

# Caracterización y evaluación sistémica de empaquetamientos de partículas como conjuntos iniciales para simulaciones con elementos discretos

## Systemic characterization and evaluation of particle packings as initial sets for discrete elements simulations

Roberto L. Roselló Valera, Irvin P. Pérez Morales, Carlos A. Recarey Morfa

Universidad Central Marta Abreu de Las Villas, Villa Clara, Cuba  
Correo electrónico: [rosello@uclv.edu.cu](mailto:rosello@uclv.edu.cu)

Este documento posee una [licencia Creative Commons Reconocimiento/No Comercial 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)



Recibido: 23 de febrero del 2017    Aprobado: 16 de marzo del 2017

### Resumen

La metodología creada comprende varias técnicas de caracterización de empaquetamientos de partículas. Las técnicas tienen en cuenta factores como dimensión y forma de partículas, ocupación espacial, homogeneidad, conectividad e isotropía, entre otros. Esta clasificación e integración de varias técnicas permite llevar a cabo un proceso de caracterización que hace posible evaluar sistémicamente los empaquetamientos de partículas para garantizar la calidad de las mallas iniciales en las simulaciones de elementos discretos, tanto en la micro como en la macroescala. Se crearon varias nuevas técnicas y se presentan otras que tienen mejoras en cuanto a las existentes. Técnicas de otras disciplinas fueron adaptadas para ser utilizadas en la evaluación de sistemas de partículas. Las técnicas de la metodología permiten caracterizar fácilmente los medios a nivel de la microescala (geometrías continuas - aceros, microestructuras de rocas, etc., y geometrías discretas) y la macroescala. Finalmente se muestran ejemplos de aplicaciones.

Palabras claves: empaquetamiento de partículas, método de elementos discretos, técnicas de caracterización y evaluación de empaquetamiento de partículas

### Abstract

A methodology that comprises several characterization techniques for particle packings was created. The methodology techniques take into account factors such as dimension and shape of particles, space occupation, homogeneity, connectivity and isotropy, among others. This classification and integration of several techniques allows to carry out a characterization process that allows to systemically evaluate the particle packings in order to guarantee the quality of the initial meshes in Discrete Element simulations, both in the micro and the macro scales. Several new techniques were created and others that have improvements in the existing ones are presented. Techniques from other disciplines were adapted to be used in the evaluation of particle systems. The techniques of the methodology allow to easily characterize media at the level of the micro-scale (continuous geometries – steels, rocks microstructures, etc., and discrete geometries) and the macro-scale. Examples of applications are shown.

Key words: particle packing, Discrete Element Method, characterization and evaluation techniques of particle packings

## INTRODUCCIÓN

Los conjuntos de partículas dan lugar a patrones geométricos complicados que habitualmente requieren ser analizados con modelos matemáticos apropiados. El campo de investigación que busca proporcionar tales modelos es la llamada Geometría Estocástica [1]. Dentro de esa disciplina científica, la investigación se centra principalmente en los procesos puntuales, y tal disciplina es fácilmente extensible a una aplicación al caso de las partículas. En [2] se definen varias estadísticas que pueden describir la forma geométrica y la variabilidad espacial de los sistemas de partículas (homogeneidad, isotropía, etc.). Sin embargo, se pueden desarrollar nuevas técnicas y todas pueden utilizarse de manera unificada.

Las simulaciones numéricas con el Método de Elementos Discretos (DEM) están estrechamente relacionadas con las técnicas de evaluación de empaquetamientos de partículas, ya que estas últimas garantizan parcialmente el éxito de la simulación. En varias investigaciones anteriores, se han desarrollado o aplicado muchas técnicas separadas, pero el problema necesita ser abordado de una manera sistémica. Varias técnicas separadas para evaluar embalajes de partículas son tratadas en la literatura científica [3-11]. Estas pueden agruparse en las dos categorías siguientes: Técnicas que dependen (directamente o no) de la geometría de las partículas y técnicas que no dependen en absoluto de la geometría de las partículas. El primer grupo incluye fracción de volumen, porosidad, isotropía, aleatoriedad de las áreas formadas por intersección con planos de corte, covarianza, distribución de contacto esférica, función de covarianza y coeficiente de autocorrelación, etc. Las técnicas que no dependen de la geometría de las partículas incluyen el tejido tensor, el número de coordinación, la homogeneidad de los centros de las partículas y la aleatoriedad del centro a las líneas centrales que unen a las partículas en contacto, entre otras técnicas. Otra mejor clasificación sería tener en cuenta la función que tiene la técnica, como el llenado del espacio, la homogeneidad, la isotropía, la conectividad y las características de las partículas individuales. Una de las técnicas descritas es la homogeneidad de los centros de partículas, que se mide en [3], comprobando la uniformidad del número de centros en las células de una partición espacial regular. Esta manera de medir la homogeneidad tiene la desventaja de depender del tamaño de la celda, y se propone un mejor enfoque en el presente trabajo.

Las técnicas de evaluación de empaquetamientos que dependen de las formas de partícula existen principalmente para el caso más simple, que son esferas. Dichas técnicas deben generalizarse a otras formas de partículas, con el fin de evaluar empaquetamientos de formas distintas de las esferas que se utilizarán en simulaciones de DEM. Se han llevado a cabo estudios con cierto grado de completitud para algunos empaquetamientos [6], empleando algunas técnicas aisladas. Un análisis estadístico espacial para esferas con radio y posición aleatoria se presenta en [6]. Sin embargo, las técnicas se aplican allí sin un enfoque sistémico. A veces es conveniente poder cuantificar la aleatoriedad de un sistema de cuerpos; por ejemplo, si es necesario realizar una simulación DEM de un material isotrópico, es conveniente que el empaque desde el cual comience la simulación sea lo más homogéneo posible. Varias técnicas para evaluar la aleatoriedad de los sistemas de partículas para simulaciones computacionales se presentan en [3]. El enfoque solo se aplica a las partículas esféricas. En otras investigaciones se han implementado enfoques más completos, y se han utilizado más técnicas (como la verificación de la uniformidad de las coordenadas de los centros). En otras investigaciones como [8], se han utilizado algunos parámetros de caracterización como el radio medio y el tensor de tejido. Este último radio medio se define como la media cuadrática (cúbica) en 2D (3D), y el tensor del tejido tiene la propiedad de que sus valores propios son iguales en una media completamente isotrópica. Las características del espacio vacío entre las esferas reordenadas por gravedad se ha estudiado con Delaunay Tessellations [11]. La estructura vacía se ha cuantificado con funciones de densidad de probabilidad y con funciones de conectividad. Según los autores de [11], será necesario, como parte de una investigación futura, relacionar cuantitativamente las medidas obtenidas de morfología y topología con las propiedades de transporte del material.

