura 4.6: Campo de presiones a diferentes tiempos.

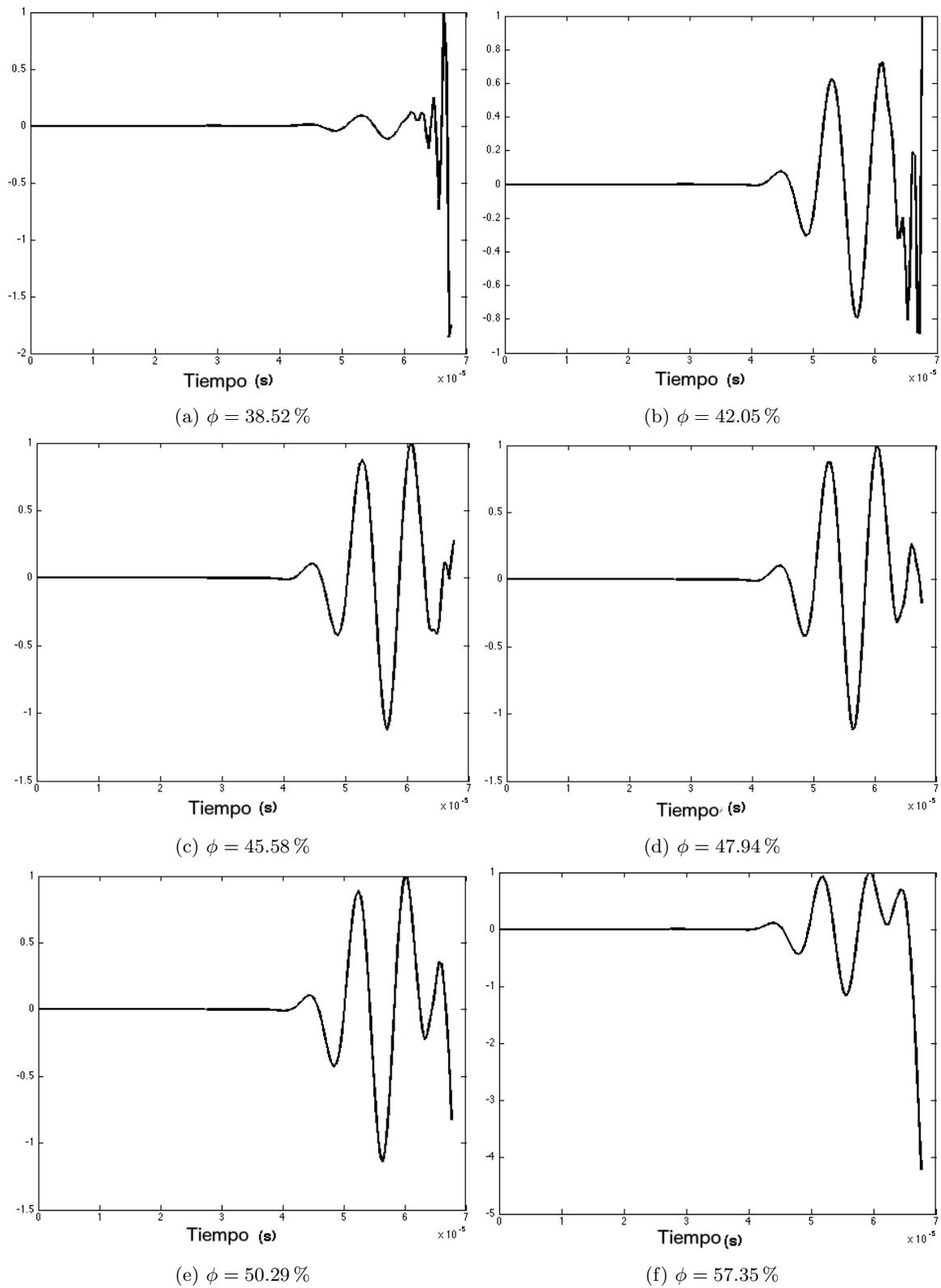


Figura 4.7: Señales obtenidas al variar la porosidad del material.

Capítulo 5

Métodos de Optimización para Estimados Puntuales y de Intervalo

En el presente capítulo se muestran los métodos de optimización para obtener estimados puntuales y de intervalo obtenidos en el presente trabajo. En el caso del estimador puntual, se obtiene mediante u_{MAP} a través del método de Nelder–Mead [27]. Mientras que el estimador de intervalo se obtiene mediante el muestreo de la densidad de probabilidad posterior $\pi_{\text{post}}(u)$ al usar el muestreador `emcee` donde el punto inicial de las caminatas aleatorias es u_{MAP} .

Para determinar el valor de u_{CM} , el muestreador tomó 5000 caminatas aleatorias, se escogió este número de manera experimental, ya que si los caminantes comienzan en un punto u_{MAP} alejado del maximizador de la distribución posterior, la cadena convergerá lentamente a la distribución posterior, como se muestra en la figura 5.1 para el parámetro K_b , mientras que para K_s la cadena converge rápidamente a dicha distribución. Lo anterior se aprecia de mejor manera al observar las distribuciones conjunta y marginales de K_s y K_b mostradas en la figura 5.2 donde se observa que la distribución posterior de K_b es incorrecta.

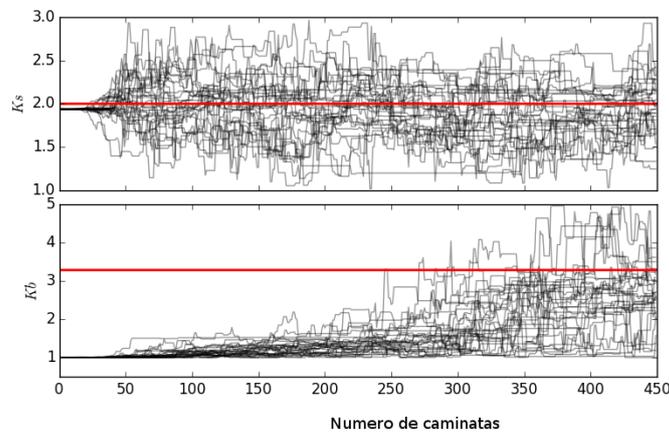


Figura 5.1: 450 caminatas de 20 caminantes aleatorios para los parámetros K_b y K_s . En rojo se muestra el valor verdadero de cada parámetro.

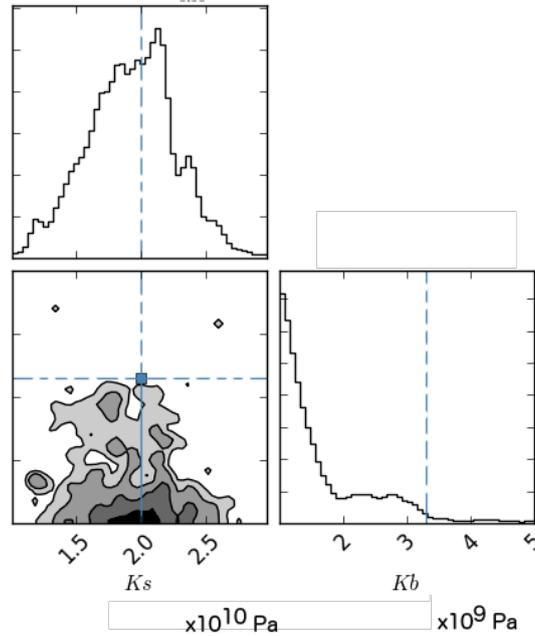


Figura 5.2: Distribuciones conjunta y marginales de K_s y K_b obtenidas de las caminatas mostradas en la figura 5.1. La línea discontinua muestra el valor verdadero del parámetro.

5.1. Problema Inverso con Distribuciones a Priori Gaussianas

En el caso en que la distribución a priori $\pi_0(\cdot)$ se modele como gaussiana con media u^0 y desviación estándar γ , se tiene el problema de estimación puntual

$$u_{\text{MAP}} = \underset{u}{\operatorname{argmax}} \exp \left\{ -\frac{1}{\sigma} \|y - \mathcal{G}(u)\|^2 - \sum_{i=1}^n \frac{1}{\gamma_i} \|u_i - u_i^0\|^2 \right\}. \quad (5.1)$$

Tomando el logaritmo natural de (5.1) se tiene

$$u_{\text{MAP}} = \underset{u}{\operatorname{argmin}} \|y - \mathcal{G}(u)\|^2 + \sum_{i=1}^n \frac{\sigma}{\gamma_i} \|u_i - u_i^0\|^2 \quad (5.2)$$

Como primer experimento en este contexto se observó el comportamiento de (5.2) cerca del valor real del parámetro, por lo que se realizó un barrido de los parámetros cerca de este punto, para cada parámetro dejando el resto como constantes. En las figuras 5.3a – 5.3f se observa que (5.1) tiene un mínimo global para cada parámetro. Mientras que en el caso particular de ϕ , α y K_s la función presenta mínimos locales que pueden evitar obtener un correcto estimado de u_{MAP} . Los valores de u_0 y γ usados para estas simulaciones son los mostrados en la tabla 5.1.

Propiedad	Media (u_i^0)	Desviación estándar (γ_i)
Porosidad (ϕ)	0.8	0.10
Tortuosidad (α)	1.6	1.5
Módulo de volumen del sólido (K_s)	$25.0 \times 10^9 \text{Pa}$	$9 \times 10^9 \text{Pa}$
Módulo de volumen de est. porosa (K_b)	$3.8 \times 10^9 \text{Pa}$	$2.5 \times 10^9 \text{Pa}$
Módulo de corte (N)	$4.5 \times 10^9 \text{Pa}$	$5.5 \times 10^9 \text{Pa}$
Densidad del sólido (ρ_s)	1940Kg/m^3	250Kg/m^3

Tabla 5.1: Media y desviación estándar propuestas para las distribuciones a priori.

