

Estudio de estimación de parámetros constitutivos en el método de elementos discretos o de partículas

C. Recarey
E. Oñate
J. Miquel
F. Zárate
J. Rojek
S. Burrel

Estudio de estimación de parámetros constitutivos en el método de elementos discretos o de partículas

C. Recarey
E. Oñate
J. Miquel
F. Zárate
J. Rojek
S. Burrel

Monograph CIMNE N°-93, May 2005

INTERNACIONAL CENTER FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING
Edificio C1, Campus Norte UPC
Gran Capitán s/n
08034 Barcelona, Spain
www.cimne.upc.es

First edition: May 2005

Estudio de estimación de parámetros constitutivos en el método de elementos discretos o de partículas
Monograph CIMNE M93
© The authors

ISBN: 84-95999-84-6

Índice

Índice.

Resumen.	2
Abstract.	3
Introducción.	5
Capítulo I: Método de elementos discretos con un enfoque microestructural.	14
1.0- Introducción y aspectos generales de la formulación del método de los elementos discretos.	15
2.0- Proceso de cálculo del método de los elementos discretos.	18
3.0- Formulación del método de los elementos discretos.	20
3.1- Ecuaciones de Movimiento.	20
3.2 - Amortiguamiento global.	21
3.3- Determinación de la densidad y masa micro-estructural.	23
3.4- Integración del problema con un esquema de diferencia finita central.	24
3.5- Estabilidad numérica del esquema de integración explícito.	25
3.6- Modelo constitutivo de contacto micro estructural y evaluación de las fuerzas de contacto.	27
3.7- Búsqueda y Chequeo de Contacto.	35
3.8- Extensión del método de los elementos discretos en la resolución de problemas termo-acoplados y de desgaste.	45
Capítulo II: Estimación y interrelación preliminares de parámetros constitutivos macro y micro.	48
4.0- Estimación de parámetros constitutivos micro.	49
4.1- Enfoque general.	49
4.2- Análisis dimensional.	51
4.3- Valoraciones sobre la aplicación de cargas cuasiestáticas, velocidad de aplicación y tiempo de aplicación de la misma.	53
4.4- Valoración sobre la holgura o tolerancia (Gap) - separación-penetración entre esferas -.	61
4.5- Ejecución de los ensayos virtuales de compresión y tracción.	67
4.6- Estudio exploratorio.	69
4.7- Estudio estocástico preliminar empleando método de Monte Carlo.	102
4.8- Estudio preliminar para estimar las relaciones entre los parámetros macro-microestructurales considerando $K_{nc} \neq K_{nt}$.	111
4.9- Conclusiones Parciales del estudio preliminar para estimar las relaciones entre los parámetros macro-microestructurales considerando $K_{nc} \neq K_{nt}$.	121
4.10 - Deducción analítica de las ecuaciones generales que relacionan los parámetros macro y micro.	122
Conclusiones	129
Recomendaciones	131
Referencias	133
Bibliografía	135

Resumen

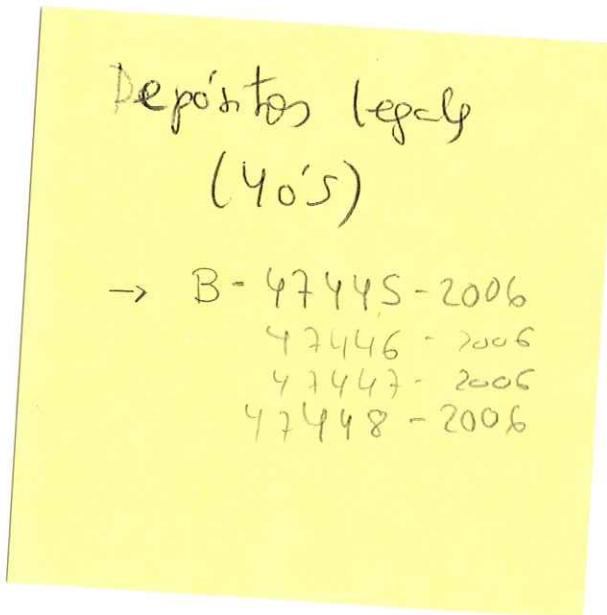
Resumen.

Se presenta un modelo numérico que emplea elementos discretos esféricos o también denominados elementos distintos. Este modelo se aplica en la simulación de rocas, suelos, medios granulares y otros materiales. El movimiento de elementos esféricos se describe por medio de las ecuaciones de dinámica del cuerpo rígido. Se emplea en la formulación una integración explícita, la cual, brinda una buena eficiencia computacional. Los elementos esféricos interactúan recíprocamente entre si a través de las fuerzas del contacto, en la dirección normal y tangencial. El esquema de búsqueda de contacto es muy eficaz y está basado en las estructuras de *oct-tree*. El modelo constitutivo de contacto presenta una singularidad muy especial ya que puede simular las fuerzas de cohesión que permiten modelar la fractura y descohesión de los materiales. La estimación de las propiedades microestructurales se realizan a través de la simulación de ensayos de compresión y tracción. En este estudio se toma como referencia los parámetros mecánicos macroestructurales. En la identificación de las propiedades microestructurales primeramente se realiza un estudio de investigación preliminar para conocer la región donde los parámetros constitutivos microestructurales tienen sentido físico y con posterioridad se emplean técnicas estocásticas para conocer la tendencia de comportamiento entre las variables macro y micro.

Abstract

Abstract.

A numerical constitutive model using spherical Discrete Elements, also called Distinct Element is present. This model is applied to the simulation of rock, soils, granular media, and other materials. The motion of spherical elements is described by means of equations of rigid body dynamics. Explicit integration in time yields high computational efficiency. Spherical elements interact among one another with contact forces, both in normal and tangential direction. An efficient contact search scheme based on the *oct-tree* structures has been implemented. As special constitutive model of contact interface taking into account cohesion forces allows us to model fracture and decohesion of materials. They are considered the properties micro-structural starting from the performance of compression rehearsals and traction test. In this study it takes like reference the macro-structural parameters mechanical. Stochastic methods are used in the simulation of the material identification process.



Introducción

Introducción.

El hombre, a lo largo de los años ha adoptado una posición científica al tratar de estudiar los fenómenos físico-naturales que ocurren a su alrededor. En este proceso ha aceptado un aumento de responsabilidad y esfuerzo, problema éste que condiciona incluso el desarrollo de la humanidad. En este camino ha podido elegir entre dos grupos de soluciones: ahorrar sus esfuerzos y limitarse a tomar lo que la naturaleza le brinda casi directamente o intentar arrancarle el máximo de ventajas y satisfacciones materiales a cambio de un conocimiento y dominio previo de las leyes del mundo material.

Con este fin, en los últimos tiempos ha estado en boga el empleo de las técnicas de modelación para intentar investigar estas leyes y fenómenos. Al respecto, la modelación ha adquirido un carácter de método científico general que, en esencia, penetra todas las esferas de la actividad cognoscitiva y transformadora del hombre, con especial énfasis en la Ingeniería Aplicada. Enriquecido por las conquistas y desarrollo de la Matemática, la Cibernética y el enfoque sistémico, la modelación posibilita la profundización de nuestros conocimientos sobre el mundo circundante y se convierte en medio de dirección y de toma de decisiones racionales sobre problemas de utilización de la naturaleza.

El aumento de la importancia del método de la modelación en el conocimiento científico está determinado, ante todo, por la lógica interna del desarrollo de la ciencia; en particular, por la frecuente necesidad de un reflejo mediatizado de la realidad objetiva. En el desarrollo y proliferación de la modelación han tenido una gran trascendencia las consideraciones económicas relacionadas con el aumento de la efectividad de las investigaciones científicas y la optimización de la actividad humana, en términos generales.

Debe señalarse que, a pesar de que en los últimos años haya aumentado la intensidad de las investigaciones en el campo de la modelación, la problemática metodológica de este importante método del conocimiento científico moderno está muy lejos de haber sido agotada. Importantísimos problemas gnoseológicos de la modelación deben ser estudiados minuciosamente a la luz de las circunstancias de la ciencia de nuestros días. Esta situación puede explicarse por la circunstancia de que el método de la modelación en la ciencia actual es muy complicado y diverso y, lo que es fundamental, se encuentra en un estado de permanente enriquecimiento y desarrollo. La ingeniería y específicamente, la Ingeniería Estructural y Geotécnica no han quedado ajenas a este desarrollo, por lo que se buscan nuevos enfoques con carácter general y sistémico, para la solución de los diferentes problemas que enfrenta un ingeniero civil.

Estos aspectos han propiciado el desarrollo de nuevos procedimientos de análisis y diseño de estructuras, con el empleo de los novedosos modelos constitutivos que describen el comportamiento de los diferentes materiales que conforman la edificación, estructura u obra de ingeniería y por qué no, el terreno.

Si a lo expresado con anterioridad se le añade que el objetivo central del mundo en general para los próximos tiempos, tiene que ser la eficiencia, pues constituye una de las mejores potencialidades de que se dispone. Por ende, hacer un mejor uso de los recursos y alcanzar mejores resultados con menos costo tiene que ser la estrategia

económica número uno, la que debe estar apoyada por una correcta política científico-técnica.

Desde este punto de vista, viene la modelación a desempeñar un papel decisivo como piedra angular del proceso de análisis y diseño de estructuras. La mejor forma de lograr lo anterior, es abordar las soluciones de los problemas ingenieriles de la mejor manera posible, con el empleo de las nuevas técnicas de modelación sistémica, las cuales se sustentan, de forma indirecta, en criterios racionales y eficientes. En este sentido, la búsqueda de nuevas técnicas de modelación que incluyan la naturaleza microestructural de los fenómenos, posibilitan obtener solicitudes (esfuerzos mecánicos y desplazamientos) más reales, en el proceso de análisis de estructuras, lo que se traduce en soluciones más eficientes y económicas en el proceso de diseño de las diferentes obras de ingeniería.

El desarrollo alcanzado hasta la actualidad en la temática de análisis y modelación de los problemas de Ingeniería Estructural y Geotécnica ha quedado ajeno a la esencia microestructural de estos fenómenos físicos relacionados con estas disciplinas. Solo existen someros intentos, que no se basan en un enfoque sistémico del proceso de modelación del estado tenso-deformacional desde el punto de vista microestructural y su extrapolación a un medio discreto.

Se buscan nuevas técnicas de modelación que se basen en un enfoque sistémico que incluyan la naturaleza microestructural de los fenómenos físicos. Precisamente, esta es la idea básica del contexto investigativo en que se enmarca la presente tesis, con el afán de resolver lo concerniente a la modelación físico-matemática del estado tenso-deformacional de un material en un punto desde el punto de vista microestructural y su extrapolación al medio discontinuo, para solucionar la modelación y análisis de diversos problemas de ingeniería.

El estudio de modelos de partículas a través del Método de los Elementos Distintos con el empleo de nuevos modelos constitutivos micro-estructurales es un tema de indudable interés científico en el campo de los métodos numéricos en la ingeniería y es un aspecto que guarda singular significación con lo ya expresado con anterioridad.

El desarrollo de la mecánica computacional siempre ha ido paralelo al intento de aproximar mediante modelaciones y simulaciones numéricas la esencia de los fenómenos físicos. Los modelos discretos (modelos de partículas) se basan en el estudio de los problemas de ingeniería a una escala cada vez menor, en la actualidad, hasta la escala microscópica. Todo esfuerzo encaminado al acercamiento del micro-mundo y al estudio de sus leyes y comportamiento es una tarea de constante investigación y es precisamente en esta tendencia de trabajo donde se centra la finalidad de esta investigación.

La finalidad de acercarse cada vez más al micro-mundo y a la esencia micro-estructural de los fenómenos físicos, permite realizar estudios de seguridad estructural con un alto grado de precisión y fiabilidad, lo que a su vez posibilita prever fallos estructurales severos, ya que los modelos discretos (modelos de partículas) permiten detectar fallos a nivel micro. El hecho de poder estudiar los estados tensionales y deformacionales a un nivel microscópico posibilita detectar las aparición de microfisuras y discontinuidades que son el comienzo de las cadenas de fallos estructurales y la formación de micro-

zonas de plastificación que culminan desafortunadamente a nivel macroscópico en el fallo estructural. Estas delimitaciones no apreciables por los métodos macroscópicos convencionales, posibilitan estudiar la evolución de las micro-grietas y permiten prevenir catástrofes y desastres que pueden afectar a las estructuras y el medio ambiente. Esta es la razón fundamental para desarrollar métodos numéricos que posibiliten realizar estudios a nivel microscópico y es por eso el objetivo primordial del presente trabajo que hoy por hoy es un tema de singular interés e importancia para los centros de investigación de élite mundial.

El desarrollo de nuevas formulaciones de los métodos de los elementos distintos y la implementación de nuevos modelos constitutivos (micro-estructurales) constituye un elemento importante dentro del desarrollo de la mecánica computacional. La solución de diversos problemas que propician los fallos estructurales producto a catástrofes naturales (sismo, huracanes, deslizamientos de taludes, impactos de explosivos, etc); los cuales afectan severamente a la naturaleza, la biosfera, el medio ambiente, el ecosistema y a la vida social de la humanidad son temas de investigación de relevancia internacional. El estudio de estos fenómenos a través de técnicas de simulación, dirigiendo el interés de las investigaciones a la esencia más micro-estructural de los fenómenos naturales propiciará tener un conocimiento más detallado de fenómenos y su incidencia en las estructuras, posibilitando prevenir y mitigar con mayor certeza, seguridad y fiabilidad estos fenómenos.

Fundamentos y diseño metodológicos del trabajo de investigación

Situación Problemática:

La búsqueda de métodos de simulación y modelación que se acerquen cada día más a la realidad de los fenómenos físicos naturales es la esencia de la ciencia moderna. Es por ello que el desarrollo de métodos de modelación que trabajen a escala de la micromecánica es un aspecto esencial dentro del desarrollo de la Mecánica Computacional y los Métodos Numéricos en la Ingeniería. La inexistencia de métodos que describan los mecanismos de fallos estructurales y geotécnicos desde un nivel micro con la formación de microfisuras, hasta fisuras y grietas a nivel macro estructural es un aspecto que es tema de investigación de los diferentes centros de élite mundial. A lo anteriormente expresado se le une las diferentes políticas internacionales relacionadas con la preservación del medio ambiente y el ahorro de los recursos materiales disponibles en la naturaleza o creados por el hombre.

Problemas:

- ¿Qué métodos de modelación y simulación de problemas de ingeniería que trabajen a nivel de la escala de la micro-mecánica se pueden formular para dar respuesta a los fenómenos físicos que se desarrollan a nivel micro y macro respectivamente?
- ¿Qué leyes o relaciones matemáticas se pueden establecer para obtener las relaciones correspondientes entre los parámetros constitutivos micro y macro?

Interrogantes

¿Se podrá establecer un método de modelación y simulación de problemas de ingeniería que trabajen a nivel de escala de la micro-mecánica?

¿Será posible establecer las leyes o relaciones matemáticas que relacionen los parámetros constitutivos micro y macro?

Objeto de estudio

En correspondencia con lo planteado con anterioridad, queda definido el planteamiento del problema, es decir, *el objeto de estudio* de la presente investigación consistente en la modelación físico-matemática del comportamiento de los materiales a nivel microestructural y la solución de diversos problemas de ingeniería. En este caso el enfoque de la investigación está dirigido a los estudios micro-mecánicos donde se delimita la microestructura de los materiales y los microdefectos que en una concatenación de fallos se transforman en fisuras, grietas y colapsos de las edificaciones y el terreno.

Conocido el objeto de estudio de la investigación es necesario definir la hipótesis de trabajo de la misma:

La *hipótesis* de la presente investigación es, en esencia, que la modelación físico-matemática (ecuaciones constitutivas) del estado tenso-deformacional de un material a nivel microestructural y su extrapolación a un medio discontinuo (formulación MED) para resolver diversos problemas de ingeniería, posibilita una mejor correspondencia entre el modelo y el fenómeno físico real, lo que implica una mejor modelización de los problemas ingenieriles, permitiendo, a su vez, obtener soluciones más fiables, acabadas y racionales.

Delimitados el objeto de estudio y la hipótesis de la investigación se procede a definir los objetivos (generales y específicos) y las tareas científicas:

Objetivo general:

Desarrollar una formulación que posibilite el estudio sistemático del comportamiento físico-matemático del estado tenso-deformacional de un material en un punto desde un punto de vista microestructural y su extrapolación para la modelación del medio discontinuo para dar solución a distintos problemas ingenieriles.

Objetivos específicos:

- Formulación del Método de los Elementos Distintos (MED) que posibilite realizar estudios a escala de la micromecánica donde se delimita la microestructura de los materiales y los microdefectos que en una concatenación de fallos se transforman en fisuras, grietas y colapsos de las edificaciones y el terreno.
- Estimar y estudiar la interrelación entre los parámetros micros y macros. Definición y delimitación las ecuaciones de interrelación de las propiedades micros y macros.

Tareas científicas a acometer:

- Recopilación bibliográfica preliminar, definición, aprobación del tema y elaboración del plan de trabajo.

- Estudio bibliográfico y análisis del estado del arte de la temática.
- Formulación del Método de los Elementos Distintos (MED).
- Estimación y estudio preliminar de interrelación entre los parámetros micros y macros. Definición y delimitación de las ecuaciones de interrelación de las propiedades micros y macros.
- Conclusiones de este primer estudio.

Novedad científica:

Desarrollo de una formulación que permite realizar un estudio sistemático del comportamiento físico-matemático del estado tenso-deformacional de un material en un punto, desde un punto de vista micro-estructural y su extrapolación al estudio de medios discretos simulando este a escala de la micro-mecánica, permitiendo dar solución a distintos problemas ingenieriles.

Aportes científicos relevantes:

- El establecimiento de una formulación del Método de los Elementos Distintos (MED) con enfoque micro-estructural, que posibilite realizar estudios a escala de la micro-mecánica.
- Establecimiento preliminar de las ecuaciones que interrelacionan los parámetros constitutivos micros y macros.

Valor Científico de la Investigación.

El valor científico de la investigación se centra en el hecho de estudiar los estados tensionales y deformacionales a un nivel microscópico posibilitando, detectar las aparición de microfisuras y discontinuidades que son el comienzo de las cadenas de fallos estructurales y la formación de micro-zonas de plastificación que culminan desafortunadamente a nivel macroscópico en el fallo estructural. Este tipo de estudio no se puede realizar con los métodos clásico convencionales aspecto que delimita el valor científico de la investigación, el cual se vincula al valor científico que presenta obtener los vínculos de interrelación entre las propiedades constitutivas marco-micro respectivamente.

Valor Metodológico de la Investigación.

El valor metodológico de la investigación se evidencia a través de dos aspectos fundamentales:

- Enfoque sistemático e integral para estimar las relaciones entre los parámetros constitutivos macro y micro empleándose las técnicas de estudios exploratorio, técnicas estocásticas y optimización.
- Establecimiento de una metodología de trabajo para aplicar el MED a escala de la micro-mecánica, para resolver diversos problemas de ingeniería.

Valor Práctico Ingenieril de la Investigación.

El valor práctico de esta investigación está fundamentado sobre la base de que se dispone de una formulación que permite detectar las aparición de microfisuras y discontinuidades que son el comienzo de las cadenas de fallos estructurales y la

formación de micro-zonas de plastificación que culminan desafortunadamente a nivel macroscópico en el fallo estructural. Desde el punto de vista práctico ingenieril este aspecto es de singular importancia, ya que el método permite estudiar los mecánicos de fallos geotécnicos y estructurales a escala de la micro-mecánica y a su vez posibilita resolver, bajo estas condiciones, diversos problemas de ingeniería.

Beneficios de la investigación

Las formulaciones desarrolladas en la investigación y su implementación computacional servirán para modelizar y simular numéricamente (modelo de partículas) diversos problemas de ingeniería con la peculiaridad y novedad científica que en este caso se podrá investigar los fenómenos hasta un nivel microscópico. Se aplicará a aquellos problemas de ingeniería donde el riguroso conocimiento y estudio micro estructural y microscópico constituya un aspecto importante en su seguridad estructural. La simulación numérica de voladuras, estabilidad de laderas, minas a cielo abierto, etc. donde su investigación tenga una marcada influencia en la preservación del medio ambiente, son problemas a abordar y estudiar en el proyecto, con la singularidad de que el estudio se realiza a un nivel elemental de las micro-partículas que conforman el medio. La simulación de problemas convencionales de ingeniería y de mecánica computacional es otro de los problemas que no escapan a esta formulación.

Campo de aplicación:

El campo de aplicación de este trabajo está estrechamente vinculado con el proceso de modelización y análisis de las estructuras y el terreno. En este sentido, la búsqueda de nuevas técnicas de modelación que incluyan la naturaleza micro-estructural de los fenómenos, posibilitan obtener solicitudes (esfuerzos mecánicos y desplazamientos) más reales, en el proceso de análisis de estructuras, lo que se traduce en soluciones más eficientes y económicas en el proceso de diseño de las diferentes obras de arquitectura e ingeniería.

Metodología general de investigación.

Para dar cumplimiento a los objetivos trazados en la tesis y tomando en cuenta el volumen de tareas científicas a acometer fue necesario organizar y estructurar el trabajo en varias etapas, las cuales definen la metodología general de investigación.

La metodología de investigación concebida incluyó:

Definición del problema de estudio: Ya en los fundamentos conceptuales y metodológicos de la tesis se explicó la necesidad de la investigación del comportamiento y modelación de los fenómenos a escala de la micro-mecánica.

Recopilación bibliográfica: El estudio de la bibliografía se efectuara en distintas etapas en correspondencia con las exigencias que va generando el trabajo, por lo que aunque se ubicó al comienzo de la investigación, el mismo se realizará de forma sistemática hasta el final del trabajo. Se efectuaron búsquedas bibliográficas automatizadas en los principales centros de información, así como por los métodos clásicos. La búsqueda bibliográfica incluye el empleo de sistemas de búsqueda de avanzada (current content, internet).

Formación de la base teórica: Por la complejidad matemática y estadística del tema tratado en la tesis se hace necesario tener una formación adicional en estas disciplinas, que permite enfrentar las distintas fases del desarrollo investigativo del trabajo; realizándose la formación de la base teórica relacionada con la investigación, específicamente, en temas de modelación físico-matemática del comportamiento de materiales y en mecánica del cuerpo deformable.

Diseño general de la investigación: En esta etapa se efectuó la concepción general de la investigación, se definieron las hipótesis, los objetivos, tareas científicas y la estrategia de trabajo para enfrentar la investigación. Seguidamente, se estructuró la investigación en fases para ir dándole respuesta a cada uno de los objetivos y tareas científicas propuestas. También se realizó el diseño experimental (virtual), definiéndose los estudios a realizar, los ensayos correspondientes y la selección de las normativas a seguir.

Desarrollo particular de cada fase de la investigación: El desarrollo de la investigación queda estructurado en tres fases. La primera relacionada con el estudio bibliográfico y análisis del estado del arte de la temática, lo que posibilita justificar el desarrollo de la investigación.

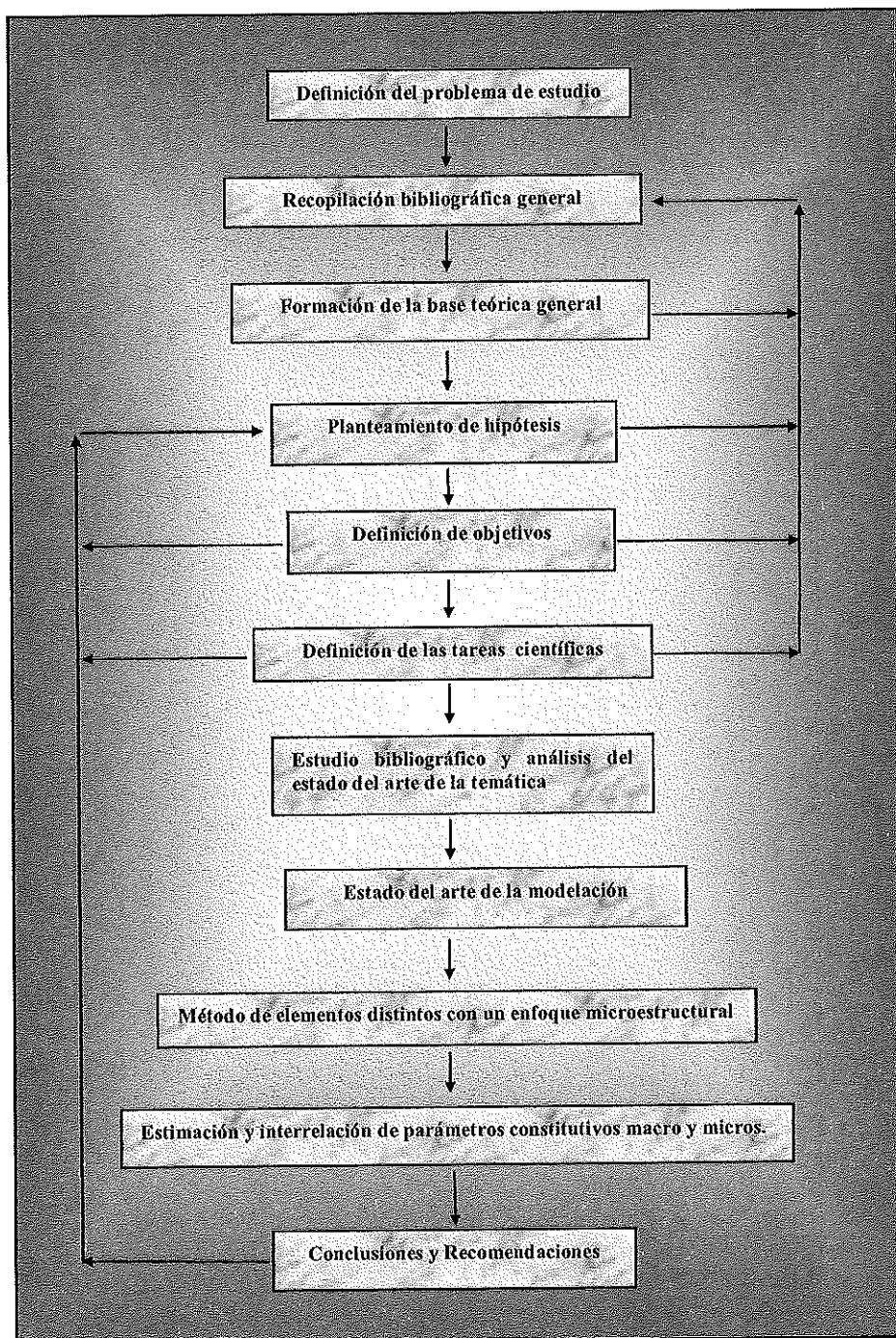
La segunda fase se relaciona con la formulación de MED con un enfoque microestructural el cual permite estudiar los fenómenos a escala de la micromecánica. En la tercera fase se realiza un estudio para estimar y obtener las ecuaciones que interrelacionan las propiedades constitutivas macro y micro-estructurales. En esta fase se emplearon dos técnicas de investigación relacionadas con: Estudios exploratorios, y técnicas estocásticas, específicamente el método de Monte Carlo.

Elaboración de conclusiones y recomendaciones: Finalmente se procederá al análisis integral de los resultados obtenidos en cada una de las fases del desarrollo de la investigación, formulándose en cada caso las correspondientes conclusiones parciales, las generales, así como las recomendaciones definitivas del trabajo.

Estructura del trabajo. La estructura de la tesis guarda una relación directa con la metodología de investigación establecida y, específicamente, con el desarrollo particular de cada una de las fases de la investigación. La misma se encuentra formada por una introducción general, dos capítulos, las conclusiones, recomendaciones y bibliografía.

El orden y estructura lógica del trabajo se establece a continuación:

- *Síntesis*
- *Introducción*
- *Capítulo I. Método de elementos distintos con un enfoque microestructural.*
- *Capítulo II: Estimación y interrelación preliminares de parámetros constitutivos macro y micros.*
- *Conclusiones*
- *Recomendaciones*
- *Bibliografía*



Capítulo I

1.0 - Introducción y aspectos generales de la formulación del método de los elementos discretos.

El Método de los elementos discretos fue introducido por Cundall (1971) para el análisis de problemas de mecánica de rocas y con posterioridad se aplicó a los sólidos por Cundall y Strack (1979) [1].

El método de los elementos discretos simula el comportamiento mecánico de un sistema conformado por una colección o sistema de partículas dispuestas arbitrariamente. Este modelo considera las partículas como elementos discretos que en su conjunto conforman el sistema complejo de partículas. Estos elementos distintos, como también se le conoce, se desplazan independientemente uno de otros e interaccionan entre sí en las zonas de contacto.

En este método a nivel de cada partícula se hace uso de la mecánica del cuerpo rígido y los elementos discretos se consideran elementos rígidos en sí. El modelo constitutivo o de comportamiento del material es establecido en las zonas de contactos entre partículas y queda caracterizado por varios elementos mecánicos como: muelles, pistones y elementos de fricción. Los elementos muelles describen la fase de comportamiento elástico del medio en la zona de contacto entre cada partícula. Este comportamiento elástico queda caracterizado por dos muelles uno en la dirección de contacto normal y otro en la dirección tangencial, los cuales corresponden con la descomposición de fuerzas de contacto que se utilizan en la formulación del método. Los elementos de fricción describen la descohesión y la falla del material en la zona de contacto entre cada partícula. Por su parte los pistones son elementos que toman en cuenta la viscosidad del medio que se simula y son elementos reguladores de la energía. En la formulación establecida puede emplearse indistintamente varios modelos de contacto viscoso y no viscoso

Como el medio es descrito por un sistema de partículas es necesario emplear la ecuación de balance de la cantidad de movimiento. Supóngase para ello de un sistema discreto formado por n elementos distintos tal que cada partícula i tiene una masa m_i , que se mueve con una aceleración a_i y está sometida a una fuerza f_i . En este caso la segunda ley de Newton establece que la fuerza que actúa sobre las partículas es igual a la masa de cada elemento discreto por su aceleración. Utilizando la definición de aceleración como la derivada material de la velocidad y teniendo en cuenta el principio de conservación de la masa (la variación de la masa de la partícula es igual a cero) se tiene:

$$f_i = m_i a_i = m_i \frac{dv_i}{dt} = \frac{d}{dt} (m_i v_i)$$

Definiendo la cantidad de movimiento de la partícula como el producto de su masa por su velocidad (m_i, v_i), expresa que la fuerza que actúa sobre el elemento distinto es igual a la variación de la cantidad de movimiento de la misma. Aplicando este concepto y la segunda Ley de Newton al sistema de n partículas o elementos discretos se tiene:

$$R(t) = \sum_i f_i = \sum_i m_i a_i = \sum_i m_i \frac{dv_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\sum_i m_i v_i \right)$$

suponiendo que se cumple el principio de conservación de la masa $\left(\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = 0 \right)$

La ecuación anterior expresa que la resultante de todas las fuerzas que actúan sobre el sistema discreto de partículas es igual a la variación por unidad de tiempo de la cantidad de movimiento del mismo.

La ley de Newton proporciona la relación fundamental entre el movimiento del sistema de partículas y las fuerzas que causan dicho movimiento. El sistema de fuerzas puede estar en equilibrio estático cuando estas no están en movimiento o no actúan fuerzas sobre los diferentes elementos distintos o el medio en cuestión.

Las fuerzas, los desplazamientos, tensiones y deformaciones son determinados a nivel de cada zona de contacto entre los elementos distintos. En correspondencia con el modelo constitutivo empleado, estos elementos mecánicos son descompuestos en sus componentes normal y desviadora.

La formulación establecida parte de una serie de hipótesis que permiten simplificar el problema real desechando los aspectos menos significativos y permitiendo establecer un modelo físico y matemático del problema en estudio. Estas hipótesis son:

1. Las partículas son consideradas como cuerpos rígidos.
2. El contacto ocurre en el punto o área muy pequeña de contacto entre cada partícula.
3. En las uniones entre partículas se considera que existe contactos entre los elementos discretos.
4. Todas las partículas son circulares. En 2D se emplean cilindros y en 3D esferas. Si embargo, la formulación puede considerar o emplear otros tipos de partículas con formas diversas y arbitrarias.
5. La generación del medio empleando elementos discretos debe ser aleatoria y los diámetros de los mismos deben ser tratados de forma similar (posición y diámetro de los elementos distintos aleatorio).
6. Se trabaja en el campo de las pequeñas deformaciones.
7. El comportamiento constitutivo en la zona de contacto emplea un tolerancia (separación / penetración), donde las partículas o elementos distintos se les permite cierto solape (holgura, gap o penetración) o separación en el punto de contacto. Este aspecto implica desde el punto de vista numérico un contacto aproximado.
8. La magnitud del solape (holgura, penetración o gap) y la separación está relacionada con la fuerza de contacto, la ley fuerza-desplazamiento (modelo constitutivo de contacto), y la magnitud de estos es pequeña con relación al tamaño de los elementos distintos o partícula.

Suponer que las partículas son elementos rígidos es mejor cuando la deformación del sistema físico es considerada a partir del movimiento a lo largo de las interfaces o zonas de contacto entre las partículas.

En la formulación del modelo se han incluido elementos rígidos o paredes, a los cuales, se les pueden imponer condiciones de contorno como: velocidades impuestas,

desplazamientos, fuerzas o el caso totalmente opuesto como restricciones de movimiento.

En el método de los elementos discretos, la interacción de las partículas es abordada en el proceso de cálculo como un proceso dinámico con desarrollo de estados de equilibrio siempre y cuando exista un balance de las fuerzas interiores. La fuerza de contacto, los desplazamientos, tensiones y deformaciones relativas de una partícula del conjunto son determinadas a través de los movimientos que presentan las partículas individuales. Los movimientos son el resultado de la propagación a través del sistema de partículas de perturbaciones (condiciones de contorno impuestas: fuerzas, desplazamientos, velocidades, etc.) causadas por las paredes o por condiciones impuestas a los mismos elementos discretos. En este proceso dinámico la velocidad de propagación de las perturbaciones impuestas sobre el sistema de partículas depende de las propiedades físicas y mecánicas del sistema discreto en cuestión. La estimación de estas propiedades microestructurales y su relación con las macroestructurales son el objetivo esencial de esta investigación.

