

Método de Monte Carlo para el cálculo computacional de las propiedades mecánicas de un medio poroso

Liz Marina Áñez Borges¹, Juan Ramón Primera Ferrer^{2}, Anwar Hasmy³,
Pedro Franceschini², Néstor Sánchez² y Thierry Woignier⁴*

¹Departamento de Física, Facultad de Ingeniería.

²Departamento de Física, Facultad Experimental de Ciencias,
Universidad del Zulia, Maracaibo, Venezuela.

³Cecalcula, Corporación Parque Tecnológico de Mérida 5101, Venezuela.

⁴UR Seqbio IRD-PRAM, quartier petit Morne, BP 213, 97200 Le Lamentin Cedex 2, France.

Recibido: 11-04-08 Aceptado 20-02-09

Resumen

Este estudio presenta un método para el cálculo computacional del Módulo de Elasticidad (E) de un medio poroso simulado de geometría conocida. El medio poroso se simula como una red elástica de fuerzas centrales, al cual se aplica una deformación conocida. Aplicando el método Monte Carlo, se calcula la energía de deformación mínima. Se obtiene E a partir de las relaciones teóricas entre la energía de deformación de un sistema y su deformación. El método computacional se valida al aplicarlo en sistemas de solución analítica conocida. Para medios porosos generados a través de algoritmos de agregación en dos dimensiones, a saber: Agregación Secuencial Aleatoria (RSA, por sus siglas en inglés), en el rango de concentraciones estudiadas, se encontró que E disminuye según aumenta la porosidad del sistema. El método propuesto es sensible a variaciones en la estructura de la matriz porosa.

Palabras clave: método Monte Carlo, módulo de elasticidad, medio poroso, RSA.

Monte Carlo method for computing the mechanical properties of porous media

Abstract

This research reports the design of a method for computing the elasticity modulus (E) of a known geometry porous medium. The porous medium is simulated as an elastic network of central forces, to which a known deformation is applied. The minimum deformation energy is calculated applying the Monte Carlo Method. E is obtained from theoretical relations between the deformation energy of a system and its deformation. The method is validated by applying to a known analytical solution. The porous media model used in 2 dimensions is Random Sequential Aggregation (RSA). As for the range of concentrations studied for the RSA system, it was found that the elasticity modulus E decreases as the porosity of the system increases. Our method is able to differentiate the variations in the structures of different porous media.

Key words: Monte Carlo method, elasticity modulus, porous media, RSA.

* Autor para la correspondencia: juanrpf@hotmail.com

Introducción

Muchos de los estudios de propiedades físicas en medios porosos son motivados por una pregunta central: ¿cómo los parámetros macroscópicos efectivos, tales como las propiedades mecánicas y de transporte, son influenciados por la microestructura geométrica del medio? Las propiedades físicas efectivas (macroscópicas) de un medio poroso dependen, además de las propiedades de las fases involucradas, de la información microestructural, incluyendo la fracción volumétrica de cada una de las fases presentes. Las propiedades efectivas generalmente no muestran relaciones simples envolviendo las fracciones volumétricas, lo cual sugiere que las mismas resultan de complejas interacciones entre las fases presentes (1).

Identificar el papel que desempeña la geometría de un cuerpo en sus propiedades efectivas tales como su respuesta mecánica, permitiría explicar y predecir el comportamiento mecánico de un material conociendo su geometría o incluso sintetizar materiales con requerimiento de propiedades mecánicas específicas mediante el control de su geometría. En construcción, por ejemplo, la resistencia de los materiales porosos utilizados es sin duda un factor determinante; de hecho, el módulo de elasticidad (E) es una propiedad mecánica utilizada extensamente, en especial en el diseño de estructuras.

Tradicionalmente el estudio de la interacción entre las propiedades mecánicas y los parámetros texturales o geométricos de un medio se lleva a cabo a través de una gran cantidad y variedad de experimentos, pero el uso de sistemas modelos de geometría conocida permite analizar de forma sistemática los efectos de las diferentes propiedades texturales en el medio, por lo que se convierte en una alternativa para abordar el problema.

Estudios teóricos y computacionales han abordado el tema utilizando redes de percolación elástica, conceptos de escalamiento, modelos de simulación de fenóme-

nos elásticos, enfoque basados en Patrones Morfológicamente Representativos (MRP, por sus siglas en inglés), química de defectos puntuales, ecuaciones de propagación de ondas, entre otros (2-10). Esta investigación presenta un método para el cálculo computacional del Módulo de Elasticidad (E) de un medio poroso simulado de geometría conocida utilizando el método Monte Carlo.