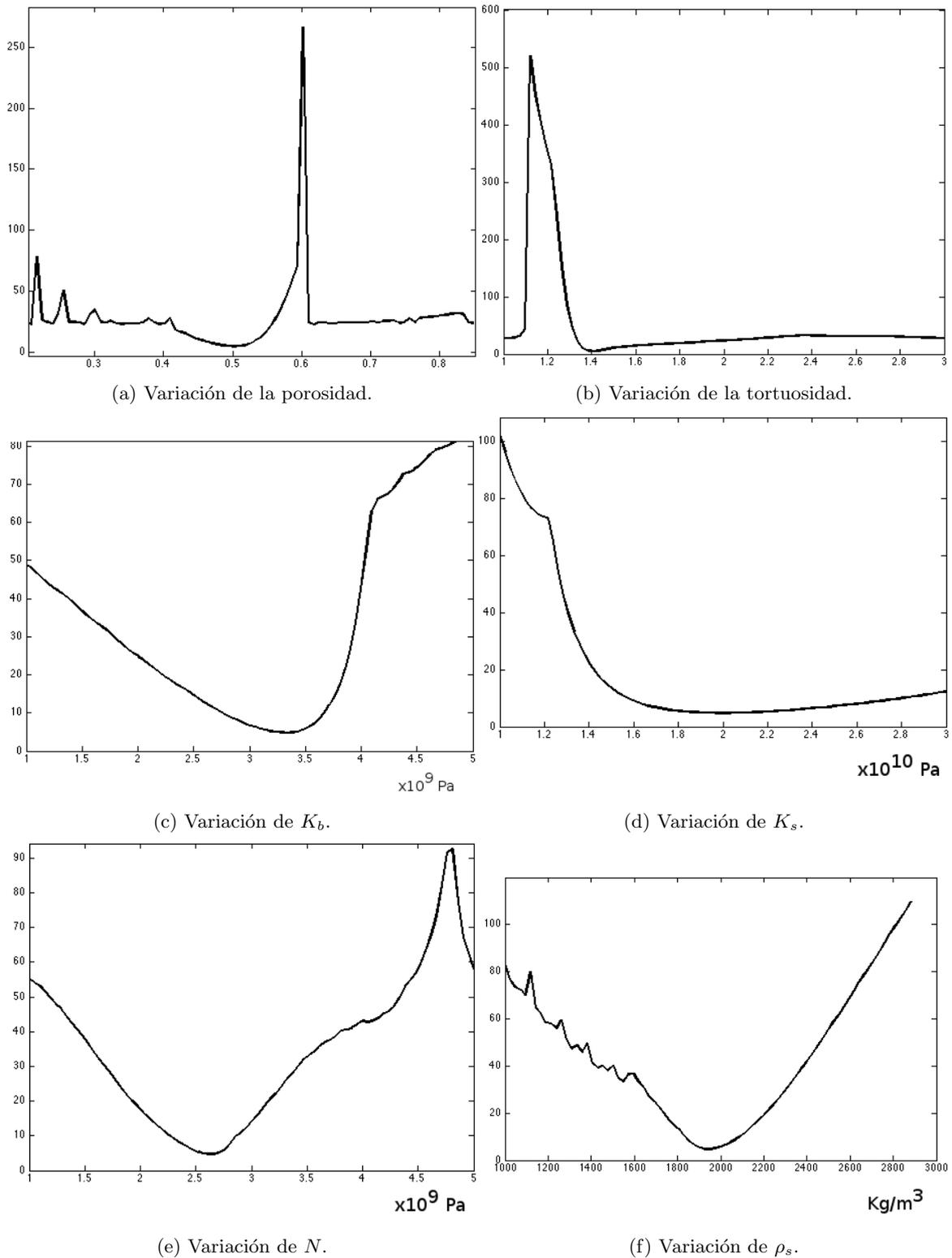


Figura 5.3: Variación de la función objetivo (5.1) cerca del punto óptimo.

5.1.1. Estimador MAP

En las figuras 5.4a – 5.4d se muestra la evolución de la función objetivo al obtener el estimador u_{MAP} para diferentes configuraciones del vector de parámetros. Mientras que en las figuras 5.5a–5.5d se muestran las señales

generadas con u_{MAP} y se superponen con la señal obtenida con el valor verdadero de u .

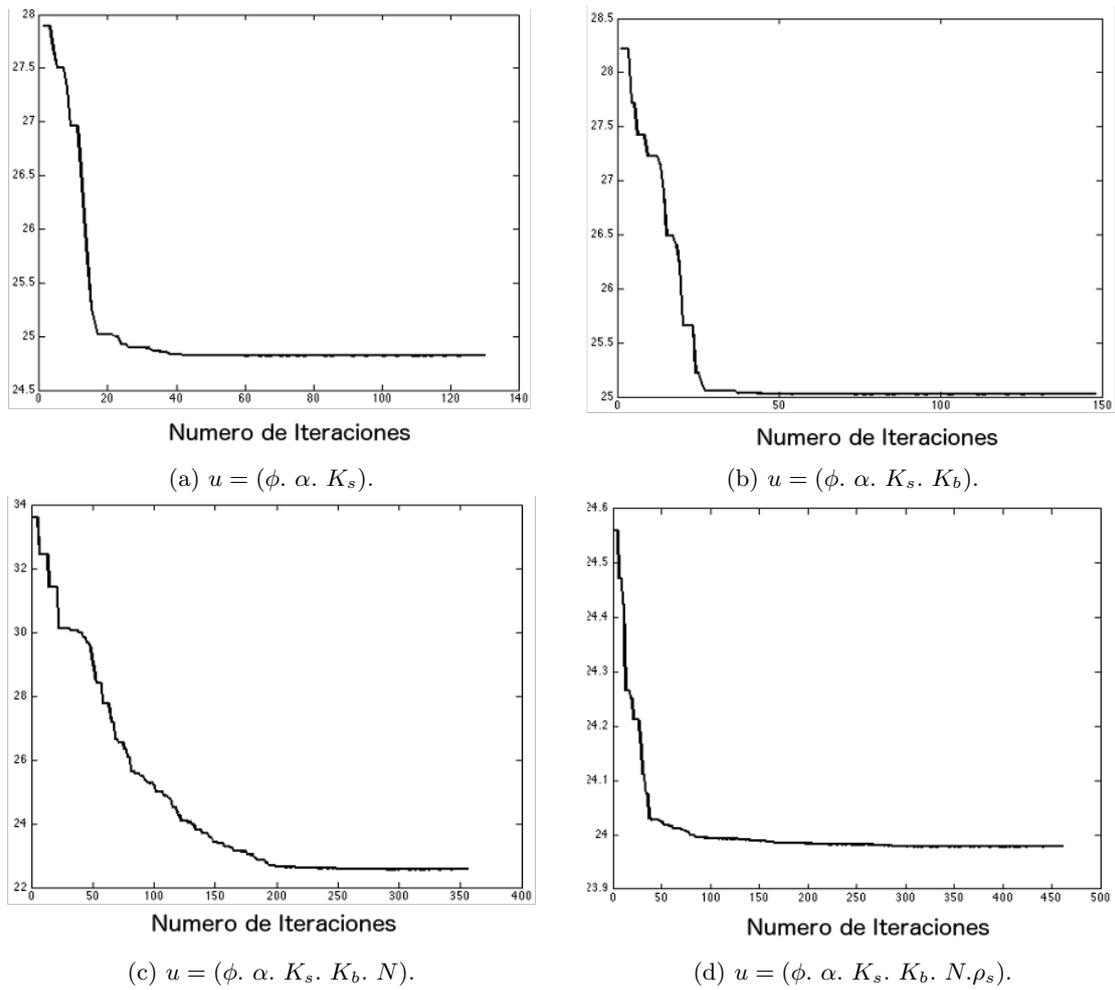


Figura 5.4: Evolución del problema (5.2) para algunas configuraciones de u .