El comportamiento dinámico del sistema de partículas se representa numéricamente por un algoritmo explícito con determinados paso de tiempo considerando que las velocidades y aceleraciones son constantes dentro de cada paso de tiempo. El método de los elementos discretos se basa en la idea de que el paso de tiempo escogido tiene que ser muy pequeño, de forma tal que durante la propagación de una perturbación de una partícula a otra en un paso de tiempo determinado no se puede propagar la misma más allá que a los vecinos inmediatos de cada partícula. Este aspecto propicia que en todo momento, las fuerzas que actúan en cualquier partícula sean exclusivamente determinadas por su interacción con los elementos discretos con los que está en contacto. El paso de tiempo se calcula en función de las propiedades físicas y mecánicas del medio, lo que permite asegurar que la velocidad a que una perturbación determinada se propaga cumpla con la restricción y suposiciones anteriores.

El proceso de cálculo en el método de los elementos discretos se realiza alternando la aplicación de la segunda ley de Newton y una ley de fuerza-desplazamiento (ecuación constitutiva de contacto) en los contactos existentes entre cada elementos que conforma el sistema de partículas. La segunda ley de Newton se usa para determinar el movimiento de cada partícula que se origina como resultado de la acción de las fuerzas de contacto y las fuerzas volumétricas, mientras que la ley constitutiva (ley fuerza-desplazamiento) se emplea para actualizar las fuerzas originadas por el movimiento relativo en cada contacto. En los contactos esfera pared solo se requiere aplicar la ley de fuerza-desplazamiento para cada contacto y no es necesario aplicar la ley de Newton porque en el caso de las paredes los movimientos son prefijados como condiciones impuestas.

El modelo consiste en emplear elementos esféricos rígidos para modelar el medio. Esta forma de modelación es apropiada para materiales granulares, geomateriales y otros. La hipótesis de considerar los elementos (esferas o discos) rígidos y concentrar la deformación en los punto de contacto entre ellos es adecuada para describir y caracterizar el comportamiento de los materiales (metales, terreno, rocas, suelo, etc) y el movimiento de las discontinuidades a nivel microscópico y macroscópico. Por consiguiente este modelo también puede aplicarse para modelar el problema a diversas escalas (modelos multiescala) en función de las dimensiones de los diversos elementos

que conforman el medio. En la definición de las leyes de contacto entre elementos se incluye las fuerzas de cohesión y fricción, aspectos que permiten modelar la fractura y la descohesión o pérdida de cohesión del material. Esta consideración en el modelo permite a su vez delimitar la formación de micro-fisuras y fisuras que provocan al final el colapso de una estructura. Tener en cuenta en el modelo de contacto la cohesión y fricción del material permite modelar materiales como rocas y suelos, que colapsarán, para ciertos rangos de esfuerzos, debido a la propagación de fisuras en el seno de los mismos.

2.0 - Proceso de cálculo del método de los elementos discretos.

El proceso del cálculo es un algoritmo cíclico o repetitivo que requiere la aplicación de la ley de movimiento a cada partícula, una ley de fuerza-desplazamiento en cada contacto y una actualización constante de posiciones de las paredes. En cada paso de tiempo cambian de forma dinámica la estructura de contacto existente entre los elementos discretos o entre las esferas y las paredes. Este aspecto implica tener un control estricto de los contactos en cada paso de tiempo, además de tener implementado un algoritmo eficiente que actualice constantemente los mismos durante el transcurso de la simulación. De forma muy simplificada el proceso de cálculo se ilustra en la figura siguiente:

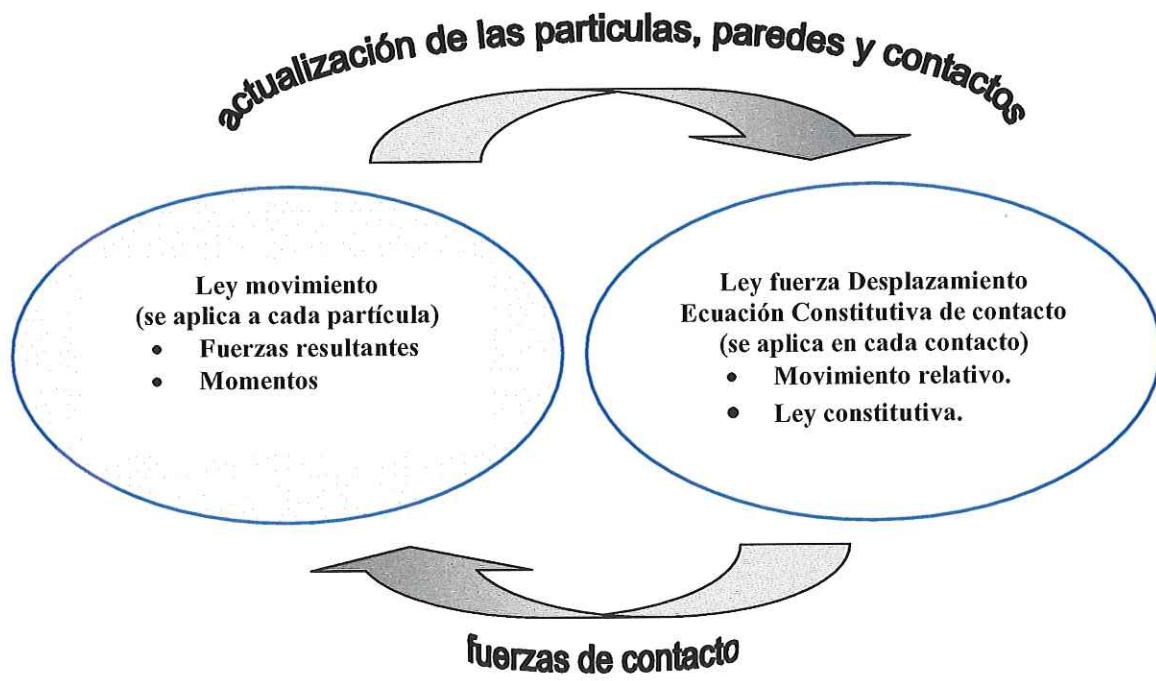


Figura 1: Esquema explícito del método de los elementos discretos.

En el proceso de cálculo en cada instante de tiempo, los contactos se actualizan obteniéndose los diferentes contactos entre esferas y esferas-pared, conociéndose además la posición de cada partícula y de las paredes. Por su parte la ley fuerza-desplazamiento se aplica en cada contacto para actualizar las fuerzas basándose en el movimiento relativo entre las partículas en contacto y el modelo constitutivo empleado. Seguidamente, la ley de movimiento se aplica a cada partícula para actualizar su velocidad y la posición en base a las fuerzas y momentos resultantes que se originan

como resultado de la acción de las fuerzas de contacto y las fuerzas volumétricas en cada elemento discreto. Análogamente la posición de la pared se actualiza basándose en las velocidades especificadas como condición impuesta.

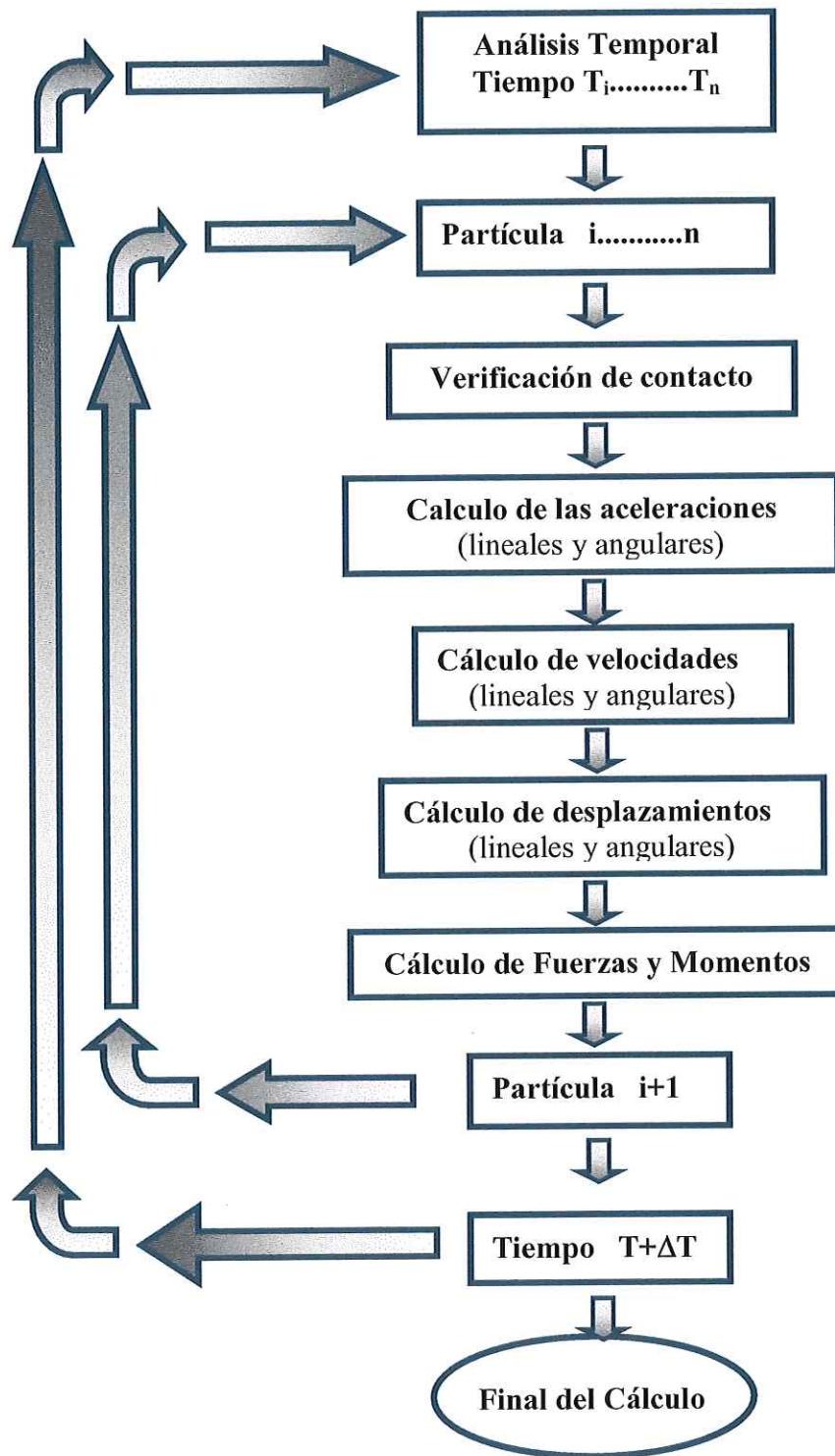


Figura 2: Esquema de la secuencia de cálculo en el método de los elementos discretos.

3.0 - Formulación del método de los elementos discretos.

3.1 – Ecuaciones de Movimiento.

El estudio de modelos de partículas a través del Método de los Elementos Discretos con el empleo de nuevos modelos constitutivos micro-estructurales es un tema de indudable interés científico en el campo de los métodos numéricos en la ingeniería.

La finalidad de acercarse cada vez más al micro-mundo y a la esencia micro-estructural de los fenómenos físicos, permite realizar estudios de seguridad estructural con un alto grado de precisión y fiabilidad, lo que a su vez posibilita prever fallos estructurales severos, ya que los modelos discretos (modelos de partículas) permiten detectar fallos a nivel micro. El hecho de poder estudiar los estados tensionales y deformacionales a un nivel microscópico posibilita detectar las aparición de microfisuras y discontinuidades que son el comienzo de las cadenas de fallos estructurales y la formación de micro-zonas de plastificación que culminan desafortunadamente, a nivel macroscópico, en el fallo estructural. Estas delimitaciones no apreciables por los métodos macroscópicos convencionales, posibilita estudiar la evolución de las micro-grietas y permite a su vez prevenir catástrofes y desastres que pueden afectar a las estructuras.

El movimiento de los diferentes elementos discretos que conforman el modelo de partículas se rige por las leyes de la dinámica de la mecánica del sólido rígido. La translación y la rotación de las partículas esféricas o cilíndricas rígidas se describen por medio de las ecuaciones de la dinámica de Newton-Euler (figura 3). El movimiento del elemento i -ésimo del conjunto de elementos discretos se describe por las siguientes ecuaciones:

$$m_i \ddot{u}_i = F_i \quad (1)$$

$$I_i \ddot{\omega}_i = T_i \quad (2)$$

donde :

- u** - es el vector de desplazamiento del centroide del elemento en un sistema de coordenadas fijo **X**.
- ω** - velocidad angular del elementos respecto a sistema de referencia móvil x, con el elementos y el origen en el centro del mismo.
- m** - masa del elemento o partícula i -ésimo.
- I** - momento de inercia.
- F** - fuerza resultante
- T** - momento resultante.

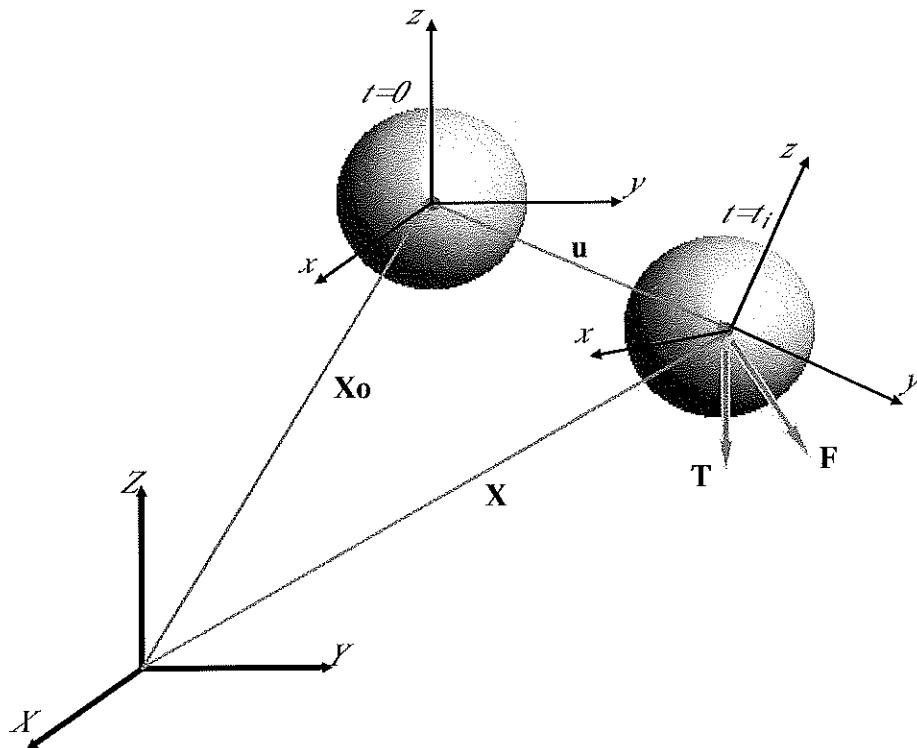


Figura 3: Movimiento de sólido rígido en un sistema de referencia espacial

3.2 - Amortiguamiento global.

Los códigos dinámicos explícitos satisfacen mejor la simulación de procesos dinámicos, aunque se pueden aplicar con facilidad en la simulación de problemas cuasi-estáticos. Una de las metodologías elaboradas para analizar los problemas cuasi-estáticos con el modelo dinámico explícito es la relajación dinámica [10]. Un factor importante para el éxito del análisis de los problemas cuasi-estáticos con un código dinámico consiste en la aplicación de un amortiguamiento adecuado. En el modelo de los elementos discretos, las oscilaciones con las frecuencias más altas se amortiguan con el amortiguamiento impuesto al contacto. Igualmente en los problemas cuasi-estáticos, es necesario amortiguar las oscilaciones de los modos de vibración más bajos a través de un amortiguamiento exterior o global. Esto puede lograrse aplicando el amortiguamiento viscoso global cerca del valor crítico para las frecuencias más bajas. La velocidad de las cargas también debe corresponder a las propiedades dinámicas del sistema, y debe introducirse durante un tiempo suficientemente largo comparado con el periodo de vibraciones en el modo natural más bajo.

El estado de equilibrio del sistema de partículas puede ser lograrse por la aplicación de un amortiguamiento adecuado. A veces es necesario, la aplicación de un amortiguamiento para disipar la energía cinética de las partículas que no están en contacto y esta es la justificación para el empleo de un amortiguamiento global del sistema de partículas. En el caso del amortiguamiento global, al igual que en el amortiguamiento de contacto, existen dos tipos: amortiguamiento viscoso y no viscoso.

En los dos casos los términos de amortiguamiento F_i^{Amortig} y T_i^{Amortig} se agregan a las ecuaciones de movimiento (1) y (2):

$$m_i \ddot{u}_i = F_i + F_i^{\text{Amortig}} \quad (3)$$

$$I_i \ddot{\omega}_i = T_i + T_i^{\text{Amortig}} \quad (4)$$

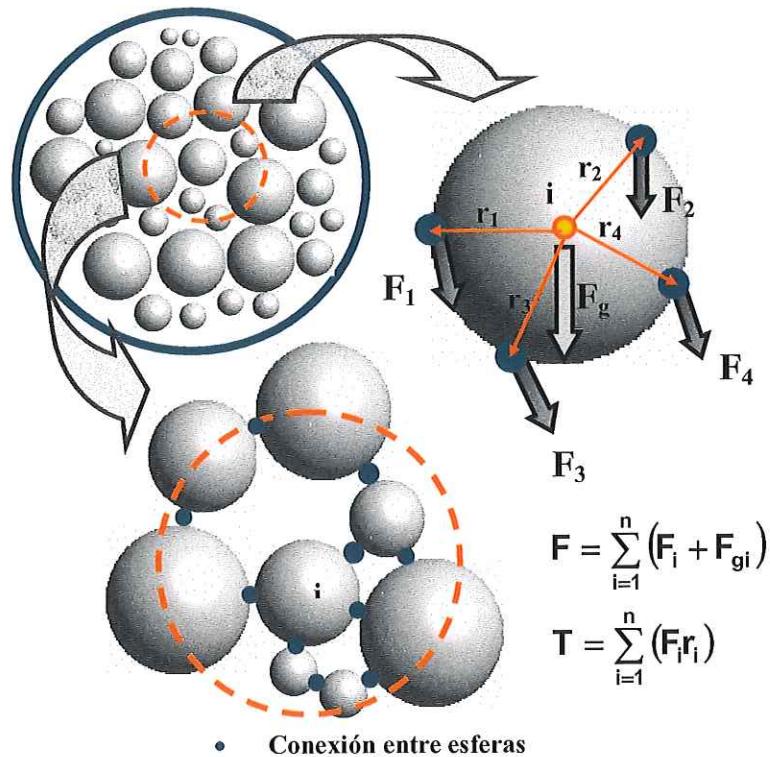


Figura 4 : Fuerzas de contacto entre partículas o elementos discretos.

El cálculo del amortiguamiento global es diferente para el caso viscoso y el no viscoso. En el viscoso el amortiguamiento queda definido por:

$$F_i^{\text{amortig}} = -\alpha^{\text{vT}} m_i \dot{u}_i$$

$$T_i^{\text{amortig}} = -\alpha^{\text{vr}} I_i \dot{\omega}_i$$

y para el caso no viscoso :

$$F_i^{\text{amortig}} = -\alpha^{\text{nvT}} \|F_i\| \frac{\dot{u}_i}{\|\dot{u}_i\|}$$

$$T_i^{\text{amortig}} = -\alpha^{\text{nv}} \|T_i\| \frac{\dot{\omega}_i}{\|\dot{\omega}_i\|}$$

donde: α^{vT} , α^{vr} , α^{nvT} , α^{nv} r son las constantes de amortiguamiento. En estas ecuaciones queda expresado el amortiguamiento del sistema global para los casos viscoso y no viscoso. En el caso de amortiguamiento viscoso la fuerza de

amortiguamiento es proporcional a la velocidad, mientras que en el no viscoso es proporcional a la fuerza y al momento resultante.

3.3 - Determinación de la densidad y masa micro-estructural.

La masa de cada elemento discreto se puede estimar conociendo de antemano la densidad de material y los diámetros o radios de cada una de las esferas que conforman el medio. El cálculo de la masa (Figura 5) puede realizar por:

$$m_i = \gamma V_i$$

donde:

γ - densidad del material.

V - Volumen.

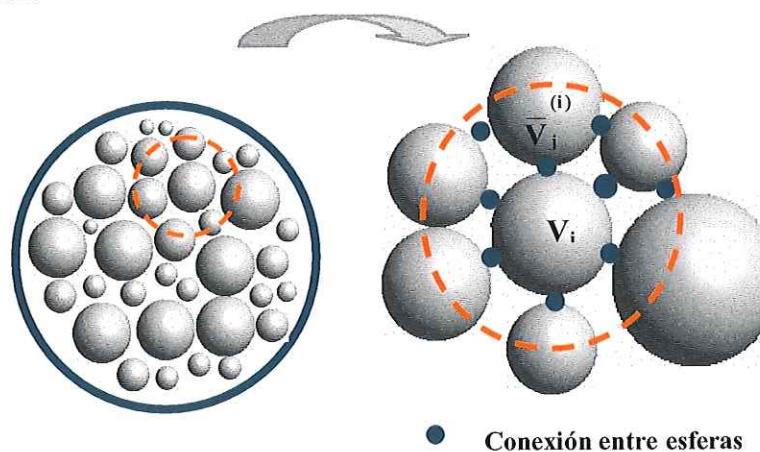


Figura 5: Definición del volumen de control para evaluar la densidad microestructural

En los modelos de partículas, como su nombre lo indica, se discretiza el medio por elementos discretos esféricos, lo que propicia la formación de zonas de vacío o huecos que a su vez delimitan la porosidad del material. Esto hace necesario tomar en cuenta este aspecto para el cálculo de la densidad micro-estructural. Para ello en cada partícula se define un volumen de control (V_c), lo que posibilita definir la densidad micro para cada elemento discreto:

$$\bar{\gamma}^{(i)} = \gamma \frac{V_c - V_o^{(i)}}{V_c}, \quad V_o^{(i)} = V_c - V_i - \sum V_j^{(i)}$$

$$V_i = \frac{4}{3} \pi r_i^3 \quad (3D - \text{esferas})$$

Para el caso 2D se trabaja con el concepto de área de control (A_c) obteniéndose:

$$\bar{\gamma}^{(i)} = \gamma \frac{A_c - A_o^{(i)}}{A_c}, \quad A_o^{(i)} = A_c - A_i - \sum A_j^{(i)}$$

$$A_i = \pi r^2 \quad (2D - \text{cilindros})$$

3. 4 - Integración del problema con un esquema de diferencia finita central.

El movimiento rotatorio se describe con respecto al corotacional de un sistema de coordenadas locales x incluido en cada elemento. Los vectores \mathbf{F} y \mathbf{T} son las sumas de todas las fuerzas y momentos aplicadas en el elemento i -ésimo debido a la carga externa, y a las interacciones de contacto entre las esferas, etc., así como a las fuerzas resultante del amortiguamiento en el sistema.

Las ecuaciones de movimiento (1), (2) o (3) (4) se integran en el tiempo usando un esquema de diferencias finitas centrado. La integración del movimiento translacional de los elementos discretos para el paso de tiempo i -ésimo se realiza como sigue:

$$\ddot{\mathbf{u}}_i^n = \frac{\mathbf{F}_i^n}{m_i} \quad (5)$$

Tomando en cuenta las fuerzas de amortiguamiento:

$$\ddot{\mathbf{u}}_i^n = \frac{\mathbf{F}_i^{\text{amortig}} + \mathbf{F}_i^n}{m_i} \quad (6)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_i^{\frac{n+1}{2}} = \dot{\mathbf{u}}_i^{\frac{n-1}{2}} + \ddot{\mathbf{u}}_i^n \Delta t \quad (7)$$

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n + \dot{\mathbf{u}}_i^{\frac{n+1}{2}} \Delta t \quad (8)$$

En el caso del movimiento rotacional también se emplea un esquema en diferencias finitas centrado, obteniéndose para la velocidad y el desplazamiento angular:

$$\dot{\omega}_i^n = \frac{\mathbf{T}_i^n}{I_i} \quad (9)$$

y tomando en cuenta el amortiguamiento global:

$$\dot{\omega}_i^n = \frac{\mathbf{T}_i^{\text{amortig}} + \mathbf{T}_i^n}{I_i} \quad (10)$$

$$\omega_i^{\frac{n+1}{2}} = \omega_i^{\frac{n-1}{2}} + \dot{\omega}_i^n \Delta t \quad (11)$$

En problemas en 2D el ángulo de la rotación (θ) se puede obtener de modo similar al vector del desplazamientos \mathbf{u}_i (8):

$$\theta_i^{n+1} = \theta_i^n + \omega_i^{\frac{n+1}{2}} \Delta t \quad (12)$$

En el caso del movimiento tridimensional (3D), la matriz de rotación define el cambio de coordenadas del sistema de referencia móvil en cada paso de tiempo x_i respecto al sistema de referencia fijo X_i :

$$\mathbf{X} = \Lambda_i \mathbf{x}_i \quad (13)$$

La matriz de rotación se formula para cada paso de tiempo [5], [6] por:

$$\Delta\theta = \omega_i^{\frac{n+1}{2}} \Delta t \quad (14)$$

$$\Delta\Lambda_i = \cos\|\Delta\theta_i\| \mathbf{I} + \frac{\sin\|\Delta\theta_i\|}{\|\Delta\theta_i\|} \Delta\tilde{\theta}_i + \frac{1 - \cos\|\Delta\theta_i\|}{\|\Delta\theta_i\|^2} \Delta\theta_i \Delta\theta_i^T \quad (15)$$

$$\Lambda_i^{n+1} = \Delta\Lambda_i \Lambda_i^n \quad (16)$$

donde:

$\Delta\theta = \{\Delta\theta_x, \Delta\theta_y, \Delta\theta_z\}^T$ denota el vector de rotación incremental,

$\Delta\Lambda$ es la matriz rotacional incremental,

$\Delta\tilde{\theta}_i$ es una matriz antisimétrica, definida como:

$$\Delta\tilde{\theta} = \begin{bmatrix} 0 & -\Delta\theta_z & \Delta\theta_y \\ \Delta\theta_z & 0 & -\Delta\theta_x \\ -\Delta\theta_y & \Delta\theta_x & 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

3.5 - Estabilidad numérica del esquema de integración explícito.

La integración explícita en el tiempo presenta una alta eficiencia computacional pero no es incondicionalmente estable. La desventaja del esquema de la integración explícito es conocida, su estabilidad numérica condicional impone una limitación en el paso o discretización del tiempo. Para cumplir con la estabilidad del método es necesario que el paso de tiempo sea menor o igual al tiempo crítico:

$$\Delta t \leq \Delta t_{\text{crítico}} \quad (18)$$

El tiempo crítico se obtiene a partir de la frecuencia natural más alta del sistema ω_{max} por:

$$\Delta t_{\text{crítico}} = \frac{2}{\omega_{\text{max}}} \quad (19)$$

Si existe amortiguamiento, el incremento de tiempo crítico se calcula por:

$$\Delta t_{\text{crítico}} = \frac{2}{\omega_{\text{max}}} \left(\sqrt{1 + \xi^2} - \xi \right) \quad (20)$$

donde:

ξ - es el fracción del amortiguamiento crítico que corresponde a la frecuencia más alta ω_{max} .

La determinación exacta de la frecuencia más alta ω_{max} requiere la solución de un problema de autovalores definidos para el sistema de n partículas rígidas conectadas

entre sí. En un procedimiento de solución aproximado pueden definirse los problemas de autovalores separadamente usando las ecuaciones linealizadas del movimiento:

$$\mathbf{m}_i \ddot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{k}_i \mathbf{r}_i = \mathbf{0} \quad (21)$$

donde

$$\mathbf{m}_i = \{\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_i, \mathbf{m}_i, \mathbf{l}_i, \mathbf{l}_i, \mathbf{l}_i\}^T, \mathbf{r}_i = \{(\mathbf{u}_x)_i, (\mathbf{u}_y)_i, (\mathbf{u}_z)_i, (\theta_x)_i, (\theta_y)_i, (\theta_z)_i\}^T \quad (22)$$

\mathbf{k}_i - matriz rigidez que toma en cuenta la contribución de todas las partículas i .

La ecuación (22) define los vectores \mathbf{m}_i y \mathbf{r}_i para una partícula esférica en el espacio tridimensional. Para una partícula cilíndrica en un modelo bidimensional se definen como sigue:

$$\mathbf{m}_i = \{\mathbf{m}_i, \mathbf{m}_i, \mathbf{l}_i\}^T, \quad \mathbf{r}_i = \{(\mathbf{u}_x)_i, (\mathbf{u}_y)_i, (\theta_z)_i\}^T. \quad (23)$$

La ecuación (21) conduce a resolver el problema de autovalores siguiente:

$$\mathbf{k}_i \mathbf{r}_i = \mathbf{m}_i \lambda_i \mathbf{r}_i \quad (24)$$

donde: los autovalores λ_j ($j \in \{1, \dots, 6\}$ en el caso de 3D, y para el caso de 2D $j \in \{1, \dots, 3\}$) son los cuadrados de las frecuencias de vibraciones libres:

$$\lambda_j = \omega_j^2 \quad (25)$$

En los problemas 3D, tres de las seis frecuencias son de translación, y las otras tres de rotación, mientras que en 2D dos frecuencias son de translación y una de rotación.

Una forma de simplificar el problema de autovalores para el cálculo de la frecuencia máxima ω_{\max} puede ser estimando la misma como la máxima frecuencia natural de un sistema masa-resorte definido para todas las partículas con una translación y un rotación por grado de libertad. Las translaciones y las rotaciones de la vibración libre son gobernadas por las ecuaciones siguientes:

$$\mathbf{m}_i \ddot{\mathbf{u}}_{ni} + \mathbf{k}_n \mathbf{u}_{ni} = \mathbf{0} \quad (26)$$

$$\mathbf{l}_i \ddot{\theta}_{ni} + \mathbf{k}_\theta \mathbf{u}_{ni} = \mathbf{0} \quad (27)$$

donde se tiene que el movimiento de translación es debido a la interacción de contacto en la dirección normal (\mathbf{k}_n es la rigidez elásticas del contacto en la dirección normal), y el movimiento rotacional a la interacción en el sentido tangencial (\mathbf{k}_θ rigidez elásticas del contacto en la dirección tangencial al mismo). Conocida la rigidez tangencial, la rigidez rotatoria puede obtenerse como:

$$\mathbf{k}_\theta = \mathbf{k}_T \mathbf{r}^2 \quad (28)$$

donde \mathbf{r} es la longitud del vector que conecta el centro de masa de los puntos en contacto

La frecuencia natural de las vibraciones de translación se obtiene por la ecuación siguiente:

$$\omega_n = \sqrt{\frac{k_n}{m_i}} \quad (29)$$

mientras la frecuencia rotacional puede obtenerse por la fórmula

$$\omega_\theta = \sqrt{\frac{k_\theta}{I_i}} \quad (30)$$

Como la inercia rotacional es:

$$I = \frac{2}{5} mr^2 \quad (3D, \text{ esferas}) \quad (31)$$

$$I = \frac{mr^2}{2} \quad (2D, \text{ discos}) \quad (32)$$

y k_θ esta dado por la ecuación (28), la frecuencia rotacional puede calcularse como:

$$\omega_\theta = \sqrt{\frac{5k_T}{2m_i}} \quad (3D, \text{ esferas}) \quad (33)$$

$$\omega_\theta = \sqrt{\frac{2k_T}{m_i}} \quad (2D, \text{ discos}) \quad (34)$$

Si $k_T=k_n$ la frecuencia rotacional ω_θ es considerablemente mayor que la frecuencia de translación ω_n obtenido por la ecuación (30), como resultado el incremento de tiempo crítico tiene que ser menor que el obtenido por la ecuación (19). Con tal de evitar que el paso de tiempo crítico venga fijado por las frecuencias de rotación, la inercia rotacional se escala de forma adecuada.

3.6 - Modelo constitutivo de contacto micro estructural y evaluación de las fuerzas de contacto.

El modelo constitutivo microestructural se formula a nivel de cada contacto entre esferas o discos según sea el caso (2D y 3D). Despues de haber detectado los contactos entre un par de partículas, se procede a calcular las fuerzas que ocurren en ese punto de contacto. Si se considera dos partículas la interacción entre estas se puede representar por la aplicación de la tercera ley de Newton. La interacción entre estos dos elementos discretos se representa por las fuerzas de contacto F_1 y F_2 , que por principio de acción y reacción satisfacen la relación siguiente:

$$F_1 = -F_2 \quad (35)$$

Si se descomponen las fuerzas (F_1 o F_2 que ahora se denota por F) en sus componentes normales y tangenciales, F_n y F_T , respectivamente:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_n + \mathbf{F}_T = \mathbf{F}_n \mathbf{n} + \mathbf{F}_T \quad (36)$$

donde:

n - es el vector de la unidad normal a la superficie de la partícula en el punto de contacto (por tanto, para elementos esféricos o discos tiene la dirección de la recta que une las dos partículas y su dirección es apuntando hacia afuera respecto la partícula 1).

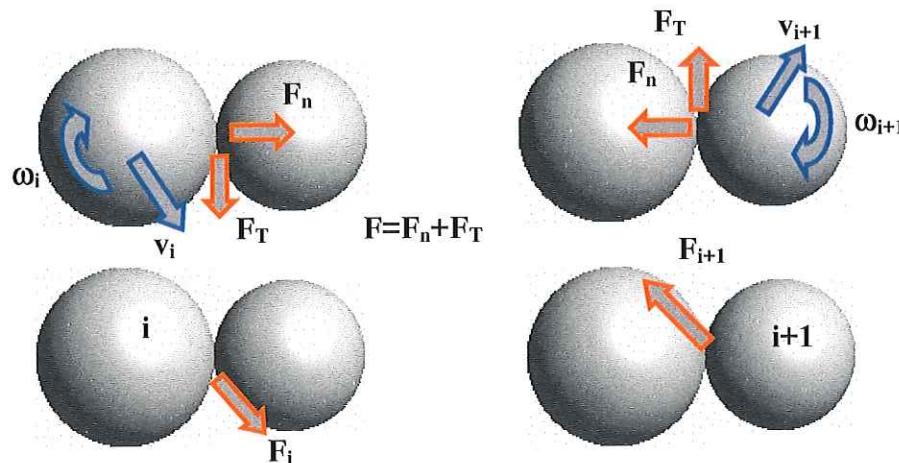


Figura 6: Descomposición de las fuerzas en sus componentes normal y tangencial.