La Teoría Matemática de Elasticidad, desarrollada para cuerpos que se deforman gradualmente, a temperatura constante, desde un estado inicial de cero esfuerzo hasta un estado final que difiere infinitesimalmente del estado inicial, explica la respuesta mecánica de un sólido a través del tensor de constantes de rigidez elástica (C_{ijkl}), el cual constituye la constante de proporcionalidad entre el tensor de esfuerzos (σ_{ij}) y el tensor de deformaciones específicas (e_{kl}) en la Ley de Hooke generalizada:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \cdot e_{kl} \quad [1]$$

Las 81 constantes del tensor de rigidez elástica pueden reducirse a 36 debido a la simetría de los tensores σ_{ij} y e_{kl} (11). La notación matricial simplifica las expresiones tensoriales, y la Ley de Hooke puede expresarse como:

$$\sigma_m = c_{mn} \cdot e_n \quad (m, n = 1, 2, \dots, 6) \quad [2]$$

Haciendo consideraciones de energía las 36 constantes independientes se reducen a sólo 21 (12). El número de constantes elásticas independientes se reduce aún más si el sólido posee elementos de simetría (13). Los sólidos isotrópicos sólo poseen dos constantes de rigidez independientes C_{11} y C_{12} (11, 12).

Cuando un cuerpo es deformado adiabáticamente, la energía potencial, por unidad de volumen, almacenada en el cuerpo debido a la deformación se conoce como densidad de energía de deformación o energía elástica. En un sólido isotrópico, la densidad de energía elástica está dada por (12):

$$W = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + C_{12} (e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy}) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) \quad [3]$$

En el caso de un sólido isotrópico $C_{44} = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12})$.

Muchos investigadores, al hacer cálculos computacionales o simulación de fenómenos elásticos en redes de percolación en 2D y 3D, utilizan la siguiente expresión para definir la densidad de energía de deformación (2-8):

$$W = \frac{\alpha}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [(\bar{u}_i - \bar{u}_j) \hat{R}_{ij}]^2 g_{ij} \quad [4]$$

donde W : Densidad de energía elástica de una red elástica.

α : Constante de fuerzas centrales.

\bar{u}_i, \bar{u}_j : Desplazamiento del sitio i y j respectivamente.

\hat{R}_{ij} : Vector unitario desde el sitio i al j .

g_{ij} : Parámetro asociado a la existencia del enlace $i-j$.

Puede observarse que la expresión anterior considera únicamente las fuerzas centrales (CF, por sus siglas en inglés "Central Forces"), es decir, fuerzas que actúen en la línea que une los sitios $i-j$.

Sin embargo, con frecuencia es difícil y en ocasiones imposibles evaluar estas constantes de rigidez elástica mediante experimentación directa. En consecuencia, se utilizan propiedades susceptibles de medición para caracterizar los materiales, conocidos como los módulos técnicos, entre los que se encuentran el módulo de Young o de elasticidad (E), módulo de corte (G) y la relación de Poisson (ν) que relaciona los dos anteriores (14). Estos módulos técnicos se manifiestan al aplicar ensayos mecánicos y constituyen

las propiedades mecánicas que describen la respuesta del material en la región elástica. Tanto las constantes de rigidez elástica como los módulos técnicos son constantes que describen la misma respuesta de un sólido sujeto a un sistema de esfuerzos, por lo que bajo condiciones ideales de simulación donde puede restringirse la deformación en algunas direcciones podrían igualarse constantes equivalentes, por ejemplo, para una deformación normal pura $C_{11} = E$ (14). Este análisis abre la posibilidad de usar las relaciones de la teoría matemática de la elasticidad en el cálculo del módulo de elasticidad mediante simulación computacional.

El método computacional

El modelo de simulación propuesto para el cálculo del módulo de elasticidad, considera al medio poroso como una red elástica de fuerzas centrales, que actúan sobre la línea que une los centros de dos partículas que están en contacto. Las condiciones de borde son fijas lo cual implica que las partículas localizadas en los bordes del sistema, se comportan como paredes estáticas que no se deforman durante todo el proceso, y limitan el movimiento de las partículas.