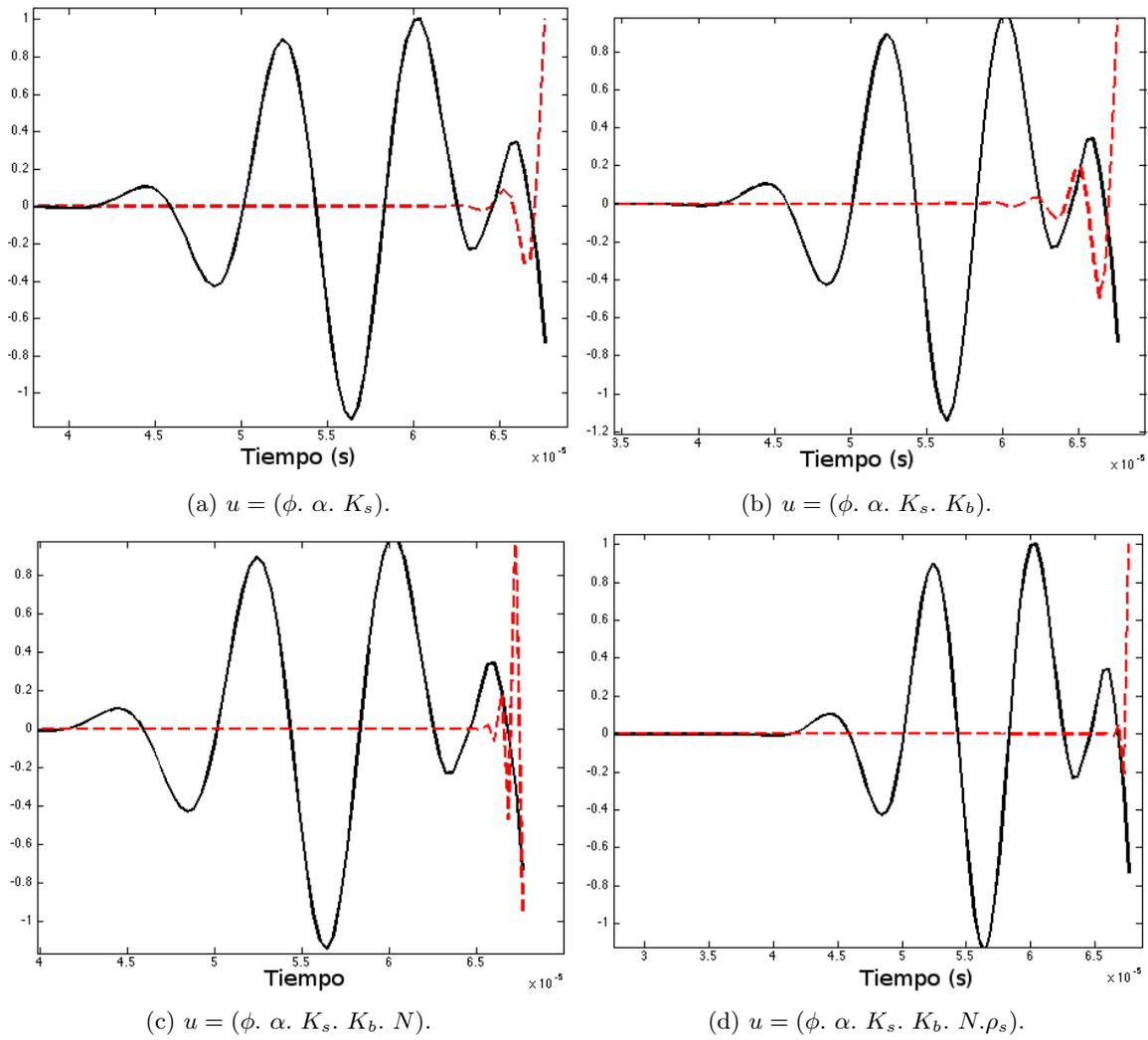


Figura 5.5: Señales obtenidas al usar u_{MAP} (línea roja discontinua) y señales generadas al usar el valor verdadero de u .

5.1.2. Estimados CM y de Intervalo

Usando como punto inicial u_{MAP} se obtuvieron las caminatas mostradas en la figura 5.6.

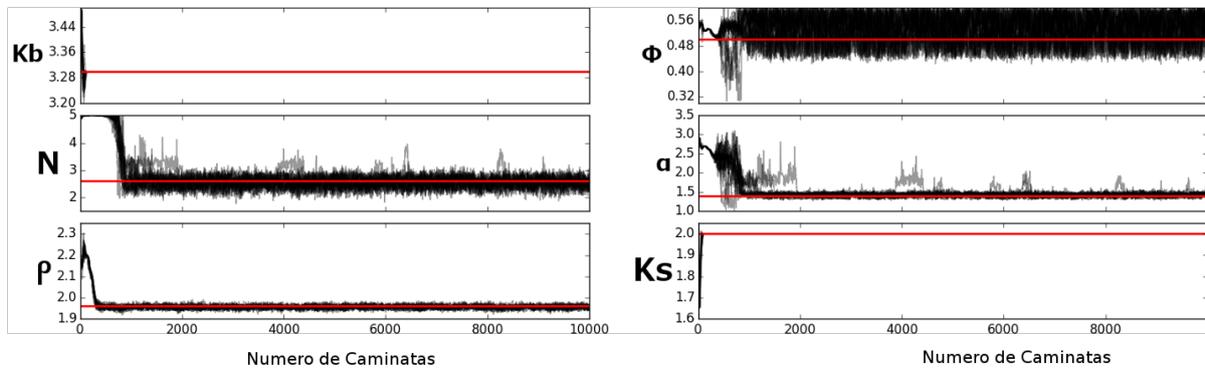


Figura 5.6: 10000 caminatas de 20 caminantes aleatorios para los parámetros $\phi, \alpha, K_b, K_s, N$ y ρ_s . En rojo se muestra el valor verdadero de cada parámetro.

Posteriormente se realizó el histograma de cada una de las distribuciones marginales. Dichos histogramas se muestran en las figuras 5.7–5.12, donde a la izquierda de cada uno de ellos se muestra la distribución a priori. Seguidamente, usando el estimador u_{CM} se obtuvo una señal que en la figura 5.13a se superpone a la señal ruidosa y , mientras que en la figura 5.13b esta misma señal se superpone con la señal generada con los parámetros verdaderos. Finalmente, usando el estimador de intervalo¹ con los cuantiles 5 y 95 se estima la incertidumbre asociada a u_{CM} .

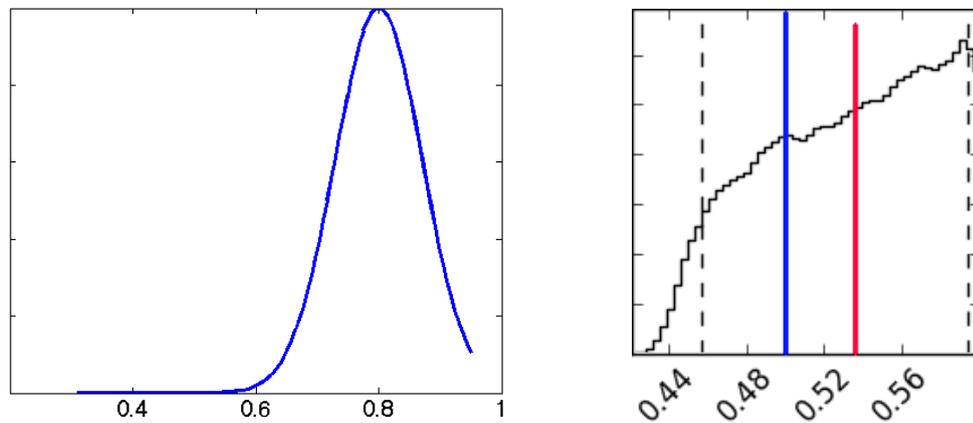


Figura 5.7: Histogramas de las distribuciones a priori (izquierda) y posterior (derecha) para la porosidad. En azul se muestra el valor verdadero del parámetro y en rojo el valor de la media condicional.

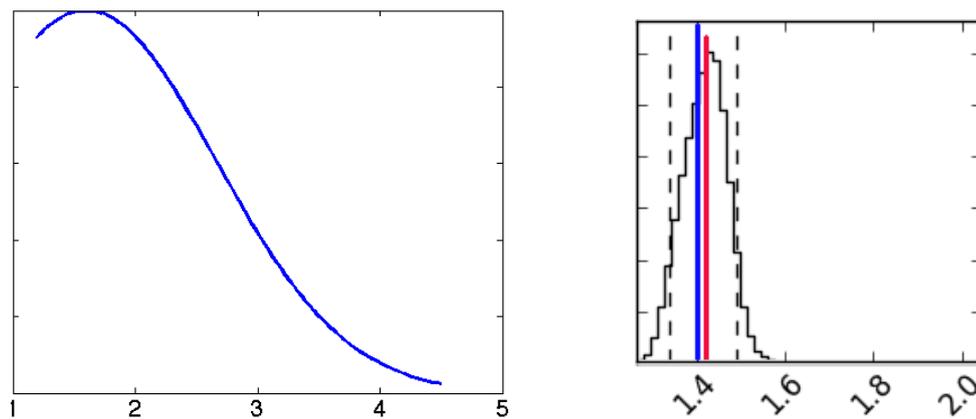


Figura 5.8: Histogramas de las distribuciones a priori (izquierda) y posterior (derecha) para la tortuosidad. En azul se muestra el valor verdadero del parámetro y en rojo el valor de la media condicional.

¹c.f. §3.3.1

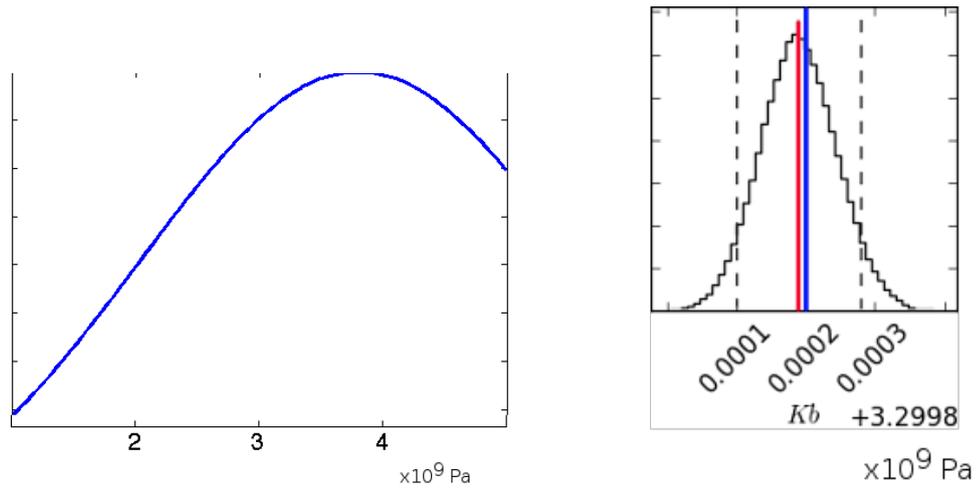


Figura 5.9: Histogramas de las distribuciones a priori (izquierda) y posterior (derecha) para K_b . En azul se muestra el valor verdadero del parámetro y en rojo el valor de la media condicional.

