

Tipo de artículo: Artículo original
Temática: Matemática Computacional
Recibido:17/08/2016 | Aceptado:10/10/2016

Modelación geométrica de microestructuras granulares poliédricas

Geometric modeling of polyhedral granular microstructures

Roberto L. Roselló Valera ^{1*}, Irvin P. Pérez Morales ¹, Harold Díaz-Guzmán Casañas ¹

¹ Centro de Estudios de Mecánica Computacional y Métodos Numéricos en la Ingeniería (CIMCNI). Carretera a Camajuaní Km 5½, Santa Clara, Villa Clara, Cuba. {[rosello](mailto:rosello@uclv.edu.cu), [ipm](mailto:ipm@uclv.edu.cu), [harold](mailto:harold@uclv.edu.cu)}@uclv.edu.cu

* Autor para correspondencia: rosello@uclv.edu.cu

Resumen

La influencia de las heterogeneidades micro-estructurales en el procesamiento de materiales es un tema de vital importancia, la cual explica la necesidad de modelar materiales virtuales equivalentes estadísticamente a la micro-estructura considerada, y conectar esta descripción con un método numérico como el Método de Elementos Finitos (MEF) o Método de Elementos Discretos (MED). La modelación se basa en el uso de un método de avance frontal para la generación de partículas esféricas y el método de particiones de Laguerre, permitiendo obtener una aproximación de la forma y tamaño de los granos reales del material. El método de avance frontal asegura datos estadísticos como el tamaño de los granos. Se presenta un ejemplo de modelación de la microestructura de rocas.

Palabras clave: generación de partículas; microestructuras granulares poliédricas; diagrama de Laguerre

Abstract

The influence of micro-structural heterogeneities in materials processing is a vital issue, which explains the need to model equivalent statistically virtual materials to the micro-structure considered, and connect this description with a numerical method such as Finite Elements Methods (FEM) or Discrete Element Method (DEM). The modeling is based on the use of advancing front method for the generation of spherical particles and Laguerre tessellations, allowing an approximation of the shape and size of the material grains. The advancing front method ensures statistical data such as the size of the grains. An example of modeling the microstructure of rocks is presented.

Keywords: particle packing, polyhedral granular microstructure, Laguerre tessellations

Introducción

En muchos campos de la física y la ingeniería tales como metalurgia, biología, mecánica de rocas, biomecánica, etc., el sector empresarial y los científicos, están interesados en las estructuras granulares poliédricas. A menudo, una muestra de una estructura granular se modela por un paralelepípedo en 3D (un paralelogramo en 2D) que contiene granos aproximados por esferas (círculos). Más allá de la simplificación de los cálculos geométricos, se provee un modelo aceptable en muchos casos donde el cómputo con geometrías de grano reales (formas complejas) es muy difícil de realizar.

Es de nuestro interés de investigación, el modelado de la microestructura de materiales con estructuras granulares poliédricas. En la modelación de este tipo de estructura, se utiliza un algoritmo de empaquetamiento de avance frontal y el método de particionamiento de Laguerre [Lubachevsky and Stillinger, 1990]. En este estudio, nos centraremos en generar partículas esféricas densamente empaquetadas y respetando una ley de distribución de tamaño. Dado que la distribución de partículas esféricas sirve como base para construir las celdas gracias al diagrama de Laguerre, el modelado geométrico de materiales con microestructura granular se puede considerar como un problema clásico de empaquetamiento de esferas. Además, en la estructura generada, los granos no se deben solapar unos con otros o intersecar los bordes del dominio, y su repartición debe ser irregular para cubrir todas las configuraciones posibles. Varios acercamientos han sido propuestos para generar partículas dentro de un dominio en dos y tres dimensiones. Estos métodos pueden ser clasificados en dos familias: técnicas dinámicas y técnicas constructivas. En la sección 2 se presenta una visión general sobre estas técnicas.

El método más usado para modelar estructuras poliédricas es conocido como Método de Particiones de Voronoi (MPV) o diagrama de Voronoi. Este método realiza una partición del espacio de dimensión d en poliedros convexos o celdas. Debido a su semejanza, en apariencia geométrica y estadística, con varias estructuras celulares y patrones estocásticos presentes en la naturaleza, el diagrama de Voronoi ha tenido muchas aplicaciones en varios campos. Pero el MPV presenta limitaciones en cuanto a la distribución del tamaño de celda debido a que el núcleo de la celda es la única manera de definir el diagrama de Voronoi sin tener control de las características de esta. Para superar esta dificultad, surge el Método de Particionamiento de Laguerre (MPL) o diagrama de Laguerre. Este diagrama se corresponde con el diagrama de Voronoi con la diferencia de que los vértices de las celdas están desplazados a partir de pesos asignados a los puntos, en este caso los pesos mencionados se corresponden con el tamaño de las partículas en el empaquetamiento de esferas no intersecadas. En [Benabbou, 2009; Benabbou, 2010] se hace uso del MPL para generar estructuras

granulares. En su trabajo las esferas fueron generadas con una distribución de celda impuesta para aproximar el tamaño de celda.