El cálculo de las fuerzas entre partículas se realiza utilizando la expresión que corresponde a la fuerza de un resorte deformado:

$$F = -\alpha \cdot x \quad [5]$$

La constante α del resorte corresponde a la constante de fuerza central, y la deformación " x " del resorte es igual a la deformación de la distancia entre centros de dos partículas i y j que interactúan, en la dirección ij final después del desplazamiento. La fuerza resultante sobre una partícula i es igual a la sumatoria de las fuerzas que producen las partículas con las que esté interactuando o en contacto.

El cálculo de la densidad de energía elástica o de deformación del sistema poroso

se realiza utilizando la ecuación [4]. Esta es la energía potencial almacenada en los esfuerzos internos del material. El programa calcula diferenciales de energía, debido a que asume que la energía del sistema no deformado es igual a cero.

Puede observarse en la expresión para la densidad de energía elástica o de deformación (ecuación [4]), que dicha energía depende de las posiciones relativas de las partículas que conforman el sistema. Es sabido que debe existir una configuración de las partículas que minimice la energía del sistema cuando este sea deformado. Es decir, una deformación inicial impuesta sobre una parte del sistema producirá que las partículas se muevan en busca del equilibrio, hacia una configuración que minimice la energía del sistema (15). La energía final o mínima, que resulta del reacomodo interno de las partículas, corresponde a la densidad de energía de deformación del sistema.

El programa aplica el método Monte Carlo para hallar la configuración de mínima energía, va seleccionando de manera aleatoria cada una de las partículas para desplazarlas. El movimiento de una partícula se hace en la dirección de la fuerza resultante que actúa sobre ella. Los desplazamientos son iguales a una fracción de la deformación (eps) que ha sufrido del sistema, ponderada por el valor de la fuerza resultante; y el movimiento de una partícula se hace efectivo, si y sólo si, dicho desplazamiento hace disminuir la energía de deformación del sistema. El proceso se repite hasta que se observe que un movimiento en cualquier de ellas aumenta la energía de deformación, en cuyo caso, se considera que se ha alcanzado el mínimo de energía. En este punto de equilibrio la fuerza resultante sobre cada partícula ha de ser cero.

Una vez conocido el valor de la densidad de energía de deformación mínima para una deformación dada, se compara con la expresión teórica (ecuación [3]) en el caso de sólidos isotrópicos y se determina el valor de

la constante de rigidez elástica que corresponda según sea la naturaleza de la deformación impuesta.

En los cálculos efectuados se condicionó el sistema para que únicamente se aplicara una deformación normal en una dirección arbitraria, impidiendo cualquier otra deformación normal o cortante en otra dirección, por lo que la expresión [3] se reduce a:

$$W = \frac{1}{2} C_{11} e_{xx}^2 \quad [6]$$

Despejando la constante de rigidez elástica, se tiene que:

$$C_{11} = \frac{2W}{e_{xx}^2} \quad [7]$$

Como se explicó anteriormente, bajo estas condiciones especiales de esfuerzo puede decirse que $C_{11} = E$ (Módulo de Elasticidad), esto es:

$$C_{11} = E = \frac{2W}{e_{xx}^2} \quad [8]$$

El método propuesto se validó mediante la comparación de resultados en sistemas ordenados de constante elástica equivalente (Keq) conocida analíticamente. Estos sistemas fueron: sistemas de resortes en serie, en paralelo y una red cuadrada de resortes en 2D.

La estructura del medio poroso utilizado en el estudio se obtiene a partir de un algoritmo computacional cuyos parámetros de formación pueden ser controlados y, por ende, su geometría es también susceptible a ser controlada. Se utilizó el modelo de Agregación Secuencial Aleatoria (RSA, por sus siglas en inglés: Random Sequential Aggregation). Este modelo de absorción secuencial al azar se basa en la agregación al azar de N partículas sobre una red cúbica o cuadrada. El modelo RSA simula, por ejemplo,

un sistema poroso obtenido a través de técnicas de evaporación o bien de partículas coloidales que precipitan sobre un sustrato (16).

Discusión de resultados

Utilizando el método Monte Carlo, se calculó el módulo de elasticidad de los sistemas trabajados, los cuales fueron modelados como empaquetamientos de esferas de radio $r=0.5$ unidades arbitrarias (u.a.) al que se le aplica una deformación (eps) y la constante elástica microscópica utilizada es $\alpha=1$. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 1.