Las fuerzas de contacto \mathbf{F}_n y \mathbf{F}_T se obtienen a través del modelo constitutivo empleado para describir el comportamiento en el contacto entre las esferas. En este caso se han formulado dos modelos constitutivos: uno con comportamiento viscoso y otro no viscoso (figura 7). El comportamiento no viscoso es un caso particular del viscoso cuando la viscosidad en el contacto es cero.

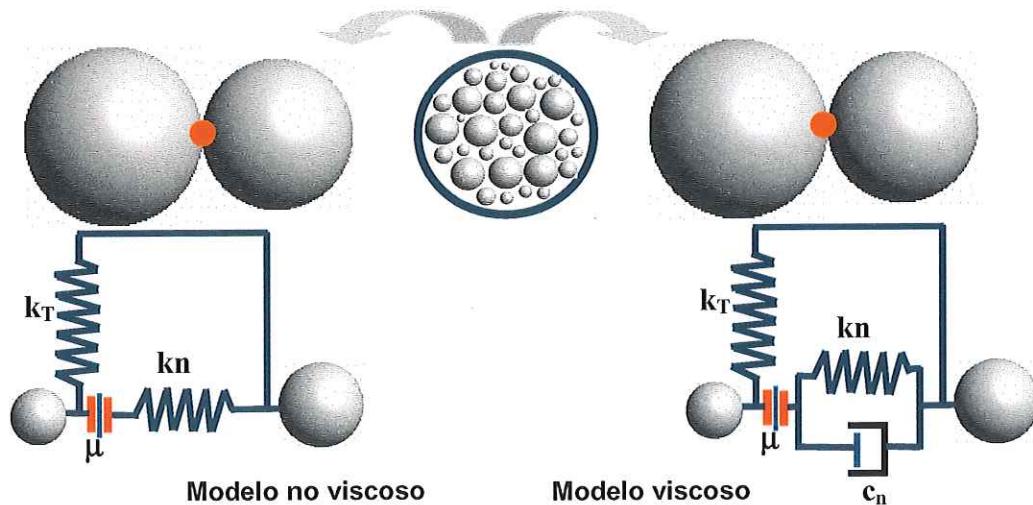


Figura 7: Tipos de modelos constitutivos de contacto.

Estos modelos quedan caracterizados por diferentes elementos que describen la parte elástica y plástica del comportamiento del material y en el caso específico del modelo viscoso existe un pistón que describe el comportamiento viscoso del contacto. Simultáneamente al estudio del contacto, las fuerzas han sido descompuestas en su componente normal y tangencial; en consecuencia con esto se ha formulado el modelo constitutivo de contacto, lo que implica que la interfase del contacto se caracteriza por:

una rigidez normal k_n y otra tangencial k_t , los esfuerzos máximos de cohesión en la dirección normal R_n (“fuerza” máxima en la dirección normal) y tangencial R_t (“fuerza” máxima en la dirección tangencial), el coeficiente de rozamiento de Coulomb μ , la intensidad de adhesión o adherencia β , y el coeficiente de amortiguamiento (c - en el modelo viscoso).

En el caso del modelo viscoso se introduce un amortiguamiento en el contacto con la finalidad de disipar la energía cinética y disminuir las oscilaciones de las fuerzas de contacto. Por esta razón se asume la contribución de una fuerza de amortiguamiento en la componente de la fuerza de contacto normal. Por tanto, se pueden descomponer las fuerzas de contacto normal F_n en su parte elástica F_{ne} y en su respectiva fuerza de contacto de amortiguamiento F_{nd} . Esta fuerza F_{nd} no existe en el caso del modelo no viscoso.

$$F_n = F_{ne} + F_{nd} \quad (37)$$

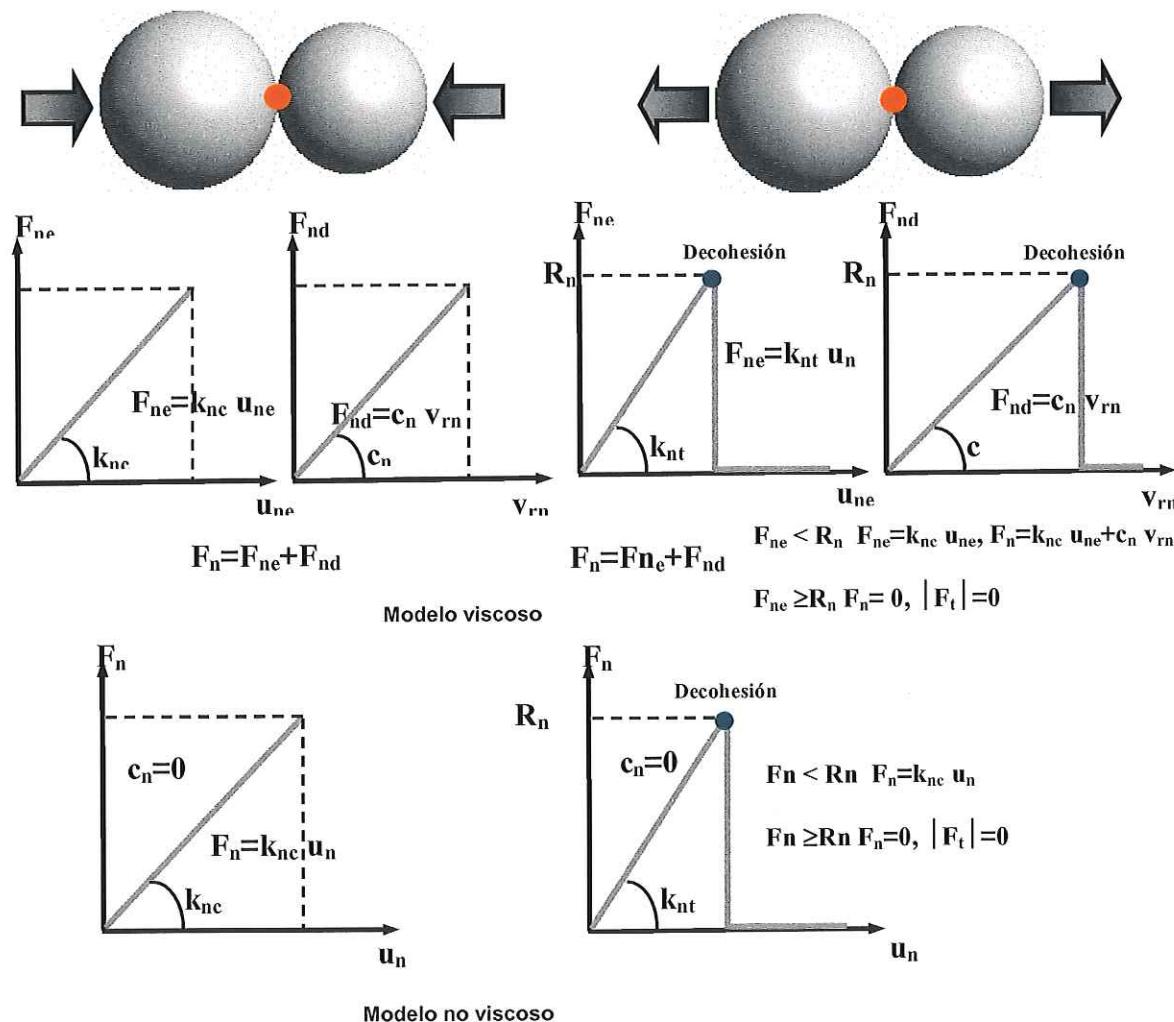


Figura 8: Modelos constitutivos viscoso y no viscoso. Comportamiento a compresión y tracción en la dirección normal.

En el caso del modelo de contacto viscoso la fuerza de amortiguamiento se determina por:

$$F_{nd} = c v_{rn} \quad (38)$$

donde la componente de fuerza de amortiguamiento es proporcional a la velocidad relativa normal v_{rn} de los centros de las dos partículas en el contacto.

$$v_{rn} = (\dot{u}_2 - \dot{u}_1) \cdot n \quad (39)$$

El valor de amortiguamiento c se puede tomar como la fracción del amortiguamiento crítico C_{cr} para el sistema de dos cuerpos rígidos con masas m_1 y m_2 , conectadas por un muelle con rigidez k_n [8].

$$C_{cr} = 2 \sqrt{\frac{m_1 m_2 k_n}{m_1 + m_2}} \quad (40)$$

La parte elástica de la fuerza del contacto normal F_{ne} es proporcional a la rigidez normal k_n (knc - rigidez compresión y knt - tracción) y a la separación existente entre las partículas u_{rn} (Figura 8).

$$F_{ne} = k_n u_{rn} \quad (41)$$

En el caso de materiales sin cohesión ($\beta = 0$) no podrá desarrollarse una fuerza de contacto normal de tracción:

$$F_{ne} \leq 0 \quad (42)$$

La separación entre partículas u_{rn} se calcula como la distancia entre los centros (d) menos los radios (r_1 y r_2) de las esferas en contacto:

$$u_{rn} = d - r_1 - r_2 \quad (43)$$

donde:

d - distancia entre los centro de las partículas

r_1, r_2 - radios.

Si $u_{rn} \leq 0$, la fórmula (41) es valida, y por su parte $F_{ne} = 0$.

Si el material es cohesivo ($\beta=1$) las fuerzas del contacto normales pueden ser de compresión o de tracción indistintamente. La fuerza del contacto normal debido a la cohesión es calculada por la ecuación (41), pero en este caso la separación u_{rn} es calculada como la componente relativa del desplazamiento normal entre los puntos en contacto:

$$u_{rn} = u_r \cdot n \quad (44)$$

$$u_{rn} = (X_2^n + \Lambda_2 r_{c2}) - (X_1^n + \Lambda_1 r_{c1}) \quad (45)$$

En el momento que se establece la adherencia cohesiva los puntos en cuestión coinciden y se establece:

$$\overset{0}{\mathbf{X}_2} + \overset{0}{\Lambda_2} \overset{0}{\mathbf{r}_{c2}} = \overset{0}{\mathbf{X}_1} + \overset{0}{\Lambda_1} \overset{0}{\mathbf{r}_{c1}} \quad (42)$$

donde:

$\overset{0}{\mathbf{X}_1}, \overset{0}{\mathbf{X}_2}, \overset{n}{\mathbf{X}_1}$ y $\overset{n}{\mathbf{X}_2}$ - denotan las posiciones del centro de las partículas en el sistema de la coordenada global en un instante de tiempo t_0 y el instante de tiempo de estudio t_n . Este aspecto denotando la configuración presente y la configuración cuando la cohesión se ha establecido.

$\overset{0}{\Lambda_1}, \overset{0}{\Lambda_2}, \overset{n}{\Lambda_1}$ y $\overset{n}{\Lambda_2}$ - son las correspondientes matrices de rotación (matriz de cósenos directores),

$\mathbf{r}_{c1}, \mathbf{r}_{c2}$ - son los vectores que conectan los centros de la partícula con el punto de contacto en el momento de establecerse la conexión entre esferas.

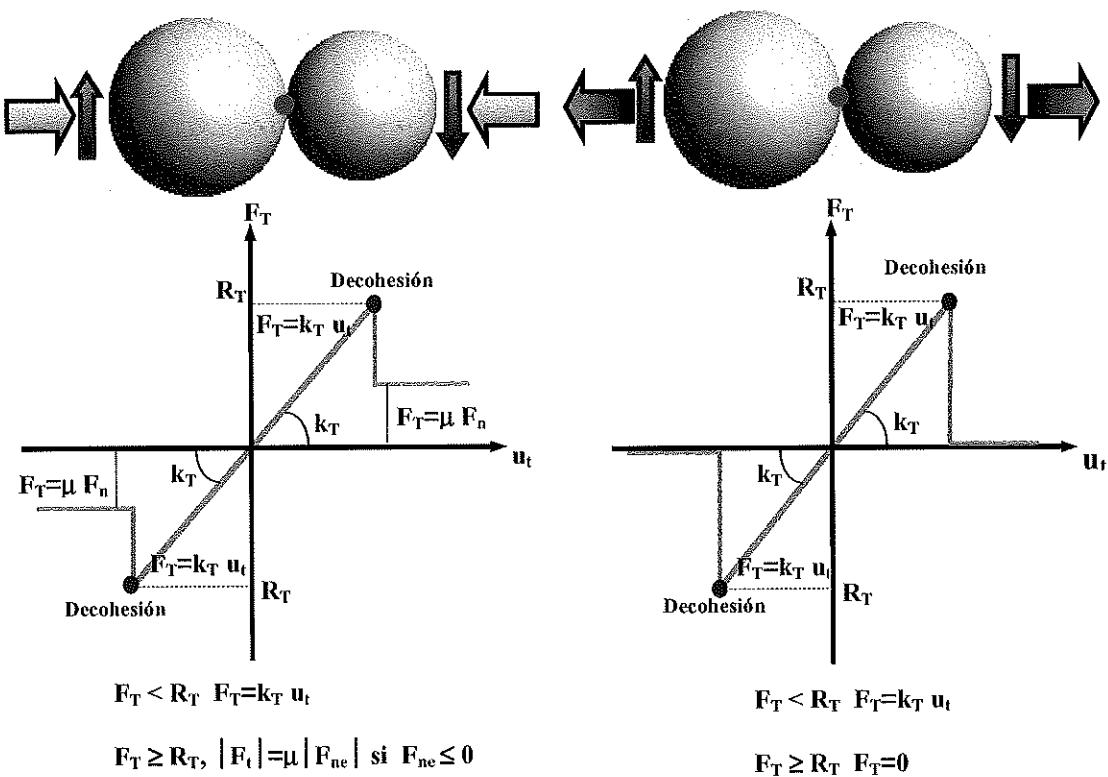


Figura 9: Modelos constitutivos viscoso y no viscoso. Comportamiento de la componente tangencial cuando en la dirección normal esta sometida a compresión y a tracción.

La fuerza elástica correspondiente a la dirección tangencial (Figura 9) se puede calcular por:

$$\mathbf{F}_T = k_T \mathbf{u}_{rT} \quad (46)$$

donde

$$\mathbf{u}_{rT} = \mathbf{u}_r - \mathbf{u}_{rn} \mathbf{n} \quad (47)$$

La existencia de cohesión también implica que existe fuerza de contacto tangencial al mismo.

El modelo de contacto presenta un criterio de rotura microestructural que caracteriza el fallo por tracción o por cortante de los contactos entre los elementos distintos. Este aspecto queda definido por una superficie de rotura (Figura 10), que se delimita por la resistencia máxima (esfuerzo máximo) a tracción (R_T) y la resistencia máxima (esfuerzo máximo) a cortante (R_n).

Empleando el criterio de rotura, los contactos entre las partículas pueden romperse (ruptura del aporte por cohesión entre las partículas) debido a las acciones de las cargas externas de cierto grado de magnitud. Dichos contactos se rompen cuando se exceden las fuerzas en las interfasas en las direcciones normal o tangencial ($F_n > R_n$ o $\|F_T\| > R_T$). En este modelo constitutivo de contacto se considera que al romperse el contacto se ha perdido totalmente la cohesión del material ($\beta=0$). Existen otros modelos de contacto [9] que consideran la perdida parcial de la cohesión ($0 < \beta < 1$). En la presente formulación, las ataduras cohesivas (aporte por cohesión entre las partículas), es decir, los contactos, no pueden ser restituidos después de la rotura de los mismos.

Cuando la fuerza normal de tracción alcanza un valor igual a R_n , el contacto entre elementos discretos se romperá provocado por un fallo a nivel micro de tracción y dejará de existir tal fuerza. De forma análoga, cuando la fuerza tangencial alcanza un valor R_T provocará un fallo de cortante microestructural y el contacto entre estos elementos discretos dejará de existir de forma análoga al caso de la falla por tracción.

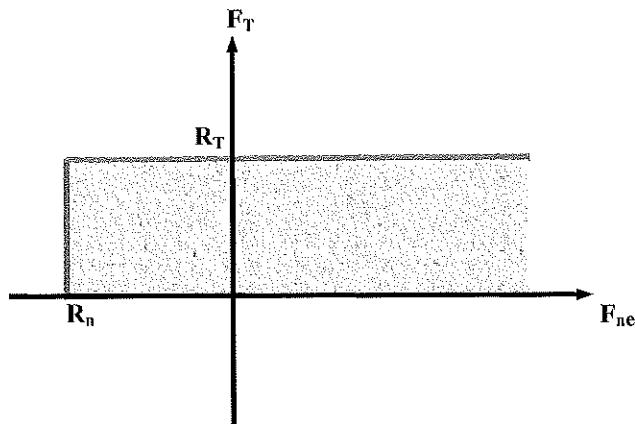


Figura 10: Superficie de rotura del modelo de contacto.

En la ausencia de cohesión o después que la cohesión entre partículas deja de existir, la reacción o fuerza tangencial puede propiciarse por el rozamiento o fricción (figura 9). Existen dos tipos de modelos básicos para simular los problemas de rozamiento o fricción entre elementos discretos: el modelo de fricción cinemática y el modelo de fricción de Coulomb. En esta formulación se hace uso del modelo de fricción de Coulomb. En el modelo de Coulomb, se produce un deslizamiento relativo entre los dos elementos distintos cuando la fuerza máxima tangencial R_T alcanza cierto valor umbral

que es proporcional a la fuerza de contacto. El coeficiente de proporcionalidad entre las fuerzas tangenciales y normales cuando se produce el deslizamiento (descohesión) entre las partículas o elementos discretos “condición de *slip*”, se denomina coeficiente de fricción de Coulomb. Realizando una abstracción y asumiendo que en el contacto la fuerza tangencial no alcanza el umbral, entonces no existe deslizamiento relativo entre los elementos discretos que están en contacto “condición *stick*”.

En el modelo de Coulomb el punto clave es la evaluación de las fuerzas de rozamiento (fricción). Estas fuerzas dependen de las fuerzas de contacto normales entre elementos discretos cuando estos están en contacto. Como se relacionan esta fuerza normal de contacto es un tema complicado y complejo.

En esta formulación se pueden emplear dos tipo de modelos o leyes de comportamiento de Coulomb: Ley de Coulomb estándar o la Ley regularizada de Coulomb (figura 11).

En ausencia de cohesión o después de producirse la descohesión la fuerza tangencial se calcula por:

$$\mathbf{F}_T = -\mathbf{F}_T \frac{\mathbf{v}_{rT}}{\|\mathbf{v}_{rT}\|} \quad (48)$$

donde

\mathbf{v}_{rT} - es la velocidad tangencial relativa al punto del contacto

$$\mathbf{v}_{rT} = \mathbf{v}_r - \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n} \quad (49)$$

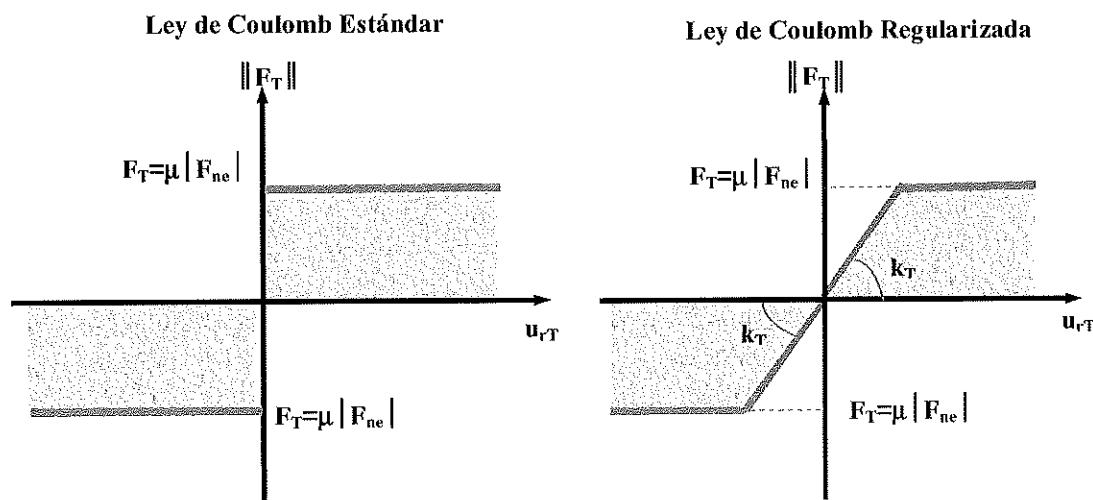


Figura 11: Leyes de Coulomb Estándar y Regularizada.

La velocidad relativa \mathbf{V}_r se obtiene de la diferencia de velocidades entre los puntos del contacto. La velocidad del punto de contacto se obtiene de la suma de la velocidad del centro de la partícula i a la que pertenece y el producto de la velocidad de rotación de la misma por la distancia entre el punto de contacto y el centro.

$$\mathbf{v}_r = (\dot{\mathbf{u}}_2 + \omega_2 \times \mathbf{r}_{c2}) - (\dot{\mathbf{u}}_1 + \omega_1 \times \mathbf{r}_{c1}) \quad (50)$$

donde:

$\dot{\mathbf{u}}_1, \dot{\mathbf{u}}_2$ y ω_1, ω_2 - son las velocidades de traslación y rotación de las partículas en contacto.

\mathbf{r}_{c1} y \mathbf{r}_{c2} - son los vectores de conectan los centros de las dos partículas en contacto.

En el modelo de Coulomb estándar se ha adoptado para calcular la fuerza de rozamiento (fricción) por:

$$\mathbf{F}_T = \mu |\mathbf{F}_n| \quad (51)$$

donde:

μ - Coeficiente de fricción de Coulomb.

Es conocido que la Ley de rozamiento (fricción) de Coulomb estándar o clásica produce una oscilación no física de la fuerza de rozamiento en la solución numérica debido a posible cambio de la dirección de la velocidad de deslizamiento. Para prevenir esta inestabilidad del modelo de rozamiento de Coulomb, dicha fuerza debe ser regularizada (figura 11).

Con la finalidad de evitar oscilaciones en la solución se limita la fuerza de rozamiento (fricción) a un valor F_{Ts} . En el algoritmo numérico el modelo de Coulomb tiene que ser regulado para evitar las oscilaciones en la solución. Como consecuencia se limita el valor de la ley de rozamiento para prevenir el cambio de la dirección de la velocidad tangencial:

$$F_T = \min(\mu |F_n|, F_{Ts}) \quad (52)$$

donde

F_{Ts} - es la llamada fuerza que retiene la fricción, es decir, la fuerza que reduciría la velocidad tangencial $\mathbf{v}_i = (\dot{\mathbf{u}}_i + \omega_i \times \mathbf{r}_{ci})$ a cero.

Un posible proceso de regularización involucra la descomposición de la velocidad relativa tangencial en una velocidad reversible \mathbf{V}_{rT}^r e irreversible \mathbf{V}_{rT}^{ir} respectivamente.

$$\mathbf{V}_{rT} = \mathbf{V}_{rT}^r - \mathbf{V}_{rT}^{ir} \quad (53)$$

Esto es equivalente a la formulación del problema de contacto friccional de elastoplásticidad, con lo que se puede ver claramente que la fuerza tangencial de fricción esta relacionada con el desplazamiento \mathbf{u}_{rT} . Así, primeramente se calcula:

$$\mathbf{F}_T^{\text{Pred}} = \mathbf{F}_T^{\text{Ant}} - \mathbf{k}_T \mathbf{V}_{rT} \Delta t \quad (54)$$

donde:

$\mathbf{F}_T^{\text{Pred}}$ - Fuerza de rozamiento (fricción) predicha.

$\mathbf{F}_T^{\text{Ant}}$ - Fuerza de rozamiento (fricción) calculada en el tiempo $t - \Delta t$.

y la condición de descohesión o deslizamiento se comprueba por:

$$\phi^{\text{Pred}} = \left\| \mathbf{F}_T^{\text{Pred}} \right\| - \mu |\mathbf{F}_n| \quad (55)$$

Si $\phi^{\text{Pred}} \leq 0$, se está en presencia de un contacto cohesivo ("stick") y la fuerza de rozamiento (fricción) se le asigna el valor de la fuerza de fricción predicha:

$$\mathbf{F}_T^{\text{Nuevo}} = \mathbf{F}_T^{\text{Pred}} \quad (56)$$

donde:

$\mathbf{F}_T^{\text{Nuevo}}$ - Fuerza de rozamiento (fricción) calculada en el tiempo t .

En caso de que $\phi^{\text{Pred}} > 0$, entonces:

$$\mathbf{F}_T^{\text{Nuevo}} = \mu |\mathbf{F}_T| \left\| \frac{\mathbf{F}_T^{\text{Pred}}}{\left\| \mathbf{F}_T^{\text{Pred}} \right\|} \right\| \quad (57)$$

3.7 - Búsqueda y Chequeo de Contacto.

3.7.1 - Generalidades al problema de Contacto.

En la simulación de problemas de ingeniería con el método de los elementos discretos, el diseño de los algoritmos de detección de contacto es de suma importancia, ya que el proceso puede ser muy exigente en cuanto a tiempo de cómputo. Generalmente, la detección de contacto se divide en dos fases diferentes, la búsqueda de vecindad y la resolución geométrica. El objetivo de la búsqueda de vecindad es identificar y listar los objetos presentes en cierta vecindad o zona alrededor del objeto analizado. La lista resultante suele llamarse la lista de vecinos. La fase de resolución geométrica compara entonces, en detalle, la geometría del elemento analizado con la de los objetos presentes en la lista de vecinos. El costo computacional depende de la complejidad y de la representación geométrica. Por ejemplo, de presentarse N caras, un esquema muy simplista requerirá un tiempo de computo del orden de $O(N^2)$ operaciones.

Esquemas más sofisticados tal como el DFR (O'Connor, 1996; Williams y O'Connor, 1995) requieren $O(N^{1/2})$ operaciones. De manera similar, el costo de la búsqueda de vecindad depende del numero de objetos a chequear y es más potente a pequeña escala; con un esquema poco desarrollado donde se chequea cada objeto en relación con cada uno de los demás, el costo es de $O(N^2)$ operaciones.

Como, casi siempre el numero de elementos tratados en simulaciones de elementos discretos es elevado, se entiende que la búsqueda de vecindad puede ser un "cuello de botella" computacional.

Separando, los algoritmos de búsqueda de vecindad de los de resolución geométrica, es posible considerar el problema de la búsqueda de vecindad sin referirse a los detalles de la geometría local. Esta separación, acabada mediante el uso de "volúmenes circundantes", asegurando que el algoritmo de búsqueda de vecindad quede valido para

cualquiera representación geométrica y esquema de resolución escogido. Esta robustez es esencial en el desarrollo de un sistema generalizado de simulación mediante el MED, donde una variedad de representaciones geométricas pueden ser usadas en la actualidad.

3.7.2 - Detección de contacto.

La interfase entre la geometría local y la búsqueda global de vecindad se lleva acabo mediante el uso de volúmenes circundantes.

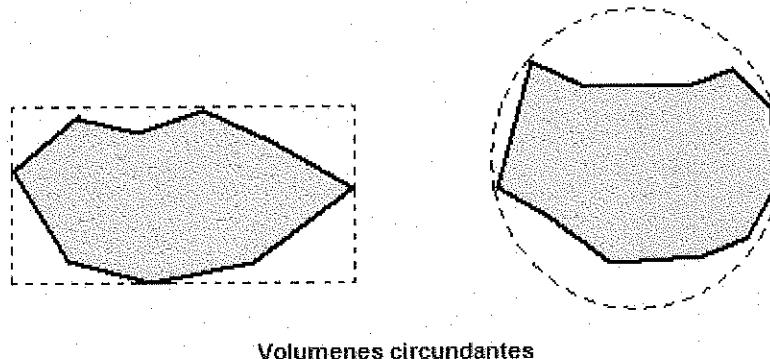


Figura 12: Volúmenes circundantes empleados en la búsqueda de vecindad

Actuando sobre el volumen circundante en vez de la geometría local, el algoritmo de búsqueda de vecindad puede tratar cualquier representación geométrica de la misma forma simplificada. Aun cuando cualquier volumen circundante puede usarse, la esfera es el más común. La esfera se representa simplemente mediante su posición y su radio, y además es invariante frente a la rotación, así que su radio necesita ser computado una sola vez para cada elemento de la simulación.

El algoritmo de búsqueda de vecindad utiliza los volúmenes circundantes para determinar una lista de vecinos, para cada objeto. El juego completo de todas las parejas candidatas (C) determinado por el algoritmo de búsqueda de vecindad viene dado por todas los pares (blanco/candidato al contacto) sacados de las listas de vecinos, después de haber quitado los duplicados.

El algoritmo de búsqueda de vecindad hipotéticamente ideal retornaría un juego de candidatos C_{exact} que es exacto para el volumen circundante analizado en el sentido de que no incluye ningunos pares cuyos volúmenes circundantes no se solapan.

En la realidad, los algoritmos implementados usan esquemas simplificados que identifican rápidamente una aproximación conservadora de C_{exact} . Esta aproximación puede incluir pares cuyos volúmenes circundantes no se solapan, pero debe incluir todos los pares cuyos dichos volúmenes se solapan. Cualquiera aproximación de este tipo puede ser reducida a C_{exact} aplicando simplemente una prueba exacta de intersección al volumen circundante de cada miembro. Con esta prueba empieza la fase de resolución geométrica. Esta división pone de relieve el compromiso entre la reducción del tiempo de computo (T) y la reducción del tamaño del juego de candidatos C . Estos dos objetivos son respectivamente la velocidad y la precisión. En la mayoría de los algoritmos implementados hasta la fecha, C es proporcional a C_{exact} (y por consiguiente

a N), pero T puede ser del orden de N^2 . Esto significa que en el caso de simulaciones arbitrariamente grandes, la velocidad será de mayor consideración.

Con la aparición de representaciones geométricas más complejas, se hace necesario considerar el proceso de detección más allá de simples geometrías esféricas, y desarrollar métodos más generales.

Aun cuando el uso de volúmenes circundantes aísla efectivamente la búsqueda de vecindad de los detalles de la geometría local, y permite considerar cada cuerpo como una esfera, objetos non esféricos pueden tener volúmenes circundantes significativamente mayores que esferas de tamaño similar.

Cuando se combina esto a variaciones de tamaño de los objetos, puede llevar a una amplia distribución de tamaños de esferas circundantes. Los objetos non esféricos pueden permitir también un mayor grado de solape entre volúmenes circundantes y, así, aumentar la densidad del vecindario de contacto.

Estos tipos de heterogeneidades pueden ser al detimento del rendimiento y de la precisión de los algoritmos de búsqueda de vecindad y representan consideraciones muy importantes a la hora de su diseño y uso.

3.7.3 - Problema de Contacto entre elementos discretos esféricos.

Los pares de esferas en contacto deben detectarse automáticamente durante el proceso de cálculo. Si se chequea el contacto de cada esfera contra todas las demás el tiempo de computación sería proporcional a n^2 , siendo n el número de elementos.

Se han desarrollado varios métodos para la determinación de los contactos mucho más efectivos. Previamente a la detección del contacto se suelen ordenar los elementos espacialmente mediante un algoritmo que los agrupe. De este modo, se determinan los elementos vecinos y sólo es necesario chequear el contacto entre estos.

En ausencia de cohesión, el contacto se determina cuando una esfera ha penetrado en la contigua. En el caso de esferas o cilindros simplemente se debe verificar que:

$$u_{rn} \leq 0$$

en donde u_{rn} se calcula como $u_{rn} = d - r_1 - r_2$, tal.

Si el contacto es cohesivo, la condición precedente se reemplaza por:

$$u_{rn} \leq u_{rn,max}^+$$

en donde $u_{rn,max}^+$ es la separación que debe crearse para que el contacto entre dos esferas o discos se rompa por completo, la cual debe determinarse en base al modelo constitutivo y las propiedades del material.

La determinación del contacto es sencilla, simplemente hay que verificar la ecuación correspondiente en función de si existe o no cohesión. Por tanto, nuestro problema se reduce a la efectividad del algoritmo de agrupación de los elementos. Los algoritmos más populares para llevar a cabo esta operación se pueden agrupar en:

- Subdivisión en celdas
- Árboles binarios
- Celdas centradas en el cuerpo
- Spatial heap sort y Spatial sorting.
- NBS.
- Quadtree (2D) y Octree (3D)

3.7.3.1 - Subdivisión en celdas

El espacio que engloba el problema de estudio se discretiza en celdas rectangulares (2D) o hexaédricas (3D) del mismo tamaño. Los elementos se asocian a las celdas en base a sus coordenadas. La eficacia del método depende del equilibrio entre el tamaño de la celda y el número de elementos por celda. La eficiencia del método depende de que los elementos estén distribuidos entre las celdas. Un método adaptativo puede ser implementado en caso de que la distribución de elementos no sea uniforme.

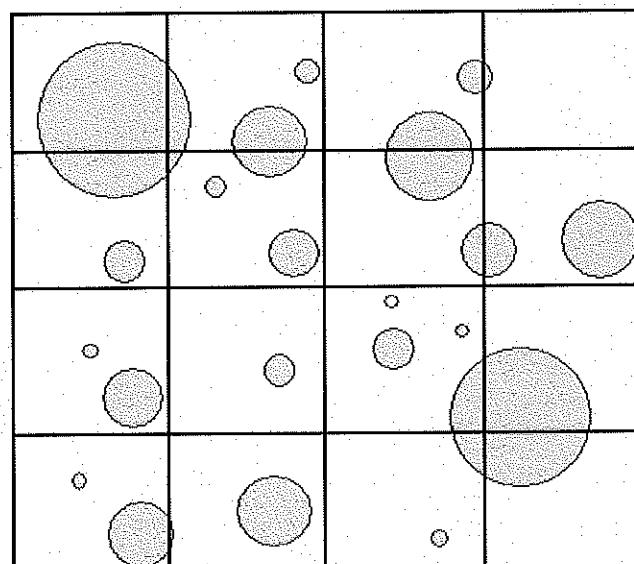


Figura 13: Subdivisión regular en celdas

3.7.3.2 - Árboles binarios

Un método efectivo de clasificación para una distribución espacial no ordenada de los elementos se basa en las estructuras en árbol binarias. El espacio se divide en celdas rectangulares que pueden contener como máximo dos elementos. En caso de que el número de elementos en una celda sea mayor que dos esta se divide en dos. La subdivisión de las celdas se realiza alternativamente en el eje x, z e y. La representación del espacio, si se ha discretizado de este modo, se realiza cómodamente mediante una estructura en árbol binaria. Dicha estructura permite localizar fácilmente objetos

pertenecientes a un subdominio recorriendo el árbol de arriba abajo. El costo de dicha búsqueda es del orden de $O(N \cdot \log_2 N)$.