La principal diferencia entre este trabajo y los mencionados anteriormente donde se modelan estructuras granulares es el método de generación de partículas esféricas. En la presente investigación se hace uso del método de avance frontal propuesto en [Roselló, 2015] se hace una comparación con otros métodos de generación de partículas donde. De esta comparación se concluye que el nuevo método de avance frontal propuesto presenta mejor desempeño que los demás en cuanto a fracción de volumen para el caso de generación de esferas.

Materiales y métodos

En esta sección se presenta de manera general el algoritmo de generación de avance frontal utilizado para la obtención de los empaquetamientos de partículas esféricas que serán la base de la modelación estructuras granulares poliédricas; así como la definición del diagrama de Laguerre y el procedimiento para la construcción de celdas de Laguerre a partir del empaquetamiento de esferas.

Método de empaquetamiento de avance frontal

Antes de presentar el algoritmo general del método empaquetamiento de avance frontal es necesario explicar algunos aspectos para una mejor comprensión. Los elementos del frente (pivotes), serán aquellas partículas con las cuales aún es posible colocar otras nuevas. Intersecciones entre elementos del frente no son permitidas, tampoco entre el resto de las partículas. Una esfera (círculo) se define por un punto que determina su centro y un radio descrito por la granulometría del tamaño de los granos. La posición de cada esfera (círculo) es calculada usando un elemento del frente y tres esferas (dos círculos) de manera que la nueva (el nuevo) esfera (círculo) sea tangente a estos. La posición de la nueva partícula es válida si no existe intersección con las partículas ya existentes y está completamente contenida en el dominio.

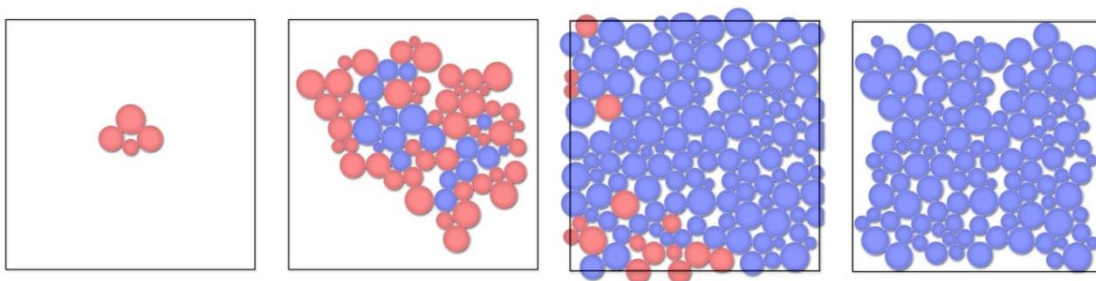


Figura 1. Proceso de generación para el caso 2D

El primer paso consiste en la creación del frente inicial, colocando un conjunto de esferas (círculos) dentro del dominio y tangentes entre ellas. Luego, la generación es realizada mediante la propagación del frente hacia los límites de la geometría. En la Figura 1 se ilustra el proceso de generación para el caso bidimensional y en la Figura 2 se muestra el pseudocódigo del algoritmo.

```

Data: lista_partículas ( $L$ ), lista_pivotes ( $C_{ext}$ )
Result: empaquetamiento de partículas
// Crear frente inicial
1 generar Partículas_Iniciales  $L$ ;
2  $C_{ext} = L$ ;
3 while  $C_{ext} \neq \phi$  do
4   generar Radio  $r$ ;
5   seleccionar partícula_pivote  $piv$  de  $C_{ext}$ ;
6   seleccionar partículas_vecinas  $vecinas$  a  $piv$ ;
7   partícula  $p \leftarrow$  generar( $piv, vecinas, r$ );
8   if validar( $p$ ) then
9      $C_{ext} \leftarrow C_{ext} \cup \{p\}$ ;
10     $L \leftarrow L \cup \{p\}$ ;
11  else
12     $C_{ext} \leftarrow C_{ext} - \{p\}$ ;
13  end
14 end
    
```

Figura 2. Pseudocódigo del algoritmo de empaquetamiento de avance frontal

Comparación con otros métodos

Adicionalmente a la comparación realizada en [Roselló, 2015] de este algoritmo para el caso de esferas, fue realizada una comparación para el caso de círculos con un método dinámico de reacomodamiento colectivo descrito en [Lubachevsky and Stillinger, 1990] y el método “*inwards packing method*” propuesto en [Bagi, 2005], considerando el modelo propuesto por este último:

- **geometría contenedora:** cuadrado de 100x100 cm,
- **tamaño de partícula:** radios distribuidos uniformemente en el intervalo [0.06, 0.42].

