

# Software open-source para la generación de estructuras estocásticas bicontinuas

N. Vazquez<sup>1,\*</sup>, C.J. Ruestes<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN) - Universidad Nacional de Cuyo

<sup>2</sup>Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB) - CONICET

(\*)Correo electrónico: nicolasvazquez95@gmail.com

## Problema

Los metales nanoporosos presentan una estructura bicontinua estocástica [1]. Fabricados por corrosión selectiva, ofrecen diversas propiedades excepcionales que pueden ser ajustadas en base a parámetros del proceso de fabricación. El uso sistemático de simulaciones computacionales ha permitido identificar parámetros estructurales clave en estas nanoespumas. En este contexto, disponer de modelos fidedignos resulta vital para evaluar estos materiales y ofrecer pautas para su desarrollo.

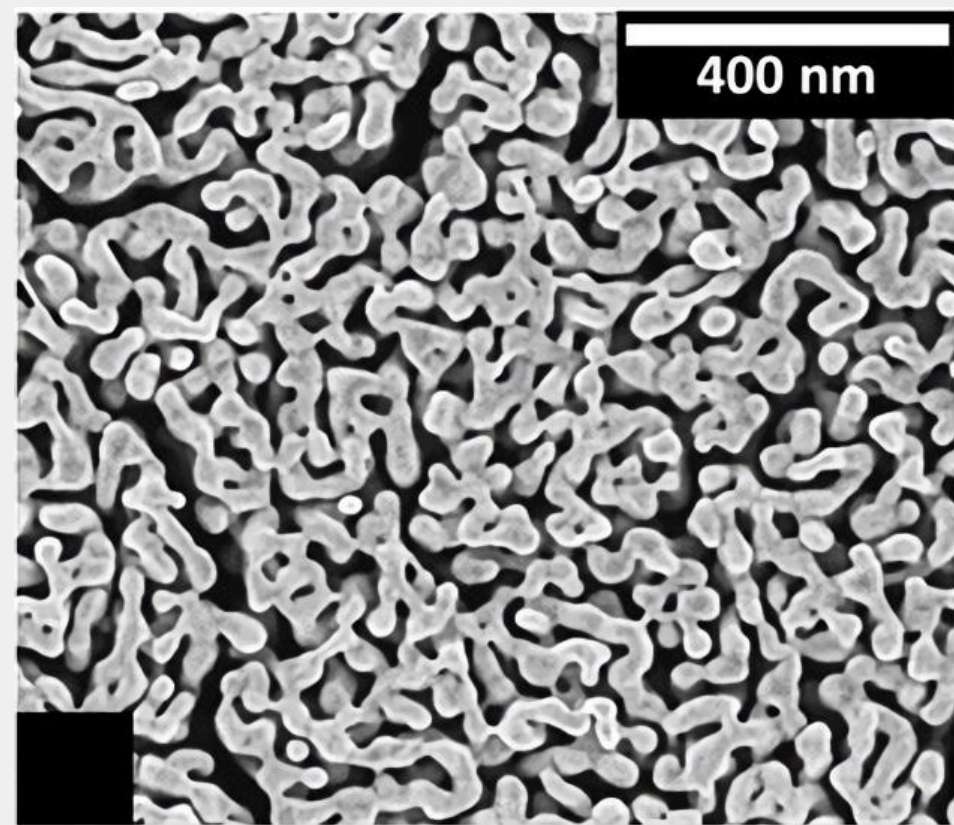


Figura 1. SEM de una muestra de oro nanoporoso [2].

El esquema tradicional de preparación de muestras nanoporosas computacionales se ha basado principalmente en el método de phase-field mediante la ecuación de Cahn-Hilliard, y métodos Monte Carlo. Sin embargo, no se advierte la existencia de una herramienta software libre para la generación de estas estructuras, lo cual resulta un factor limitante para el desarrollo de estos materiales y sus aplicaciones.