Se puede decir como conclusiones genéricas, que las técnicas de evaluación de empaquetamientos encontradas en la literatura, solo se han aplicado a casos específicos. No existe una formulación general y sistémica aplicada a la evaluación de los empaquetamientos. Además, las técnicas para la caracterización local que dependen de las formas de las partículas no han sido analizadas estadísticamente y ni siquiera han sido estudiadas con estadística descriptiva. Teniendo en cuenta las conclusiones genéricas anteriores y el estado del arte del tema, es obvio que es necesario establecer un enfoque general y sistémico para evaluar y caracterizar los sistemas de partículas.

## MATERIALES Y MÉTODOS

Como se ha expresado anteriormente, en este trabajo se han clasificado las técnicas de evaluación en dos grandes grupos: Técnicas que dependen de las formas de las partículas; técnicas que no lo hacen. Se propone una clasificación aún más integral, mediante la cual las técnicas se agrupan según su función. Esta clasificación permite tener un enfoque sistémico para evaluar y caracterizar las empaquetaduras de partículas. Las técnicas de evaluación pueden ser utiliza-

das con varios propósitos, tales como 1. Para estudiar y encontrar el tamaño apropiado de un elemento de volumen representativo (RVE) en DEM; 2. Caracterizar el conjunto inicial de partículas en DEM y verificar si el embalaje inicial cumple los requisitos necesarios con respecto a la calidad y semejanza con el medio real; 3. Estudiar el desempeño de los diferentes algoritmos de generación de embalajes; 4. Tener criterios de evaluación para el embalaje de partículas; 5. Estudiar la evolución de los parámetros de evaluación del empaque a lo largo de una simulación DEM, así como utilizar otras técnicas encontradas en la literatura [2].

Como se ha mencionado anteriormente, las técnicas de caracterización pueden agruparse según su función. Esto determina el enfoque sistémico de la evaluación, que incluye otras técnicas encontradas en la literatura [2], incluyendo la isotropía macro, la homogeneidad y la aleatoriedad de las líneas centro-centro entre partículas, etc. La clasificación detallada de las técnicas de evaluación de empaquetamientos con respecto a su función es la siguiente: 1. Forma y dimensión de las partículas; 2. Ocupación espacial; 3. Homogeneidad del embalaje; 4. Conectividad; 5. Isotropía. Muchas de las técnicas de caracterización de empaquetamientos pueden aplicarse a diferentes niveles. Pueden aplicarse global o localmente. Si se tiene un embalaje de forma genérica, se deben seleccionar varios RVE, para aplicar dentro de ellos las técnicas de evaluación de embalaje. De esta manera se puede poner en práctica un uso masivo y sistémico de todas las técnicas formuladas en este trabajo. Por último, se puede aplicar un sistema de inferencia difusa que tenga en cuenta los intereses de investigación.

### Caracterización de la forma y dimensiones de la partícula

Describir una partícula en 3D puede ser más complejo de lo que parece. Para fines prácticos, es conveniente describir el tamaño de partícula con parámetros genéricos únicos, denominados dimensiones equivalentes. Sin embargo, a menos que las partículas sean esferas perfectas (algo raro en el mundo real), hay muchas maneras de describir el tamaño de una partícula. Ese es el principal desafío en el análisis del tamaño de partícula. ¿Cómo describir un objeto 3D con un solo parámetro? Para resolver esto, se pueden emplear varias definiciones. Los parámetros para caracterizar la morfología de las partículas deben basarse en criterios que cumplan las siguientes condiciones: 1. Criterios intuitivos; 2. Criterios normalizados; 3. Criterios de sensibilidad. Los criterios intuitivos deben basarse en una comprensión humana adecuada, teniendo en cuenta la forma en que el investigador percibe el nombre del parámetro y, al mismo tiempo, su interpretación física. El criterio de normalización debe exigir valores limitados entre 0 y 1 siempre que sea posible, facilitando la interpretación y procesamiento de datos. El criterio de sensibilidad debe capturar la desviación como la forma ya probada en la vida cotidiana. A pesar de estos criterios es necesario tener en cuenta que ningún parámetro es el más apropiado para todas las aplicaciones, lo que implica la necesidad de definir el conjunto de parámetros más adecuado para cada investigación. En este sentido, se puede decir que para caracterizar la forma y las dimensiones de las partículas (figura 1), se pueden usar parámetros que midan lo siguiente: 1. Dimensiones de las partículas (longitud, ancho, altura, dimensiones equivalentes, etc.); 2. Aspecto de partícula (relación de aspecto, alargamiento, etc.) y forma (esfericidad, circularidad, convexidad, etc.). En el caso de los parámetros que caracterizan las dimensiones, se sugiere que la mejor alternativa es utilizar el concepto de dimensiones equivalentes en lugar de solo longitud, altura y ancho.

A veces, con solo medir el tamaño no es suficiente para identificar diferencias sutiles pero importantes entre las muestras. Algunos grupos de muestras pueden ser diferentes por una cantidad tan pequeña que la diferencia se pierde al traducir algo similar a un diámetro equivalente, por ejemplo. Lo anterior muestra la principal desventaja de medir el tamaño solamente, ya que las muestras muy diferentes podrían ser caracterizadas como idénticas debido simplemente a tener áreas bidimensionales similares proyectadas. La forma de la partícula con frecuencia tiene una influencia en los parámetros de rendimiento, por lo tanto, es importante tener alguna forma de caracterizar la forma, tales como: esfericidad, circularidad, convexidad, alargamiento, cubicidad, etcétera.