Se toma como parámetro de comparación los valores de fracción de área. La cantidad de partículas obtenidas está alrededor de 39 000. Los resultados se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Comparación con otros métodos existentes en 2D.

Método de generación	Medio de cómputo (PC)	Fracción de área	Tiempo
Lubachevsky and Stillinger, 1990	IBM PC, 3GHz, Pentium 4	0.84	Horas
Bagi, 2005	IBM PC, 3GHz, Pentium 4	0.82	180 s
Roselló, 2015	Intel Core 2 Quad, 2.83 GHz	0.84	2.35 s

A partir del resultado de la comparación se concluye que con el nuevo método de generación de avance frontal [Roselló, 2015] se obtiene un resultado comparable con el método dinámico y mejor que el método propuesto por [Bagi, 2005] en cuanto a fracción de área. En cuanto a tiempo de computación el nuevo método es mucho mejor, sin embargo, la diferencia entre los medios de cómputo que hace la comparación en cuanto a tiempo de cómputo no sea justa y solo se tome como una referencia.

Construcción del diagrama de Laguerre

El Método de Particionamiento de Laguerre (diagramas de Laguerre) consiste en usar un conjunto de partículas esféricas (circulares) no intersecadas que sirven de base para la construcción de la microestructura. Este método ha sido usado exitosamente para modelar estructuras policristalinas [Fan, 2004]. El diagrama de Laguerre se define por un conjunto de N núcleos y pesos $(S_i, R_i), i = 1, \dots, N$. Cada par (S_i, R_i) define una celda de Laguerre L_i , la cual está compuesta por todos los puntos más cercanos a S_i que a otro núcleo, a través de la distancia definida en (1):

$$L_i = \left\{ x \in \mathbb{R}^d : \Pi(x, S_i) = \min_{j \neq i} \Pi(x, S_j) \right\} \quad (1)$$

donde $\Pi(x, S_i) = d(x, S_i)^2 - R_i^2$ es la distancia de x a S_i .

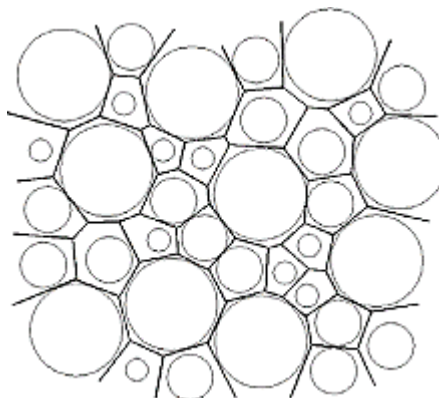


Figura 3. Ejemplo de diagrama de Laguerre

Como resultado del nuevo método de avance frontal se obtiene un conjunto compacto de partículas esféricas (o circulares) cuya distribución de tamaño coincide con la distribución de tamaño de los granos del material. A partir de este empaquetamiento es posible obtener una estructura de celdas similar a la forma de los granos observados en la realidad mediante el uso del diagrama de Laguerre construido sobre la nube de puntos constituida por los centros de las partículas y donde se consideran como pesos los radios de estas.

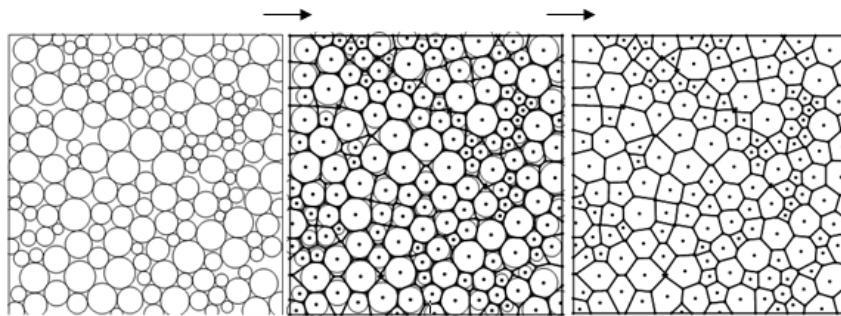


Figura 4. Obtención de celdas de Laguerre a partir de un empaquetamiento de círculos

El proceso de modelar geoméricamente una microestructura poligonal (poliédrica), mediante diagramas de Laguerre construidos a partir de un empaquetamiento de círculos (esferas), se representa en la Figura 4 para el caso bidimensional.