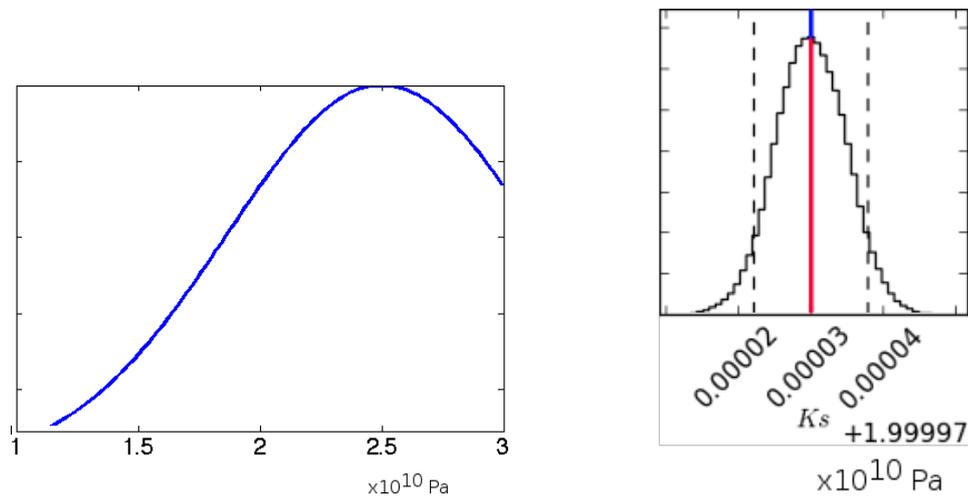


Figura 5.10: Histogramas de las distribuciones a priori (izquierda) y posterior (derecha) para K_s . En azul se muestra el valor verdadero del parámetro y en rojo el valor de la media condicional.

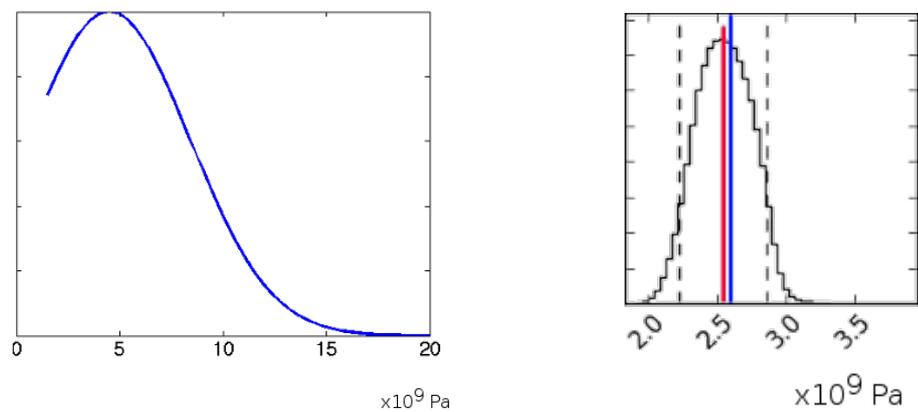


Figura 5.11: Histogramas de las distribuciones a priori (izquierda) y posterior (derecha) para N . En azul se muestra el valor verdadero del parámetro y en rojo el valor de la media condicional.

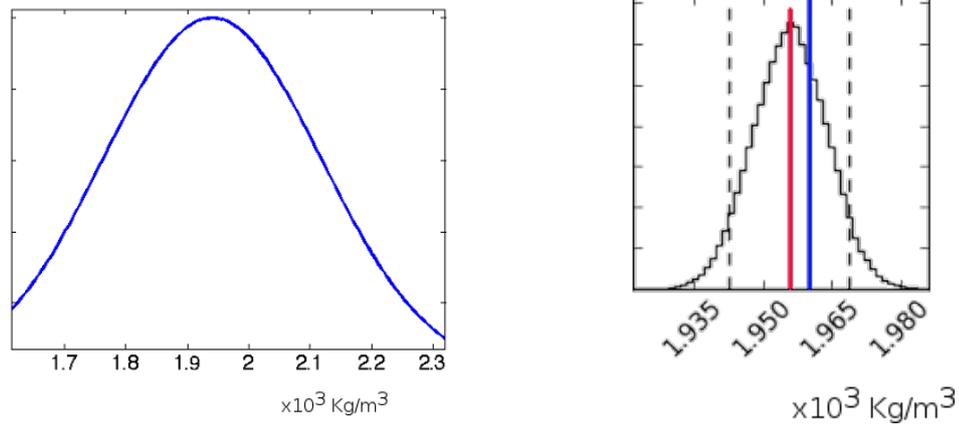


Figura 5.12: Histogramas de las distribuciones a priori (izquierda) y posterior (derecha) para ρ_s . En azul se muestra el valor verdadero del parámetro y en rojo el valor de la media condicional.

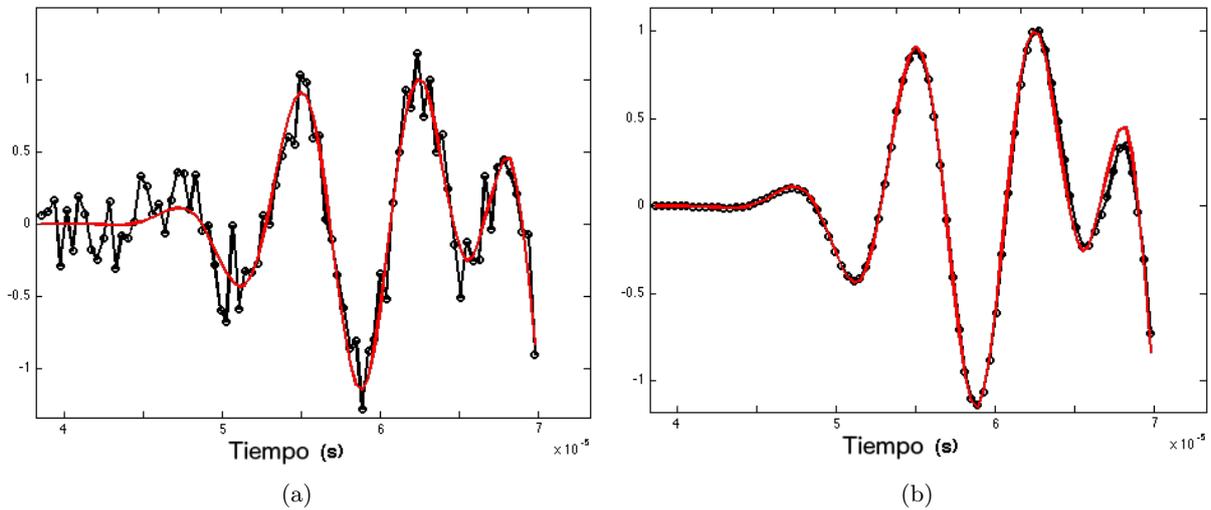


Figura 5.13: Comparación entre la señal generada (línea roja continua) usando u_{CM} y: (a) la señal ruidosa y (izquierda); (b) señal generada con el valor verdadero de u (derecha).

5.2. Problema Inverso con Distribuciones a Priori no Informativas

La denominada distribución no informativa se define hasta una constante de proporcionalidad como

$$\pi(x) \propto \begin{cases} 1 & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} = \chi_{[a,b]}(x). \quad (5.3)$$

donde $[a,b]$ es el intervalo donde se cree que se encuentra el parámetro a estimar.

En el caso en que la distribución a priori de los parámetros se modele como no informativa, entonces se tendrá

$$u_{MAP} = \operatorname{argmax}_u \exp \left\{ -\frac{1}{\sigma} \|y - \mathcal{G}(u)\|^2 \right\} \prod_{i=1}^6 \chi_{[a_i, b_i]}(u_i). \quad (5.4)$$

Aplicando el logaritmo natural a (5.4) se tiene

$$u_{MAP} = \operatorname{argmin}_u \|y - \mathcal{G}(u)\|^2 + \sigma \sum_{i=1}^6 \log(\chi_{[a_i, b_i]}(u_i)). \quad (5.5)$$

Como primer experimento se observó el comportamiento de (5.5) cerca de valor óptimo. En las figuras 5.14a – 5.14f se muestra dicho comportamiento, sin embargo en este caso el óptimo global no coincide con el punto con el que se generaron los datos u_{TRUE} , i.e. el problema es mal planteado