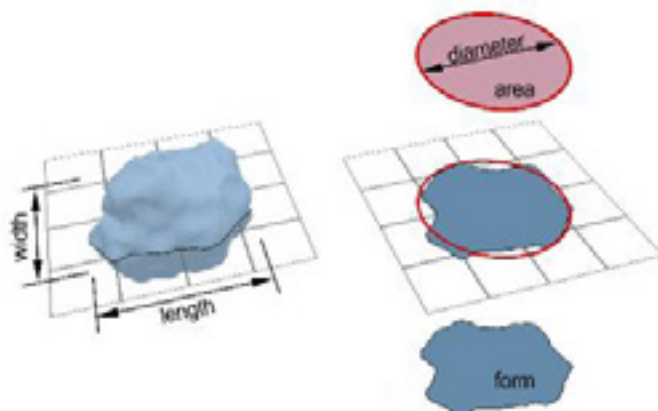


Fig. 1. Caracterización de la dimensión y forma de la partícula

### Caracterización de la dimensión de las partículas

Las partículas pueden ser regulares (por ejemplo, esferas) o irregulares, y sus dimensiones se pueden caracterizar usando su longitud, ancho y altura (figura 1), que son los parámetros más convencionales. Caracterizar la forma de las partículas regulares es simple, pero el caso de las partículas irregulares es mucho más complejo. Las esferas se pueden caracterizar por un solo parámetro (por ejemplo, el radio), pero en el caso de partículas irregulares puede utilizarse el concepto de esfera equivalente. La idea es relacionar algunas propiedades geométricas de la partícula irregular con las propiedades correspondientes de una esfera y calcular un diámetro equivalente ( $d_v$ ) el cual se define por:

$$d_v = \left( \frac{6V}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

El diámetro equivalente es el diámetro de la esfera que tiene el mismo volumen  $v$  que la partícula que se caracteriza. El diámetro de Martin ( $d_M$ ), el diámetro de Feret ( $d_F$ ) y el diámetro del tamiz ( $d_{st}$ ) son otros parámetros utilizados para caracterizar partículas irregulares. El diámetro de Martin se utiliza en el proceso de caracterización de las imágenes de partículas de microscopio, y representa la longitud de la línea que divide el área proyectada de la partícula (figura 2 a). Se pueden obtener varios diámetros de Martin para la misma partícula, dependiendo de las direcciones de la línea bisectriz. Por lo tanto, el diámetro de Martin asignado a una partícula debe ser el promedio de varios diámetros obtenidos con diferentes líneas a la mitad.

El diámetro de Feret, al igual que el diámetro de Martin, se utiliza en la caracterización de partículas irregulares, cuyas imágenes se obtienen de la microscopía. El diámetro de Feret representa la distancia entre dos líneas paralelas que son tangentes a la proyección de la partícula (figura 2 b). Como el caso del diámetro de Martin, con el diámetro de Feret se puede obtener varios diámetros dependiendo de la dirección de las líneas paralelas. En este caso también deben realizarse varias mediciones, y asumirse un valor de diámetro igual a una media de valores obtenidos con líneas en varias direcciones.

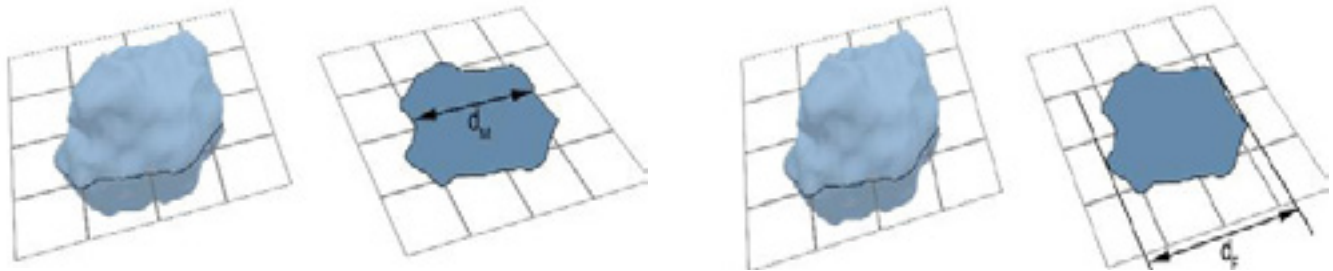


Fig. 2. Diámetro de Martín a) y Diámetro de Feret b)

Otro método para medir el tamaño de partícula consiste en tamizar partículas con tamices de orificio cuadrado, como puede verse en la figura 3. El diámetro del tamiz coincide con el tamaño del orificio de la rejilla. El empleo de esta técnica para caracterizar virtualmente partículas irregulares es una buena alternativa, y para ello solo es necesario identificar los diámetros de las partículas que determinan los tamices estándar necesarios para su uso. Una vez que las partículas se han clasificado según el tamiz virtual elegido, se clasifica cada partícula.