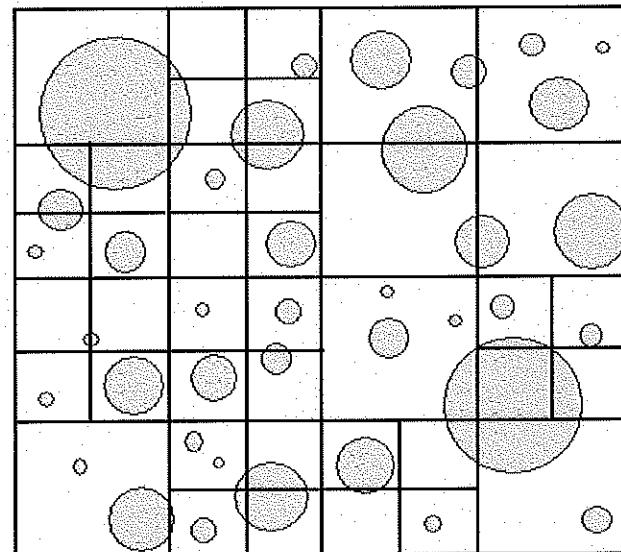


Figura 14: Subdivision adaptativa del espacio en celdas

3.7.3.3 - Celdas centradas en el cuerpo

Este método de detección del contacto se beneficia de la suposición de que la configuración de los elementos evoluciona lentamente y que, por tanto, los nuevos contactos pueden formarse únicamente entre elementos que estén lo suficientemente cercanos en el paso de estudio. La lista de contactos potenciales para cada elemento incluye los objetos que estén contenidos en una celda que englobe el elemento de estudio. Este método combinado con el de Quadtree para 2D y el de Octree para 3D es el que se ha implementado en el algoritmo de detección del contacto utilizado.

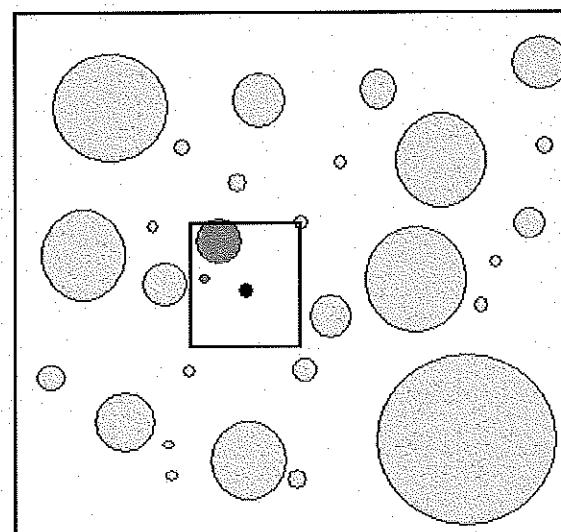


Figura 15: Celda centrada en el cuerpo.

3.7.3.4 - Spatial heap sort y Spatial sorting

Las bases del método Spatial heap sort es la clasificación de los elementos en base a sus coordenadas. Los elementos se almacenan en un árbol binario. La búsqueda de un elemento en este tipo de estructura es del orden de $O(N \cdot \log_2 N)$. Cada objeto se ve clasificado en función de su menor coordenada en cada eje. Después de definir de forma arbitraria un eje como “master” y el otro como “slave”, cada objeto (blanco) se analiza en orden a lo largo del eje “master”. Mediante una búsqueda binaria se encuentran los límites superiores del blanco. Para el eje “master”, los límites superiores e inferiores permiten delimitar un rango de objetos en la lista ordenada de dicho eje, que potencialmente intersecan el objeto blanco. Es el rango “master”.

En el caso del eje “slave”, se extiende el límite inferior hasta el objeto con la menor coordenada que pueda intersecar el blanco. El rango de objetos encontrándose entre el límite inferior extendido del eje “slave” y su límite superior se denomina rango “slave”. La intersección de ambos rangos determina el juego final de candidatos. (Figura 16)

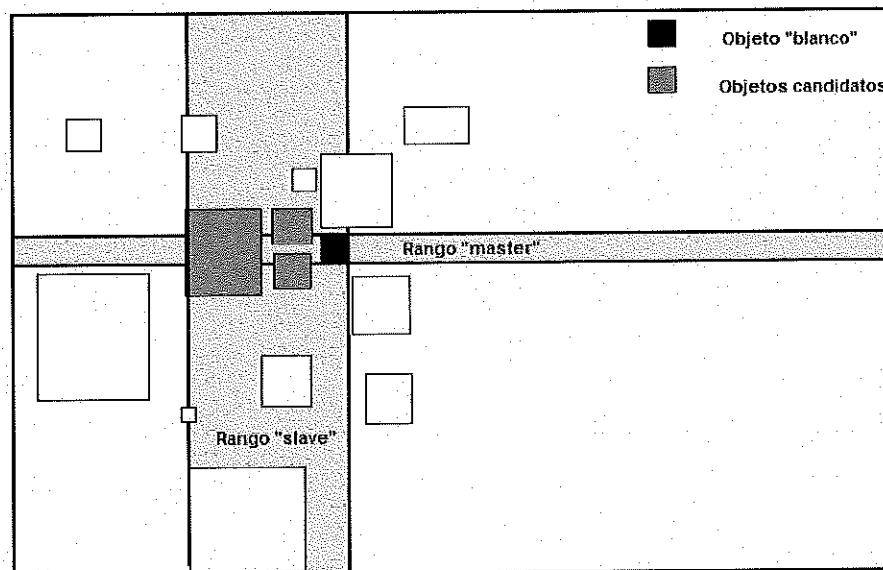


Figura 16: Delimitación de los rangos “slave” y “master” en el Spatial sorting

3.7.3.5 - NBS.

3.7.3.5.1 - Generalidades.

El algoritmo NBS (No Binary Search) es conveniente para problemas involucrando un gran número de cuerpos y desplazamientos significativos de estos. El tiene un tiempo total de detección T proporcional al número de elementos discretos, o sea $T \propto N$.

Los requerimientos de memoria total son proporcionales al número total de elementos

discretos: $M \propto \begin{cases} N \frac{1}{\sqrt[2]{p}} & \text{problemas en 2D} \\ N \frac{1}{\sqrt[3]{p}} & \text{problemas en 3D} \end{cases}$

donde: p es la densidad del medio (el volumen total de elementos discretos por unidad de volumen).

El algoritmo NBS trabaja tan bien para ensamblajes densos como sueltos, con un tiempo de cómputo independiente de la densidad del medio e incrementos insignificativos de requerimientos de memoria debido a una disminución de la densidad de ensamblajes.

3.7.3.5.2 - - Definición del Problema de Detección de Contacto en el algoritmo NBS.

El algoritmo de detección de contacto NBS se basa en la suposición que cada elemento discreto se puede asimilar, para los propósitos de detección de contacto, a una esfera en 3D o a un disco en 2D. El diámetro de un disco equivalente $2r$ se obtiene a partir del elemento discreto de mayor tamaño del sistema, o sea que todos los elementos discretos son aproximados mediante discos similares. Entonces el algoritmo asume un sistema constituido de N discos idénticos ocupando un espacio finito de forma rectangular.

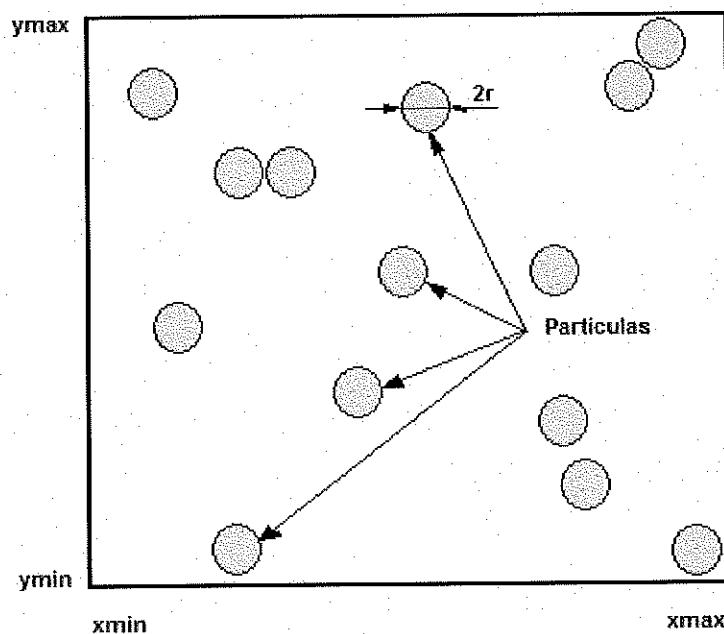


Figura 17: Espacio de análisis del algoritmo NBS

Los límites del espacio se definen como x_{\max} , x_{\min} , y_{\max} , y_{\min} . No pueden existir círculos cuyo centro tenga coordenadas mayores que x_{\max} , y_{\max} , o menor que x_{\min} , y_{\min} . El objetivo es de encontrar todos los pares de discos lo suficientemente próximos como para que la distancia entre sus puntos más cercanos sea menor o igual a cero, en otras palabras, que se solapan o están en contacto.

3.7.3.5.3 - Descomposición del Espacio en el Algoritmo NBS.

El algoritmo NBS se basa en la descomposición del espacio. Este se divide en celdas cuadradas de tamaño $2r$.

A cada disco se le asigna un número (entero) de identificación $\{0, 1, 2, \dots, N-1\}$.

De forma similar, a cada celda se le asigna un par de números (enteros) de identificación (i_x, i_y) , donde $i_x = 0, 1, 2, 3, \dots, n_{celx}-1$ y $i_y = 0, 1, 2, \dots, n_{cely}-1$ con n_{celx} y n_{cely} como el numero total de celdas en las direcciones X y Y respectivamente.

$$n_{celx} = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{2r}$$

$$n_{cely} = \frac{y_{\max} - y_{\min}}{2r}$$

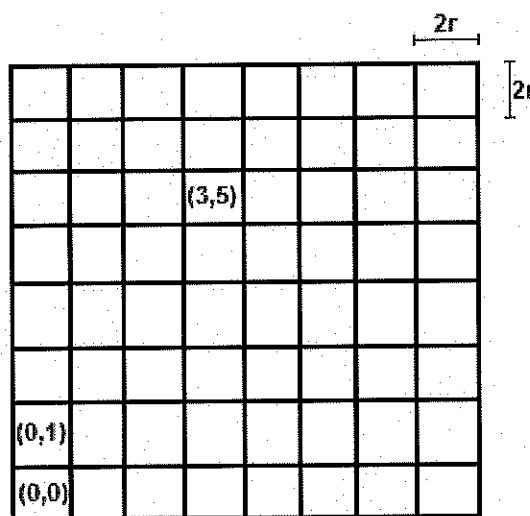


Figura 18: Espacio cuadriculado del algoritmo NBS

La proyección del juego de discos

$$E = \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$$

sobre el juego de celdas

$$C = \left\{ \begin{array}{cccc} (0,0), & (0,1), & \dots & (0,n_{cely}-1), \\ (1,0), & (1,1), & \dots & (1,n_{cely}-1), \\ (\dots, \dots, \dots, \dots) & & & \\ (n_{celx}-1,0), & (n_{celx}-1,1), & \dots & (n_{celx}-1,n_{cely}-1) \end{array} \right\}$$

se define de forma tal que cada elemento discreto este asignado a una sola y única celda. El disco con coordenadas (x,y) se asigna a la celda (i_x, i_y) donde

$$i_x = \text{Int}\left(\frac{x - x_{\min}}{2r}\right)$$

$$i_y = \text{Int}\left(\frac{y - y_{\min}}{2r}\right)$$

3.7.3.5.4 -- Detección de Contacto en el Algoritmo NBS.

La detección del contacto se efectúa mediante el chequeo de todos los discos proyectados en una celda particular contra los discos de las celdas vecinas. Los discos proyectados en la celda (i_x, i_y) se chequean para el contacto con los discos proyectados en las celdas $(i_x, i_y), (i_x - 1, i_y), (i_x - 1, i_y - 1), (i_x, i_y - 1)$, y $(i_x + 1, i_y - 1)$. De esta forma, los discos asignados a celdas no vacías van a chequearse contra los discos proyectados en las celdas adyacentes.

3.7.3.6 - Quadtree (2D) y Octree (3D)

Si se trabaja en 2 dimensiones el dominio se divide en celdas rectangulares con un máximo de cuatro elementos por celda. Si una celda contiene más de cuatro elementos esta se divide en cuatro celdas. Al discretizar el dominio así se puede representar mediante un árbol de cuatro ramas (Quadtree). Dicha estructura permite identificar fácilmente objetos pertenecientes a un subdominio recorriendo el árbol de arriba abajo. El coste de dicha búsqueda es del orden de $O(N \cdot \log_4 N)$.

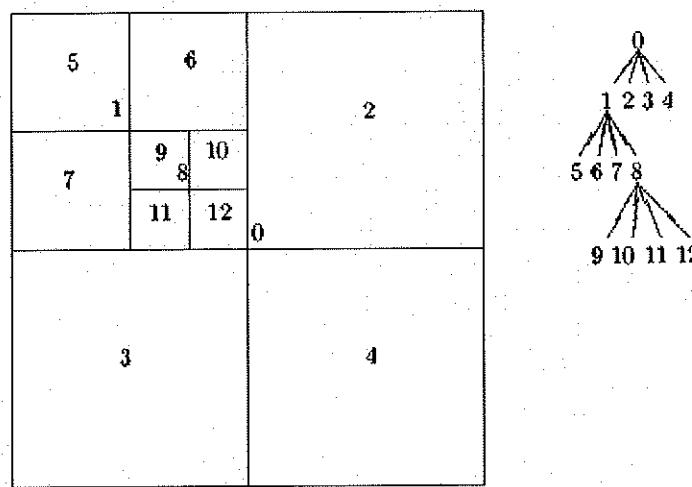


Figura 19: Estructura Quadtree

La extrapolación de este concepto a las tres dimensiones del espacio da lugar a las estructuras de ocho elementos (Octree). Ahora el dominio se subdividirá en celdas que contengan ocho elementos como máximo, si en una celda hay más de ocho elementos ésta se subdividirá en ocho celdas. Para buscar elementos pertenecientes a un subdominio se recorre el árbol de arriba abajo como en los casos anteriores y el coste de la búsqueda será del orden de $O(N \cdot \log_8 N)$.

En la formulación implementada la búsqueda del contacto se basa en estructuras Quadtree en 2D y Octree en 3D combinadas con la técnica de agrupación basada en las celdas centradas en el cuerpo. De este modo el coste computacional del proceso pasa a ser proporcional a $n \cdot \ln(n)$, permitiéndose usar sistemas de mayor tamaño.

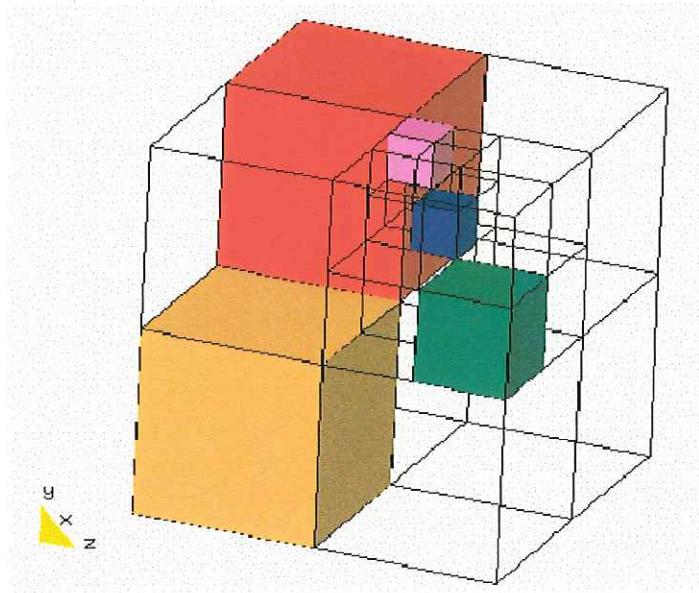


Figura 20: Estructura Octree

La construcción de estructuras Quadtree (2D) y Octree (3D) en cada paso de tiempo sería muy caro. Para pasos de tiempo muy pequeños, la mayoría de contactos pueden ser los mismos que en los pasos anteriores. La utilización de la información sobre los pares de contactos existentes en el paso de tiempo anterior puede agilizar la búsqueda de contactos en el actual. Por este motivo el algoritmo de búsqueda consta de dos etapas: una primera consistente en una búsqueda global de pares de elementos potencialmente en contacto basada en las estructuras quadtree y octree; y una búsqueda local verificando la lista de contactos potenciales basada en el método de las celdas centradas en el cuerpo.

3.7.3.6.1 - Búsqueda global

Los elementos se organizan en el espacio mediante estructuras octree y quadtree. Posteriormente se crea una lista de contactos existentes y contactos potenciales. El método de las celdas centradas en el cuerpo se usa para la lista de contactos potenciales. Cada objeto se envuelve por una celda circular o esférica y todos los objetos que estén en ella o que la intersecan se incluyen en la lista de contactos potenciales.

La organización del espacio por medio del método quadtree o octree y la actualización de la lista de contactos por medio de éste se realiza cada cierto número de pasos de tiempo.

3.7.3.6.2 - Búsqueda local

En cada paso de tiempo se realiza la búsqueda local. Se verifican las condiciones de contacto de los elementos de la lista de contactos potenciales y se encuentran los contactos actuales.

La celda centrada en el cuerpo tiene un radio igual al de la esfera o cilindro incrementado una cantidad determinada por el usuario c_{tol} . Dicho parámetro determina la longitud de la lista de contactos potenciales y el intervalo de tiempo entre búsquedas globales.

La metodología sería la siguiente:

- Se realiza una búsqueda global cuando:

$$u_{\max} = \max_{\substack{i=1,D \\ n=1,N}} \{ u_i^n \} \geq c_{tol}$$

donde:

- D** es la dimensión del problema (2 para problemas bidimensionales y 3 para los tridimensionales);
- N** es el número total de elementos que constituyen el problema de estudio;
- U** es el desplazamiento acumulado de la esfera n en la dirección i del espacio desde la realización de la última búsqueda global.

- A la lista de posibles contactos de cada esfera se le añaden aquellas esferas que estén a una separación menor de $2 \cdot \sqrt{2} \cdot c_{tol}$ en problemas bidimensionales y de $2 \cdot \sqrt{3} \cdot c_{tol}$ en problemas tridimensionales.
- Se quitarán de la lista de posibles contactos de una esfera o elemento aquellas esferas que se separen hasta una distancia mayor de la mencionada

El algoritmo de contacto desarrollado es muy eficiente, permitiendo trabajar con grandes conjuntos de esferas. El valor de C_{tol} debe escogerse de tal modo que se halle el equilibrio entre el aumento de tiempo al realizar un mayor número de búsquedas globales cuando este decrece y el de invertir más tiempo en la búsqueda local al aumentar la lista de contactos potenciales cuando es menor. Un valor óptimo de C_{tol} se halla entre $0.1 \cdot r$ y $0.5 \cdot r$ (r es el radio medio de las esferas).

3.8 - Extensión del método de los elementos discretos en la resolución de problemas termo-acoplados y de desgaste.

3.8.1 - Ecuaciones del problema termo-mecánico

A las ecuaciones del movimiento (3) y (4) descritas anteriormente se les debe añadir la ecuación de balance del calor:

$$m_i \cdot c \cdot \dot{T}_i = Q_{gen} - (Q_{cp} + Q_{cb} + Q_{rd});$$

donde:

m_i - masa de la partícula i-ésima.

C - capacidad calorífica de la partícula.

Q_{gen} - calor generado debido a la energía disipada por la fricción y que es absorbida en forma de calor por la partícula.

Q_{cp} - calor transferido por conducción entre partículas

Q_{cb} - calor transferido por conducción al contorno

Q_{rd} - calor irradiado entre partículas y al entorno

El calor generado en un contacto se puede obtener de la siguiente expresión:

$$\tilde{Q}_{gen} = \chi \cdot |F_T \cdot v_{rT}|;$$

donde χ es la parte del trabajo de fricción que se transforma en calor. El resto de variables involucradas se han descrito anteriormente.

Se asume que el calor disipado por fricción en un contacto es absorbido equitativamente por las dos partículas en contacto. El calor generado Q_{gen} será la suma del calor generado en cada uno de los contactos ($\frac{1}{2} \tilde{Q}_{gen}$) de la partícula con sus vecinas.

El calor transferido por conducción entre dos partículas se estima como el calor que se conduce en una barra de longitud d igual a la distancia entre los centros de las partículas y de sección equivalente \bar{A} (función del tamaño de las partículas):

$$\tilde{Q}_{cp} = \frac{\kappa}{d} \cdot \bar{A} \cdot (T_i - T_j);$$

donde:

κ - es la conductividad del material;

T_i y T_j - son las temperaturas de las partículas i y j en contacto.

El calor transferido por conducción Q_{cp} tiene en cuenta la contribución de todas las partículas en contacto con la partícula i-ésima de estudio.

Integrando la ecuación de balance del calor mediante un esquema explícito de Euler hacia adelante se obtiene:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\Delta t}{m_i \cdot C} \cdot [Q_{gen}^n - (Q_{cp}^n + Q_{cb}^n + Q_{rd}^n)];$$

El problema térmico se soluciona para una configuración geométrica dada y el calor generado por fricción se obtiene de la solución del problema mecánico. Las temperaturas halladas para cada partícula modifican las propiedades del material que se usarán en el paso siguiente del problema mecánico.

3.8.2 - Los efectos de la temperatura en el modelo de desgaste

La influencia de la temperatura en el desgaste se ha tenido en cuenta adaptando la ley de Archard que asume que el ratio de desgaste es proporcional a la presión en el contacto p_n y la velocidad de deslizamiento v_t :

$$\dot{w} = k \cdot \frac{p_n \cdot v_t}{H};$$

donde:

H - es una medida de la dureza de la superficie de contacto;

k - es un parámetro adimensional.

Si hacemos H dependiente de la temperatura T , se tiene en cuenta su influencia en el desgaste.

$$H = H(T)$$

La fricción se evalúa mediante la ley de Coulomb:

$$p_t = \mu \cdot p_n$$

Operando con las ecuaciones anteriores se obtiene:

$$\dot{w} = \bar{k} \cdot \frac{p_t \cdot v_t}{H(t)} = \bar{k} \cdot \frac{\dot{D}}{H(t)};$$

donde:

\dot{D} es el ratio de disipación friccional;

$$\bar{k} = \frac{k}{\mu}.$$

3.8.3 - El desgaste

Integrando el ratio de desgaste a lo largo del tiempo se obtiene el desgaste producido.

$$w = \int \dot{w} dt$$

El desgaste se va integrando a lo largo del tiempo para cada una de las partículas que constituyen la superficie externa de la herramienta de excavación. Una vez dicho desgaste alcanza el valor del tamaño de la partícula, se considera que la partícula ya no forma parte de la herramienta. Por tanto, la geometría de la herramienta se modifica a lo largo del tiempo. Tal como pasaría en la realidad en un proceso de excavación.

Capítulo III

4.0 - Estimación de parámetros constitutivos micro.

4.1- Enfoque general.

Con el objetivo de estimar las propiedades del modelo constitutivo de contacto (modelo microestructural) se parte de la hipótesis que existen relaciones físicas entre los habituales parámetros constitutivos macroscópicos (modulo de deformación, coeficiente de Poisson, tensión de rotura a compresión y tracción) y los microscópicos (rigidez normal, tangencial y los parámetros de rotura microestructurales - R_n y R_t) que son los que caracterizan el modelo de contacto. El estudio se aborda de forma tal que se obtengan relaciones generales para cualquier tipo de material.

El estudio de caracterización física de un material se basa en el empleo de técnicas experimentales. La determinación de las propiedades mecánicas macroscópicas convencionales (modulo de deformación, coeficiente de Poisson, tensión de rotura a compresión y tracción) se puede obtener a través de ensayos de compresión y tracción (2D o 3D). Estos ensayos pueden ser uniaxiales, biaxiales o triaxiales. Los ensayos de laboratorios más representativos son los triaxiales, pero a su vez son los más complejos desde el punto de vista técnico. Por su parte los ensayos uniaxiales son más sencillos y se emplean con mayor generalidad al estudio de diversos tipos de materiales (aceros, rocas, suelos, ect). Sobre esta base se realizará un estudio de simulación numérica virtual de ensayos de compresión y tracción uniaxial (2D y 3D) para estimar las relaciones entre parámetros macro y microestructurales.

El estudio de estimación de las propiedades microestructurales se debe subdividir en fases:

- Estudio experimental: Realización de ensayos de laboratorio de diversos materiales y obtención de los parámetros constitutivos macroscópicos.
- Simulación numérica o virtual de los ensayos de laboratorios de compresión y tracción a través de la aplicación del método de los elementos discretos.
- Calibración del modelo constitutivo microestructural y búsqueda de los parámetros “micro” que mejor describen el comportamiento (tensión-deformación) macroestructural. Con estos parámetros microestructurales y simulando ensayos virtuales se estiman correspondientemente los parámetros constitutivos macroestructurales (modulo de deformación, coeficiente de Poisson, tensión de rotura a compresión y tracción).
- Estudio y validación de las relaciones físicas y expresiones matemáticas que relacionan las propiedades constitutivas macroestructurales con las microestructurales, con el fin de poder estimar estas últimas para cualquier tipo de material.

El estudio de caracterización mecánica experimental de diversos materiales a través de la realización de ensayos de compresión y tracción es un tema convencional por lo que no se abordará explícitamente. Por su parte la realización de simulaciones numéricas de ensayos de laboratorio es un aspecto al cual se le dedicará una explicación más detallada.

En la figura 12 se ilustra el modelo geométrico de un material para ensayarlo de forma virtual. La disposición y diámetro de los elementos discretos es completamente aleatorio (Figura 12 a) y es conocido. Los vínculos de contactos (figura 2b) representan las conexiones cohesivas que en un primer momento existen entre las partículas. Como es conocido [13] la clave del éxito de una simulación con el método de los elementos discretos es configurar un modelo muy denso de partículas dispuestas irregularmente (con diámetro y posición arbitraria o aleatoria) y bien conectadas entre sí. Para obtener el ensamblaje adecuado se genera el medio discreto con partículas esféricas y se somete inicialmente a efectos dinámicos (compactación dinámica) con una frecuencia adecuada para lograr la mayor compacidad posible. Antes de someter a compresión o tracción la muestra se deja que se disipen la energía cinética y potencial acumulada por los elementos discretos durante el proceso de vibración.

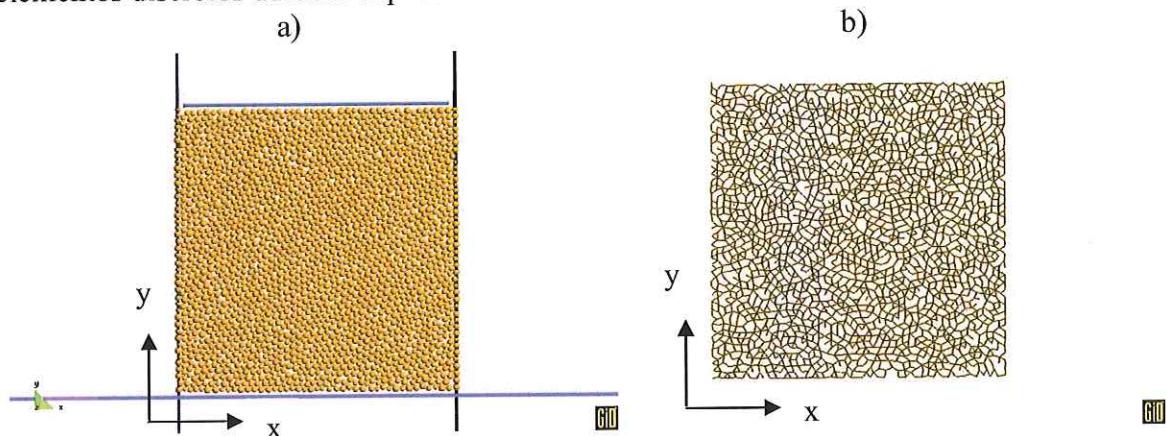


Figure 12: Modelo Geométrico de elementos discretos.

- a) ensamblaje de esferas
- b) gráfico de vínculos de contacto o conexiones cohesivas.

La respuesta del material puede ser estudiada a partir de la realización de ensayos de compresión y tracción. La carga se aplica por el método de deformaciones controladas, es decir, bajo control cinemático prescribiendo el movimiento de las paredes por donde se aplicará la carga. La aplicación de la carga se realiza en una dirección determinada y en la otra la deformación es libre. La velocidad del desplazamiento de las paredes se establece en función de tipo de material que se está estudiando. Esta velocidad se recomienda que sea suficientemente baja en función de la rigidez del material, para describir la acción de una carga quasi-estática.

La estimación de las propiedades constitutivas micro-estructurales de cualquier tipo de material se debe realizar siguiendo una metodología adecuada. El éxito de encontrar relaciones físicas y matemáticas coherentes que permitan estimar los parámetros constitutivos microestructurales a partir de los macros, depende de una correcta estrategia de investigación donde se combinen las técnicas de instrumentación-experimentación con las de simulación numérica. Esta estrategia se define como sigue:

- Definición del problema de estudio y establecimiento de relaciones adimensionales entre los factores que dominan el problema.
- Estudio exploratorio preliminar: Delimitación de la región acotada donde los parámetros microestructurales tienen un sentido físico marcado. Determinación

de la magnitud, variabilidad y rango de variación de cada uno de los parámetros que definen el modelo constitutivo de contacto.

- Búsqueda de relaciones físicas y matemáticas preliminares entre los parámetros macros y micros a partir del estudio de adimensionalización del problema.
- Aplicación de métodos científicos que posibiliten establecer las relaciones físicas y matemáticas entre los parámetros constitutivos macros y micros para diversos materiales reales. En este caso se pueden aplicar varias técnicas como: métodos estocásticos (método de Monte Carlo), optimización multicriterial o aplicación de redes neuronales. La clave del éxito en la aplicación de estos métodos es haber definido correctamente la región acotada donde los parámetros constitutivos presenten un correcto sentido físico. En caso contrario se llegarían a resultado coherentes desde el punto de vista matemático, pero físicamente no tendrían sentido.
- Establecimiento de relaciones generales que expresen los parámetros microestructurales en función de las características mecánicas convencionales (modulo de deformación, coeficiente de Poisson, tensión de rotura a compresión y tracción).
- Estudio de sensibilidad de modelo constitutivo de contacto. Valoración de la influencia de la porosidad, compacidad, diámetro de los elementos discretos, ect.
- Estudios combinados en 2D y 3D para estimar las relaciones entre los parámetros micro de rotura para estos dos casos. Estudios de correlaciones entre ellos.

4.2 – Análisis dimensional.

Como la estimación de las propiedades microestructurales se pueden realizar a través de ensayos virtuales de compresión y tracción (Figura 13) hay que identificar los parámetros que influyen en el análisis: parámetros físicos, geométricos y variables constitutivas microestructurales. Un análisis preliminar para adimensionalizar las variables conduce a:

- Parámetros físicos y geométricos.
 - R - Radio medio [L]
 - ρ - Densidad [$FL^{-1}T^2$]
 - n - Porosidad.
- Parámetros constitutivos de contacto a nivel de la micro-escala.
 - K_{ncomp} - Rígidez normal a compresión [FL^{-2}]
 - K_{ntracc} - Rígidez normal a tracción [FL^{-2}].
 - K_T - Rígidez tangencial [FL^{-2}].
 - R_n - Fuerza cohesiva máxima normal [FL^{-1}].
 - R_t - Fuerza cohesiva máxima tangencial [FL^{-1}].
 - μ - Coeficiente de fricción o Coulomb.

A nivel macro un material se caracteriza desde el punto de vista constitutivo por las constantes fenomenológicas. Estas constantes se clasifican en elásticas y plásticas. Las constantes elásticas son el modulo de deformación y el coeficiente de Poisson y como parámetros plásticos se tiene la resistencia a compresión y tracción. No hay ninguna teoría completa para predecir las propiedades microscópicas a partir de las macroscópicas o viceversa. Las estimaciones de las propiedades microscópicas son

requisito indispensable y previo para la realización de simulaciones con el método de los elementos discretos.

Cuando se realizan las simulaciones virtuales de los ensayos uniaxiles el comportamiento inicial es elástico hasta el momento que microestructuralmente comienzan a propiciarse los fallos de los primeros contactos cohesivos. En esta fase del comportamiento del material los parámetros involucrados son $\{K_{n\text{-comp}}, K_{n\text{-tracen}}, K_T, R, n, \rho, L, V\}$. La variable V define el volumen y L las dimensiones de la probeta. Nótese que la porosidad n se ha tomado de forma indirecta como una medida de la distribución aleatoria de las esferas en el medio que se modela. En este caso en el análisis dimensional hay ocho parámetros y tres dimensiones independientes. Aplicando el teorema de Buckingham- π se obtiene que los cinco parámetros dimensionales siguientes gobiernan la respuesta elástica de medio generado por esferas:

$$\left\{ \frac{k_T}{k_{nc}}, \frac{k_{nc}}{k_{nt}}, n, \frac{R}{h}, \frac{V}{\sqrt{k_{nc} \cdot h / \rho}} \right\} \quad (58)$$

Las relaciones $\frac{R}{L}$ y $\frac{V}{\sqrt{k_{nc} \cdot h / \rho}}$ realmente puede despreciarse, si se realizan las simulaciones con bastantes grados de libertad $\left(\frac{R}{L}\right) \ll 1$ y bajo condiciones de cargas cuasiestáticas $\frac{V}{\sqrt{k_{nc} \cdot h / \rho}} \ll 1$. Conociendo estos parámetros adimensionales se pueden establecer relaciones entre los parámetros constitutivos microestructurales y macroestructurales o viceversa. La relaciones entre los parámetros elásticos de la macro-escala (modulo de deformación E' y coeficiente de Poisson ν') y los parámetros microscópicos expresados de forma adimensional se puede escribir como:

$$E' = k_{nc} \cdot f_E \left(\frac{k_T}{k_{nc}}, \frac{k_{nc}}{k_{nt}}, n \right) \quad (59)$$

$$\nu' = f_\nu \left(\frac{k_T}{k_{nc}}, \frac{k_{nc}}{k_{nt}}, n \right) \quad (60)$$

donde:

K_{nc} - Rígidez normal a compresión (micro-escala)

K_T - Rígidez tangencial (micro-escala).