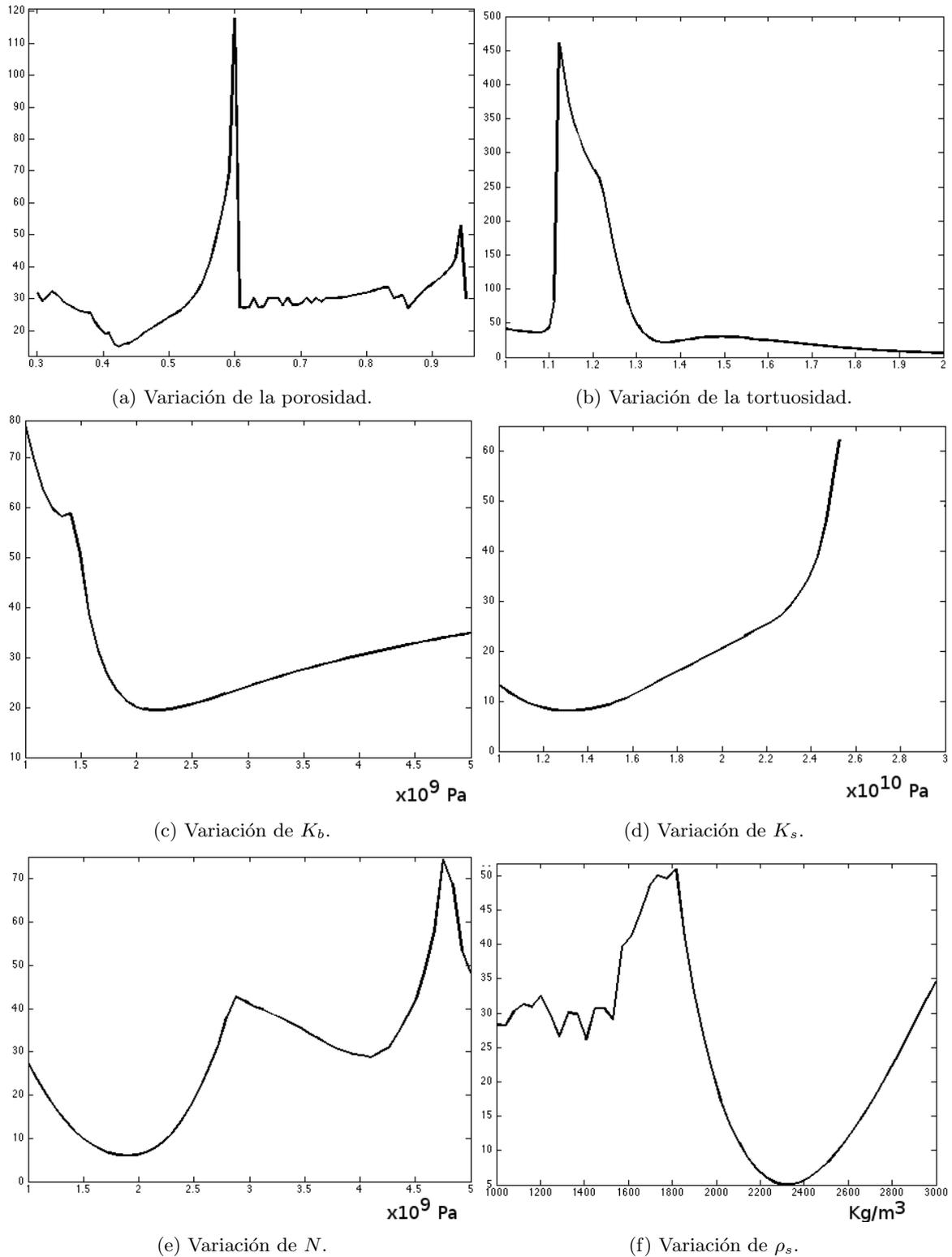


Figura 5.14: Variación de la función objetivo (5.1) cerca del punto óptimo.

5.2.1. Estimador MAP

En las figuras 5.15a – 5.15d se presenta la evolución de la función objetivo al obtener el estimador u_{MAP} para diferentes configuraciones del vector de parámetros. Finalmente en las figuras 5.16a–5.16d se muestran las señales generadas con u_{MAP} y se superponen con la señal obtenida con el valor verdadero de u .

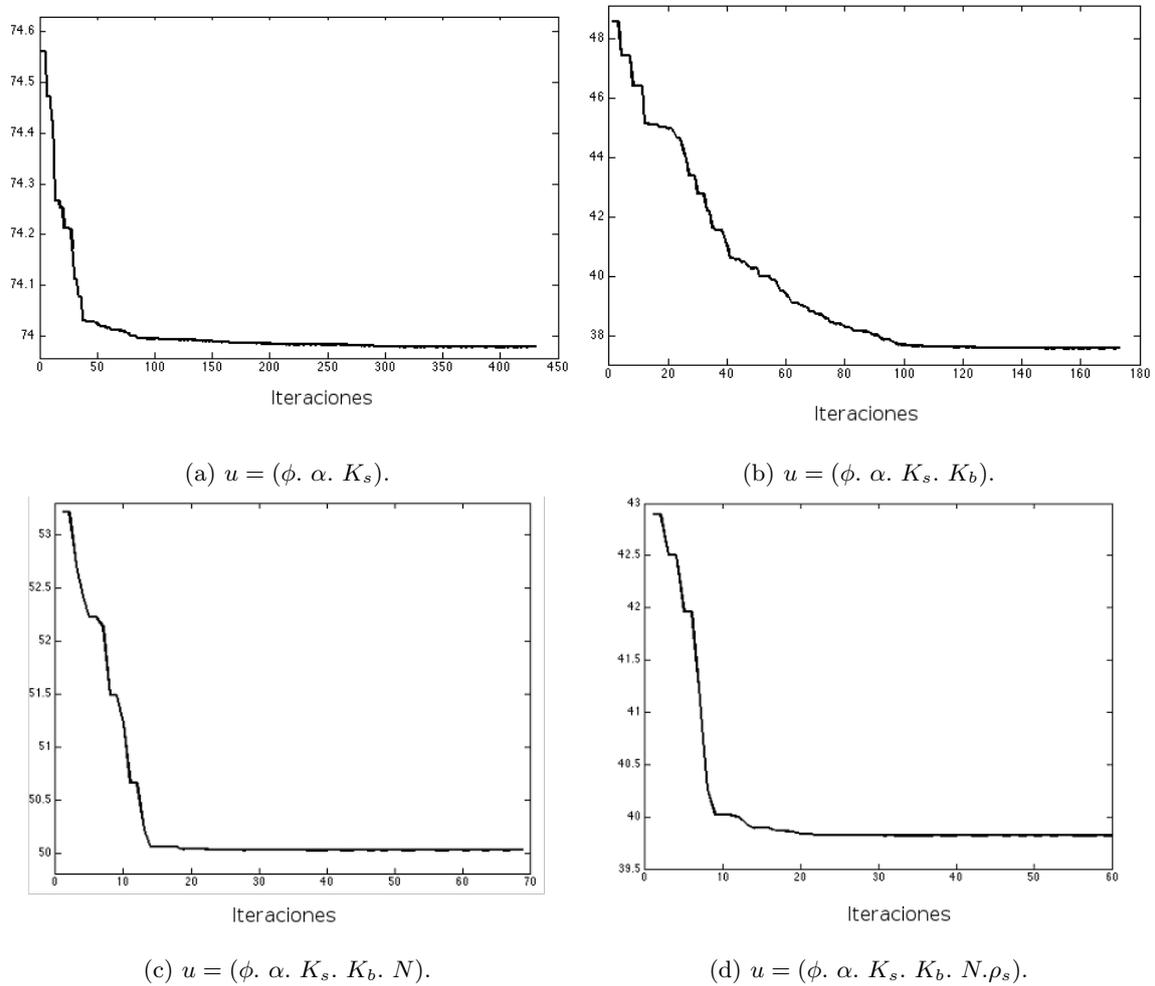


Figura 5.15: Evolución del problema (5.5) para algunas configuraciones de u .

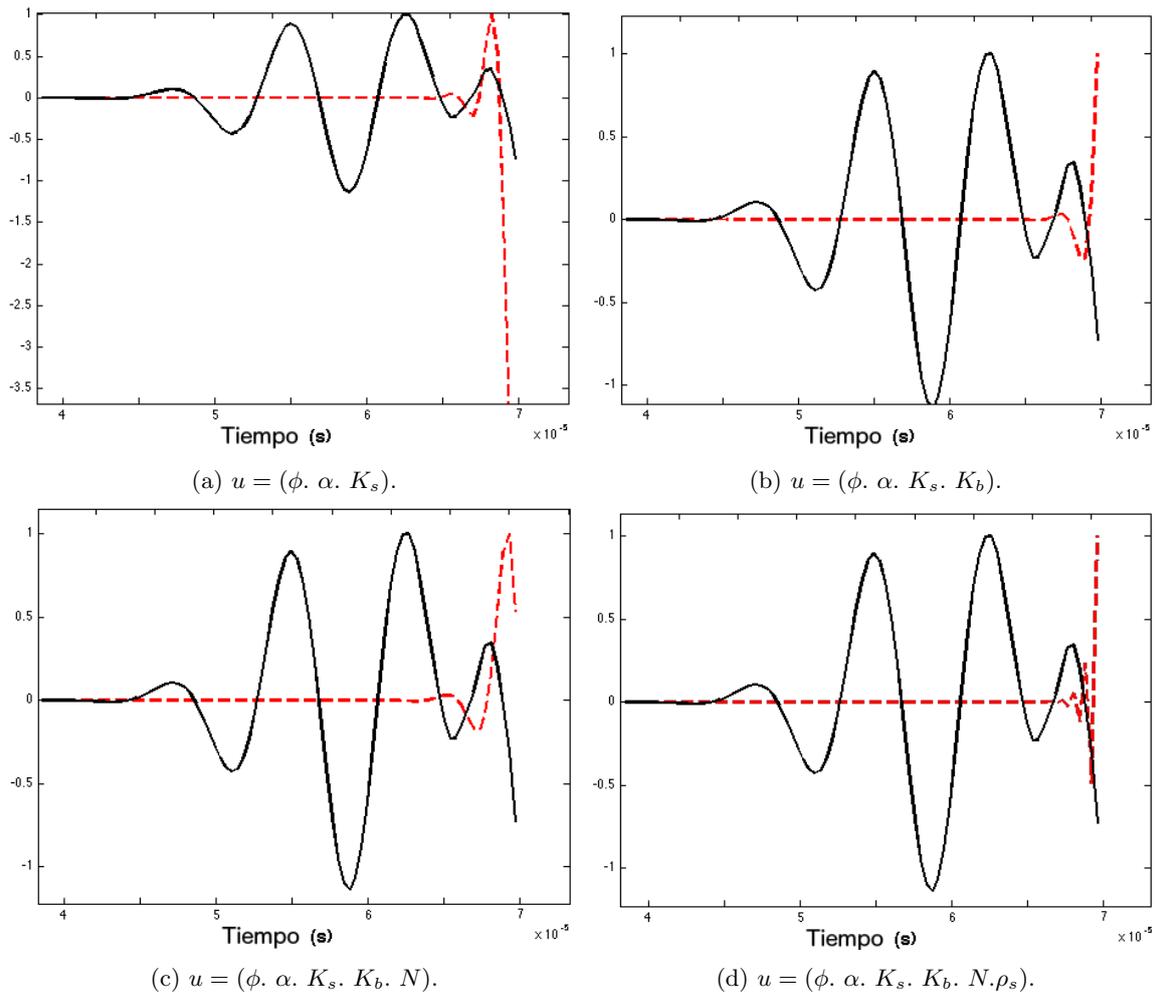


Figura 5.16: Señales obtenidas al usar u_{MAP} (línea roja discontinua) y señales generadas al usar el valor verdadero de u .