Puede observarse que en los tres sistemas utilizados para validar el programa, los resultados analíticos coinciden con el obtenido a través del cálculo computacional; validando de esta forma la utilización del método propuesto en el cálculo del módulo de elasticidad en medios porosos.

Cuando se trabaja sobre sistemas finitos, como en el caso computacional, es importante conocer la influencia que el tamaño del sistema (L) tiene sobre los resultados; L corresponde a la longitud del lado del cuadrado (2D) o del cubo (3D) que forma el medio simulado; de manera que los cálculos se efectúen sobre sistemas cuyos resultados no reflejen dependencia con el tamaño. La figura 1 muestra el comportamiento del módulo de Elasticidad en función del tamaño del sistema, para un medio poroso ge-

nerado a través del algoritmo de agregación RSA en 2D con concentración de partículas de 60%.

Puede observarse que para $L \geq 35$ existe una tendencia a estabilizarse en el valor de E; también los errores a partir de este tamaño se minimizan y llegan a valores por debajo del 5%. Tomando en cuenta este resultado, la capacidad y tiempo de cálculo, se decidió efectuar los cálculos del módulo de elasticidad en sistemas con $L=40$.

En el sistema RSA la fracción de materia está dada por la concentración de partículas C, y la porosidad corresponde a su complemento (1-C). Las propiedades mecánicas de los medios porosos se calculan sobre sistemas que percolan, condición que se alcanza para porosidades alrededor a 50%.

Con el propósito de observar la influencia que tiene la conexión entre partículas del sistema sobre su respuesta mecánica, se estudió el comportamiento del número de coordinación (Z) y su relación con el módulo de elasticidad. La figura 2 muestra la evolución del número de coordinación con la concentración de partículas para el sistema estudiado. El número de coordinación aumenta según aumenta la concentración de partículas C.

La figura 3 muestra el resultado del módulo de elasticidad calculado utilizando el método Monte Carlo descrito anteriormente, sobre en medios porosos generados por el algoritmo RSA.

Tabla 1
Cálculo computacional de K_{eq} .

N° Partículas	Arreglo	eps (u.a)	E (comp)	K_{eq} (teórica)
10	2×5 (paralelo)	0,10	5,00000	5,00000
20	20×1 (serie)	0,25	0,05263	0,05263
36	6×6 (red)	0,25	1,20000	1,20000

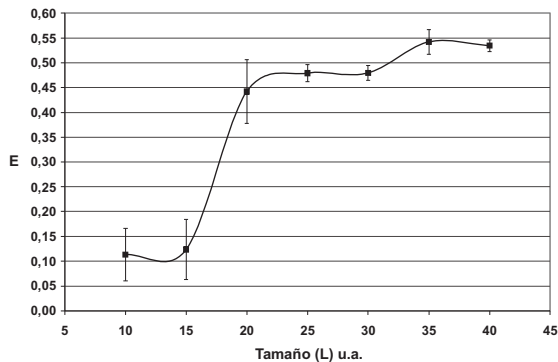


Figura 1. Módulo de Elasticidad en función del tamaño del sistema para $C=60\%$. Sistema RSA 2D.

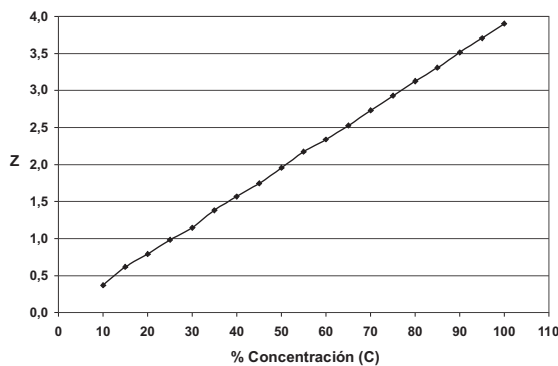


Figura 2. Número de Coordinación para el sistema RSA ($L=40$). Sistema RSA 2D.