Resultados y discusión

Para la modelación de la microestructura de rocas se cuenta con un muestrario confeccionado a partir de un estudio realizado en el Laboratorio de Infraestructura (InfraLab) de la Universidad de Brasilia (UnB) como parte de la colaboración que existe entre esta y la Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas. Para este estudio se escoge tipo de roca de naturaleza sedimentaria y se clasifica como Arenisca (Figura 5). Macroscópicamente es de color rosa claro y de estructura maciza. El mayor porcentaje en su composición microscópica corresponde al cuarzo; el resto de la composición corresponde a roca alterada ferruginosa, feldespato alterado y minerales opacos. Esta es de granulación fina, con características sedimentarias bien establecidas, observándose granos desde redondeados hasta casi angulosos, desde equidimensionales hasta casi alargados y de selección comedida, que caracteriza una arena de muy acabada a arena media. Se tienen datos e imágenes de secciones planas del examen microscópico.

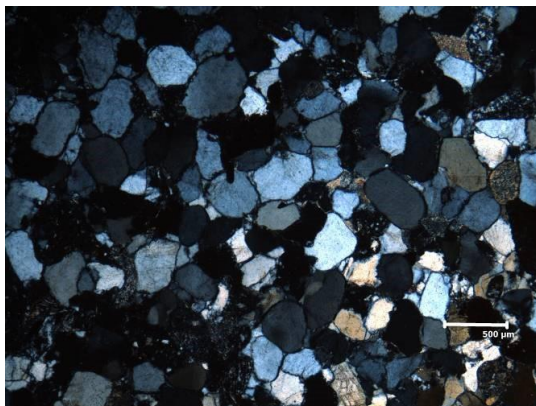


Figura 5. Imagen microscópica (sección plana) de la muestra de arenisca

Cuatro características son principalmente responsables de la complejidad de la microestructura, las cuales están asociadas con las propiedades ópticas de los minerales y su heterogeneidad: (a) diferentes tonos y patrones pueden ser observados para el mismo tipo de mineral, dependiendo de la orientación del eje cristalográfico con respecto al plano de corte de la SP; (b) los límites de los granos pequeños rara vez se observan con claridad debido a la interpenetración de los granos; (c) los minerales muestran una superficie no homogénea dentro de los límites de grano; y (d) minerales oscuros se producen debido a la extinción óptica, y no es posible identificarlos mineralógicamente. Estas características de la imagen microscópica hacen difícil el análisis automático de la imagen, por lo que se hacen necesarias algunas suposiciones para simplificar el procedimiento.

Para reducir la complejidad de la caracterización microestructural se asume que: (a) 50 secciones planas dan una información representativa de la microestructura de la roca y (b) los granos de los minerales son homogéneos dentro de sus contornos. Sobre la base de la suposición (a) la metodología utilizada en la modelación microestructural consiste en usar las medidas del tamaño de grano para seleccionar el modelo estadístico apropiado. Sobre la base de la suposición (b) los bordes de los granos son usados para aproximar y calcular el tamaño de estos.

Los límites de los granos en las imágenes originales han sido aproximados con círculos tomando como descriptor del tamaño de los granos el diámetro de estos. Esta aproximación se hace con el objetivo obtener un particionamiento de Laguerre a partir de un empaquetamiento de círculos (Figura 4) con tamaños distribuidos según los tamaños de los granos. De igual manera el método permite el uso de funciones teóricas continuas o empíricas discreteas como descriptores de los tamaños de los granos en el caso de que se conozcan.

La modelación de la microestructura consiste principalmente en escoger una función de densidad estadística apropiada para modelar la evolución cuantitativa de los descriptores de la microestructura, en este caso, el tamaño de los granos. La variable x del tamaño de grano fue modelada con ocho funciones de distribución de densidad $f(x)$: Cauchy, Chi-cuadrado, Exponencial, Gamma (γ), Laplace, Normal, Uniforme y Weibull.