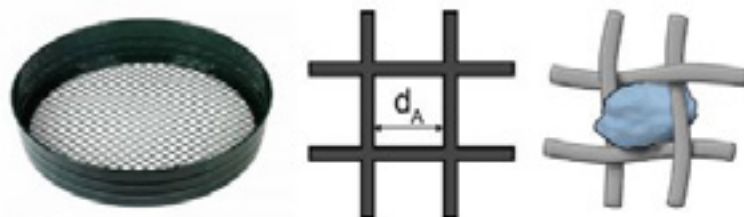


Fig. 3. Diámetro de tamiz

El diámetro del tamiz puede usarse tanto para caracterizar partículas individuales como para caracterizar un conjunto completo de partículas. En este último caso debe realizarse un tratamiento estadístico descrito más adelante. En estos estudios granulométricos es conveniente dividir el intervalo de tamaño de partícula en intervalos de clase. Una escala de clasificación granulométrica corresponde a una serie de subdivisiones de una distribución de tamaños continuos, con fines de normalización. Se ha propuesto una unidad de escala adimensional phi ( $\Phi$ ) basada en el logaritmo base 2 de los diámetros de las partículas en milímetros  $d_{mm}$  [13]. El logaritmo se multiplica por -1 para evitar números negativos en la clasificación cuando las partículas son muy pequeñas. La escala phi se define por:

$$\phi = -\log_2 d_{mm} \quad (2)$$

Los ingenieros suelen representar gráficamente los resultados del análisis del tamaño de partícula utilizando un sistema de coordenadas cartesianas, con el diámetro en milímetros en el eje x en escala logarítmica y el porcentaje de material que pasa a través del tamiz en el eje y. La representación gráfica de los datos granulométricos puede realizarse con histogramas, curvas de densidad o frecuencia acumulativa. Este último se llama curva granulométrica. La curva acumulativa es la más común en el estudio del tamaño de las poblaciones granulométricas. Los parámetros estadísticos que caracterizan la granulometría de un empaquetamiento de partículas pueden obtenerse a partir de un histograma de frecuencia. Algunos de estos parámetros son la moda, la media, la mediana, la desviación estándar y el grado de asimetría, entre otros.

La notación  $d_x$  y  $\phi_x$  utilizada a continuación denota los valores de diámetro de los granos o partículas en las gráficas logarítmicas, y la adimensional phi, respectivamente; para un porcentaje dado de peso acumulado. La moda  $M_o$  se define como el valor de la clase más poblada (la más importante), es decir, corresponde al valor máximo de la distribución granulométrica de las frecuencias. La mediana  $M_d$  se define en [12] como el percentil 50, que corresponde al tamaño de grano  $d_{50}$  que divide la distribución granulométrica en dos mitades, o dos grupos granulométricos de igual masa. El valor  $M_d$  también se conoce como el punto de equilibrio de masa y permite hacer una clasificación de toda la población en granos finos (los más pequeños o iguales a  $d_{50}$ ) y los granos gruesos (aquellos mayores que  $d_{50}$ ). Un resumen de los estadísticos que caracterizan la granulometría de un empaquetamiento de partículas se muestra en la tabla 1.

Tabla 1. Resumen de estadísticos usados para caracterizar

Parámetros estadísticos	Referencia	Fórmula
Media ( $M_g$ )	[13]	$M_g = \frac{\phi_{16} + \phi_{50} + \phi_{84}}{3} = \sqrt[3]{d_{16} * d_{50} * d_{84}}$
Mediana ( $M_d$ )	[12]	$M_d = d_{50}$
Desviación estándar gráfica ( $S_{gr}$ )	[13]	$S_{gr} = \frac{\phi_{85} - \phi_{15}}{4} + \frac{\phi_{95} - \phi_{05}}{6,6}$
Coficiente de asimetría ( $S_k$ )	[13]	$S_k = \frac{\phi_{25} + \phi_{16} - 2\phi_{50}}{2(\phi_{25} - \phi_{16})} + \frac{\phi_{75} + \phi_{85} - 2\phi_{50}}{2(\phi_{75} - \phi_{85})}$
Curtosis ( $K_G$ )	[13]	$K_G = \frac{\phi_{95} - \phi_{05}}{2,44(\phi_{75} - \phi_{25})}$
<b>Obs.</b> $\phi_x$ es un percentil. Por ejemplo, $\phi_{25} = \log_2(d_{25})$ , es la base negativa del logaritmo base 2 del tamaño de grano $d_{25}$ , correspondiente al 25% de la masa acumulada en la curva ascendente, o al 75% de la masa acumulada en la curva descendente.		

También existen los cuantificadores del tamaño de partícula de todo el conjunto de partículas. Este es el caso de los coeficientes de uniformidad y curvatura [5]. Sea  $D_\alpha$  una magnitud tal que el  $\alpha$  por ciento de partículas tenga un tamaño menor que  $D_\alpha$  con  $0 \leq \alpha \leq 100$ ; entonces el primero de los coeficientes arriba mencionados se define como  $C_u = d_{60}/d_{10}$ , y el segundo se define por la igualdad  $C_c = d_{30}^3/(d_{60}d_{10})$ . Cuanto mayor sea  $C_u$ , más amplia será la gama de tamaños de partícula. Además, un tamaño de partícula bien graduado tendrá un  $C_c$  entre 1 y 3.

#### Ocupación del espacio

La caracterización del grado de ocupación espacial es otra alternativa para la caracterización de empaquetamiento de partículas. En este sentido, la fracción volumétrica es la relación entre el volumen de las partículas y el volumen de la

geometría contenedora. Esta técnica mide el grado de ocupación geométrica de un medio. Para el caso del modelado a escala macro, este valor debe ser lo más alto posible, y en el caso de modelaciones a escala micro, este valor debe ser similar al valor correspondiente del medio físico real que se está modelando con DEM. La fracción de volumen puede expresarse como:

$$F_v = \frac{\sum_{i=1}^{n_p} V_i}{V} \quad (3)$$

donde:

$n_p$ : Número total de partículas.

$V_i$ : Volumen de la  $i$ -ésima partícula.

$V$ : Volumen de la geometría contenedora.

El índice de poros es una medida relativa al vacío geométrico de un medio y se define por la relación

$$e = \frac{V_v}{V_p} \quad (4)$$

donde:

$V_v$  y  $V_p$ : Volúmenes de espacio vacío y de partículas respectivamente.