## Marco teórico

Recientemente, Soyarslan et al. [3] han propuesto un nuevo método para la generación de microestructuras bicontinuas periódicas basado en la superposición de ondas sinusoidales con longitud de onda fija y un conjunto fijo de direcciones, dentro de una celda cúbica.

$$f(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{i=1}^N \cos(\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{x} + \phi_i).$$

Esta función define un **campo gaussiano aleatorio**, y las diferentes fases del sistema (por ejemplo, la fase sólida  $\mathcal{B}$  y la fase porosa  $\mathcal{P}$ ) pueden ser definidas mediante un valor de corte  $\xi$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \in \mathcal{B} & \text{ si } f(\mathbf{x}) \leq \xi, \\ \mathbf{x} \in \mathcal{P} & \text{ si } f(\mathbf{x}) > \xi \end{aligned}$$

## Referencias

- [1] Jin, H.-J., Weissmüller, J., & Farkas, D. (2018). *MRS Bulletin*, 43(1), 35–42.
- [2] Lionello, D. F., Ramallo, J. I., Caro, M., Wang, Y. Q., Sheehan, C., Baldwin, J. K., ... & Ruestes, C. J. (2021). *Journal of Materials Research*, 36(10), 2001–2009.
- [3] Soyarslan, C., Bargmann, S., Pradas, M., & Weissmüller, J. (2018). *Acta Materialia*, 149, 326–340.
- [4] Guillotte, M., Godet, J., & Pizzagalli, L. (2019). *Computational Materials Science*, 161, 135–142.
- [5] Li, Y., Dinh Ngô, B.-N., Markmann, J., & Weissmüller, J. (2019). *Physical Review Materials*, 3(7), 076001.

## Agradecimientos

El trabajo fue desarrollado en el marco de una beca de Estímulo a las Vocaciones Científicas (EVC-CIN, becario N.Vazquez). Agradecemos al Dr. Emmanuel Millán (CONICET-ITIC) por su ayuda en etapas tempranas del desarrollo del código. Este trabajo utilizó el Cluster TOKO-FCEN-UNCuyo (SNCAD-MinCyT, Argentina).

## La implementación

Se intentaron diversas soluciones, agregando complejidad y mejoras en cada iteración. El avance más importante fue poder llevar a cabo los cálculos mediante arrays, matrices y tensores:

$$T_{ijk} = \cos(\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{x}_j + \varphi_k)$$

A partir de esto, fue posible añadir posteriormente la paralelización en threads y cores vía MPI, y una implementación alternativa para GPUs utilizando el framework de TensorFlow.