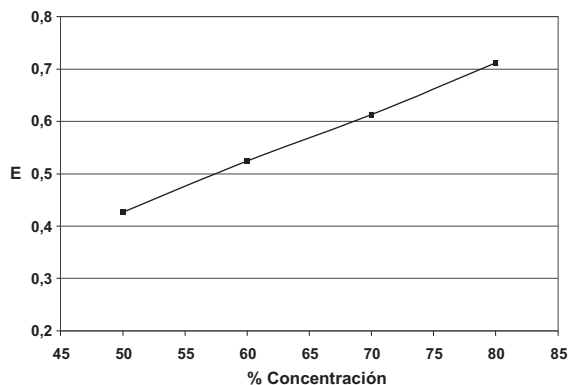


Figura 3. Módulo de Elasticidad en función de la concentración de partículas para el sistema RSA ($L=40$). Sistema RSA 2D.

La gráfica permite comprobar un resultado que generalmente se anticipa intuitivamente, a saber, que el módulo de elasticidad aumenta a mayor concentración de materia. La tendencia lineal marcada que exhibe el sistema RSA coincide con los resultados reportados de estudios similares realizados sobre redes de percolación elástica (8).

Las tendencias lineales crecientes observadas en el módulo de elasticidad y el número de coordinación en función de la concentración dejan ver que la forma como la materia está interconectada es importante al momento de estudiar la respuesta mecánica que dará un sistema ante la aplicación de esfuerzos.

Conclusiones

El método computacional propuesto es válido para el cálculo del módulo de elasticidad de medios porosos, como lo deja ver el hecho de que los resultados computacionales coinciden con los resultados analíticos cuando se aplica el modelo a un sistema de solución analítica conocida.

Los resultados obtenidos muestran que el método Monte Carlo para el cálculo del módulo de elasticidad es efectivo al coincidir con resultados reportados de estudios similares que aplican otros métodos.

Asimismo, puede decirse que el método es aplicable a medios porosos con estructuras diferentes, puesto que se basa en la interacción partícula-partícula independiente del arreglo que ellas forman; lo que lo hace sensible a variaciones en los parámetros geométricos de sistemas porosos y fortalece su uso en estudios enfocados en la comprensión de las relaciones entre las propiedades mecánicas de un medio poroso y su geometría.

Referencias bibliográficas

1. TORQUATO S. *Random Heterogeneous Materials. Microstructure and Macro-*

-
- scopic Properties.** Editorial Springer. Estados Unidos de América. 2002.
 2. ARBABI S., SAHIMI M. *Phys Rev B* 38(10): 7173-7176. 1988.
 3. ARBABI S., SAHIMI M. *Phys Rev B* 47(2): 695-702. 1993.
 4. ARBABI S., SAHIMI M. *Phys Rev B* 47(2): 703-712. 1993.
 5. GARCÍA X. Estudio Acústico de Modelos de Medios Porosos con Saturación Parcial de Fluidos (Para obtener el título de Magíster Scientiarum en Física). Centro de Estudios Avanzados, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas IVIC. Caracas (Venezuela). 82 pp. 2004.
 6. HE H., THORPE M. *Phys Rev Lett* 54(19): 2107-2110. 1985.
 7. KANTOR Y., WEBMAN I. *Phys Rev Lett* 52(21): 1891-1894. 1984.
 8. THORPE M., GARBOCZI E. *Phys Rev B* 35(16): 8579-8586. 1987.
 9. MARCADON V., HERVE E., ZAOUI A. *Int J Solid Struct* 44(25-26): 8213-8228. 2007.
 10. PAVLOV I., POTAPOV A., MAUGIN G. *Int J Solid Struct* 43(20): 6194-6207. 2006.
 11. SCHREIBER E., ANDERSON O., SOGA N. *Elastic Constants and their Measurement.* Editorial Mc Graw-Hill. Estados Unidos de América. 1973.
 12. LOVE A.E. *A Treatise of the Mathematical Theory of Elasticity.* Cuarta Edición. Editorial Dover Publications. Estados Unidos de América. 1944.
 13. KITTEL C. *Introducción a la Física del Estado Sólido.* Segunda Edición. Editorial Reverté S.A. Madrid (España). 1975.
 14. KOERBER G. *Properties of Solids.* Editorial Prentice-Hall. Estados Unidos de América. 1962.
 15. FEYMAN R., LEIGHTON R. *Física. Volumen 2: Electromagnetismo y Materia.* Editorial Addison-Wesley Iberoamericana. Estados Unidos de América. 1987.
 16. PRIMERA J. Synthese, Structure et Propriétés de Transport des Gels Composites SiO₂-SiO₂. Etude Experimentale et Simulation (Para obtener el título de Doctor). Facultad de Ciencias de la Universidad de Montpellier II. 200. París (Francia). 2002.