La porosidad es otro parámetro que mide el grado de ocupación del espacio y cuantifica cuánto espacio vacío hay, siendo un número dual de la fracción volumétrica. Esta se define como la diferencia entre uno y la fracción volumétrica:

$$n = 1 - F_v \quad (5)$$

Se obtiene una definición alternativa de  $n$  con la relación entre el volumen del espacio vacío y el volumen de la geometría contenedora:

$$n = \frac{V_v}{V} \quad (6)$$

La relación entre el índice de poros y la porosidad viene dada por la siguiente fórmula:

$$e = \frac{n}{1-n} \quad (7)$$

### Homogeneidad

La verificación de la homogeneidad de los empaquetamientos es otra propiedad que es necesario definir. Se basa en la verificación del ajuste a la distribución uniforme de las coordenadas del centro de partículas. La homogeneidad de las posiciones de las partículas se examina aquí sin dividir el espacio, que es una deficiencia en la técnica análoga existente [3]. La prueba se puede llevar a cabo utilizando pruebas de bondad de ajuste [14], para lo que las pruebas Chi-cuadrado o Kolmogorov-Smirnov [15] se puede utilizar. Esta última prueba, para el caso de la distribución uniforme, puede ser la siguiente:

Sean:

$$D_n^+ = \max_{1 \leq i \leq n} \left[ \frac{i}{n} - x_i \right], \quad (8)$$

$$D_n^- = \max_{1 \leq i \leq n} \left[ x_i - \frac{i-1}{n} \right], \quad (9)$$

$$D_n = \max \{ D_n^+, D_n^- \} \quad (10)$$

Se rechaza la hipótesis nula de que los valores analizados se distribuyen uniformemente en el intervalo  $[0,10]$  si

$$\left(\sqrt{n} + 0,12 + \frac{0,11}{\sqrt{n}}\right) D_n > c_{1-\alpha} \quad (11)$$

Donde el valor crítico  $c_{1-\alpha}$ , con una confianza de  $1 - \alpha = 95\%$  es igual a 1,358. Para realizar la prueba, los valores de las coordenadas de los centros deben ser escalados al intervalo .

### Grado de conectividad

La conectividad del sistema de partículas se puede medir de varias maneras. Algunos de los indicadores que pueden utilizarse para este propósito son el número de coordinación [2], el número de coordinación mecánica [2, 16], el número de coordinación específico [2, 17] y la densidad de contacto [2, 18], entre otros. El número de coordinación [2] cuantifica el número de contactos por partícula en el material, y da una idea del número de contactos a la escala de las partículas. Su definición está dada por

$$Z = 2 \frac{N_c}{N_p} \quad (12)$$

donde:

$N_p$ : Cantidad de partículas.

$N_c$ : Número total de contactos entre partículas.

Dado que en el proceso de transmisión de los esfuerzos mecánicos en los envases de partículas, no todas las partículas contribuyen de la misma manera, es necesario refinar este criterio de número de coordinación. Un criterio refinado [2, 16] es el número de coordinación mecánica, dado por:

$$Z_m = 2 \frac{N_c - N_p^1}{N_p - (N_p^1 + N_p^0)} \quad (13)$$

Donde  $N_p^0$  y  $N_p^1$  son el número de partículas con un solo contacto y el número de partículas sin contactos respectivamente.

La última modificación trata de cuantificar las partículas que realmente participan en la transmisión de esfuerzos. Una forma de cuantificar la densidad de contactos en el material se ha propuesto en [2, 18], junto a los números de coordinación  $Z$  y  $Z_m$  ya definidos. Esta técnica de caracterización y evaluación de empaques se denomina densidad de contacto ( $m_v$ ), y se define como:

$$m_v = \frac{2N_c}{V} \quad (14)$$

donde:

$V$ : Volumen del material.

### Isotropía

La caracterización de la isotropía de un empaquetamiento es otra de las características que deben ser evaluadas. Para ello se pueden utilizar técnicas como la isotropía global, el coeficiente de autocorrelación, el tensor de tejido y la aleatoriedad de las líneas centro a centro. La isotropía global se basa en la aplicación de una prueba de igualdad de varianzas a las varianzas de las áreas procedentes de los planos de corte que son perpendiculares a las tres direcciones principales del espacio [3] (figura 4). La posible diferencia de varianzas de las áreas de intersección de partículas con planos equidistantes perpendiculares a cada eje, se puede evaluar con esta técnica. La diferencia de variancias implica la anisotropía del empaquetamiento.

Sea  $\alpha_x$  una variable de varianza  $\sigma^2(\alpha_x)$ , que sigue una distribución normal y representa la fracción de área obtenida a partir de un plano de corte, perpendicular al eje  $x$ ; Y dejar  $\alpha_y$  y  $\alpha_z$  las otras dos variantes análogas definidas con respecto a los otros ejes. Sea  $\hat{\alpha}_x = \{\alpha_{x1}, \dots, \alpha_{xm}\}$ ,  $\hat{\alpha}_y = \{\alpha_{y1}, \dots, \alpha_{ym}\}$ ,  $\hat{\alpha}_z = \{\alpha_{z1}, \dots, \alpha_{zm}\}$  observaciones de  $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$  and  $\alpha_z$  correspondientes a  $m$  planos equiespaciados, y  $S^2(\alpha_x)$ ,  $S^2(\alpha_y)$  and  $S^2(\alpha_z)$  sus respectivas variancias. Entonces, con el fin de probar si el embalaje tiene isotropía global, se puede plantear la hipótesis  $\sigma^2(\alpha_x) = \sigma^2(\alpha_y)$  y  $\sigma^2(\alpha_x) = \sigma^2(\alpha_z)$ . Algunas pruebas como Fisher [15], U de Mann-Whitney [15] o Conover [19] se puede utilizar para verificar la hipótesis.