K_{nt} - Rígidez normal a tracción (micro-escala).

n - Porosidad

En el momento que comienza la rotura del primer contacto durante el proceso de carga en la simulación virtual de los ensayos, aumenta el numero de variables que intervienen físicamente en la respuesta de comportamiento del material, y comienzan a tomar un papel muy importante los parámetros de rotura. Este aspecto se propicia porque comienza a generarse un comportamiento elástoplastico. En este caso las variables que intervienen son: $\{K_{n\text{-comp}}, K_{n\text{-tracen}}, K_T, R, n, \rho, L, V, R_n \text{ y } R_T\}$. Realizando las mismas suposiciones que en el caso de comportamiento elástico: $\left(\frac{R}{L}\right) \ll 1$ y $\frac{V}{\sqrt{k_{nc} \cdot h / \rho}} \ll 1$, se

tienen diez parámetros y tres dimensiones independientes. Si se aplica en este caso el teorema de Buckingham- π se obtienen nueve parámetros adimensionales que gobiernan la respuesta elástoplastica del medio generado por esferas. Estos parámetros adimensionales son:

$$\frac{k_{nc} \cdot r}{R_n}, \frac{R_T}{R_n}, \frac{\delta}{R}, \mu, \frac{k_{nc}}{k_{nt}}, \frac{k_T}{k_{nc}}, n, \frac{R}{h}, \frac{V}{\sqrt{k_{nc} \cdot h / \rho}} \quad (61)$$

Conociendo las variables adimensionales las relaciones entre los parámetros de rotura son:

$$\sigma_c = \frac{R_n}{r} \cdot f_c \left(\frac{k_{nc} \cdot R}{R_n}, \frac{R_T}{R_n}, \frac{\delta}{R}, \mu \right) \quad (62)$$

$$\sigma_t = \frac{R_T}{r} \cdot f_t \left(\frac{k_{nc} \cdot R}{R_n}, \frac{R_T}{R_n}, \frac{\delta}{R}, \mu \right) \quad (63)$$

donde:

- R_n - Resistencia máxima en la dirección normal o fuerza cohesiva normal máxima.
- R_T - Resistencia máxima en la dirección tangencial o fuerza cohesiva tangencial máxima.
- R - Radio medio.
- δ - Máximo separación (gap) para considerar atadura cohesiva entre las esferas (Gap_{max})
- μ - Coeficiente de Fricción o de Coulomb.

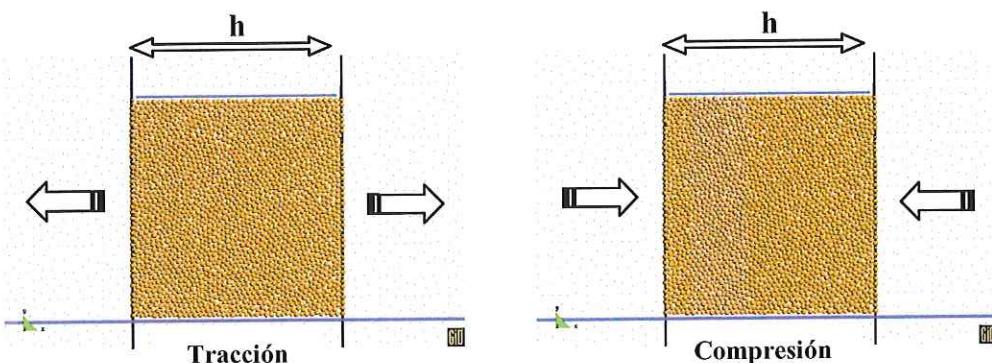


Figura 13: Modelos para la simulación virtual de ensayos de laboratorio.

4.3 - Valoraciones sobre la aplicación de cargas cuasiestáticas, velocidad de aplicación y tiempo de aplicación de la misma.

4.3.1 – Consideraciones generales y vía de estimar la velocidad de aplicación de la carga de forma experimental.

Generalmente en problemas cuasiestáticos se realizan los experimentos numéricos bajo control cinemático, es decir con deformaciones controladas. Para simular un proceso de carga cuasiestática, el problema se centra en definir cuan pequeña debe ser la velocidad de aplicación de carga.

Consecuentemente el proceso de amortiguamiento siempre se produce de forma tal que se obtenga una solución cuasiestática. Los procesos dinámicos pueden ser considerados cuasiestáticos cuando las fuerzas de desequilibrio (fuerzas producidas por la carga aplicada debido al avance de la pared) son menores o más pequeñas que las fuerzas de contacto. La comparación entre las fuerzas de desequilibrio con las fuerzas de contacto se puede expresar en términos de tensiones (fuerza promedio de reacción actuando sobre las paredes) para el caso de un ensayo uniaxial. En la figura 14 se ilustra una curva tensión-deformación de un ensayo uniaxial. En la misma se realiza una comparación entre la solución estática experimental y numérica apreciándose la oscilación de esta última.

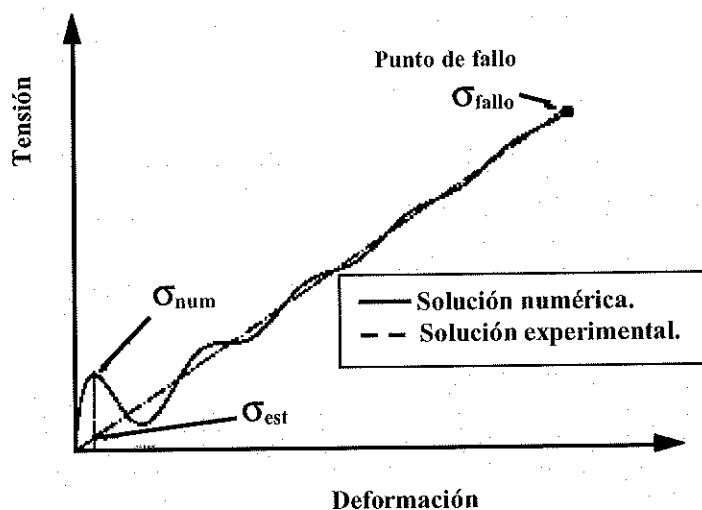


Figura 14: Curva tensión-deformación de un ensayo uniaxial. Comparación con una solución numérica.

La amplitud de las oscilaciones de la solución numérica se atenúa con el tiempo de duración del ensayo virtual o simulación (figura 14), aspecto que propicia que esta converja a la solución estática. La amplitud de las oscilaciones es indicativa de la hipereacción o hiporeacción de los esfuerzos (fuerzas desequilibradas). Para lograr que la solución numérica sea estable y no oscile es necesario aplicar la carga a velocidad muy baja. En este caso los esfuerzos que surgen en el medio discreto son muy pequeños comparados con una tensión de referencia (tensión máxima o de fallo). Este aspecto permite expresar que:

$$|\sigma_{\text{num}} - \sigma_{\text{est}}| \ll \sigma_{\text{fallo}} \quad (64)$$

donde:

σ_{num} – Tensión (solución numérica)

σ_{est} – Tensión (solución estática)

σ_{fallo} – Tensión de rotura o fallo

El efecto del amortiguamiento se puede despreciar inicialmente, aspecto que posibilita aproximar $|\sigma_{\text{num}} - \sigma_{\text{est}}|$ por σ_{num} . Para una configuración geométrica de elementos

discretos conformada por un paquete de esferas con muchos grados de libertad σ_{num} puede ser escalada por:

$$\sigma_{\text{num}} = f \left(\frac{K_T}{K_{nc}} \right) V \sqrt{\rho K_{nc}} \quad (65)$$

$$\sigma_{\text{num}} = f \left(\frac{K_T}{K_{nt}} \right) V \sqrt{\rho K_{nt}} \quad (66)$$

donde:

V - velocidad de la carga

ρ - densidad del medio.

Debe mencionarse que el efecto de la relación de rigidez K_T/K_{nc} o K_T/K_{nt} es reflejada no sólo en la rigidez global (la pendiente de la curva de la tensión-deformación), sino también en el paso de tiempo predefinido T (constante durante la simulación) que este relacionado con la rigidez local.

La velocidad de carga para un proceso cuasiestático puede expresarse por:

$$V = \kappa \frac{\sigma_c}{\sqrt{\rho K_{nc}}} \quad (67)$$

$$V = \kappa \frac{\sigma_t}{\sqrt{\rho K_{nt}}} \quad (68)$$

donde: κ es un número pequeño. $\kappa \ll 1$. La tensión de rotura a compresión (σ_c) o tracción (σ_t) se pueden obtener mediante la realización de ensayos de compresión y tracción.

La expresión de la velocidad (67 y 68) de carga también se puede escribir por:

$$V = \zeta \sqrt{\frac{K_{nc}}{\rho}} \quad (69)$$

$$\zeta = \kappa \frac{\sigma_c}{K_{nc}} \quad (70)$$

$$V = \zeta \sqrt{\frac{K_{nt}}{\rho}} \quad (71)$$

$$\zeta = \kappa \frac{\sigma_t}{K_{nt}} \quad (72)$$

Nótese que $\sqrt{\rho K_n}$ de forma general esta relacionada con la velocidad C_p de propagación de una onda en un medio elástico.

$$C_p = \sqrt{\frac{E(1-v)}{\rho(1-v)(1-2v)}} = \alpha \sqrt{\frac{K_n}{\rho}} \quad (73)$$

donde: α es una función de la relación de rigideces K_T/K_{nc} o K_T/K_{nt} y de la microestructura (porosidad y discontinuidades del medio).

Las deducciones realizadas implican que para que finamente se establezca un proceso de carga cuasiestático, la velocidad de aplicación de la carga debe ser muy pequeña comparada con la velocidad de propagación de una onda en un medio elástico. Bajo esta definición la velocidad de aplicación de carga se puede estimar como una fracción de la velocidad de propagación de una onda en un medio elástico (Ec. 73). Las propiedades elásticas a emplear en esta ecuación deben ser dinámicas y obtenidas por ensayos de ultrasonido u otra técnica experimental. Basado en este razonamiento se tiene que:

$$V = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{E(1-\nu)}{\rho(1-\nu)(1-2\nu)}} \quad (74)$$

donde:

V - Velocidad de aplicación de la carga.

4.3.2 - Estimación numérica del tiempo de ejecución de la simulación o de la velocidad de aplicación de la carga.

Como en la formulación del método de los elementos discretos en ocasiones se disminuye el tiempo de cálculo (cómputo) alterando la densidad, se puede estimar dicho tiempo imponiendo que se producirá un movimiento rectilíneo uniforme:

$$T = \frac{\Delta_{\max}}{V} \quad (75)$$

donde:

Δ_{\max} - Desplazamiento máximo.

V - Velocidad de aplicación de la carga.

Otra vía por la que se puede estimar la velocidad de aplicación de la carga es empleando las herramientas de simulación numérica (simulación virtual de ensayos de laboratorio). En este caso hay que partir de la ecuación fundamental del método de los elementos discretos:

$$F = m a = K \Delta \quad (76)$$

donde:

F - Fuerza.

m - Masa

a - Aceleración.

K - Rígidez.

Δ - Desplazamiento.

Conociendo que : $a = \frac{dv}{dt}$, entonces: $F = m \frac{dv}{dt} = K \Delta$, e integrando se obtiene la

velocidad de aplicación de la carga:

$$v = \frac{K \Delta}{m} t \quad (77)$$

Para estimar el valor de velocidad de aplicación de la carga es necesario conocer la rígidez global equivalente de la probeta, el desplazamiento máximo, la masa global y el tiempo de duración del ensayo en cuestión.

El tiempo de duración del ensayo es algo que se determina fácilmente por experiencia en la realización de los diferentes ensayos físicos. Si se conoce la deformación relativa máxima del material y las dimensiones de la probeta el desplazamiento máximo se puede estimar por:

$$\Delta = \epsilon a \quad (78)$$

donde:

Δ - Desplazamiento máximo.

ϵ - Deformación relativa máxima.

a – Altura de la probeta.

La masa global de la probeta se puede estimar conociendo de antemano la densidad del material y los diámetros o radios de cada una de las esferas que conforman el medio. Este cálculo de la masa global del espécimen se puede realizar por:

$$m = \gamma V_{\text{total}} \quad (79)$$

donde:

γ - densidad del material.

V_{total} - Volumen total.

y

$$V_{\text{total}} = \sum_{i=1}^n v_i = \sum_{i=1}^n \frac{4}{3} \pi r_i^3 \quad (3D - \text{esferas})$$

$$V_{\text{total}} = \sum_{i=1}^n v_i = \sum_{i=1}^n \pi r^2 \quad (2D - \text{cilindros})$$

La rigidez equivalente de la probeta se puede calcular realizando un símil físico entre esta y un sistema elástico, (un muelle). Para ello se puede tomar la probeta objeto de estudio, con sus correspondientes parámetros micro y aplicarle a la misma una carga unitaria para determinar la rigidez global macroscópica de la misma (figura 15).

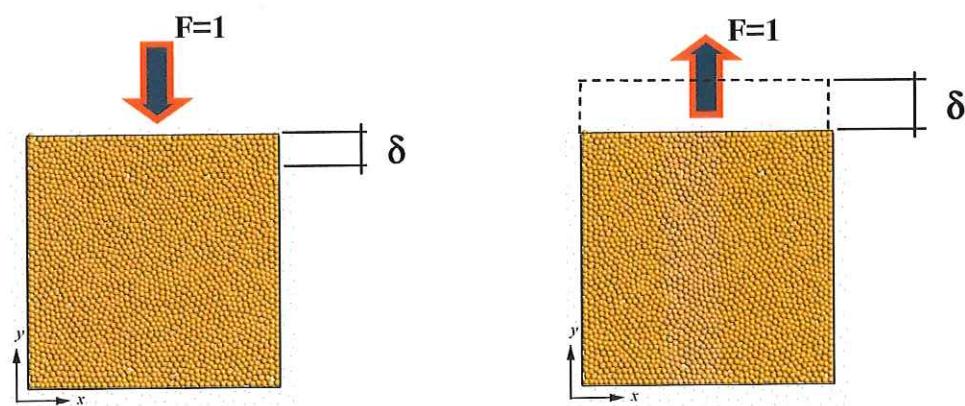


Figura 15: Procedimiento para calcular la rigidez global macroscópica de la probeta.

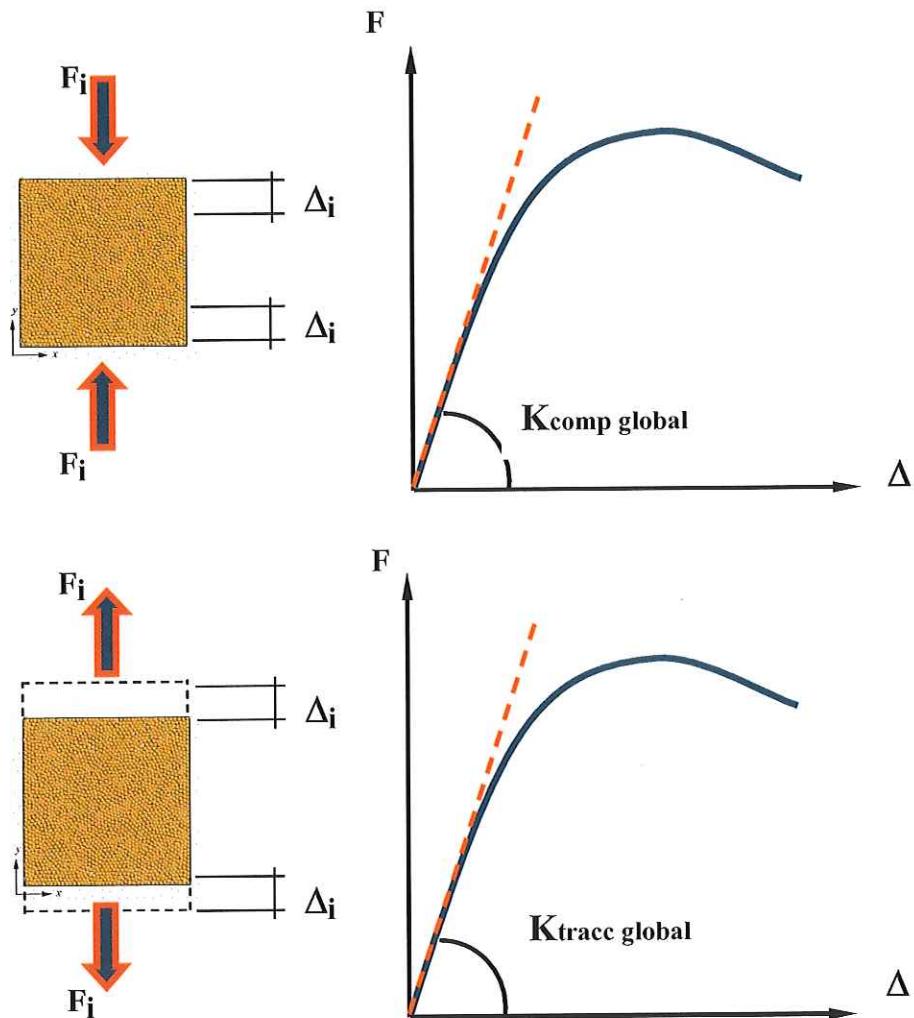


Figura 16: Procedimiento para calcular la rigidez global macroscópica de la probeta.

Partiendo del concepto de comportamiento de un resorte o muelle:

$$F = K \delta \quad (80)$$

como $F=1$, entonces la rigidez global de la probeta es:

$$K = \frac{1}{\delta} \quad (81)$$

Como es lógico este procedimiento hay que realizarlo para compresión y para tracción. De esta forma se puede estimar la rigidez global macroscópica de la probeta.

Otra forma de estimar la rigidez global macroscópica es obteniendo este valor de la curva de comportamiento de fuerza-desplazamiento (figura 16) pero aplicando la carga por escalones es decir por el método de tensiones controladas. Para ello hay que someter a la probeta a un estado sucesivo de cargas y calcular los desplazamientos correspondientes para representar la curva fuerza-desplazamiento. A partir de estos resultados por regresión se puede estimar la rigidez global macroscópica de la probeta (figura 16).



El tiempo de duración del ensayo también se puede estimar si se conoce que:

$$v = \frac{K\Delta}{m} t \quad (82)$$

Suponiendo que se produce un movimiento rectilíneo uniforme:

$$v = \frac{\Delta}{t} \quad (83)$$

entonces,

$$\frac{\Delta}{t} = \frac{K\Delta}{m} t \quad (84)$$

lo que implica que:

$$t = \sqrt{\frac{m}{K}} \quad (85)$$

De este modo se puede estimar el rango de velocidad de aplicación de las cargas en función de la rigidez y los parámetros micro de cada material.

A continuación se resumen algunos datos de velocidades de aplicación de cargas a partir de la experiencia acumulada en la realización de algunos ensayos físicos en diversos tipos de materiales (suelos, rocas, hormigones, mortero, etc). Un análisis de los mismo conduce a que el orden de la velocidad de aplicación de la carga debe ser de 10^{-4} - 10^{-8} m/seg.

Ensayo de compresión simple

Material	Velocidad	Velocidad m/s
Rocas	0.0083 mm/s	8.33×10^{-6} m/s
Arcillas y Limos	15-20 mm / h	4.16×10^{-6} - 5.55×10^{-6}
Arenas	15-20 mm / 30 minut.	8.33×10^{-6} - 1.11×10^{-5}

Ensayo triaxial lento

Material	Velocidad	Velocidad m/s
Rocas	20-15 mm/48-72h	1.16×10^{-7} - 8.68×10^{-8} , 7.7×10^{-8} - 5.78×10^{-8}
Arcillas y Limos	20-15 mm/24 h	2.31×10^{-7} - 1.73×10^{-7}
Arenas	20-15 mm/h	5.55×10^{-6} - 4.16×10^{-6}

Ensayo triaxial rápido

Material	Velocidad	Velocidad m/s
Rocas		
Arcillas y Limos	20-15 mm/h	5.55×10^{-6} - 4.16×10^{-6}
Arenas		

Ensayo corte rápido		
Material	Velocidad	Velocidad m/s
Rocas	0.6 mm/minut.	1×10^{-5}
Arcillas y Limos	8 mm/h	2.22×10^{-6}
Arenas	8 mm/30 minut.	4.44×10^{-6}

Ensayo corte lento		
Material	Velocidad	Velocidad m/s
Rocas		
Arcillas y Limos	8 mm/24h	9.26×10^{-8}
Arenas	8 mm/12h	1.85×10^{-7}

Ensayo de compresión en hormigones		
Material	Velocidad	Velocidad m/s
Morteros	2.4 Kn/seg.	$v(m/seg) = v(Kn/seg) \frac{\epsilon a}{\sigma A}$ A - Área. ϵ - Deformación relativa máxima. 0.002 σ - Tensión máxima. a - Alturas.
Hormigón	8.8 Kn/seg.	$v(m/seg) = v(Kn/seg) \frac{\epsilon a}{\sigma A}$ A - Área. ϵ - Deformación relativa máxima. 0.002 σ - Tensión máxima. a - Alturas.

Ensayo de tracción indirecta en hormigones		
Material	Velocidad	Velocidad m/s
Resistencias Hormigón	0.3 mm/minut.	5×10^{-6}

Ensayo de tracción indirecta en roca		
Material	Velocidad	Velocidad m/s
Rocas (duración 15-30 seg)	0.5-1 Mpa/seg.	$v(m/seg) = v(Kn/seg) \frac{\epsilon a}{\sigma A}$ A - Área. ϵ - Deformación relativa máxima. σ - Tensión máxima. a - Alturas.
Rocas (duración 15-30 seg)	200 N/seg.	$v(m/seg) = v(Kn/seg) \frac{\epsilon a}{\sigma A}$ A - Área. ϵ - Deformación relativa. σ - Tensión máxima. a - Alturas.

Ensayo de tracción en aceros

Material	Velocidad	Velocidad m/s
Aceros Dúctiles	5 mm/ minuto	$8.33 \cdot 10^{-5}$ m/s
Aceros Frágil	2 mm/ minuto	$3.33 \cdot 10^{-5}$ m/s

Ensayo de compresión en aceros

Material	Velocidad	Velocidad m/s
Aceros Dúctiles y Frágil	5 mm/ minuto	$8.33 \cdot 10^{-5}$ m/s

Ensayo de tracción en aceros norma Europea

Material	Velocidad	Velocidad m/s
$E < 150\,000$ Mpa	2-10 Mpa/seg	$v(\text{m/seg}) = v(\text{Kn/seg}) \frac{\epsilon a}{\sigma A}$ A - Área. ϵ - Deformación relativa. σ - Tensión máxima. a - Alturas.
$E \geq 150\,000$ Mpa	6-30 Mpa/seg	

Ensayo de tracción en gomas

Material	Velocidad	Velocidad m/s
Gomas	10 mm/ minuto	$1.6 \cdot 10^{-4}$ m/s

Ensayo de compresión en aceros

Material	Velocidad	Velocidad m/s
Aceros Dúctiles y Frágil	2 mm/ minuto	$3.33 \cdot 10^{-5}$ m/s

4.4 – Valoración sobre la holgura o tolerancia (Gap) - separación-penetración entre esferas -.

La holgura (Gap) - distancia máxima o penetración/separación - admitida entre dos esferas es la tolerancia para la cual se considera si las mismas están conectadas o no (contacto cohesivo o no), es decir es la máxima separación/penetración entre esferas para la cual se aplica conexión cohesiva.

El Gap es un parámetro del modelo que tiene una significación muy especial, ya que tiene una marcada influencia en el comportamiento macroestructural y microestructural. Este parámetro influye notablemente en aspectos físico-mecánicos y geométricos. Cuando el contacto entre dos esferas está sometido a tracción, este parámetro presenta un sentido más físico-mecánico que geométrico en sí. Por su parte, cuando el contacto trabaja a compresión el sentido geométrico está basado en que dos esferas no pueden ocupar el mismo lugar físico. Esté aspecto no debe ocurrir ya que introduciría problemas en la solución y probablemente inestabilidad numérica. Si se trabaja con parámetros mecánicos microestructurales adecuados y a su vez se verifica que las fuerzas y la penetración en el contacto en su estado límite (momento en el cual la penetración debe estar cerca del valor máximo de Gap a compresión) este fenómeno geométrico no ocurrirá. No ocurre porque entre la resistencia máxima en la dirección normal o fuerza cohesiva normal máxima - R_n -, y la resistencia máxima en la dirección tangencial o fuerza cohesiva tangencial máxima - R_T -, existe una relación físico-mecánica que no posibilita que este fenómeno se manifieste. Si un contacto está sometido a compresión y este estado tenso-deformacional en el contacto se acerca a la rotura, el fallo se producirá por deslizamiento o pérdida de cohesión debido a que se

superará el valor de R_T antes de que las dos esferas en contacto ocupen el mismo lugar físico. De aquí la importancia de la relaciones físicas que deben cumplir $\frac{R_T}{R_n}$.

Los aspectos explicados con anterioridad posibilitan expresar que el contacto entre dos esferas debe verificar únicamente los valores de R_n , R_T , $\Delta_{\text{max-comp}}$ y $\Delta_{\text{max-tracc}}$ y a su vez el **Gap** debe estar definido para los dos estados tensionales (compresión y tracción) - $\text{Gap}_{\text{tracc}}$, Gap_{comp} . - aunque este último no tenga sentido, ya que la muestra cuando trabaja a compresión y llega al estado de fallo, se producirá antes el deslizamiento o descohesión por superarse el valor de R_T .

A escala microestructural el **Gap** es una función del diámetro de las esferas en contacto y macroestructuralmente es función de las tensiones de rotura, tensión de linealidad (compresión y tracción), de las elongaciones máximas (compresión y tracción) y de la elongación elástica máxima. El hecho de que el **Gap** sea función de los diámetros de las esferas en contacto implica que el mismo tiene un valor diferente para cada par de contacto entre esferas ya que el medio es generado con esferas que presentan posición y diámetro aleatorio. Una aproximación y simplificación a este aspecto es tomar un único valor de **Gap** trabajando con el diámetro medio de las esferas y con el resto de las propiedades tenso-deformacionales.

Este parámetro (**Gap**) guarda una estrecha relación con la masa de cada esfera, la rigidez normal (compresión y tracción) y tangencial, el diámetro de las esferas, la aceleración, y la velocidad de aplicación de las cargas. Por este motivo su valor dentro de la modelización de un problema dado debe tener una correspondencia con estos parámetros físicos y geométricos. La expresión que los relaciona es la siguiente:

$$F = m a = m \frac{dv}{dt} = K \text{Gap}_{\text{max}}$$

donde:

F - Fuerza.

m - Masa.

K - Rígidez normal o tangencial (compresión o de tracción).

Gap_{max} - Separación o penetración máxima para considerar que dos esferas están en contacto, es decir, en conexión cohesiva.

Para definir que valor del gap (separación/penetración) se debe considerar en una modelización determinada, es necesario buscar una relación física y geométrica conveniente entre el diámetro de las esferas, la masa, la velocidad de aplicación de las cargas (la aceleración) y las rigideces (normales y tangenciales). Estas relaciones implican cierto grado de lógica en el problema, ya que la masa, las rigideces (normales y tangenciales) son parámetros físicos y mecánicos respectivamente, que tienen un significado y una relación directa entre la modelación física y la matemática. Por su parte el **Gap** (separación/penetración) es un parámetro que no tiene directamente un sentido físico, pero si debe tener un rango de variación (dominio acotado) que le permita a la modelación matemática cumplir con ciertos criterios físicos. La velocidad de aplicación de las cargas o la aceleración de una esfera determinada en el proceso de modelización, es otro aspecto a tener en cuenta para definir el valor del **Gap**.

(separación/penetración), el cual está muy vinculado con el diámetro (con cierto grado de variabilidad estadística) de la esfera a utilizar.

Siguiendo este razonamiento (figura 17) para definir el **Gap** (separación/penetración) es necesario, resolver la trilogía siguiente (diámetro, **Gap**-separación/penetración- y velocidad de aplicación de las cargas o aceleración de una esfera dada):

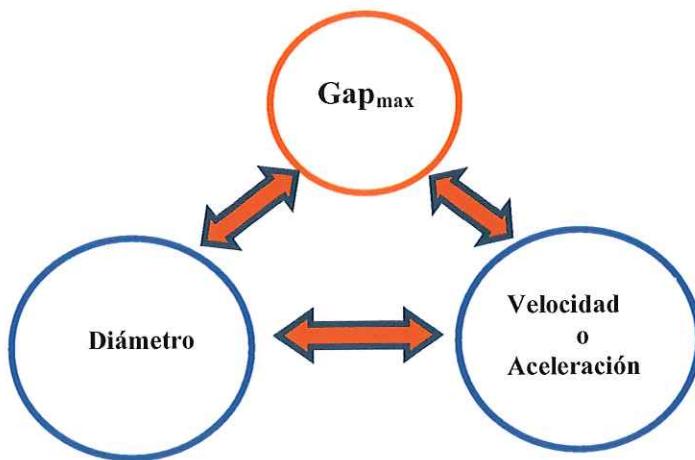


Figura 17: Trilogía para estimar el **Gap**.

En función de esta disyuntiva para cada material (densidad, masa), se empleará un rango de diámetros (zona acotada) de esfera determinados, que será inversamente proporcional a la velocidad (o aceleración) y directamente proporcional a la tolerancia (gaps - separación/penetración). Donde la tolerancia o holgura (**Gap** - separación/penetración) en el caso de la penetración va a ser una variable acotada, que estará en función del diámetro de la esfera a utilizar.

Tracción.

En el caso de la tracción para la definición del **Gap_{max tracc}** el fenómeno tiene más sentido físico que geométrico en sí. En este caso el **Gap_{max tracc}** no debe ser mayor que el desplazamiento elástico máximo y debe ser menor o igual que el producto de la deformación máxima a tracción por la suma de los dos radios de las esferas que están en contacto. En este caso influyen indirectamente otros aspectos relacionados con la cohesión entre esferas.

Partiendo del análisis anterior (figura 18), entonces el **Gap_{max tracc}** debe cumplir la siguiente relación para el caso del estado tenso-deformacional de tracción:

$$\epsilon_{\text{elást. máx. tracc.}} (r_i + r_{i+1}) < \mathbf{Gap}_{\text{max tracc.}} \leq \epsilon_{\text{máx. tracc.}} (r_i + r_{i+1})$$

Si se realiza un análisis del estado tenso-deformacional (figura 18) se puede obtener el **Gap_{max tracc}** de tracción por:

$$\mathbf{Gap}_{\text{max tracc.}} = \epsilon_{\text{máx. tracc.}} (r_i + r_{i+1})$$

aunque se puede calcular por:

$$\begin{aligned}\mathbf{Gap}_{\max \text{ tracc}} &= \mathbf{Gap}_{\text{elást. máx tracc}} + \mathbf{Gap}_{\text{plást. máx tracc}} \\ \mathbf{Gap}_{\max \text{ tracc}} &= \varepsilon_{\text{elástmáx tracc}} (r_i + r_{i+1}) + \varepsilon_{\text{plástmáx equival tracc}} (r_i + r_{i+1}) (1 - \varepsilon_{\text{elástmáx tracc}})\end{aligned}$$

donde

$$\varepsilon_{\text{plást máx equival tracc}} = (\varepsilon_{\max \text{ tracc}} - \varepsilon_{\text{elástmáx tracc}}) = \frac{(\sigma_{R \text{ tracc}} - \sigma_{L \text{ tracc}})}{\left[\frac{\sigma_{R \text{ tracc}} - \sigma_{L \text{ tracc}}}{\varepsilon_{\max \text{ tracc.}} - \varepsilon_{\text{elástmáx tracc.}}} \right]}$$

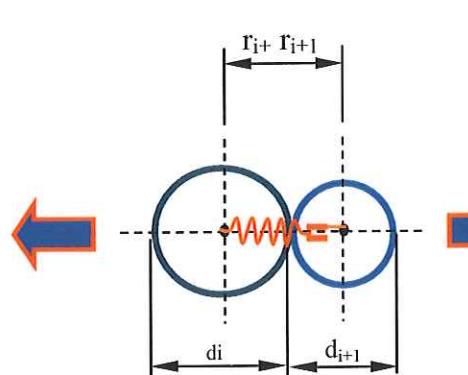
o por:

$$\mathbf{Gap}_{\max \text{ tracc}} = \Delta L_{\text{elástmáx tracc}} + \Delta L_{\text{plást máx equival. tracc}}$$

donde

$$\Delta L_{\text{elást máx tracc}} = \varepsilon_{\text{elást máx tracc}} (r_i + r_{i+1})$$

$$\Delta L_{\text{plást máx equival. tracc}} = (\Delta L_{\max \text{ tracc}} - \Delta L_{\text{elástmáx tracc}}) = \frac{(\mathbf{F}_{R \text{ tracc}} - \mathbf{F}_{L \text{ tracc}})}{\left[\frac{\mathbf{F}_{R \text{ tracc}} - \mathbf{F}_{L \text{ tracc}}}{\Delta L_{\max \text{ tracc.}} - \Delta L_{\text{elástmáx tracc.}}} \right]}$$



Ecuación de la recta 3 ($\sigma - \varepsilon$)

$$(\sigma - \sigma_L) = \left[\frac{\sigma_R - \sigma_L}{\varepsilon_{\max.} - \varepsilon_{\text{elástmáx.}}} \right] (\varepsilon - \varepsilon_{\text{elástmáx.}})$$

Ecuación de la recta 3 ($\mathbf{F} - \Delta L$)

$$(\mathbf{F} - \mathbf{F}_L) = \left[\frac{\mathbf{F}_R - \mathbf{F}_L}{\Delta L_{\max.} - \Delta L_{\text{elástmáx.}}} \right] (\Delta L - \Delta L_{\text{elástmáx.}})$$

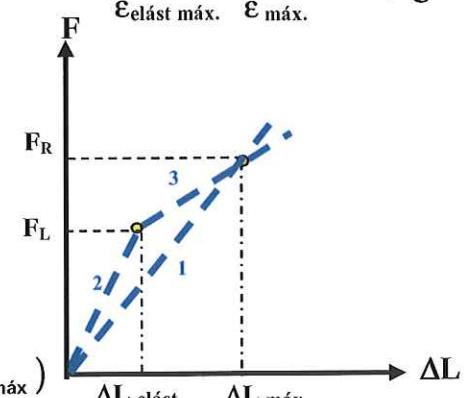
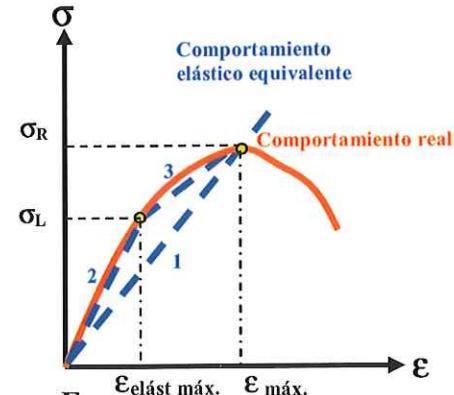


Figura 18: Representación esquemática del contacto entre dos esferas sometidas a tracción.