5.2.2. Estimados CM y de Intervalo

De la misma manera que en §5.1.2 se usó el punto u_{MAP} como inicio para las caminatas. En la figura 5.17 se presentan las caminatas aleatorias realizadas, mientras que en las figuras 5.18a–5.18f se muestra la distribución marginal para cada uno de los parámetros. Finalmente, con la misma notación que en §5.1.2 se tiene la señal reconstruida usando u_{CM} en las figuras 5.19a–5.19b

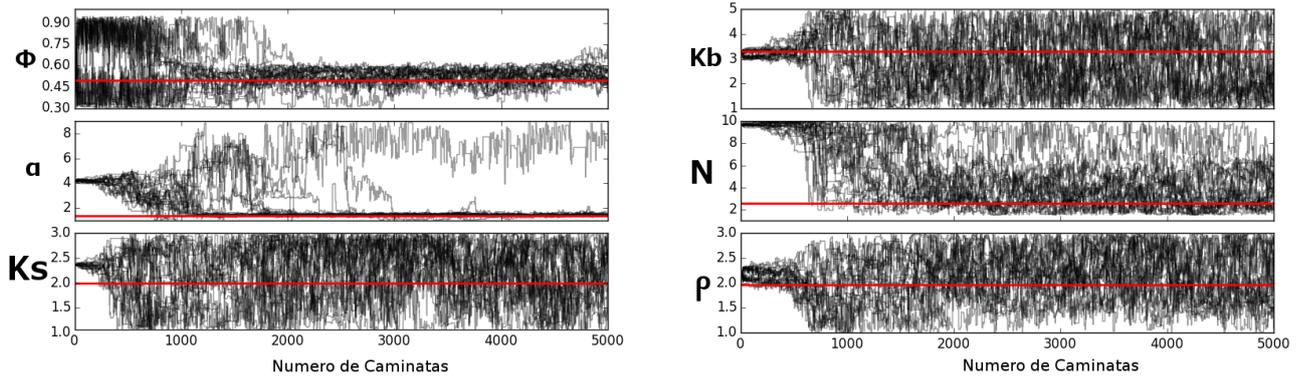


Figura 5.17: 5000 caminatas de 20 caminantes aleatorios para los parámetros ϕ , α , K_b , K_s , N y ρ_s . En rojo se muestra el valor verdadero de cada parámetro.

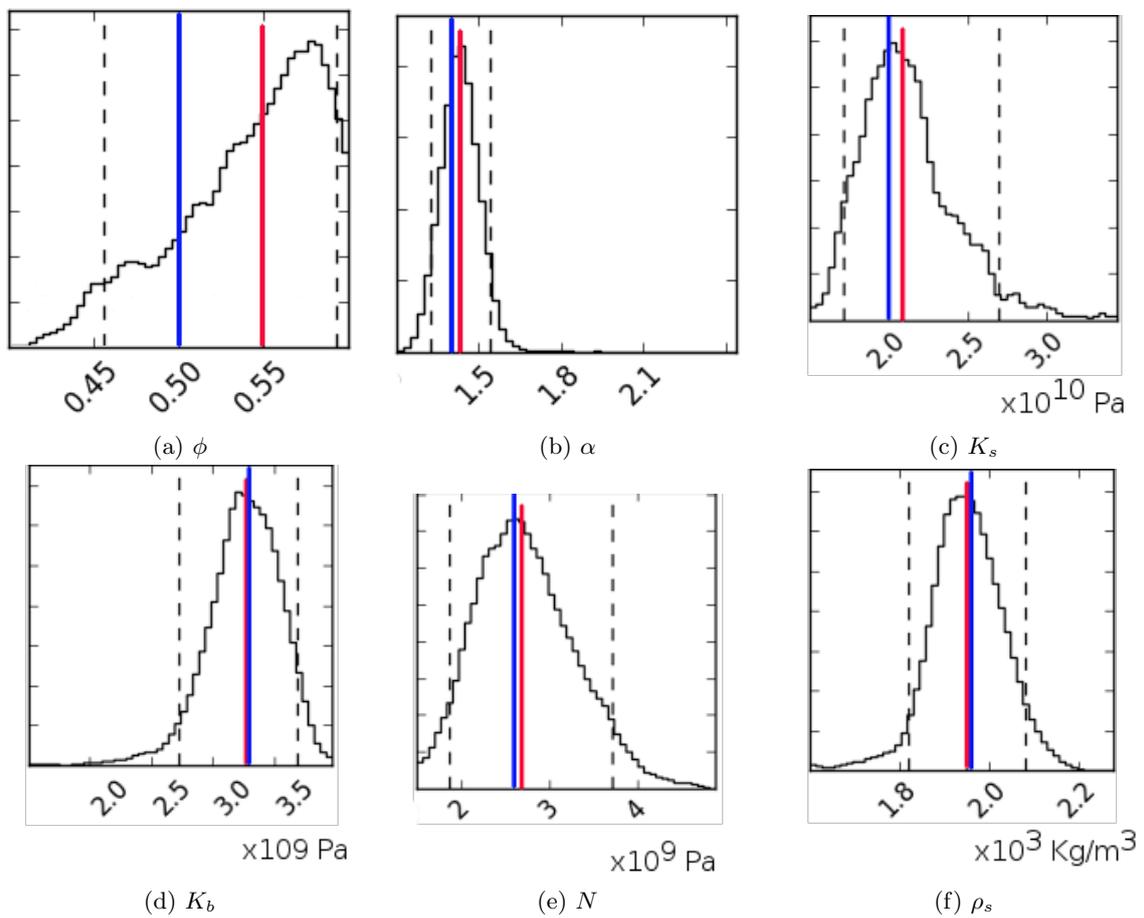


Figura 5.18: Histogramas de las distribuciones posteriores para de los parámetros al usar distribuciones a priori no informativas. En azul se muestra el valor verdadero del parámetro y en rojo el valor de la media condicional.

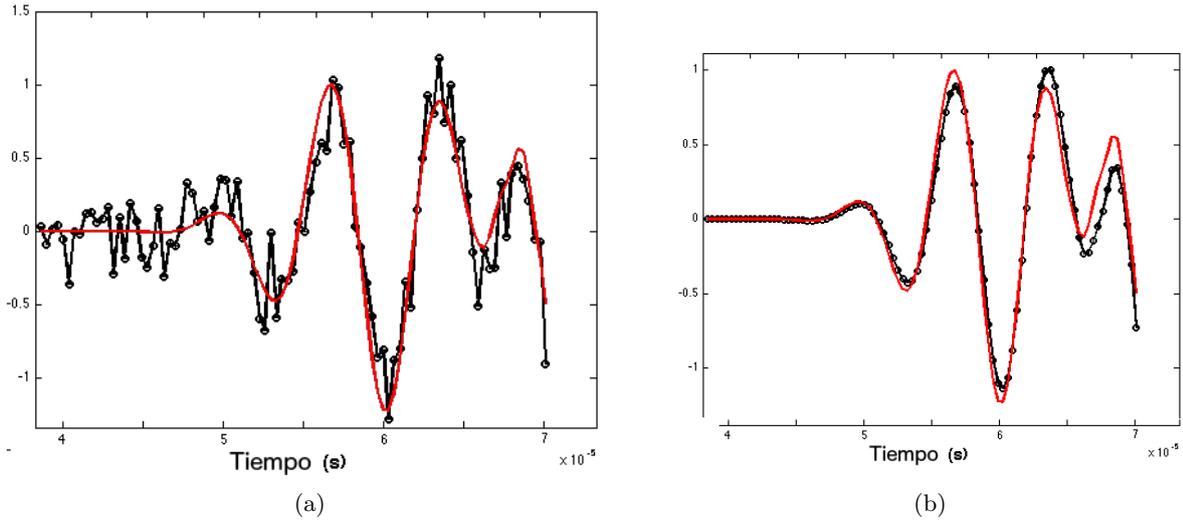


Figura 5.19: Comparación entre la señal generada (línea roja continua) usando u_{CM} y: (a) la señal ruidosa y (izquierda); (b) señal generada con el valor verdadero de u (derecha).