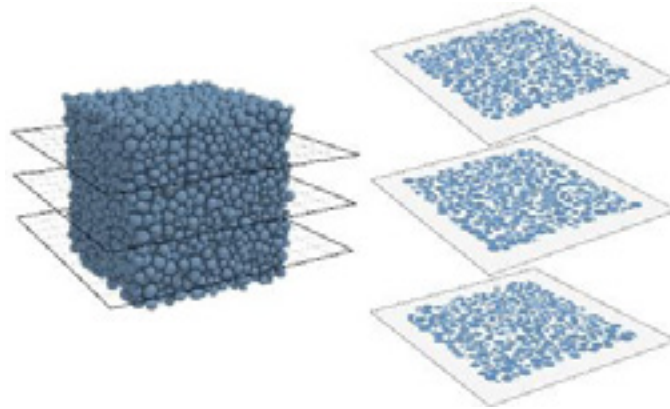


Fig. 4. Empaquetamiento y secciones de planos cortantes

Otra medida global de la aleatoriedad de un empaquetamiento es su coeficiente de autocorrelación [3]. Sea  $\vec{\theta} = [\theta_1, \dots, \theta_m]$  la lista de fracciones de área correspondientes a  $m$  planos equispaciados que cortan el empaquetamiento de las partículas. Los valores  $\vec{\theta}$  se pueden considerar como una serie temporal de una variable  $\theta$ . Si el empaquetamiento es completamente aleatorio (y no es periódico, por ejemplo), entonces no debe haber correlación entre los valores de  $\theta$ . Los coeficientes de autocorrelación [20] se definen como:

$$C_k = \frac{\sum_{j=1}^{m-k} (\theta_j - \bar{\theta})(\theta_{j+k} - \bar{\theta})}{\sum_{j=1}^m (\theta_j - \bar{\theta})^2} \quad (15)$$

Donde  $\bar{\theta}$  es la media de las observaciones. El coeficiente es inútil para  $k > m/4$ . Si una serie de tiempo es completamente aleatoria, entonces  $C_k$  seguirá una distribución normal con media cero y varianza  $1/m$  [3]. Por lo tanto, alrededor 95 % del de los valores de  $C_k$  deben tener un valor absoluto menor que  $2/\sqrt{m}$ . Si esto no se cumple para algunos  $k$ , entonces se puede decir que la serie de tiempo y por lo tanto el empaquetamiento no son completamente al azar.

El tensor de tejido [8] es una magnitud que describe la distribución de las orientaciones de los contactos en el conjunto de partículas. Utilizando los vectores unitarios  $\mathbf{u}_i^c$  (el índice  $c$  corresponde a los contactos y el índice  $i$  a las partículas) que unen los centros de las partículas en contacto, el tensor de la tela puede escribirse como:

$$\phi_{ij} = \frac{\sum_{c=1}^{N_c} n_i^c n_j^c}{n} \quad (16)$$

donde:

$n$ : Número de partículas.

$N_c$ : Número de contactos.

La técnica denominada aleatoriedad entre las líneas centro-centro entre las partículas en contacto mide el nivel de homogeneidad que tiene el medio, cuantificando la uniformidad del comportamiento del centro a las líneas centrales entre las partículas en contacto [3]. Sean las proyecciones relativas de dos partículas en contacto, donde  $x_{12}$ ,  $y_{12}$  y  $z_{12}$  son las proyecciones de las líneas centro-centro en los ejes de coordenadas cartesianas. Entonces, según [3], si el empaquetamiento es isotrópico entonces las proyecciones relativas obedecerán a la distribución uniforme sobre el intervalo.  $(-1, 1)$

$$x'_{12} = \frac{x_{12}}{r_1 + r_2}, \quad y'_{12} = \frac{y_{12}}{r_1 + r_2}, \quad z'_{12} = \frac{z_{12}}{r_1 + r_2} \quad (17)$$

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se aplican algunas de las técnicas de evaluación de empaquetamientos previamente vistas. La caracterización se lleva a cabo inicialmente con un empaquetamiento cuyas partículas tienen una distribución de tamaño uniforme. A continuación se obtienen 30 empaquetamientos más, con el fin de tener alguna significación estadística.



### Caracterización de empaquetamientos de esferas con radios en el intervalo [1, 2]

En este ejemplo, se llenó un cubo de lado 50 con esferas (figura 5) de radios que siguen una distribución uniforme continua en el intervalo [1, 2]. Las magnitudes principales que lo caracterizan se pueden ver en la tabla 2. Puede observarse que en este caso, la fracción volumétrica es aproximadamente 1 % mayor que el valor obtenido con condiciones similares en otros trabajos de investigación importantes como [21]. Aquí la comparación es justa, dado que los radios siguen la misma distribución. No se han encontrado valores superiores a este en la literatura para algoritmos de empaquetamiento geométrico de partículas. La notación en la tabla 2 corresponde a los parámetros de caracterización previamente definidos. Los valores marcados con asteriscos indican que el empaquetamiento no es completamente aleatorio.

El empaquetamiento previamente caracterizado se replicó 30 veces con el fin de tener una idea preliminar de la variabilidad de los parámetros calculados. Los resultados se muestran en la tabla 3.

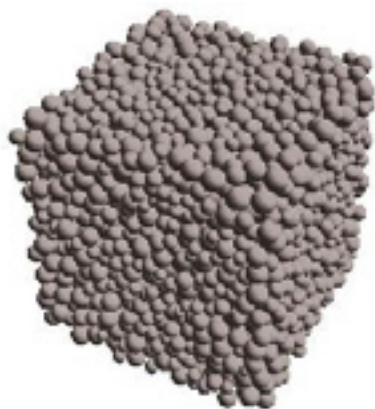


Fig. 5. Empaquetamiento de 4 249 esferas en un cubo de lado 50, con radios uniformemente distribuidos en el intervalo [1,2]

Tabla 2. Parámetros correspondientes al empaquetamiento de la figura 5

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
$VF$	0,542 343	$Var(Z)$	4,863 46	$Var(LVF)$	0,000 855 317
$n$	0,457 657	$GI$	0,780 697	$\overline{LP}$	0,373 209
$\epsilon$	0,843 85	$\lambda_{diff}$	0,008 802 89	$Var(LP)$	0,000 855 317
$KS_x$	1,459 86*	$KS_{n_x}$	0,936 745	$\overline{LPI}$	0,854 76
$KS_y$	1,033 58	$KS_{n_y}$	1,273 56	$Var(LPI)$	0,204 594
$KS_z$	1,044 81	$KS_{n_z}$	1,970 95*	$C_U$	1,460 31
$Z$	6,378 82	$\overline{LVF}$	0,626 791	$C_Z$	0,964 001

La siguiente es la notación empleada en la tabla 2. En esta tabla, así como en la tabla 3, para cualquier magnitud  $x$ , las notaciones  $\bar{x}$  y  $Var(x)$  representan la media aritmética y la varianza de  $x$  respectivamente.