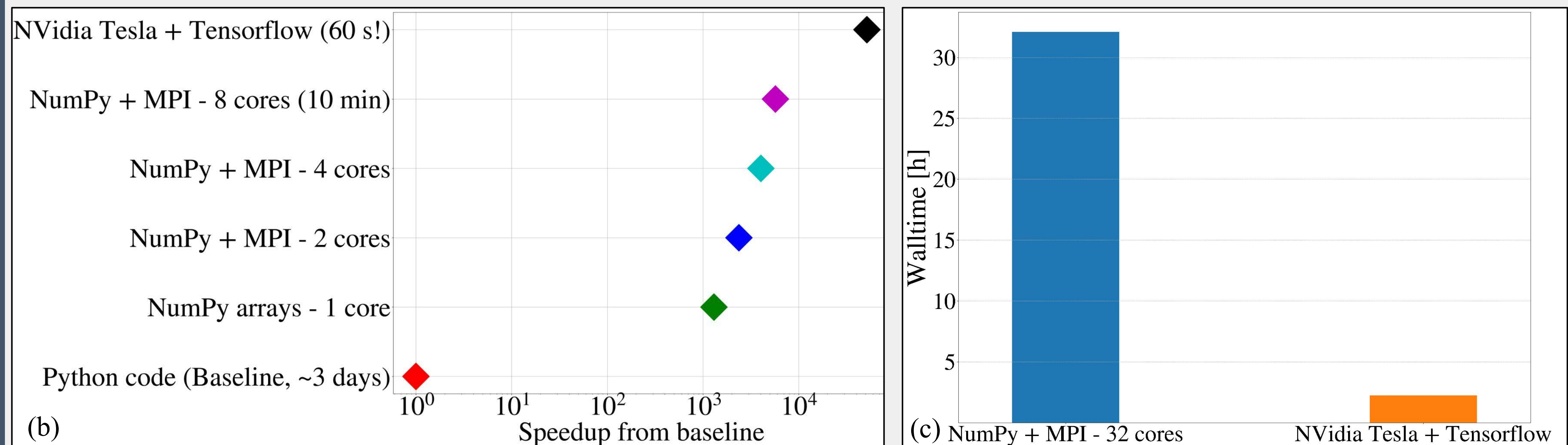
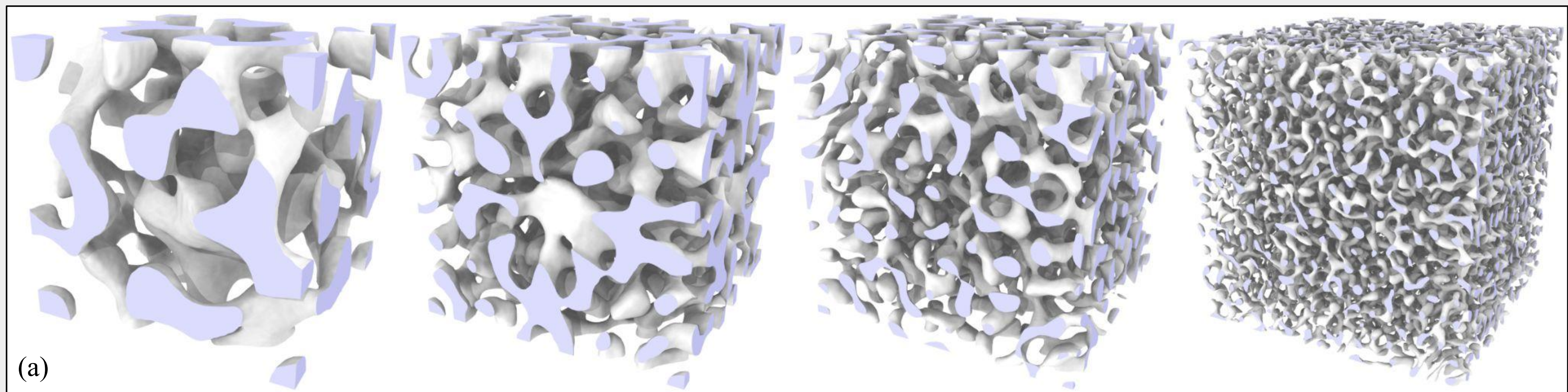


Figura 2. (a) Representación de distintas muestras generadas con el software. (b,c) Speedups en las distintas implementaciones.

## Caracterización de las muestras

Sobre series de muestras generadas mediante nuestra implementación, se realizó un estudio de ciertas propiedades topológicas y morfológicas de interés [4,5]. El modelo de Soyarslan et al. es capaz de predecir -para un conjunto de parámetros característicos de la espuma- valores de superficie específica  $S$ , el diámetro promedio de ligamento,  $L$ , y el genus  $G$  (que es una medida de la conectividad de la red), entre otros.