5.3. Comparación de Parámetros Estimados

En esta sección se resumen los valores de los parámetros estimados usando distribuciones a priori gaussianas y no informativas. Esta comparación se muestra en la tabla 5.2. Mientras que en 5.3 se tienen los errores porcentuales, definidos como

$$E_{PORCENTUAL} = 100 \frac{|u_{TRUE} - u_{ESTIMADO}|}{u_{TRUE}} \quad (5.6)$$

De la tabla 5.3, se aprecia que el estimador con mayor error porcentual en ambos casos corresponde a u_{MAP} en donde más de una componente tiene un error porcentual superior al 10 %.

Parámetro	u_{TRUE}	u_{MAP}	Distribuciones a Priori		Distribuciones a Priori		
			u_{CM}	Intervalo	u_{MAP}	u_{CM}	Intervalo
ϕ	0.5	0.541	0.536	[0.478, 0.614]	0.613	0.549	[0.505, 0.642]
α	1.4	4.171	1.421	[1.350, 1.505]	1.350	1.432	[1.321, 1.540]
K_s ($\times 10^{10}$ Pa)	2.0	2.369	2.000	$2 + [-7.8, 7.9] \times 10^{-6}$	1.382	2.085	[1.477, 2.451]
K_b ($\times 10^9$ Pa)	3.3	3.241	3.299	[3.299, 3.300]	2.301	3.270	[2.847, 3.808]
N ($\times 10^9$ Pa)	2.6	9.651	2.544	[2.226, 2.862]	4.212	2.682	[1.645, 3.482]
ρ_s ($\times 10^3$ Kg/m ³)	1.96	2.149	1.955	[1.943, 1.969]	2.351	1.949	[1.815, 2.077]

Tabla 5.2: Comparación entre los valores estimados usando distribuciones a priori gaussianas y no informativas.

Parámetro	Distribuciones a Priori Gaussianas		Distribuciones a Priori no Informativas	
	u_{MAP}	u_{CM}	u_{MAP}	u_{CM}
ϕ	8.2	7.2	22.6	9.8
α	197.92	1.42	3.57	2.28
K_s	18.45	1.1×10^{-6}	30.9	4.25
K_b	1.81	0.03	30.27	0.9
N	271.19	2.15	62	3.15
ρ_s	9.64	0.25	19.94	0.56

Tabla 5.3: Errores porcentuales en los parámetros estimados

Capítulo 6

Correlación Entre los Parámetros del Modelo de Biot y el Correcto Diagnóstico de Osteoporosis

A lo largo de los capítulos precedentes se ha planteado el problema de recuperación de parámetros del modelo de Biot mediante el enfoque Bayesiano, mostrándose que al menos en el caso de tener datos provenientes de una señal sintética como la mostrada en la figura 3.1 el problema es mal planteado pero se pueden extraer estimados puntuales mediante la media condicional que logran recuperar la forma de onda. De estos resultados se plantea la siguiente pregunta:

“¿Es posible realizar un diagnóstico correcto del riesgo de fractura mediante señales de ultrasonido como las adquiridas en [4, 9, 25]?”.

Responder a esta pregunta no es una tarea fácil, basta mencionar que a pesar de que han pasado más de 20 años desde que se reportó el uso de una tecnología de ultrasonido cuantitativo (QUS) para predecir la fuerza ósea, el campo aún no ha alcanzado un estado de madurez. Entre las diversas tecnologías QUS disponibles, al menos algunas de ellas han demostrado tener potencial para predecir riesgo de fractura en un número de circunstancias clínicas con una eficiencia equivalente comparable con las técnicas de densitometría ósea. Los dos estándares para evaluar el estado de riesgo de fractura que se usan en los dispositivos QUS actuales son la velocidad del sonido (SOS) y la BMD. Sin embargo aún no hay un consenso en como evaluar correctamente el riesgo de fractura y esto se refleja en una baja correlación en diagnóstico mediante mediciones de BMD y SOS como se muestra en la figura 6.1.

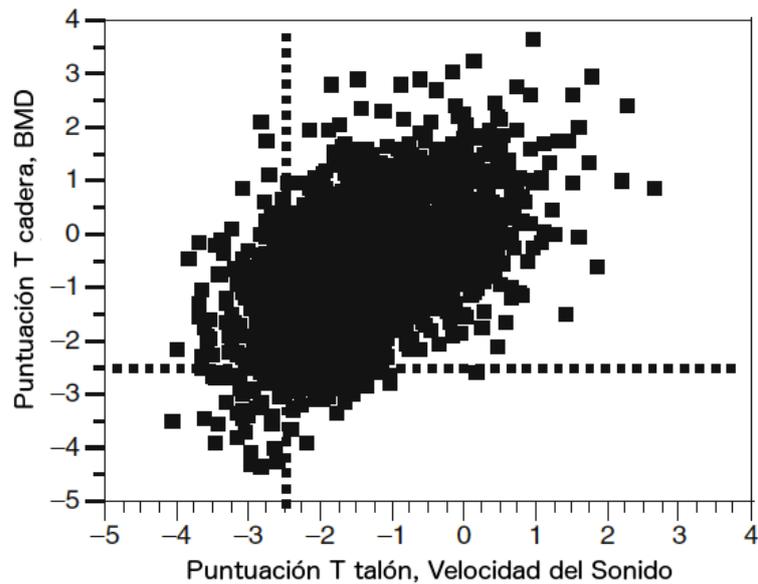


Figura 6.1: Correlación entre BMD SOS en cadera y talón, respectivamente. Las líneas punteadas marcan los umbrales de osteoporosis para ambas variables. Solamente en el rectángulo inferior izquierdo los mismos pacientes se clasifican como con osteoporosis por ambos métodos. Mientras que en los rectángulos inferior derecho y superior izquierdo una cantidad considerable de pacientes se encuentran mal clasificados. Imagen obtenida de [26].

El presente trabajo representa un esfuerzo en una dirección un tanto diferente que trata de responder otra pregunta íntimamente relacionada con la anterior:

“¿Se pueden recuperar los parámetros del modelo de Biot a través de señales obtenidas mediante ultrasonido como las adquiridas en [2, 7, 23] y realizar un diagnóstico correcto del riesgo de fractura?”.

Esta tesis sigue el camino comenzado por algunos autores como Buchanan, et al. [10, 11, 12] y Sebaa et al. [9] y contesta afirmativamente la primera parte de esta pregunta usando el enfoque Bayesiano. Pero, para ser capaces de contestar la segunda parte de la pregunta se debe de contar con señales ultrasónicas obtenidas de dos tipos de población: Personas con osteoporosis diagnosticada y personas diagnosticadas como sanas. El contar con este tipo de señales permitirá realizar estudios de discriminación, i.e. poder determinar que distribuciones tienen los parámetros en cada caso, así como también si hay alguno o más que sus magnitudes o rangos permitan discernir entre personas sanas y personas enfermas. Por lo que aún queda mucho camino por recorrer.

Capítulo 7

Conclusiones

En el presente trabajo se estudió el problema de estimación de parámetros en el modelo de propagación acústica de Biot en medios porosos tal como el hueso trabecular al usar técnicas Bayesianas usando señales sintéticas. Los parámetros con los que se generaron dichas señales sintéticas se denotan genéricamente como u_{TRUE} . Este tipo de trabajo es motivado por la idea que posteriormente se pueda realizar una estimación al usar señales obtenidas mediante ensayos no destructivos por ultrasonido y con ello realizar un diagnóstico correcto de osteoporosis. A continuación se exponen algunas de las conclusiones más relevantes obtenidas a lo largo de la tesis

- El problema de estimación de parámetros se convirtió en un problema de minimización, que en el caso suponer que la distribución de cada parámetro es Gaussiana, lleva a un problema de optimización regularizada, mientras que si se supone que la distribución es no informativa se tiene un problema de optimización no regularizada.
- En ambos problemas de minimización se observa que la función objetivo presenta diversos mínimos locales y uno global, que en el caso de las distribuciones Gaussianas coincide con el punto u_{TRUE} . Caso contrario al problema no regularizado.
- Se estimó el valor u_{TRUE} mediante tres estimadores estadísticos:
 - Estimador u_{MAP} , que corresponde a maximizar la distribución posterior mediante el método de Nelder–Mead.
 - Estimador u_{CM} , que corresponde a obtener muestras de la distribución posterior mediante el método MCMC y posteriormente calcular la media condicional.
 - Estimador de intervalo, que corresponde a obtener el histograma de la distribución posterior y calcular los cuantiles 5 y 95 para poder afirmar que con el 90 % de confianza el parámetro u_{TRUE} se encuentra entre estos cuantiles.
- Como se mencionó anteriormente, el problema de minimización presenta diversos óptimos locales por lo que, si al inicializar el algoritmo lejos de u_{TRUE} , entonces u_{MAP} será estimado cerca de este mínimo. Por otro lado, aunque la búsqueda de u_{CM} se inicie lejos de el punto óptimo (por ejemplo al usar un valor incorrecto de u_{MAP}), las caminatas mediante MCMC, convergen a una estimación correcta del parámetro, i.e. con errores menores a 10 % en cada una de las componentes.

7.0.1. Trabajo Futuro

A continuación se enuncian algunas consideraciones que se pueden hacer para lograr mejorar los resultados:

- Como ya se menciona en §3, la teoría de Biot predice la existencia de dos ondas longitudinales, denominadas rápida y lenta. Por lo que se debe de estudiar si existe relación de estas con la variación de los parámetros del modelo.

- Definir la función $g(p)$, con p representando la presión leída en un transductor receptor como

$$g(p) = \frac{1}{2} \|\mathcal{M}p - y\|_H^2, \quad (7.1)$$

donde \mathcal{M} es un operador de observación lineal, y representa datos (ruidosos) obtenidos experimentalmente y $\|\cdot\|_H$ representa alguna norma apropiada para el problema.