- $VF$ : Fracción de volumen.
- $n$ : Porosidad.
- $\epsilon$ : Índice de poros.
- $KS_x$ : Valor de la estadística de Kolmogorov-Smirnov para las coordenadas  $x$  de los centros de las partículas (el valor crítico es 1,358 y un valor de la estadística mayor que este umbral implica que no hay ajuste a la distribución uniforme). Este parámetro, junto con los dos siguientes, se utiliza para cuantificar la homogeneidad del empaquetamiento.
- $KS_y, KS_z$ : Parámetros análogos para las coordenadas  $y$  y  $z$ , respectivamente.
- $Z$ : Número de coordinación.
- $GI$ : Valor- $p$  de la prueba de Conover para la comprobación de la isotropía global utilizando planos de corte.
- $\lambda_{diff}$ : Error relativo máximo de los valores propios del tensor de la tejido con respecto a 1/3.
- $KS_{n_x}$ : Valor de la estadística Kolmogorov-Smirnov (ver anterior  $KS_x$ , para las coordenadas  $x$  de las normales de contacto).
- $KS_{n_y}, KS_{n_z}$ : Parámetros análogos para las coordenadas  $y$  y  $z$ , respectivamente.
- $LVF$ : Fracción de volumen local. El radio de la esfera de control se tomó tres veces el radio de la esfera local.
- $LP$ : Porosidad local.
- $LPI$ : Índice de poro local.

- $C_U$ : Coeficiente de uniformidad.
- $C_C$ : Coeficiente de curvatura.

Tabla 3  
Valores que caracterizan los 30 empaquetamientos distribución de tamaño uniforme

Parámetro	Valor	Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
$\overline{VF}$	0,527 242	$\overline{GI}$	0,419 068	$Var(LVF)$	$3,053\ 25 \cdot 10^{-6}$
$\overline{KS_x}$	1,481 4*	$\lambda_{diff}$	0,007 115 59	$\overline{C_U}$	1,454 36
$\overline{KS_y}$	1,483 35*	$\overline{KS_{n_x}}$	1,463 86*	$Var(\overline{C_U})$	0,000 092 808 9
$\overline{KS_z}$	1,530 89*	$\overline{KS_{n_y}}$	1,077 06	$\overline{C_C}$	0,959 507
$\overline{Z}$	6,295 28	$\overline{KS_{n_z}}$	1,039 27	$Var(\overline{C_C})$	0,000 102 388
$Var(\overline{Z})$	0,000 086 422 2	$\overline{LVF}$	0,507 127		

La fracción volumétrica de los 30 empaquetamientos (figura 6 a) puede considerarse alta [22]. Otro descriptor de la ocupación del espacio es la fracción de volumen local (figura 6 b).

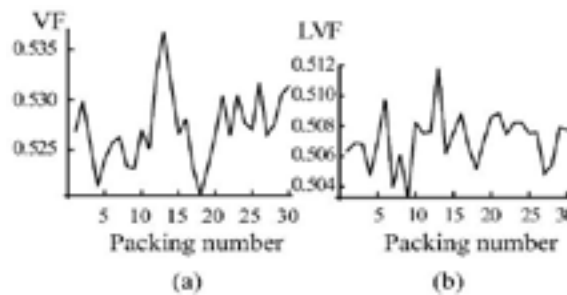


Fig. 6. Fracción de volumen (FV): a) FV global; b) FV local

Los empaquetamientos son isotrópicos de acuerdo con  $\overline{GI}$  (figura 7 a) que todos los valores-p están por encima de 0,05) y  $\lambda_{diff}$  (figura 7 b) que todos los valores de  $\lambda_{diff}$  están por debajo de 0,05); pero no lo son según las normales de contacto, que no tienen coordenadas uniformes (figura 8 a). La conectividad, que de alguna manera está relacionada con la isotropía, se midió por el número de coordinación (figura 8 b).

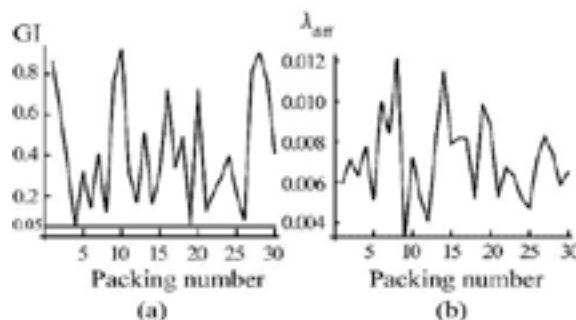


Fig. 7. Isotropía: a) Global; b) Local: error relativo de los valores propios del tensor de tejido

A pesar de que los empaquetamientos son aleatorios, no deben considerarse homogéneos, ya que varios de ellos no tienen sus centros distribuidos uniformemente dentro del dominio (figura 9).

La distribución del tamaño de partícula se muestra con los coeficientes de uniformidad y curvatura (figura 10). Se puede observar que estos coeficientes están próximos a los valores teóricos 1,45 y 0,96 respectivamente correspondientes a la distribución uniforme continua en el intervalo.