Compresión.

Para definir la región acotada del **Gap** de compresión (penetración) es necesario acudir a ciertos criterios geométricos y físicos. En el caso de compresión una esfera no puede penetrar en otra una distancia mayor que el diámetro de esta, ya que en caso contrario estaría ocupando la misma posición física. Por esta razón el **Gap** (gap/penetración) no debe ser mayor que la suma de los dos radios de las esferas que están en contacto. Físicamente el comportamiento de un material según la ecuación constitutiva empleada puede seguir un comportamiento elásto-plástico, por lo que la tolerancia de compresión (penetración) debe ser mayor que el desplazamiento elástico lineal máximo y menor o igual al desplazamiento máximo elástoplástico. Manteniendo relaciones geométricas (en función de los diámetros de las esferas en contacto) y físicas (en función de la relación R_n/R_T) se puede simular satisfactoriamente el fallo (por efecto de esfuerzo tangencial en este caso) lo que propiciaría que dos esferas no ocupen la misma posición física. A pesar de este aspecto es conveniente comprobar el estado de penetración de una esfera sobre otra con el objetivo de que no se produzcan errores en la simulación.

Partiendo del análisis anterior, la tolerancia de compresión (penetración) debe cumplir la siguiente relación para el caso del estado tenso-deformacional de compresión:

$$\varepsilon_{\text{elást. máx.comp}} (r_i + r_{i+1}) < \text{Gap}_{\text{max comp}} < (r_i + r_{i+1})$$

donde

$\text{Gap}_{\text{max comp}}$ - Tolerancia máxima de compresión.

Si se realiza una analogía entre el comportamiento real (elástoplástico) y un comportamiento elástico equivalente se puede llegar a estimar un valor de $\text{Gap}_{\text{max comp}}$, asumiendo que para alcanzar la deformación relativa máxima se sigue el comportamiento reflejado en la figura 19.

$$\text{Gap}_{\text{max comp}} = \varepsilon_{\text{máx.comp}} (r_i + r_{i+1})$$

aunque es más correcto calcularlo por:

$$\text{Gap}_{\text{max comp}} = \text{Gap}_{\text{elást. máx comp}} + \text{Gap}_{\text{plást. máx comp}}$$

$$\text{Gap}_{\text{máx comp}} = \varepsilon_{\text{elástmáx comp}} (r_i + r_{i+1}) + \varepsilon_{\text{plástmáx equival comp}} (r_i + r_{i+1}) (1 - \varepsilon_{\text{elástmáx comp}})$$

donde

$$\varepsilon_{\text{plást máx equival comp}} = (\varepsilon_{\text{máx comp}} - \varepsilon_{\text{elástmáx comp}}) = \frac{(\sigma_{R \text{ comp}} - \sigma_{L \text{ comp}})}{\frac{\sigma_{R \text{ comp}} - \sigma_{L \text{ comp}}}{\varepsilon_{\text{máx comp.}} - \varepsilon_{\text{elástmáx comp.}}}}$$

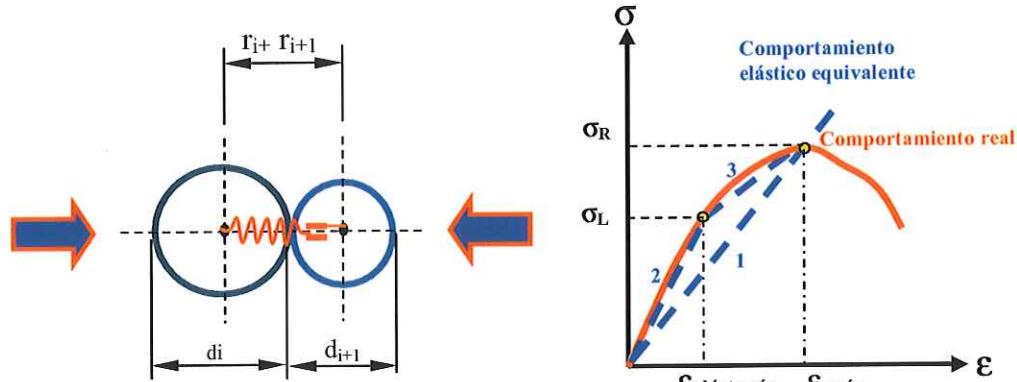
o por:

$$\text{Gap}_{\text{max comp}} = \Delta L_{\text{elástmáx comp}} + \Delta L_{\text{plást máx equival. comp}}$$

donde

$$\Delta L_{\text{elást máx comp}} = \varepsilon_{\text{elást máx comp}} (r_i + r_{i+1})$$

$$\Delta L_{\text{plást máx equival. comp}} = (\Delta L_{\text{máx comp}} - \Delta L_{\text{elástmáx comp}}) = \frac{(\mathbf{F}_{R \text{ comp}} - \mathbf{F}_{L \text{ comp}})}{\left[\frac{\mathbf{F}_{R \text{ comp}} - \mathbf{F}_{L \text{ comp}}}{\Delta L_{\text{máx comp}} - \Delta L_{\text{elástmáx comp}}} \right]}$$



Ecuación de la recta 3 ($\sigma - \epsilon$)

$$(\sigma - \sigma_L) = \left[\frac{\sigma_R - \sigma_L}{\epsilon_{\text{máx.}} - \epsilon_{\text{elástmáx.}}} \right] (\epsilon - \epsilon_{\text{elástmáx}})$$

Ecuación de la recta 3 ($F - \Delta L$)

$$(\mathbf{F} - \mathbf{F}_L) = \left[\frac{\mathbf{F}_R - \mathbf{F}_L}{\Delta L_{\text{máx.}} - \Delta L_{\text{elástmáx.}}} \right] (\Delta L - \Delta L_{\text{elástmáx}})$$

Figura 19: Representación esquemática del contacto entre dos esferas sometidas a compresión.

Cortante

El $\text{Gap}_{\text{max-cort}}$ debe analizarse en función de si el estado tenso-deformacional que se está produciendo ocurre con dominio de compresión o de tracción. En el caso del análisis de las fuerzas tangenciales con dominio de la tracción, después que ocurre el fallo por descohesión del material, este se rompe, y se pierde el vínculo total entre las esferas, es decir, el contacto y la fuerza tangencial en ese contacto toma valor un cero. En el caso de fuerzas tangenciales con dominio de la compresión, después que se supera el valor de la resistencia cohesiva tangencial se genera un estado de fricción siguiendo la ley de Coulomb (figura 20). Esto implica que el comportamiento de las fuerzas tangenciales con dominio de la compresión presenta dos fases: una cohesiva y otra friccional. Por su parte, en el caso de predominio de la tracción solo se genera la fase cohesiva (figura 9) ya que cuando se supera la resistencia cohesiva a cortante se produce el fallo del contacto y las esferas se separan físicamente. Estos aspectos permiten afirmar que cuando se propicia un estado tenso-deformacional de tracción el fallo que produce la descohesión puede ocurrir por tracción o por cortante. Por su parte, cuando el estado tenso-deformacional es de compresión la descohesión ocurre obligatoriamente por tensiones tangenciales.

El valor del $\text{Gap}_{\text{max-cort}}$ para el cual se considera conexión cohesiva entre las esferas, se puede estimar a partir de la siguiente ecuación:

$$F_{T\max} = R_T = K_T \text{Gap}_{\text{max-cort}}$$

entonces:

$$\text{Gap}_{\text{max-cort}} = R_T = \frac{R_T}{K_T}$$

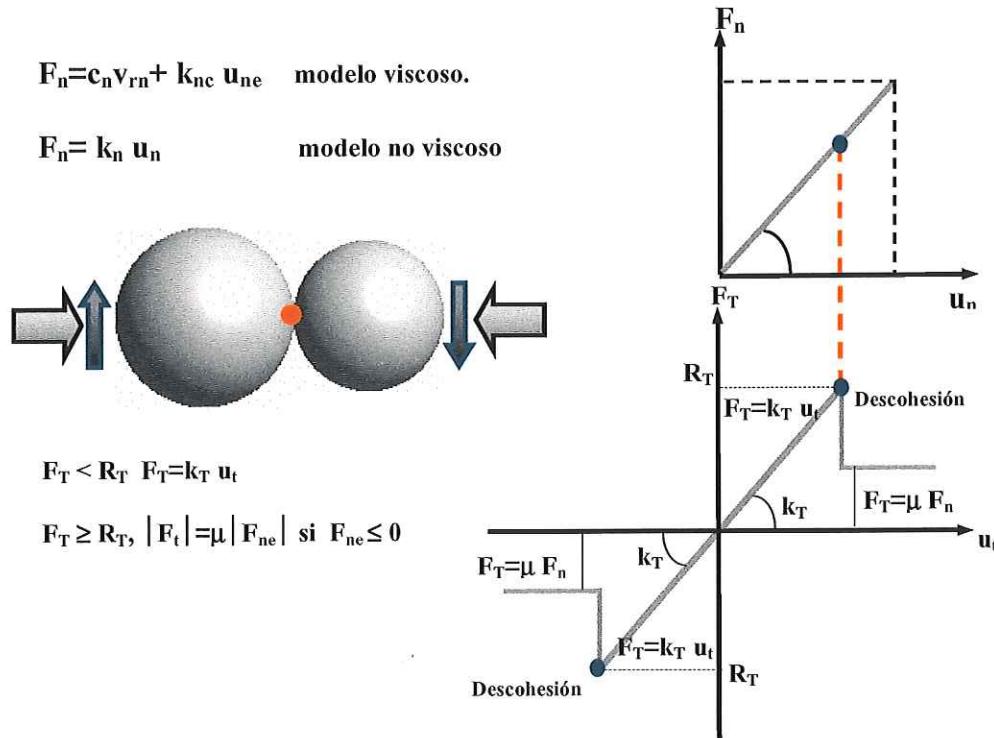


Figura 20: Comportamiento de la fuerza tangencial con dominio de la compresión. Sistema de fallo por descohesión a cortante prioritariamente en este caso.

4.5 – Ejecución de los ensayos virtuales de compresión y tracción.

En el proceso de simulación de los ensayos virtuales se somete la probeta (figura 21) primeramente a compresión y posteriormente a tracción. El medio es generado con diámetro y posición aleatoria de las esferas, lo que propicia un sistema de ligamentos cohesivos que cuando actúan las cargas genera una distribución de fuerzas de contacto (figura 21).

A partir de las curvas de comportamiento macroscópico tensión-deformación de los ensayos virtuales se estima el modulo de deformación, el coeficiente de Poisson y los parámetros de rotura correspondientes. De esta forma se tienen las variables para obtener las relaciones entre los parámetros macro y microestructurales. Si los ensayos virtuales se realizan en 3D directamente se obtienen los parámetros macroestructurales.

En el proceso de determinación de los parámetros elásticos macroestructurales se puede considerar que el material presenta un comportamiento elástico y lineal antes de ocurrir el fallo de los primeros ligamentos cohesivos. El módulo de elasticidad para tracción y

compresión puede obtenerse a partir del comportamiento (σ - ϵ) en los ensayos de laboratorio virtuales (figura 22).

Por su parte si los ensayos de laboratorio virtuales se realizan en 2D, es decir, en estado deformacional plano, es necesario calcular los verdaderos módulos de deformación y coeficiente de Poisson. En este caso:

$$E' = \frac{\Delta \sigma_{xx}}{\Delta \epsilon_{xx}}; \quad v' = \frac{\Delta \epsilon_{yy}}{\Delta \epsilon_{xx}}$$

donde

E' - Modulo de deformación en estado deformacional plano.

v' - Coeficiente de Poisson en estado deformacional plano.

Dado que se trata de un problema de deformación plana, las constantes macrscopicas se pueden relacionar con el módulo de Young E y del coeficiente de Poisson v por:

$$E' = \frac{E}{2};$$

$$1-v$$

$$v' = \frac{v}{1-v}$$

lo que implica que el modulo de deformación real y el coeficiente de Poisson se determinen por:

$$E = E'(1-v^2)$$

$$v = \frac{v'}{1+v'}$$

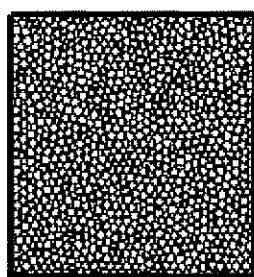


Grafico distribución aleatoria de esferas

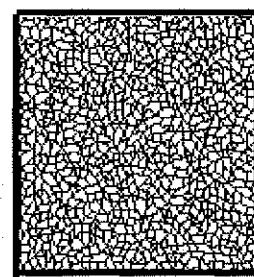


Grafico de ataduras cohesivas de contacto

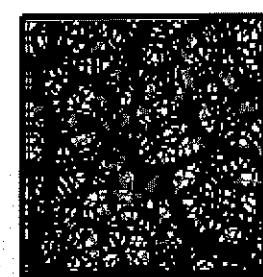


Grafico de distribución de fuerzas de contacto

Figura 21: Probeta en 2D. Gráficos de ataduras cohesivas y distribución de fuerzas de contacto.

Los resultados de las curvas tensión deformación obtenidas numéricamente permiten estimar los parámetros macroestructurales (Fig. 22). Las tensiones pueden obtenerse tomando la suma de las interacciones del contacto entre las paredes y las partículas. Puede notarse que las curvas son típicas para los materiales con fallo frágil o dúctil según sea el caso de la relación entre la rigidez normal y tangencial. En el caso de materiales con comportamiento dúctil es necesario emplear modelos constitutivos de

contacto viscoso. Los esfuerzos máximos de compresión y de tracción pueden obtenerse de la misma curva de comportamiento macroestructural (figura 22).

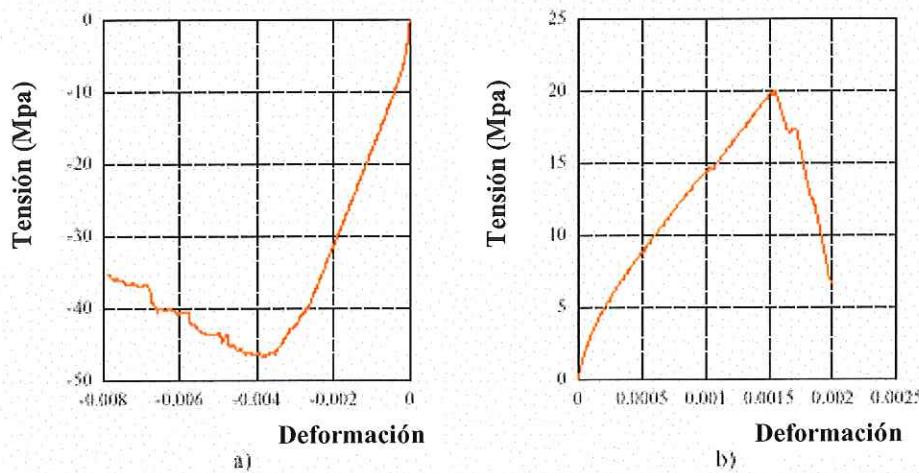


Figura 22: Relación esfuerzo-deformación: a) Compresión uniaxial, b) Tracción uniaxial.

4.6 - Estudio exploratorio.

El objetivo esencial del estudio exploratorio es definir la región de trabajo para la cual las variables y los parámetros macro y microestructurales tienen sentido físico. La definición de la región acotada permite con posterioridad delimitar los límites físicos y las restricciones matemáticas para aplicar estudios de optimización multicriterio o simulación estocástica, que posibiliten con un carácter más general estimar las relaciones entre los parámetros macro y microestructurales.

Como ya se ha mencionado con anterioridad las relaciones entre los parámetros elásticos y plásticos se ha adimensionalizado con el objetivo de obtener relaciones físicas fiables y a su vez con la finalidad de disminuir las cantidad de parámetros de estudio.

Para comenzar el estudio exploratorio se definen las variables de control y de respuesta respectivamente. En este caso las variables de control son los parámetros microestructurales y por su parte las macroestructurales son variables de respuesta. Tras ello se comenzaron a realizar los diferentes ensayos de compresión y tracción uniaxial para diferentes relaciones de parámetros micros. Ello permitió tener una idea preliminar del comportamiento de las variables de control y de respuesta en función de la formulación del método de los elementos discreto establecida y del tipo de modelo de contacto.

A modo de simplificación en este estudio inicial se supone que la rigidez normal a compresión y tracción son iguales y se trabaja solamente con el modelo de contacto lineal no viscoso. Esto conduce a una disminución de las variables a estudiar

inicialmente y conjuntamente con el análisis adimensional simplifican considerablemente la complejidad del estudio a realizar.

Debido a la complejidad del problema se decidió desacoplar el mismo en comportamiento elástico y plástico. Primeramente se realizó el estudio del comportamiento elástico asumiendo que los parámetros de rotura microestructurales presentaran valores de resistencia muy altos. Este aspecto permite hasta cierto punto aumentar el rango o dominio elástico en el comportamiento del material. Con posterioridad se realizó un estudio para establecer las relaciones entre los parámetros de rotura macro y microestructurales respectivamente.

4.6.1 - Parámetros Elásticos.

El estudio exploratorio de los parámetros elásticos permitió establecer las relaciones adimensionales entre las variables macros y microestructurales para el caso que se considera rigidez normal a compresión y tracción iguales. Los resultados de es estudio se refleja a en la figura siguiente:

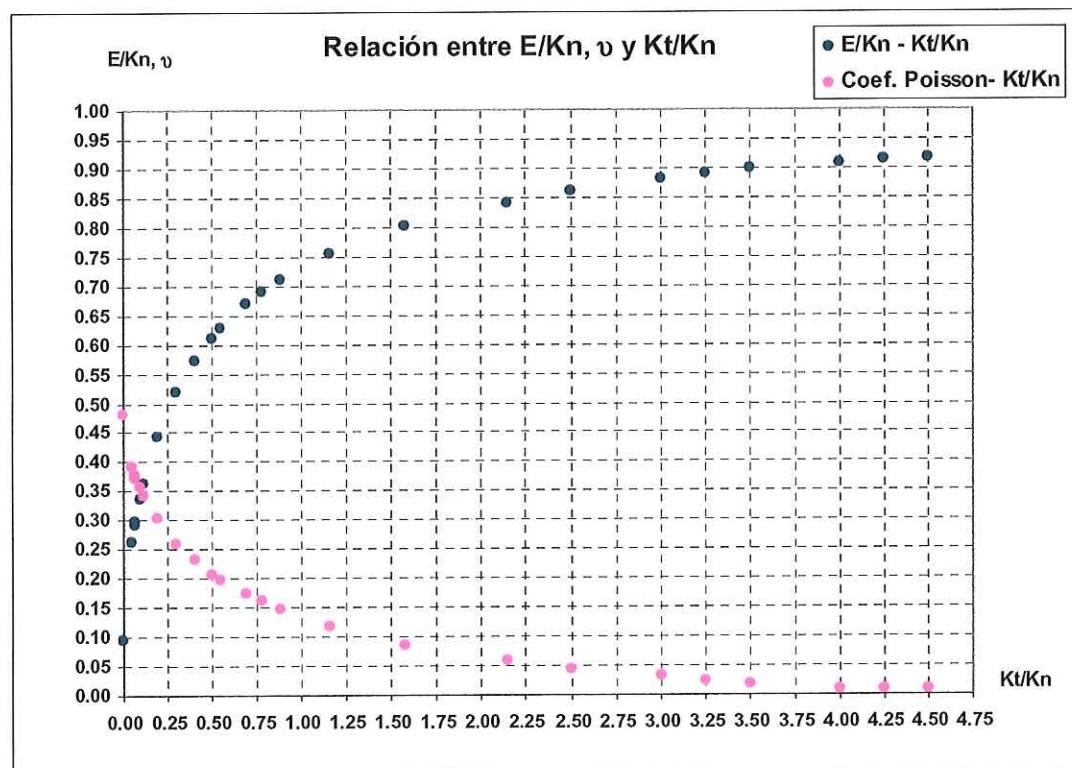


Figura 23: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales (E/K_{nc} vs K_t/K_{nc} y v vs K_t/K_{nc}). Ensayo de compresión ($K_{nc}=K_{nt}$).

En la figura 23 se ilustran los resultados obtenidos en la simulación de los ensayos de compresión. En esta grafica (figura 23) se observa las relaciones entre el módulo de deformación dividido la rigidez normal de compresión (E/K_{nc}) con la relación entre la rigidez tangencial y normal (compresión) (K_t/K_{nc}). Se obtiene así mismo la variación del coeficiente de Poisson con la relación entre la rigidez normal y tangencial (K_t/K_{nc}).

Realizando un análisis del comportamiento de las relaciones macro-micro a medida que aumenta la relación (K_T/K_{nc}) la relación (E/K_{nc}) tiende al valor de 0.9 y a su vez el coeficiente de Poisson va disminuyendo a un valor nulo.

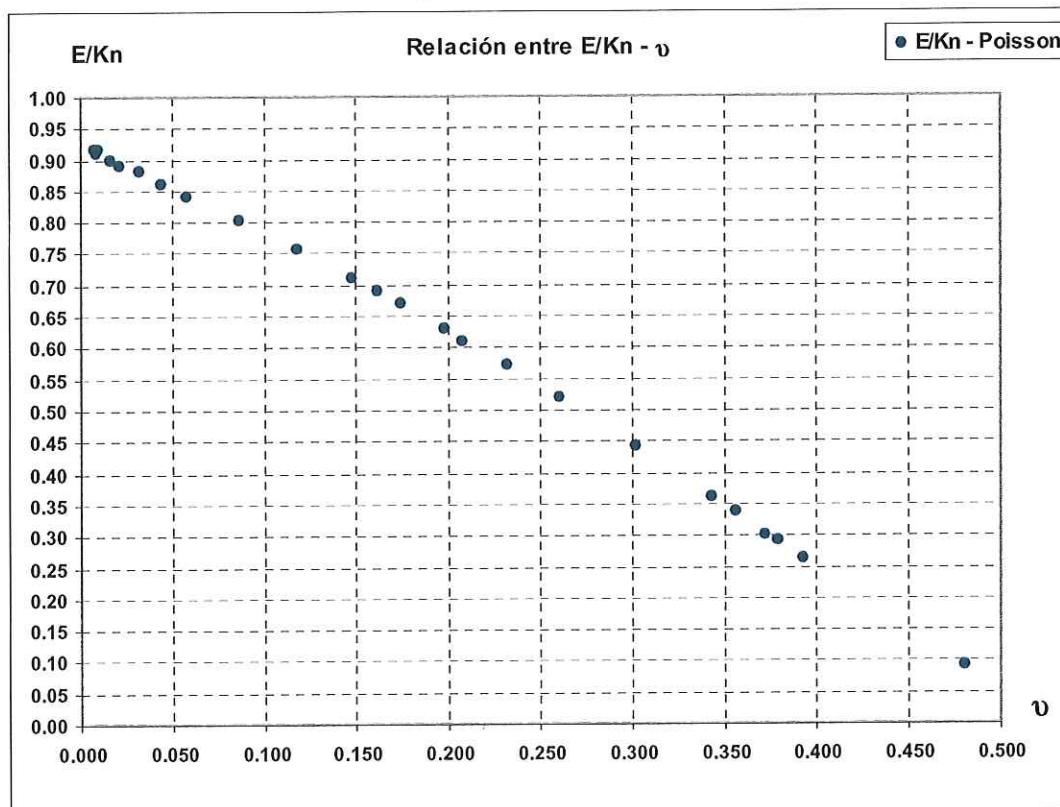


Figura 24: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales ($K_{nc}=K_{nt}$). Ensayo de compresión (E/K_{nc} vs v).

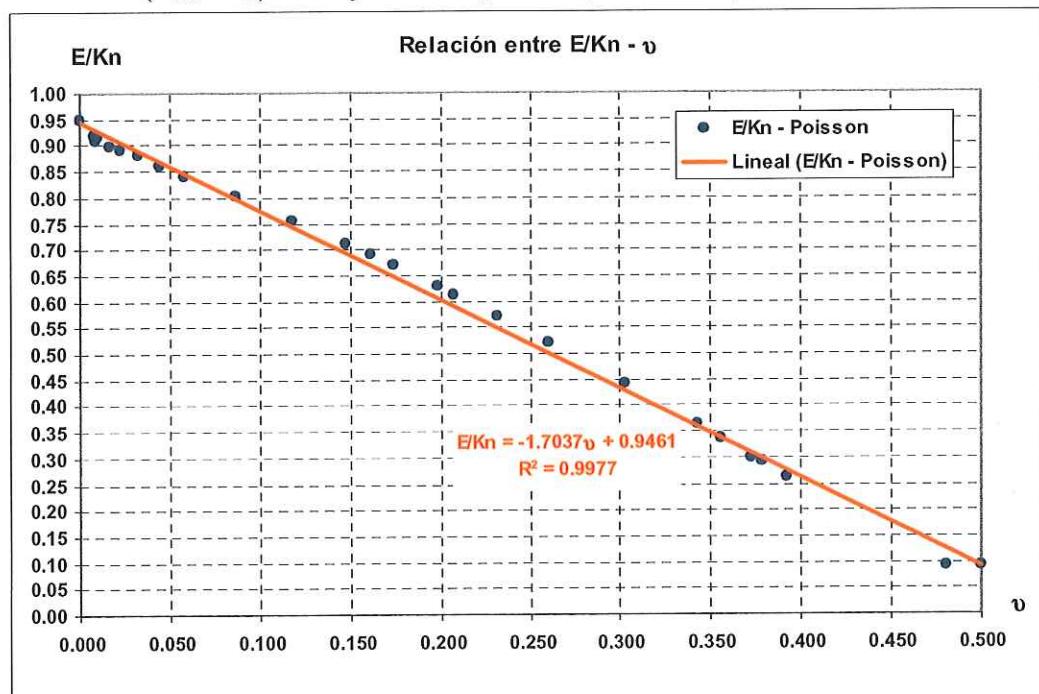


Figura 25: Ajuste de regresión para estimar los parámetros microestructurales conociendo valores de las variables macro (E/K_{nc} vs v). Ensayo de compresión ($K_{nc}=K_{nt}$).

En las figuras 24 y 25 se observa un comportamiento prácticamente lineal entre E/K_{nc} y el Coeficiente de Poisson. El análisis de los errores de pronóstico, la normalidad de los mismos y el comportamiento del coeficiente de correlación ($R^2=0.99$) garantizan una determinación confiable del parámetro K_{nc} (suponiendo que $K_{nc}=K_{nt}$).

Conociendo las relaciones convencionales entre los parámetros macro-estructurales se han obtenido otras relaciones entre los parámetros micro y macro respectivamente (Figura 26, 27, 28).

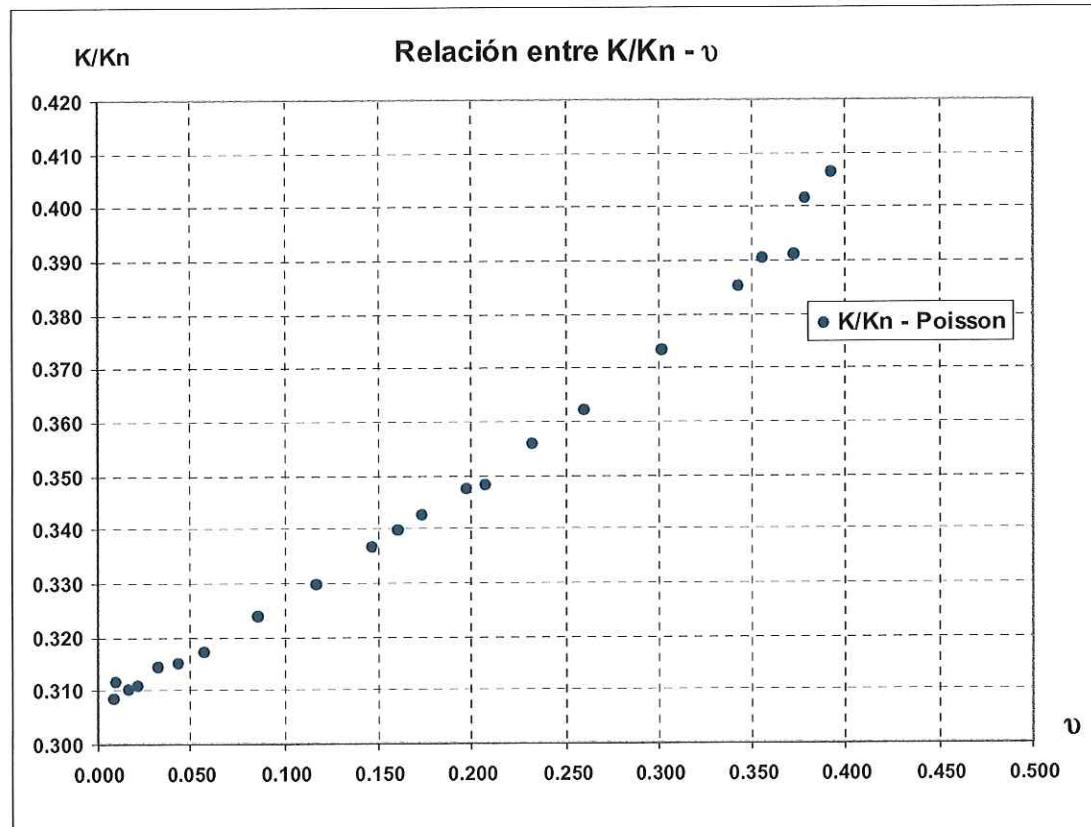


Figura 26: Relación entre los parámetros elásticos macro (K – Modulo de deformación volumétrica) y microestructurales (K/K_{nc} vs v). Ensayo de compresión ($K_{nc}=K_{nt}$).

Los resultados obtenidos (figura 24, 25 y 26) evidencian cierto grado de linealidad entre los parámetros macro y micro para el caso que se supone una relación directa entre los parámetros adimensionales y el Coeficiente de Poisson (E/K_{nc} , K/K_{nc} vs v). Estas gráficas ilustran que a medida que aumenta el coeficiente de Poisson, es decir a medida que el mismo se acerca a 0.5 la relaciones entre parámetros macro-micro (E/K_{nc} vs v) disminuye linealmente mientras que para la relación (K/K_{nc} vs v) aumenta.

Si se realiza un estudio comparativo entre los comportamientos de las relaciones macro-micro (figuras 23 y 25) y se observa el análisis de regresión (figura 25) realizado, se evidencia que cuando el coeficiente de Poisson disminuye la relación (E/K_{nc}) tiende al valor de 0.9 (suponiendo que $K_{nc}=K_{nt}$).

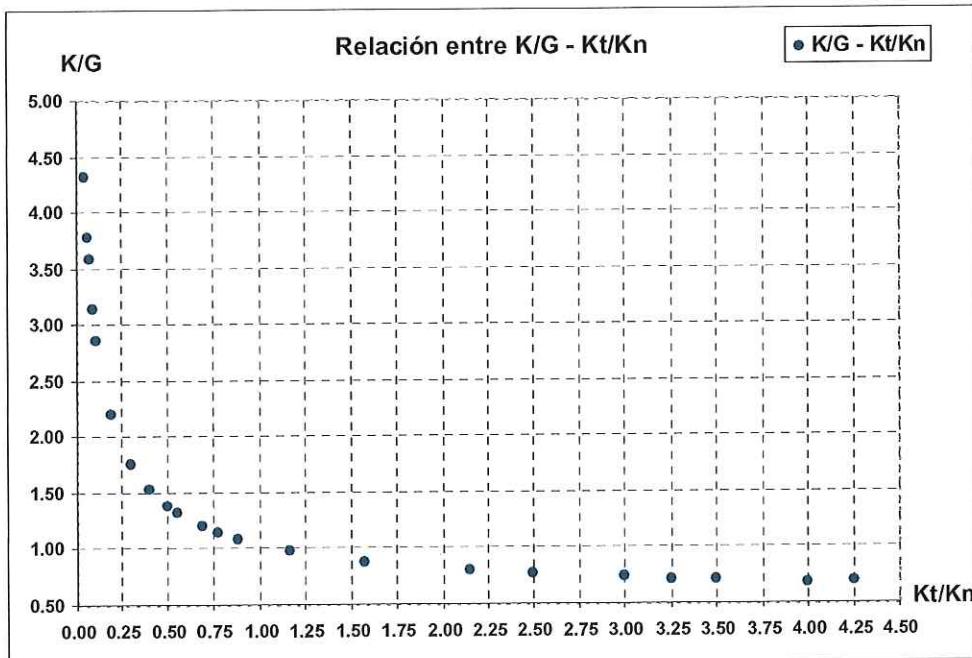


Figura 27: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales (K/G vs K_t/K_{nc}). Ensayo de compresión ($K_{nc}=K_{nt}$).