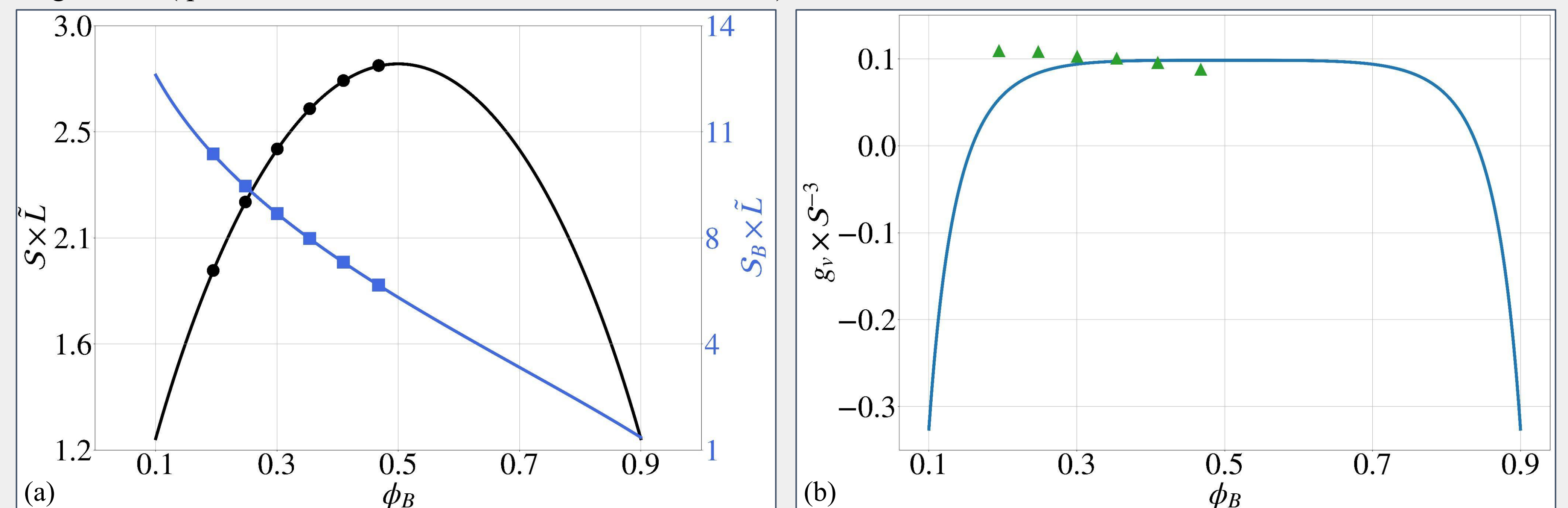
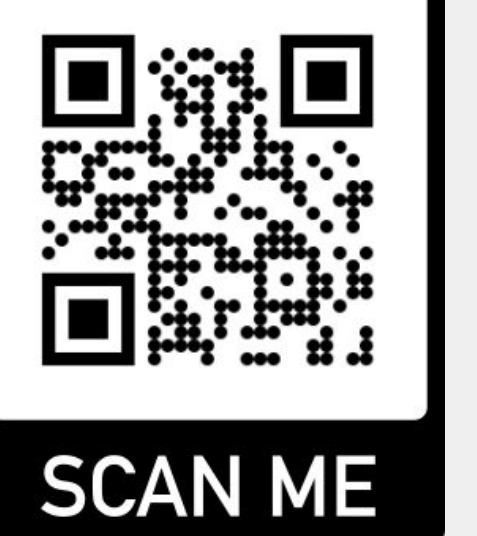


Figura 3, los puntos representan resultados obtenidos en los análisis de nuestras espumas, para muestras con distinta fracción sólida  $\phi_B$ . Las líneas continuas son los resultados analíticos exactos que predice el modelo de Soyarslan. (a): Superficie por unidad de volumen  $S_y$  por unidad de volumen sólido  $S_B$  escalada por la distancia característica entre los centros de ligamentos vecinos,  $\tilde{L}$ . (b) Densidad de genus por unidad de volumen  $g_V$ , escalada con  $S^{-3}$ .

Las muestras generadas mediante este método pueden exportarse en un formato totalmente compatible con software de simulación atomística como LAMMPS. Por ejemplo, en el QR de la derecha se puede acceder a un video que muestra el ensayo de compresión de una espuma de Ta nanoporoso.



SCAN ME