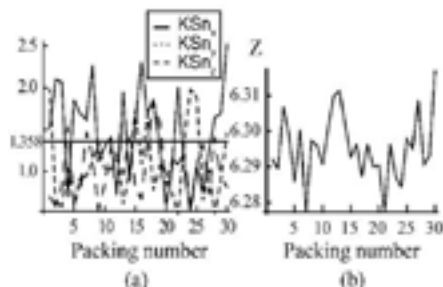


Fig. 8. Isotropía y conectividad: a) Uniformidad de las coordenadas de las normales de contacto; b) Número de coordinación

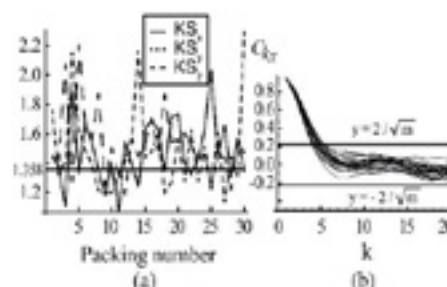


Fig. 9. Homogeneidad: a) Uniformidad de los centros de las partículas; b) Coeficientes de autocorrelación

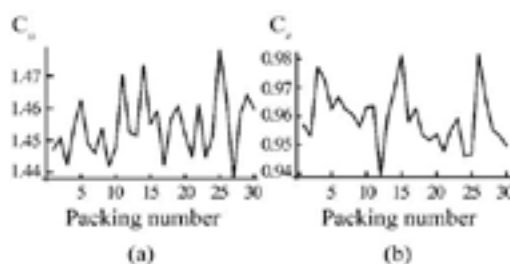


Fig. 10. Caracterización de la distribución del tamaño de partícula: a) Coeficiente de uniformidad; b) Coeficiente de curvatura

## CONCLUSIONES

Se crea una metodología que incluye varias técnicas de caracterización de empaquetamientos. Esta evalúa características como dimensiones y forma de las partículas, ocupación del espacio, homogeneidad, conectividad e isotropía. La clasificación e integración de varias técnicas de evaluación permite realizar una evaluación sistémica de los empaquetamientos de partículas, con el fin de garantizar la calidad de los conjuntos iniciales de partículas para simulaciones de DEM, tanto a nivel micro como macro.

Se utilizan varias técnicas para evaluar la ocupación del espacio, se emplean nuevas técnicas para verificar la homogeneidad y se realiza un uso sistémico de las técnicas de medición de conectividad e isotropía. También se han formulado nuevas técnicas de evaluación del empaque, entre ellas: 1. La uniformidad de las coordenadas de los centros de las partículas; 2. La uniformidad de los ángulos esféricos del centro a las líneas centrales. La técnica correspondiente a este último caso mejora las deficiencias existentes en técnicas análogas. Técnicas existentes en otras áreas del conocimiento fueron adaptadas para evaluar sistemas de partículas.

## REFERENCIAS

1. Stoyan S, Kendall WS, Mecke J. Stochastic geometry and its applications. Chichester, Inglaterra: John Wiley and Sons; 1995.
2. O' Sullivan C. Particulate, Discrete Element Modelling. A Geomechanics Perspective. London and New York: Spon Press. Taylor & Francis; 2011.
3. He, D.; Ekere NN.; Cai L. New statistic techniques for structure evaluation of particle packing. Materials Science and Engineering, 2001. A 298: pp. 209-215.

4. Stoyan D. Random systems of hard particles: models and statistics. *Chinese Journal of Stereology and Image Analysis*. 2002;7(1).
5. Craig RF. *Soil Mechanics*. EE.UU.: Taylor & Francis; 2004.
6. Bezrukov A, Stoyan D.; Bargiel M. Spatial statistics for simulated packings of spheres. *Image Anal Stereol*. 2001;20:203-6.
7. Rubio RS. Estudio estadístico de variantes de empaquetamiento de avance frontal. *Ciencias de la Computación*. Santa Clara, Cuba: Universidad Central Marta Abreu de Las Villas; 2009.
8. Bagi K. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies. *Granular Matter*. 2005;7:31-43.
9. Torquato S, Stillinger FH. Controlling the Short-Range Order and Packing Densities of Many-Particle Systems. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2002;106(33):8354-9.
10. Torquato S, Truskett TM, Debenedetti, PG. Is Random Close Packing of Spheres Well Defined. *Physical Review Letters*. 2000;84(10).
11. Reboul N, Vincens E, Cambou B. A statistical analysis of void size distribution in a simulated narrowly graded packing of spheres. *Granular Matter*. 2008;10: 457-68.
12. Trask PD. Mechanical analysis of sediments by centrifuge. *Econ Geol*. 1930;25: 581-99.
13. Folk RL, Ward WC. Brazos River bar, a study in the significance of grain size parameters. *Sedimentary Petrology*. 1957;27(1):3-37.
14. Pérez Morales I. Desarrollo de técnicas novedosas para la modelación con métodos de partículas: Método de Elementos Discretos. Villa Clara, Cuba: Universidad Central Marta Abreu de Las Villas; 2012.
15. González VB, Rodríguez DI. Formación de Investigadores. Apuntes para un libro de texto. Villa Clara, Cuba: Universidad Central Marta Abreu de Las Villas 2012.
16. Thornton C, Liu L. DEN simulations of uniaxial compression and decompression. In: *Proceedings of International Workshop on compaction of soils, granulates and powders*; EE. UU.: D. Kolymbas and W. Fellin; 2000. p. 251-61.
17. Kuhn MR. Structured deformation in granular materials. *Mechanics of Materials*. 1999;31:407-29.
18. Rothenburg L, Bathurst R. Analytical study of induced anisotropy in idealized granular materials. *Geotechnique*. 1989;39(4):601-14.
19. Pavan M, Todeschini R. *Scientific Data Ranking Methods: Theory and Applications*. London, England: Elsevier Science; 2008.
20. Chatfield C. *The Analysis of Time Series. An Introduction*. London, England: Chapman and Hall; 1989.
21. Han K, Feng YT, Owen DRJ. Sphere packing with a geometric based compression algorithm *Powder Technology* 2005;155(1):33-41.
22. Roselló Valera R, et al. Modified algorithm for generating high volume fraction sphere packings. *Computational Particle Mechanics*. 2015;2(2):161-72.