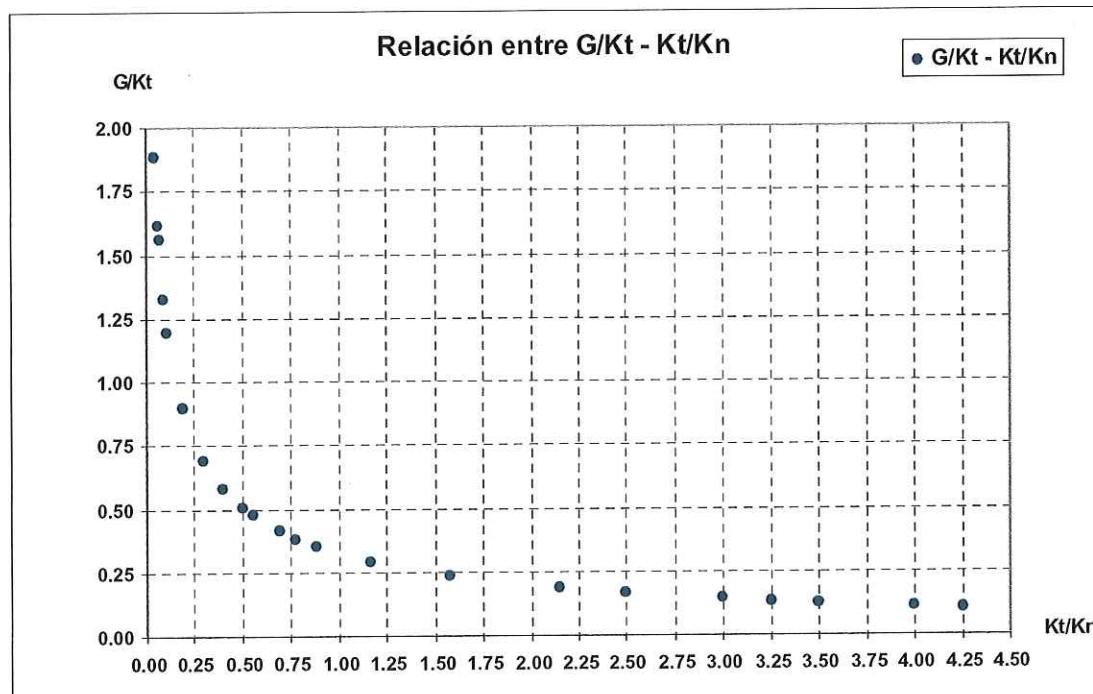


Figura 28: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales (G/K_t vs K_t/K_{nc}). Ensayo de compresión ($K_{nc}=K_{nt}$).

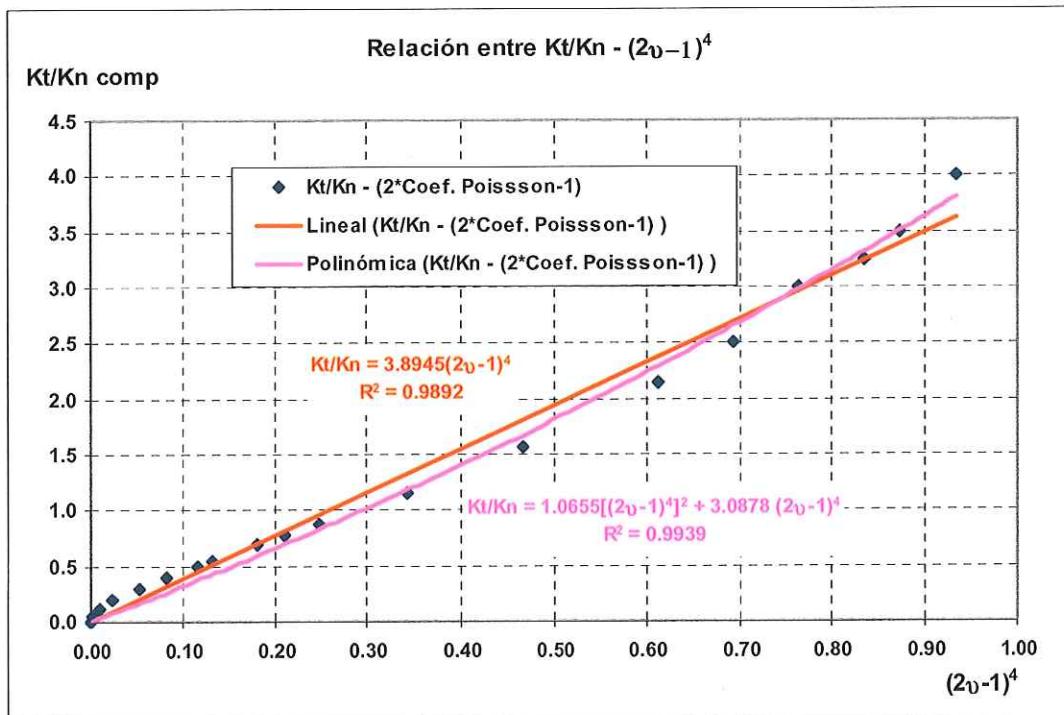


Figura 29: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales (K_t/K_{nc} vs $(2v-1)^4$). Ensayo de compresión ($K_{nc}=K_{nt}$).

En la figura 29 se observa el comportamiento de K_t/K_{nc} vs coeficiente de Poisson. El análisis de los errores de pronóstico, la normalidad de los mismos y el comportamiento del coeficiente de correlación ($R^2=0.98$) garantizan una determinación confiable del parámetro K_t (suponiendo que $K_{nc}=K_{nt}$), si se conoce de antemano el valor de K_{nc} (figura 25). En este caso se han realizado dos análisis de regresión empleando dos funciones polinómicas de diferentes ordenes. La función polinómica de orden mayor presenta un mejor comportamiento ($R^2=0.99$) pero un análisis de los parámetros y del comportamiento de los errores de pronóstico evidencia que, a pesar de esto, se puede trabajar con la función de orden menor (figura 29).

Resultados similares a los obtenidos en compresión (figuras 23,14,25,26,27,28 y 29) se obtienen para los ensayos virtuales de tracción. En la figura 30 se ilustra los resultados obtenidos entre el modulo de deformación dividido por la rigidez normal de tracción (E/K_{nt}) con la relación entre la rigidez tangencial y normal (tracción) (K_t/K_{nt}). Otra de las relaciones que se obtienen son la variación del Coeficiente de Poisson con la relación entre las rigideces normal y tangencial (K_t/K_{nt}).

Si se realiza un análisis del comportamiento de la curvas (figura 30) se observa como en este caso y a diferencia de los ensayos de compresión, a medida que aumenta la relación entre (K_t/K_{nt}) el valor de (E/K_{nt}) tiende a 0.68. Por su parte el comportamiento del coeficiente de Poisson es similar al de los ensayos de compresión (Figura 30).

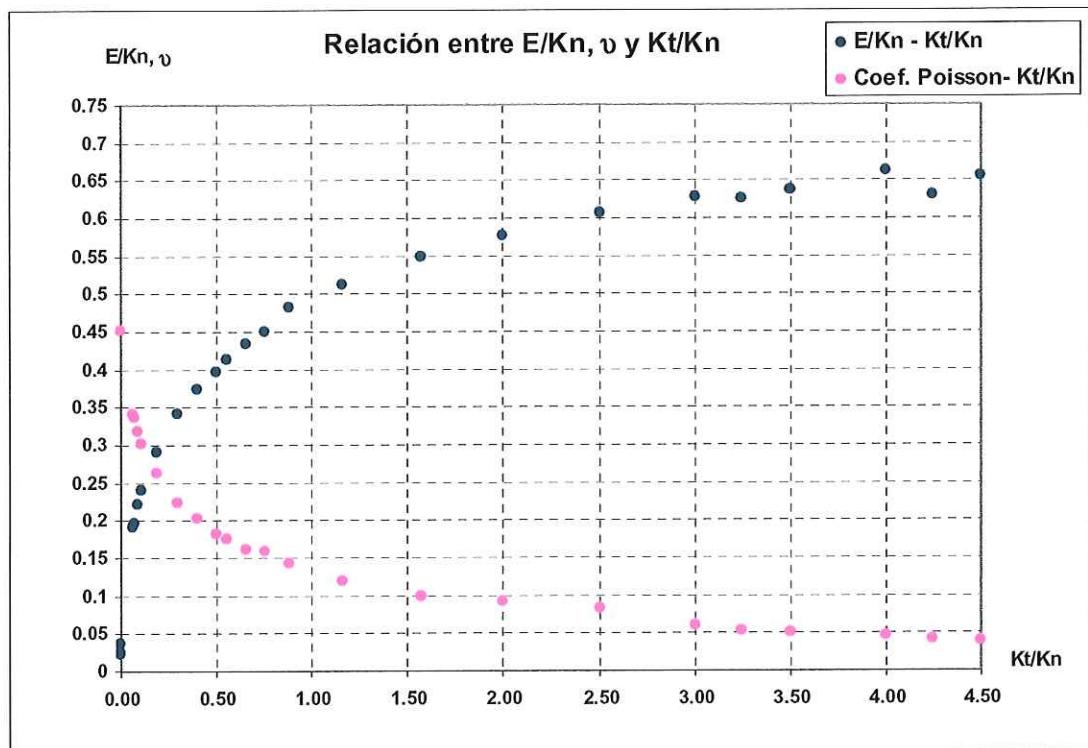


Figura 30: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales (E/K_{nt} vs K_t/K_{nt} y ν vs K_t/K_{nt}). Ensayo de tracción ($K_{nc}=K_{nt}$).

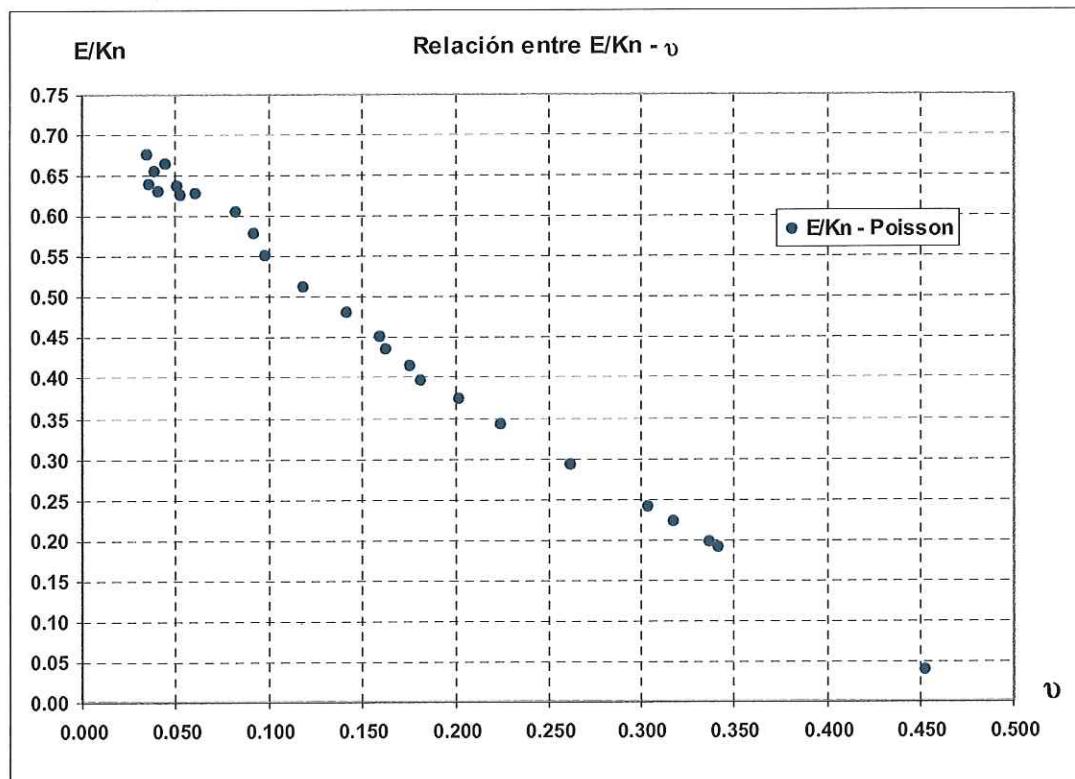


Figura 31: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales ($K_{nc}=K_{nt}$). Ensayo de tracción (E/K_{nt} vs ν).

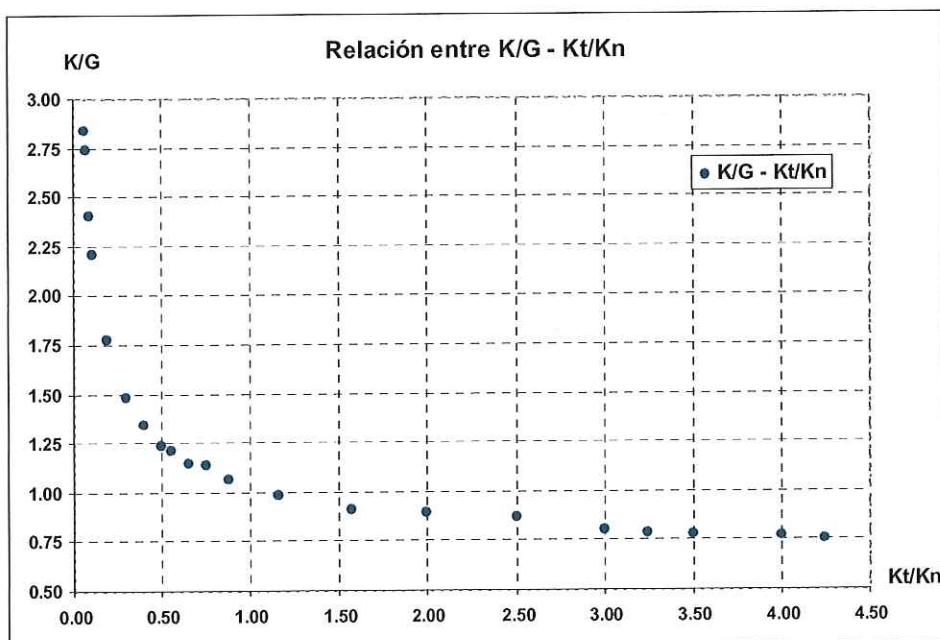


Figura 32: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales (K/G vs K_t/K_{nt}). Ensayo de tracción ($K_{nc}=K_{nt}$).

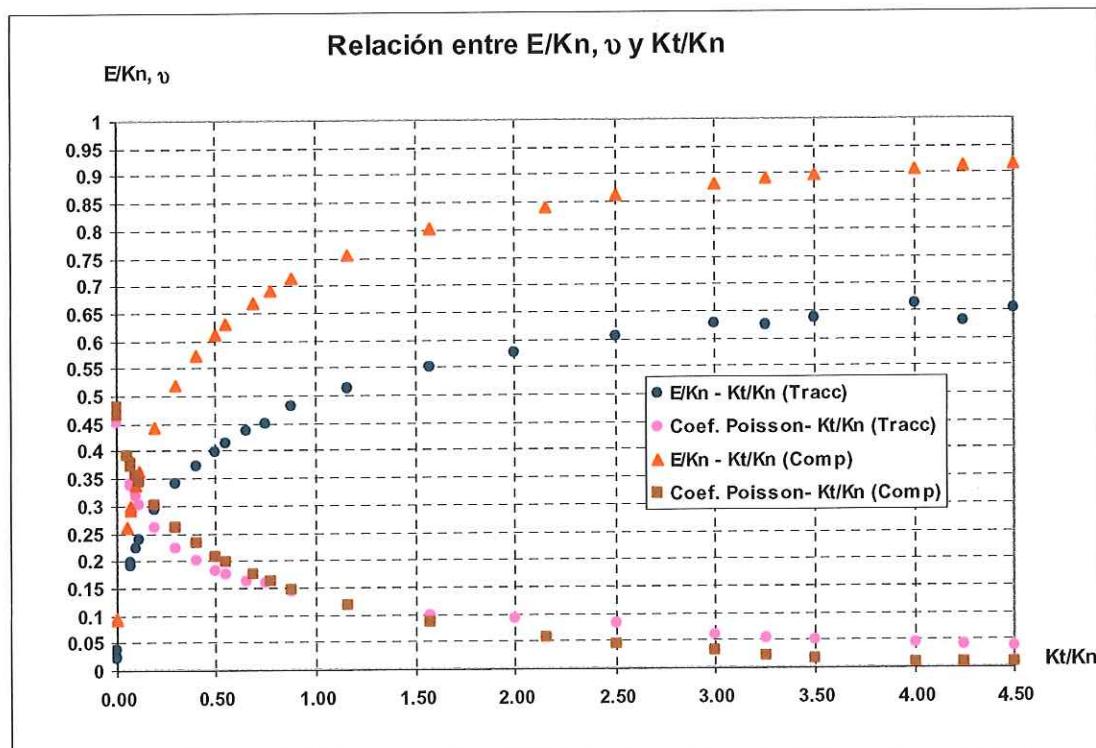


Figura 33: Relación entre los parámetros elásticos macro y microestructurales ($K_{nc}=K_{nt}$). Ensayos de compresión y tracción (E/K_{nc} vs K_t/K_{nt} y E/K_{nt} vs K_t/K_{nt}).

En la figura 33 se observa que el comportamiento de las variables adimensionales (E/K_{nc} vs ν y E/K_{nt} vs ν) en los ensayos virtuales de compresión y tracción son cualitativamente similares, pero cuantitativamente diferentes. En este caso se diferencian ya que a medida que aumenta la relación (K_T/K_n) los ensayos de compresión tienden al valor de 0.9 mientras que los de tracción a 0.65 para una diferencia de 0.25 cuando los dos comportamiento son asintóticos.

Si se realiza un análisis del comportamiento de los coeficientes de Poisson obtenido en los ensayos virtuales de compresión y tracción se puede observar que ambos resultados son muy similares (Figura 33).

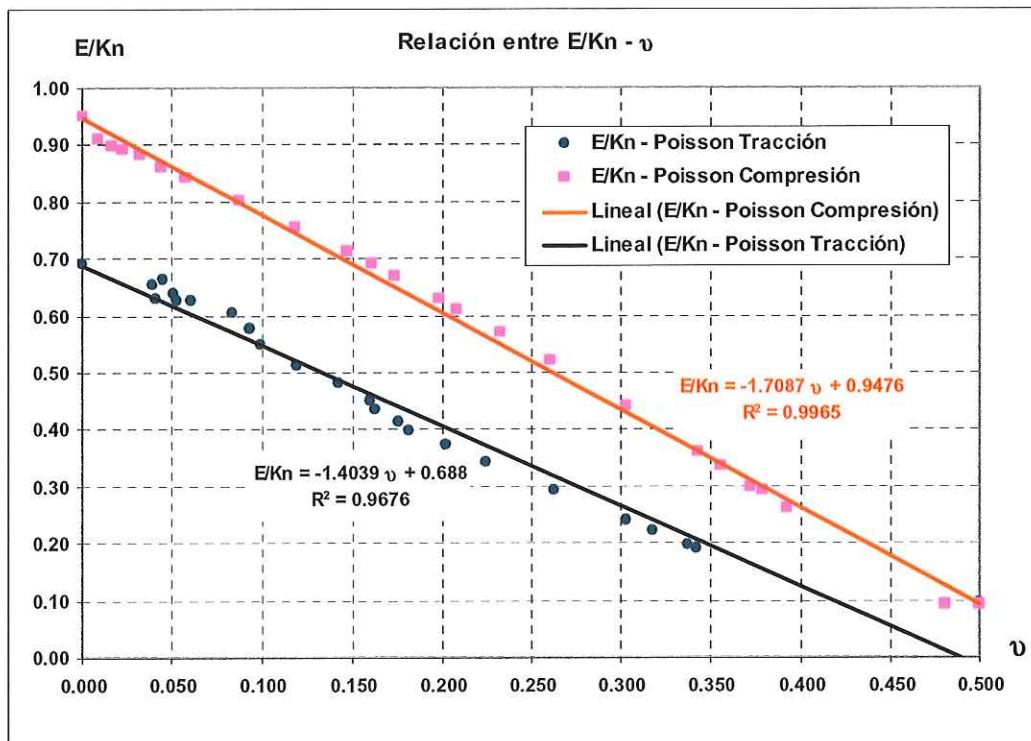


Figura 34: Ajuste de regresión para estimar los parámetros microestructurales conociendo valores de las variables macros (E/K_{nc} vs ν y E/K_{nt} vs ν). Ensayos de compresión y tracción ($K_{nc}=K_{nt}$).

En la figura 34 se muestra un ajuste de regresión lineal entre las relaciones E/K_{nc} y E/K_{nt} vs coeficiente de Poisson. Un análisis de los errores de pronóstico y el valor obtenido de coeficiente de correlación ($R^2=0.967$ - tracción y $R^2=0.99$ - compresión) permiten expresar que mediante las ecuaciones obtenidas se puede estimar de forma confiable las relaciones K_{nc} y K_{nt} (caso $K_{nc}=K_{nt}$). Las relaciones E/K_{nc} y E/K_{nt} tienen una dimensión acotada que varía entre 0.95 ($\nu=0$) a 0.093 ($\nu=0.5$) para el caso de compresión y en tracción 0.68 ($\nu=0$) y 0.013 ($\nu=0.5$).

En la figura 35 se observa que para valores de coeficientes de Poisson entre 0.5 y 0.2 los valores de $K_T/K_{nc,comp}$ y $K_T/K_{nt,trace}$ son similares para tracción y compresión, mientras que para valores inferiores a aquellos el comportamiento de la relación de rigidez es completamente diferente. Los ajuste de regresión que se observan en esta figura permiten estimar las relaciones K_T/K_{nc} y K_T/K_{nt} para el caso que ($K_{nc}=K_{nt}$) y conociendo K_{nc} y K_{nt} (Figura 34) se puede calcular el valor de K_T . En ambos

comportamientos (tracción y compresión) un análisis del coeficiente de correlación R^2 y de los errores de pronostico permiten afirmar que las ecuaciones que relacionan K_T/K_{nc} y K_T/K_{nt} vs Coeficiente de Poisson permiten estimar los parámetros micros necesarios con un alto grado de fiabilidad (caso $K_{nc}=K_{nt}$). Las relaciones K_T/K_{nc} y K_T/K_{nt} tienen una dimensión acotada que varia entre 0.0 ($v=0.5$) a 3.817 ($v=0$) para compresión y en tracción 4.66 ($v=0$) y 0.0 ($v=0.5$).

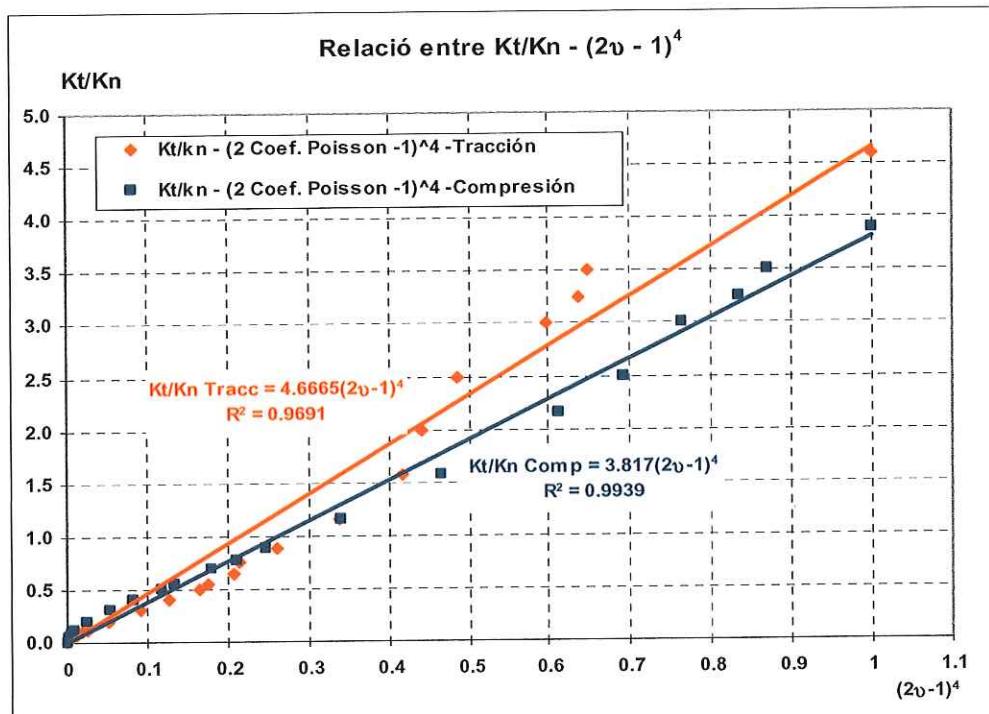


Figura 35: Ajuste de regresión para estimar los parámetros microestructurales conociendo valores de las variables macros (K_T/K_{nc} vs $(2v-1)^4$ y K_T/K_{nt} vs $(2v-1)^4$). Ensayos de compresión y tracción ($K_{nc}=K_{nt}$).

4.6 2- Comparación con otras formulaciones similares.

Con el objetivo de validar los resultados se realiza una comparación con resultados obtenidos con una formulación similar que utiliza el programa comercial PFC [1,13]. Una primera comparación entre ambos resultados se refleja en la grafica siguiente (figura 36). Como se puede observar los resultados obtenidos no son totalmente equivalentes. La diferencia puede deberse a las peculiaridades en la formulación de los modelos de contacto. Un análisis de la formulación matemática del contacto y de las peculiaridades físicas evidencia que existen diferencias entre el modelo de contacto empleado en el programa PFC^{2D} y la formulación realizada en CIMNE.

Como se puede observar (figura 36) a pesar ser modelos de contactos equivalentes no concuerdan los resultados, lo que pone de manifiesto que los modelos de contacto no son exactamente iguales. Un estudio minucioso del modelo de contacto lineal desarrollado por Cundall e implementado computacionalmente por Itasca en el software PFC^{2D} y PFC^{3D} [1,13] evidencia que en el modelo de contacto se emplean más elementos que en modelo empleado en esta investigación. El modelo de Cundall [1]

emplea dos muelles en la dirección normal y dos en la tangencial mientras que el modelo aquí utilizado tiene un solo muelle para cada componente.

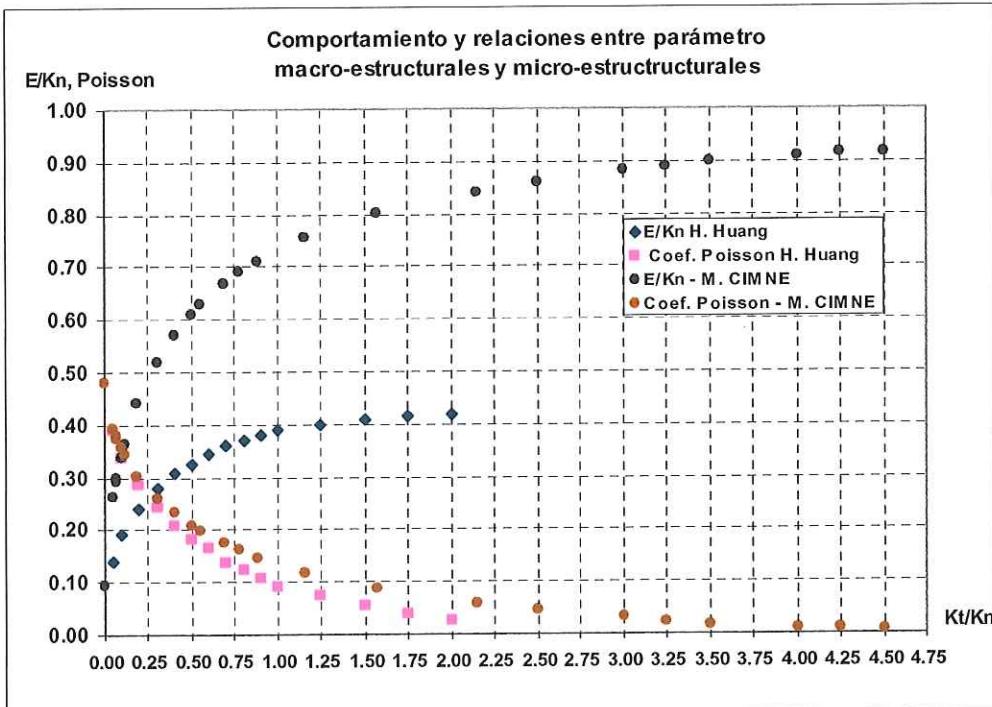


Figura 36: Comparación de los resultados del modelos desarrollado en CIMNE con otras formulaciones - modelo de contacto lineal desarrollado por Cundall e implementado computacionalmente por Itasca en el software PFC^{2D} y PFC^{3D}.

Conociendo estas diferencias entre los modelos de contacto es necesario encontrar las variables que los interrelacionan, ya que ambos modelos desde el punto de vista físico son equivalentes. Como el modelo formulado por Cundall [1] es un modelo de contacto lineal empleando en la interfase de contacto dos muelles en ambas direcciones se parte de:

$$K_n = \frac{k_n^{a,b}}{k_n + k_n}$$

$$K_t = \frac{k_t^{a,b}}{k_t + k_t}$$

si $k_n^{a,b} = k_n$ y $k_t^{a,b} = k_t$ entonces,

$$K_n = \frac{k_n^{a,b}}{k_n + k_n} = \frac{k_n^2}{2k_n} = \frac{k_n}{2}$$

$$K_t = \frac{k_t^{a,b}}{k_t + k_t} = \frac{k_t^2}{2k_t} = \frac{k_t}{2}$$

En función de esta deducción de equivalencia establecida entre ambos modelos de contacto lineal, se puede expresar que es necesario multiplicar por dos (2) los valores de K_n y K_t obtenidos por H. Huang [13], lo que da como resultado una equivalencia total entre ambos modelos (figura 36). Este resultado valida la investigación realizada y fundamenta las relaciones existentes entre los parámetros micro y macroestructurales.

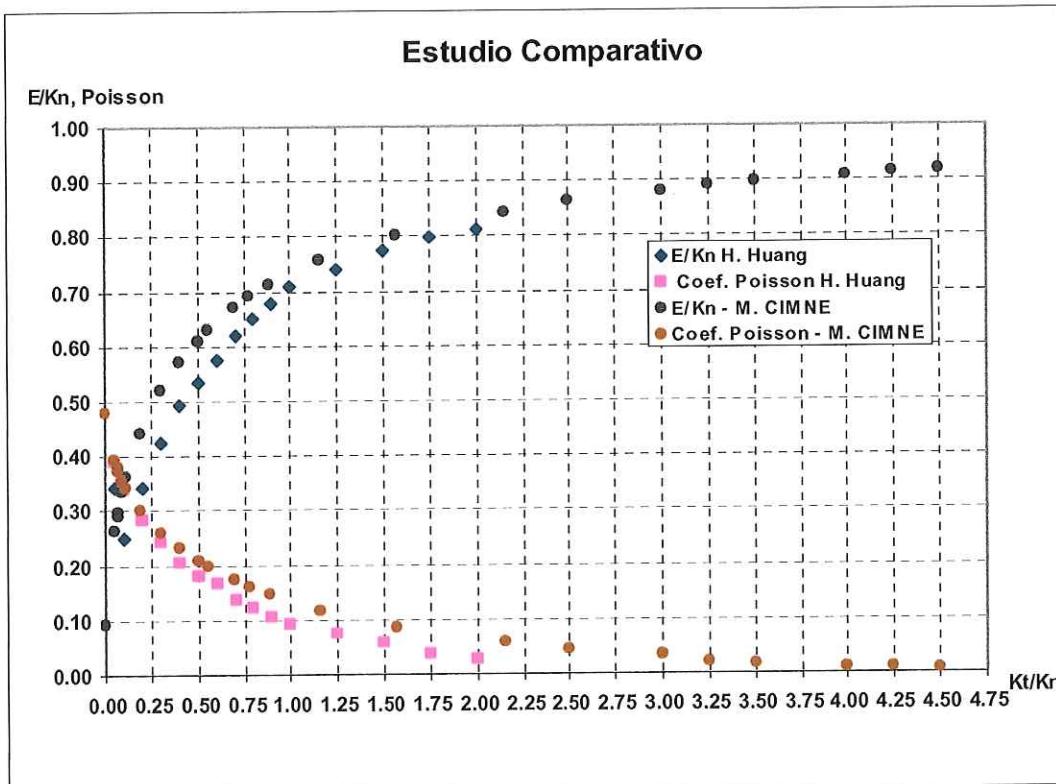


Figura 37: Comparación de los resultados del modelo desarrollado en CIMNE con otras formulaciones - modelo de contacto lineal desarrollado por Cundall e implementado computacionalmente por Itasca en el software PFC^{2D} y PFC^{3D}. Investigación desarrollada por H. Huang [13].

En la figura 37 se evidencia la correspondencia entre los dos modelos de contacto y se validan los resultados obtenidos en la investigación. En comparación con investigaciones precedentes [13] se han obtenido relaciones lineales para estimar los parámetros microestructurales elásticos asumiendo como hipótesis que ($K_{nc}=K_{nt}$). Adicionalmente en este estudio exploratorio inicial se dejan las bases para estimar las relaciones entre los parámetros macroestructurales y microestructurales donde la relación ($K_{nc}\neq K_{nt}$) sea diferente.

Desde el punto de vista físico existen materiales que presentan un comportamiento elástico muy similar a tracción y compresión. Las relaciones obtenidas en este epígrafe son validas para estimar las propiedades elásticas microestructurales de estos tipos de materiales siempre y cuando $\sigma_t \ll \sigma_c$.

4.6.3 - Comparación entre las relaciones elásticas en 2D y 3D. Estimación de propiedades micro para diferentes materiales asumiendo que $K_{nc}=K_{nt}$.

En este epígrafe se desarrolla un estudio comparativo de las relaciones obtenidas entre los macro parámetros en 3D y 2D con las variables microestructurales elásticas que caracterizan el modelo de contacto. Estos resultados no conllevan haber realizado ensayos virtuales en 3D sino simulaciones en 2D y a partir de las relaciones siguientes:

$$E = E' (1 - v')^2$$

$$v = \frac{v'}{1 + v'}$$

donde:

E' - Modulo de deformación en 2D

v' - Coeficiente de Poisson en 2D

E - Modulo de Deformación en 3D

v - Coeficiente de Poisson en 3D

Estas relaciones entre los parámetros macroscópicos en 2D y 3D permiten estimar los valores de las propiedades macroestructurales elásticas en 3D realizando las simulaciones numéricas de ensayos virtuales en 2D.