Tabla 2. Prueba KS para el tamaño de grano

	Distribución de probabilidad						
Prueba KS	Cauchy	Chi-cuadrado	Exponencial	Gamma	Normal	Uniforme	Weibull
valor-P	0.0045	0.0	4.31E-7	0.02131	0.0043973	0.0	0.26007

La pregunta que surge es ¿cuál de estas funciones es la más adecuada para modelar la tendencia de los tamaños? Para determinar a cuál de estas distribuciones se ajustan los datos de tamaño de grano se utiliza el test de bondad de ajuste Kolmogorov-Smirnov (KS), el cual calcula la máxima distancia entre la distribución acumulada de los datos y la distribución acumulada estadística. De los resultados de la Tabla 2 se puede concluir que la función de distribución de Weibull es el modelo más apropiado para los tamaños de los granos de todas las muestras en las secciones planas para cada tipo de microestructura; de esta manera es posible reproducir virtualmente modelos bidimensionales que se correspondan con datos reales de tamaño de grano del material. Como resultado se tiene una estructura granular que aproxima la forma y los granos de la microestructura de la roca (Figura 6).

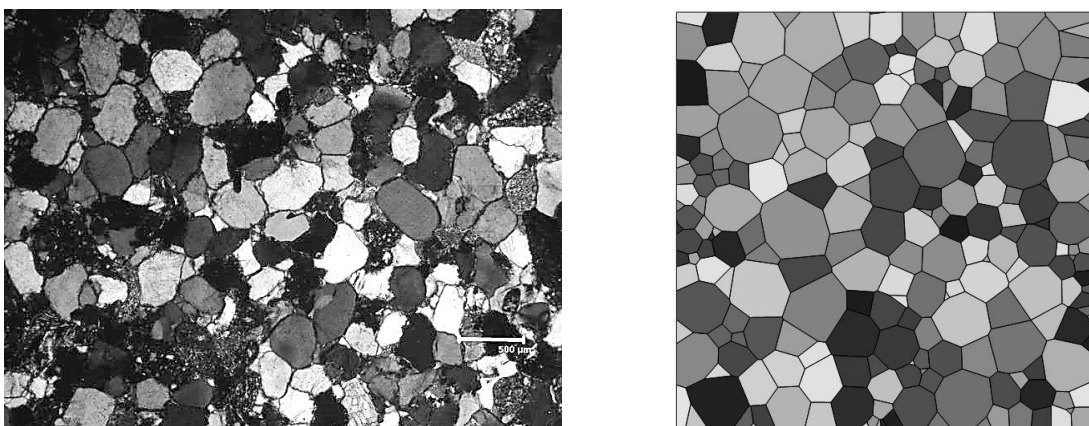


Figura 6. Secciones planas de roca arenisca. Izquierda: microestructura real; derecha: microestructura virtual

Conclusiones

Arribar a conclusiones es la fase más compleja e importante de cualquier proceso investigativo, como lo es en este trabajo. En esta se sintetiza de forma general los resultados relevantes obtenidos, los que repercuten de forma directa en la novedad científica del mismo. En el presente trabajo se considera el tema del modelado geométrico de microestructuras granulares poliédricas en dos dimensiones para lo cual se utiliza un nuevo método de generación de partículas, este respeta la ley de distribución del tamaño de las partículas y genera empaquetamientos con alto valor de fracción de área. Se logra modelar de manera aproximada la microestructura poliédrica de los granos.

Referencias

- BAGI, K. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies. *Granular Matter*, 28 January 2005, 7, 31–43.
- BENABBOU, A., H. BOROUCHAKI, P. LAUG AND J. LU Geometrical modeling of granular structures in two and three dimensions. Application to nanostructures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2009, 80(4), 425-454.
- BENABBOU, A., H. BOROUCHAKI, P. LAUG AND J. LU Numerical modeling of nanostructured materials. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2010, 46(1-2), 165-180.
- FAN, Z., Y. WU, X. ZHAO AND Y. LU Simulation of polycrystalline structure with Voronoi diagram in Laguerre geometry based on random closed packing of spheres. *Computational Materials Science*, 2004, 29, 301-308.
- IMAI, H., M. IRI AND K. MUROTA Voronoi diagram in the Laguerre geometry and its applications. *SIAM Journal on Computing*, 1985, 14, 93-105.
- LUBACHEVSKY, B. D. AND F. H. STILLINGER Geometric Properties of Random Disk Packings. *Journal of Statistical Physics*, 1990, 60(5/6).
- ROSELLÓ VALERA, R., I. PÉREZ MORALES, S. VANMAERCKE, C. RECAREY MORFA, et al. Modified algorithm for generating high volume fraction sphere packings 2015, 2(2), 161-172.