Por lo que la estimación de parámetros se puede escribir como el problema de optimización con restricciones

$$\min_{p \in P} g(p) \quad (7.2a)$$

s.a.

$$\rho_{11}\ddot{U}^s + \rho_{12}\ddot{U}^f = P\nabla\nabla \cdot U^s + Q\nabla\nabla \cdot U^f - N\nabla \times \nabla \times U^s - b\frac{\partial}{\partial t}(U^s - U^f), \quad (7.2b)$$

$$\rho_{22}\ddot{U}^f + \rho_{12}\ddot{U}^s = Q\nabla\nabla \cdot U^s + R\nabla\nabla \cdot U^f + b\frac{\partial}{\partial t}(U^s - U^f), \quad (7.2c)$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} - c^2\nabla^2 P + S(x,t) = 0. \quad (7.2d)$$

Es importante notar que p a su vez es una función de θ , donde θ es un vector que representa los parámetros de hueso que se desean estimar y en este caso es de la forma:

$$\theta = (\rho_{11}, \rho_{12}, \rho_{22}, P, Q, R, N). \quad (7.3)$$

Para aproximar la solución a (7.2a) se debe se puede usar un método de descenso como sigue

Algorithm 2 Algoritmo de solución al problema de optimización con restricciones

- 1: Inicializar θ_0
 - 2: **while** No hay convergencia **do**
 - 3: Calcular el gradiente $\nabla g(p_k(\theta_k))$
 - 4: Determinar el tamaño de paso δ_k
 - 5: $\theta_{k+1} = \theta_k + \delta_k \nabla g(p_k(\theta_k))$
 - 6: **end while**
-

Aunque se puede calcular numéricamente $\nabla g(p_k(\theta_k))$, en cada cálculo se debe evaluar la función objetivo 7 veces, lo que significa resolver las ecuaciones diferenciales (7.2b–7.2d) ese número de veces, por lo que para un mallado y tiempo grandes, esto resulta impracticable. Para evitar realizar este cómputo tan caro se propone usar la idea de resolver el problema por el método de la ecuación adjunta[35].

- Resolver el problema inverso usando señales experimentales para poder recuperar parámetros en hueso trabecular real.
- Disminuir el tiempo de cómputo.

Bibliografía

- [1] The American Society for Nondestructive Testing. *Introduction to Nondestructive Testing* <https://www.asnt.org/MinorSiteSections/AboutASNT/Intro-to-NDT>
- [2] Laugier, P., and Haeiat, G. (Eds.). (2011). Bone quantitative ultrasound. Springer.
- [3] Haire, T. J., and Langton, C. M. (1999). Biot theory: A review of its application to ultrasound propagation through cancellous bone. *Bone*, 24(4), 291-295.
- [4] Hosokawa, A., and Otani, T. (1997). *Ultrasonic wave propagation in bovine cancellous bone*. The Journal of the Acoustical Society of America, 101(1), 558-562.
- [5] Hosokawa, A., and Otani, T. (1998). *Acoustic anisotropy in bovine cancellous bone*. The Journal of the Acoustical Society of America, 103(5), 2718-2722.
- [6] Liney, G. P., Bernard, C. P., Manton, D. J., Turnbull, L. W., and Langton, C. M. (2007). *Age, gender, and skeletal variation in bone marrow composition: a preliminary study at 3.0 Tesla*. Journal of Magnetic Resonance Imaging, 26(3), 787-793.
- [7] Fellah, Z. E. A., Chapelon, J. Y., Berger, S., Lauriks, W., and Depollier, C. (2004). *Ultrasonic wave propagation in human cancellous bone: Application of Biot theory*. The Journal of the Acoustical Society of America, 116(1), 61-73.
- [8] Wear, K. A., Laib, A., Stuber, A. P., and Reynolds, J. C. (2005). *Comparison of measurements of phase velocity in human calcaneus to Biot theory*. The Journal of the Acoustical Society of America, 117(5), 3319-3324.
- [9] Sebaa, N., Fellah, Z. E. A., Fellah, M., Ogam, E., Wirgin, A., Mitri, F. G., and Lauriks, W. (2006). *Ultrasonic characterization of human cancellous bone using the Biot theory: inverse problem*. The Journal of the Acoustical Society of America, 120(4), 1816-1824.
- [10] Buchanan, J. L., and Gilbert, R. P. (2007). *Determination of the parameters of cancellous bone using high frequency acoustic measurements*. Mathematical and computer modelling, 45(3), 281-308.
- [11] Buchanan, J. L., and Gilbert, R. P. (2004). *Measuring osteoporosis using ultrasound*. Advances in Scattering and Biomedical Engineering, Eds. DI Fotiadis, CV Massalas, World Scientific, Singapore, 484-494.
- [12] Buchanan, J. L., and Gilbert, R. P. (2007). *Determination of the parameters of cancellous bone using high frequency acoustic measurements II: inverse problems*. Journal of Computational Acoustics, 15(02), 199-220.
- [13] Pakula, M., Padilla, F., Laugier, P., and Kaczmarek, M. (2008). *Application of Biot's theory to ultrasonic characterization of human cancellous bones: determination of structural, material, and mechanical properties*. The Journal of the acoustical Society of america, 123(4), 2415-2423.
- [14] Johnson, D. L., Plona, T. J., Scala, C., Pasierb, F., and Kojima, H. (1982). *Tortuosity and acoustic slow waves*. Phys. Rev. Lett., 49(25), 1840-1844.
- [15] Biot, M. A. (1956). *Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid. I. Low-frequency range*. The Journal of the acoustical Society of america, 28(2), 168-178.

- [16] Biot, M. A. (1956). *Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid. II. Higher frequency range.* the Journal of the Acoustical Society of America, 28(2), 179-191.
- [17] Fellah, Z. E., Sebaa, N., Fellah, M., Mitri, F. G., Ogam, E., Lauriks, W., and Depollier, C. (2008). *Application of the biot model to ultrasound in bone: direct problem.* IEEE Transactions on Ultrasonics Ferroelectrics and Frequency Control, 55(7), 1508-1515.
- [18] Lovera, O. M. (1987). *Boundary conditions for a fluid-saturated porous solid.* Geophysics, 52(2), 174-178.
- [19] Goodman, J., and Weare, J. (2010). *Ensemble samplers with affine invariance.* Communications in applied mathematics and computational science, 5(1), 65-80.
- [20] Foreman-Mackey, D., Hogg, D. W., Lang, D., and Goodman, J. (2013). *emcee: the MCMC hammer.* Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 125(925), 306.
- [21] Stuart, A. M. (2010). *Inverse problems: a Bayesian perspective.* Acta Numerica, 19, 451-559.
- [22] Kaipio, J., and Somersalo, E. (2006). *Statistical and computational inverse problems* (Vol. 160). Springer Science and Business Media.
- [23] Goldberg, A. (1991). *A course in econometrics.*
- [24] Gilks, W., Richardson, S., and Spiegelhalter, D. (1996). *Markov Chain Monte Carlo in Practice*, ser. Interdisciplinary Statistics Series.
- [25] Solis-Najera, S. E., Neria, P. J. A., Medina, L., Garipov, R., and Rodríguez, A. O. (2014, November). *Preliminary study of slow and fast ultrasonic waves using MR images of trabecular bone phantom.* In XIII Mexican Symposium on Medical Physics (Vol. 1626, No. 1, pp. 209-212). AIP Publishing.
- [26] Gluer, C. C., Eastell, R., Reid, D. M., Felsenberg, D., Roux, C., Barkmann, R., ... and Clowes, J. (2004). *Association of five quantitative ultrasound devices and bone densitometry with osteoporotic vertebral fractures in a population-based sample: the OPUS Study.* Journal of Bone and Mineral Research, 19(5), 782-793.
- [27] Olsson, D. M., and Nelson, L. S. (1975). *The Nelder-Mead simplex procedure for function minimization.* Technometrics, 17(1), 45-51.
- [28] IOF, *Osteoporosis in the Workplace: the social, economic and human costs of osteoporosis on employees, employers and governments* (2002).
- [29] Pothuaud, L., Benhamou, C. L., Porion, P., Lespessailles, E., Harba, R., and Levitz, P. (2000). *Fractal Dimension of Trabecular Bone Projection Texture Is Related to Three-Dimensional Microarchitecture.* Journal of Bone and Mineral Research, 15(4), 691-699.
- [30] L. J. Melton, III, E. A. Chrischilles, C. Cooper, A. W. Lane, and B. L. Riggs, *Perspective. How many women have osteoporosis?*, J Bone Miner Res 7(9), 1005-1010 (1992).
- [31] A. Randell, P. N. Sambrook, T. V. Nguyen, H. Lapsley, G. Jones, P. J. Kelly, and J. A. Eisman, *Direct clinical and welfare costs of osteoporotic fractures in elderly men and women*, Osteoporos int 5(6), 427-432 (1995).
- [32] W. Kalender, K. Engelke, T. P. Fuerst, C.C. Gluer, P. Laugier, and J. Shepherd, *Quantitative aspects of bone densitometry (ICRU Report 81)*, J ICRU 9(1), 1-130 (2009).
- [33] WHO, *Assessment of osteoporotic fracture risk and its application to screening for postmenopausal osteoporosis*, (World Health Organization, Geneva, 1994).
- [34] P. Laugier, *Instrumentation for in vivo ultrasonic characterization of bone strength*, IEEE Trans Ultrason Ferroelectr Freq Control 55(6), 1179-1196 (2008).
- [35] Capistran, M., Moreles, M. A., and Pena, J. (2012). *On full seismic waveform inversion by descent methods in a lattice.* Appl. Math, 6(2), 193-203.