Los resultados del estudio comparativo entre la relaciones microestructurales con los parámetros macroestructurales se evidencia en las figuras 38, 39, 40 y 41. Como se puede observar, los resultados a pesar de presentar diferencias entre 2D y 3D, en el caso de la relación E/K_n no son tan marcadamente diferentes. Los valores de E/K_n (2D) son ligeramente superiores que los E/K_n (3D). Las relaciones entre los coeficientes de Poisson en 2D y 3D presentan una diferencia más marcada. De igual modo los valores de coeficiente de Poisson en 2D son superiores a los de 3D como es de esperar.

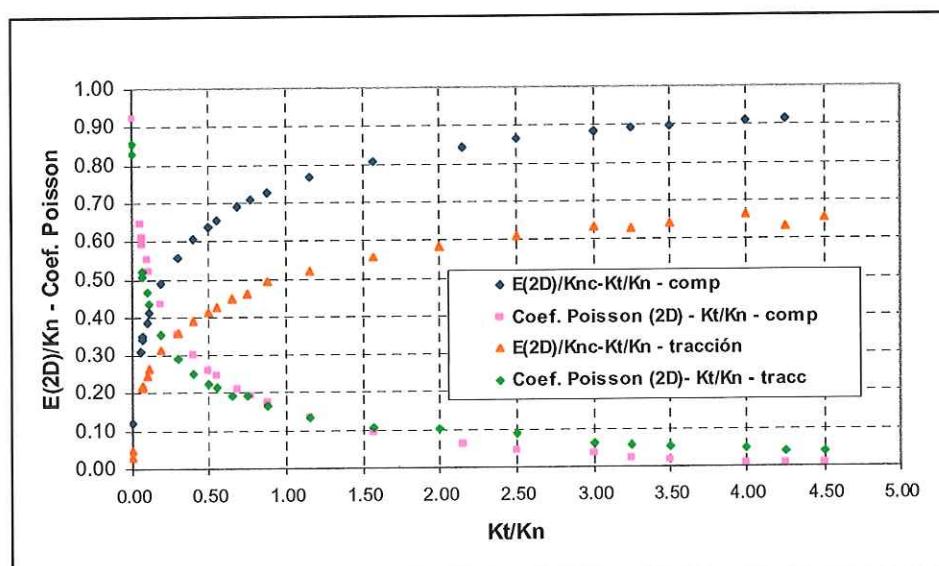


Figura 38: Relaciones entre parámetros elásticos macroestructurales en 2D con sus correspondientes microestructurales.

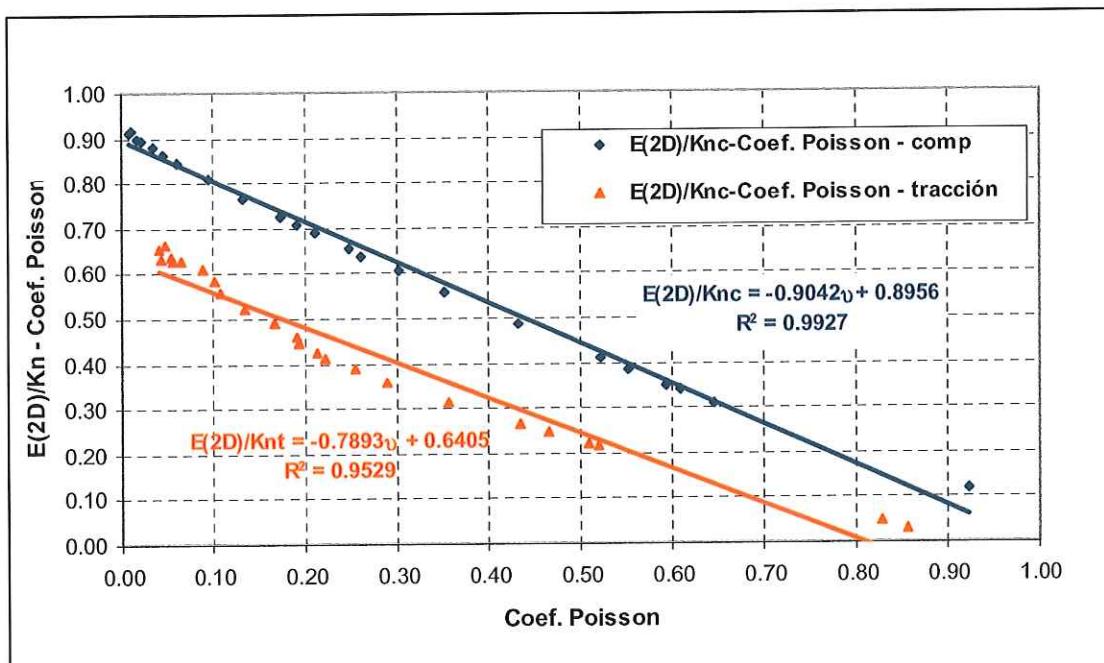


Figura 39: Relaciones entre parámetros elásticos macroestructurales en 2D con sus correspondientes microestructurales. Relación entre E/K_n con el coeficiente de Poisson.

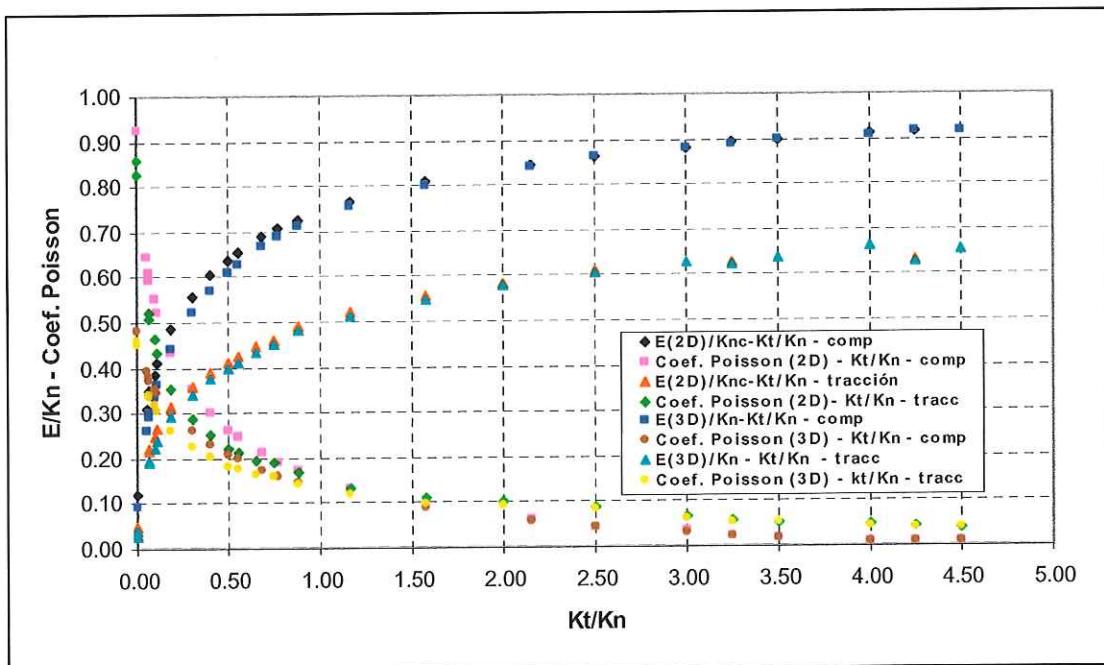


Figura 40: Estudio comparativo entre las relaciones de parámetros elásticos macroestructurales en 2D y 3D con sus correspondientes microestructurales. Relación E/K_{nc} (compresión y tracción) vs K_t/K_n y ν (compresión y tracción) vs K_t/K_n ($K_{nc}=K_{nt}$).

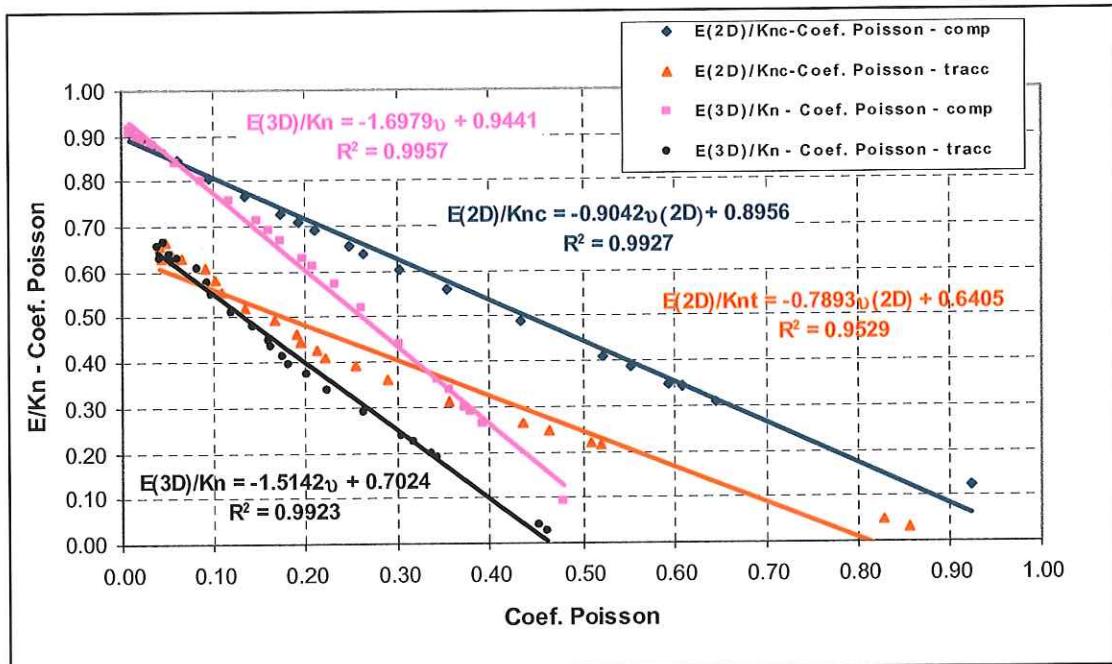


Figura 41: Estudio comparativo entre las relaciones de parámetros elásticos macroestructurales en 2D y 3D con sus correspondientes microestructurales. Relación E/K_{nc} (compresión y tracción) vs v (compresión y tracción).

K Gpa	E Gpa	E N/m ²	G Gpa	Poisson	Kn-comp N/m ²	Kt N/m ²	Kntracc N/m ²
71.28514056	71	7.100000000E+10	26.61169415	0.334	1.8838177929E+11	8.9133905810E+10	1.8838177929E+11
96.12403101	124	1.240000000E+11	48.24902724	0.285	2.6920208718E+11	3.5642967070E+10	2.6920208718E+11
100.37877879	106	1.060000000E+11	40.03021148	0.324	2.6904837084E+11	1.6068172765E+10	2.6904837084E+11
165.8653846	207	2.070000000E+11	80.10835913	0.292	4.6137428019E+11	5.3819110515E+10	4.6137428019E+11
57.67012687	100	1.000000000E+11	41.28619158	0.211	1.7033909233E+11	7.4041872017E+10	1.7033909233E+11
113.9846743	119	1.190000000E+11	44.87179487	0.326	3.0468773604E+11	1.7402981471E+10	3.0468773604E+11
10.78431373	11	1.100000000E+10	4.135338346	0.330	2.86660053811E+10	1.4916853168E+09	2.86660053811E+10
30.19607443	46.2	4.620000000E+10	18.55421687	0.245	8.7339794336E+10	2.3014481376E+10	8.7339794336E+10
169.8412698	214	2.140000000E+11	82.94573643	0.290	4.7337068685E+11	5.7365427027E+10	4.7337068685E+11
49.77777778	44.8	4.480000000E+10	16.59259259	0.350	1.2816295004E+11	4.0429579322E+09	1.2816295004E+11
285.8376511	331	3.310000000E+11	126.6258607	0.307	7.8245208190E+11	6.7648578827E+10	7.8245208190E+11
165.7407407	179	1.790000000E+11	67.8030303	0.320	4.4658695852E+10	2.9212565058E+10	4.4658695852E+11
118.9138577	127	1.270000000E+11	48.0332829	0.322	3.1957837798E+11	1.999075010E+10	3.1957837798E+11
165.0717703	207	2.070000000E+10	80.17041053	0.291	4.5962382344E+11	5.4646124398E+10	4.5962382344E+11
122.51656563	111	1.110000000E+11	41.14150533	0.349	3.16000190968E+11	1.0236917120E+10	3.16000190968E+11
162.3931624	190	1.900000000E+11	72.79693487	0.305	4.4554240684E+11	4.0142016294E+10	4.4554240684E+11
6.8966	12.000	1.200000000E+10	4.95668	0.21000	2.0381369390E+10	6.9824962093E+09	2.0381369390E+10
44.4444	48.000	4.800000000E+10	18.18182	0.32000	1.1975569838E+11	7.8333569989E+09	1.1975569838E+11
0.9269	2.500	2.500000000E+09	1.19048	0.05000	2.8998769760E+09	7.4092008200E+09	2.8998769760E+09
84.7222	61.000	6.100000000E+10	22.10145	0.38000	2.0496235266E+11	2.6422991931E+09	2.0496235266E+11
13.8889	30.000	3.000000000E+10	13.15789	0.14000	4.2350031480E+10	4.4232641281E+10	4.2350031480E+10
50.0000	90.000	9.000000000E+10	37.50000	0.20000	1.4854916978E+11	7.4976806523E+10	1.4854916978E+11
1.1111	2.800	2.800000000E+09	1.296930	0.08000	3.4529364758E+09	6.6951057490E+09	3.4529364758E+09
114.0351	130.000	1.300000000E+11	49.61832	0.31000	3.1107697241E+11	1.2562119885E+10	3.1107697241E+11
0.0214	0.041	4.100000000E+07	0.01737	0.18000	6.4059096860E+07	4.1855488555E+07	6.4059096860E+07
4.9275	6.800	6.800000000E+09	2.67717	0.27000	1.3984547075E+10	2.4365487385E+09	1.3984547075E+10
27.5556	62.000	6.200000000E+10	27.55556	0.12500	8.4467226376E+10	1.0408424478E+11	8.4467226376E+10
61.1111	110.000	1.100000000E+11	45.83333	0.20000	1.8156009639E+11	9.1638319084E+10	1.8156009639E+11
3.3333	9.600	9.600000000E+09	4.70588	0.02000	1.0509882574E+10	3.4764381250E+10	1.0509882574E+10
61.1111	110.000	1.100000000E+11	45.83333	0.20000	1.8156009639E+11	9.1638319084E+10	1.8156009639E+11
2.4306	7.000	7.000000000E+09	3.43137	0.02000	7.6634560435E+09	2.5349027995E+09	7.6634560435E+09
44.4444	80.000	8.000000000E+10	33.33333	0.20000	1.3204370647E+11	6.6646050243E+10	1.3204370647E+11
4.2735	10.000	1.000000000E+10	4.50450	0.11000	1.3164078389E+10	1.8976695052E+10	1.3164078389E+10
13.8889	25.000	2.500000000E+10	10.41667	0.20000	4.1263658271E+10	2.0626880710E+10	4.1263658271E+10
26.6667	60.000	6.000000000E+10	26.66667	0.12500	8.174277138E+10	1.007266849E+11	8.174277138E+10
55.5556	100.000	1.000000000E+11	41.66667	0.20000	1.6505463308E+11	8.3307562803E+10	1.6505463308E+11
8.9431	22.000	2.200000000E+10	10.09174	0.09000	2.7714196093E+10	4.8798829296E+09	2.7714196093E+10
84.3750	81.000	8.100000000E+10	30.22388	0.34000	2.2092395307E+11	9.0218255899E+09	2.2092395307E+11
1.7333	3.900	3.900000000E+09	1.73333	0.12500	5.3132610139E+09	6.5472347526E+09	5.3132610139E+09
61.6056	69.000	8.900000000E+10	35.31746	0.26000	1.7681955267E+11	3.6555013211E+10	1.7681955267E+11
10.2564	24.000	2.400000000E+10	10.81081	0.11000	3.1593788135E+10	4.5544068124E+10	3.1593788135E+10
46.1111	83.000	8.300000000E+10	34.58333	0.20000	1.3699534546E+11	6.9145277127E+10	1.3699534546E+11
37.9310	66.000	6.600000000E+10	27.27273	0.21000	1.1209753165E+11	4.9403729151E+10	1.1209753165E+11
4.1667	10.000	1.000000000E+10	4.54545	0.10000	1.2874486630E+10	2.0537216279E+10	1.2874486630E+10
11.1111	20.000	2.000000000E+10	8.33333	0.20000	3.3010926617E+10	1.6661512561E+10	3.3010926617E+10
3.2143	5.400	5.400000000E+09	2.21311	0.22000	9.4457446920E+09	3.6177622196E+09	9.4457446920E+09
30.7016	35.000	3.500000000E+10	13.35878	0.31000	8.3751492571E+10	6.8010920076E+09	8.3751492571E+10

Tabla 1: Estimación de propiedades microestructurales elásticas considerando que $K_{nc}=K_{nt}$

En la tabla 1 se reflejan algunas propiedades microestructurales determinadas para distintos valores de E y v , suponiendo que $K_{nc}=K_{nt}$. Estos valores reflejados en la tabla 1 son validos para materiales que presenten módulos de deformación elásticos a compresión y tracción iguales y que la relación σ_t/σ_c tienda a cero ($\sigma_t \ll \sigma_c$).

4.6.3 - Parámetros Plásticos.

Después de obtener las primeras relaciones macroestructurales y microestructurales en el dominio de la elasticidad es necesario realizar un estudio exploratorio inicial de las relaciones entre los parámetros de roturas. En el estudio adimensional realizado en este caso se llegó a las siguientes expresiones:

$$\sigma_c = \frac{R_n}{r} \cdot f_c \left(\frac{k_{nc} \cdot R}{R_n}, \frac{R_T}{R_n}, \frac{\delta}{R}, \mu \right)$$

$$\sigma_t = \frac{R_T}{r} \cdot f_t \left(\frac{k_{nc} \cdot R}{R_n}, \frac{R_T}{R_n}, \frac{\delta}{R}, \mu \right)$$

Realizando un análisis físico de las propiedades elásticas macroestructurales y sus correspondientes parámetros de rotura se puede expresar que existen relaciones muy marcadas entre ellos. Esta idea tiene un sentido lógico muy evidente, ya que en función de la magnitud del módulo de deformación elástico y el coeficiente de Poisson del material así serán los valores y magnitud de orden de las tensiones de rotura a compresión y tracción respectivamente.

Basado en el análisis físico de los parámetros macro (elásticos y plásticos) y su interrelación, se puede expresar y de hecho se demuestra que, de forma análoga, esa misma interrelación existe a nivel microestructural. Un parámetro físico que evidencia esta relación es la velocidad de aplicación de la carga, la cual influye notablemente en los parámetros elásticos y plásticos. En función del valor de la rigidez de material (en función del modulo de deformación y el coeficiente de Poisson dinámico – ver epígrafe 4.3) se decidirá que velocidad de aplicación de carga se debe emplear para propiciar una acción cuasiestática. Cuando se aplican valores de velocidades de cargas diferentes tomando como base los mismo parámetros micros elásticos y plásticos los resultados macroestructurales de tensión a compresión y tracción serán diferentes. Este aspecto y otros con un sentido físico marcado evidencia que los parámetros microestructurales elásticos guardan una estrecha relación con los parámetros micro de rotura y con sus correspondientes macro (σ_c y σ_T).

El análisis de las relaciones entre los parámetros de rotura macroestructurales y microestructurales se realiza a través de la realización de ensayos virtuales de compresión y tracción. En este caso las variables de control son los parámetros microestructurales (R_n y R_T) y las variables de respuesta son la tensión de rotura a compresión (σ_c) y tracción (σ_T).

Basado en la influencia de los parámetros micro elásticos en sus correspondientes parámetros de rotura macro y micro, se ha investigado la influencia de cada parámetro independientemente. Tomando como base el estudio adimensional existen dos relaciones adimensionales ($K_{nc}R/R_n$, $K_{nt}R/R_n$, y R_T/R_n) que son imprescindibles estudiar.

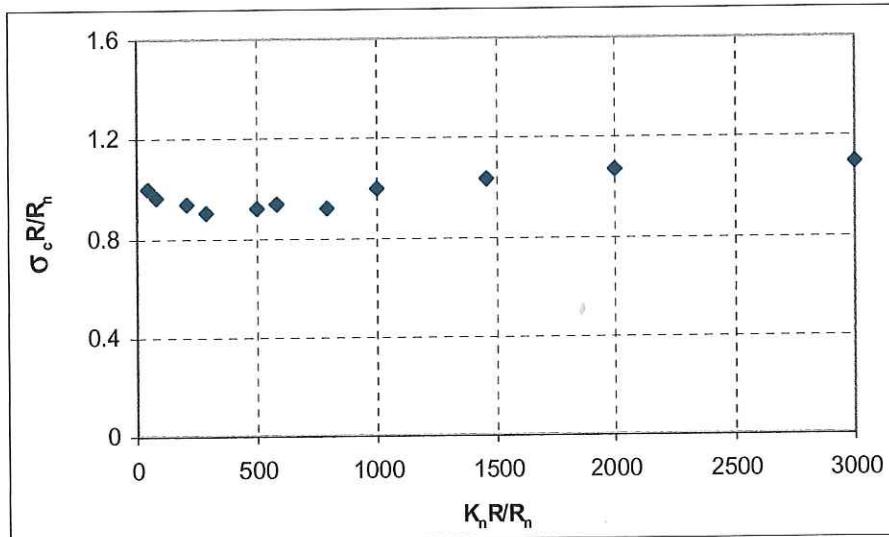


Figura 42: Comportamiento de la resistencia a compresión en función de $K_{nc}R/R_n$ ($K_T/K_{nc}=1$, $R_T/R_n=10$ y $\mu=0.839$).

En un primer estudio se busca la influencia de la rigidez normal (tracción y compresión) sobre el comportamiento macroestructural de la resistencia a compresión y tracción. En la figura 42 se ilustra el comportamiento de $\sigma_c R/R_n$ vs $K_{nc} R/R_n$. Como se puede observar la variación de $\sigma_c R/R_n$ tiende a un comportamiento variable y tiende a estabilizarse en un valor próximo a 0.9476 (Figura 43) cuando el valor de K_n disminuye.

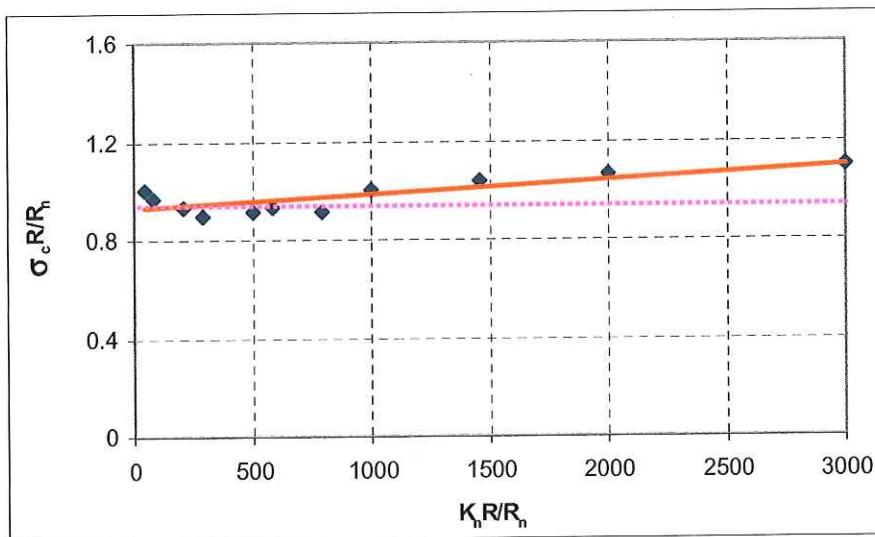


Figura 43: Ajuste de una función que relaciona $\sigma_c R/R_n$ vs $K_{nc}R/R_n$ vs ($K_T/K_{nc}=1$, $R_T/R_n=10$ y $\mu=0.839$).

En las figura 44 y 45 se ilustran los resultados obtenidos en los ensayos virtuales de tracción. En este caso se realizó un estudio variando el valor de K_{nt} y manteniendo constante las relaciones entre los parámetros de rotura microestructurales, la relación K_T/K_{nt} y el coeficiente de fricción de Coulomb. El comportamiento de $\sigma_T R/R_n$ con la

variación de $K_{nt} R/R_n$ tiene un comportamiento variable pero tiende a un valor de 0.25 cuando el valor de K_{nt} tiende a disminuir.

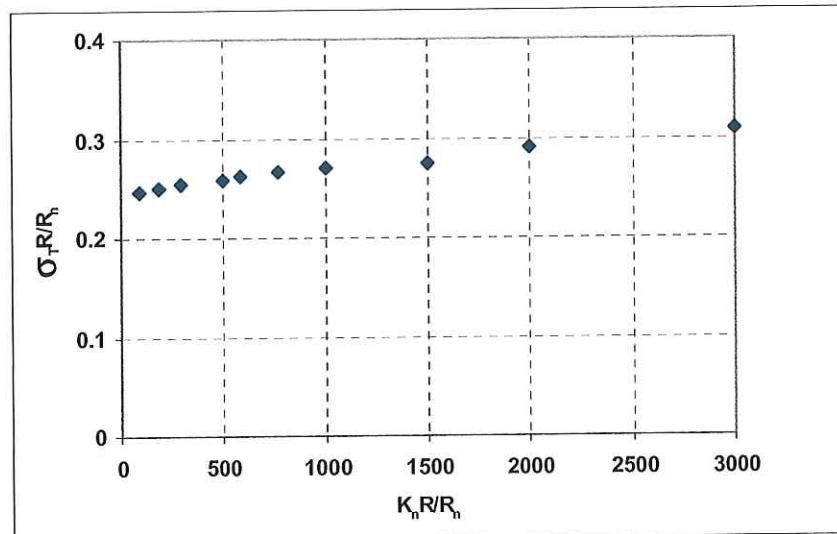


Figura 44: Comportamiento de la resistencia a tracción en función de $K_{nt}R/R_n$ ($K_T/K_{nt}=1$, $R_T/R_n=10$ y $\mu=0.839$).

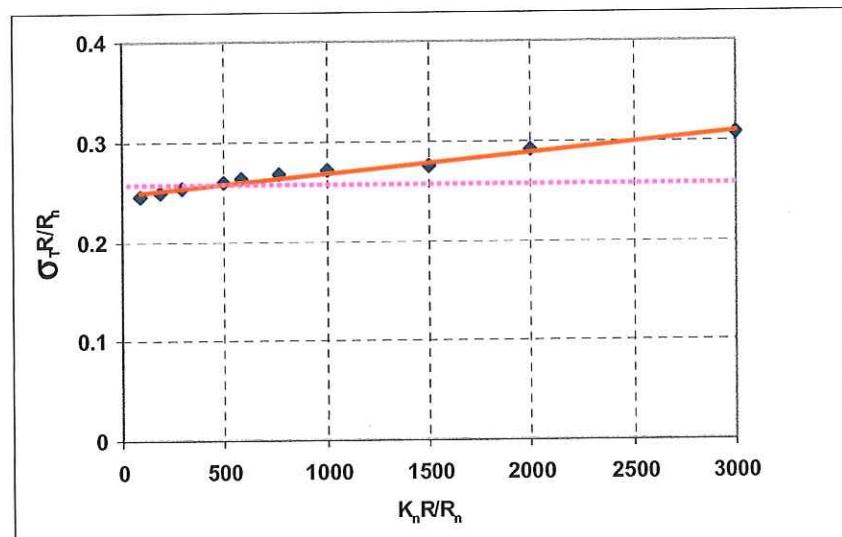


Figura 45: Ajuste de una función que relaciona $\sigma_{tr} R/R_n$ vs $K_{nt}R/R_n$ vs ($K_T/K_{nt}=1$, $R_T/R_n=10$ y $\mu=0.839$).

Conociendo los resultados obtenidos en la simulación de los ensayos de compresión y tracción respectivamente se pueden combinar ambos para buscar nuevas relaciones entre los parámetros macro y micro. En la figura 46 se ilustra el comportamiento entre la relación σ_c/σ_T en función de la relación $K_n R/R_n$. En esta grafica (figura 47) se puede observar que la tendencia media de este comportamiento es de un valor igual a 3.6. Los tres primeros valores de la graficas (figura 46 y 47) son obtenidos con valores de K_n

inferiores a los ordenes de magnitud obtenidos para el caso de materiales reales, por lo cual son valores que no tienen sentido físico.

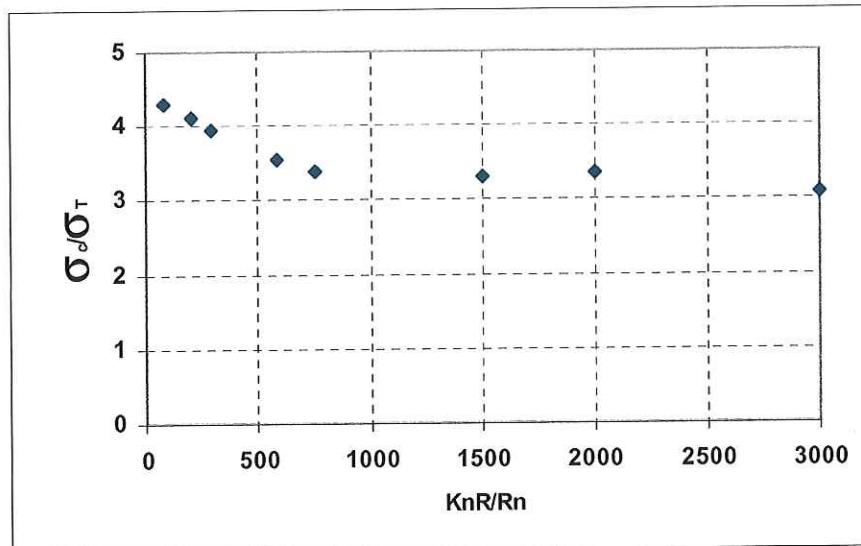


Figura 46: Comportamiento de la relación σ_c/σ_T en función de K_nR/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $R_T/R_n=10$ y $\mu=0.839$).

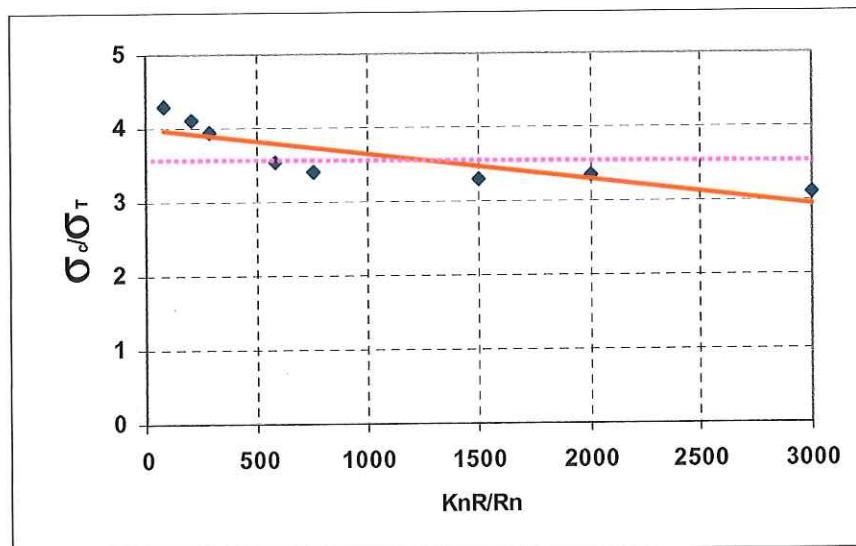


Figura 47: Ajuste de una función que relaciona y tendencia del comportamiento σ_c/σ_T vs K_nR/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $R_T/R_n=10$ y $\mu=0.839$).

Después de haber estudiado de modo puntual el comportamiento de algunas de las variables ($K_{nc}R/R_n$ y $K_{nt}R/R_n$) del análisis adimensional es necesario proceder a un estudio exploratorio inicial de la segunda variable, en este caso la relación entre los parámetros micros de rotura (R_T/R_n). Aquí se estudió el comportamiento de la resistencia a compresión y tracción macroestructural para diferentes relaciones de (R_T/R_n). Los resultados de este estudio se reflejan en la figuras 48, 49, 50, 51, 52 y 53.

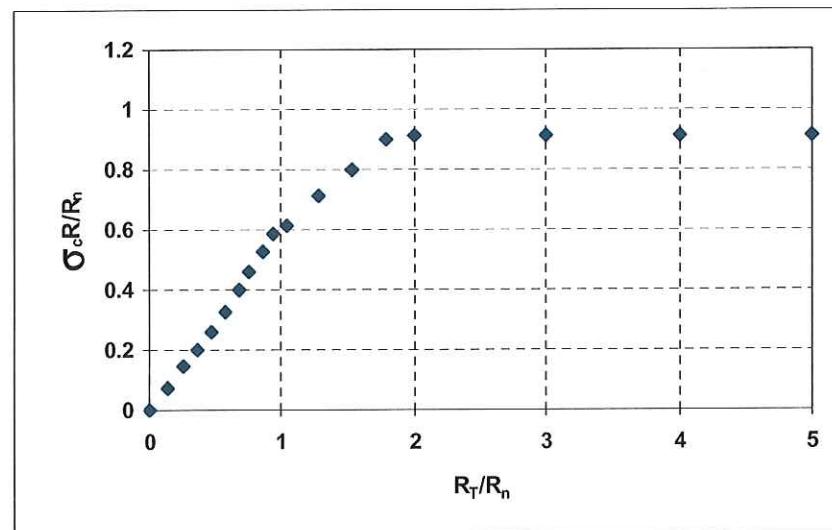


Figura 48: Comportamiento de la relación $\sigma_c R/R_n$ en función de R_T/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{nc}=K_{nt}$, $K_n R/R_n=1000$ y $\mu=0.839$).

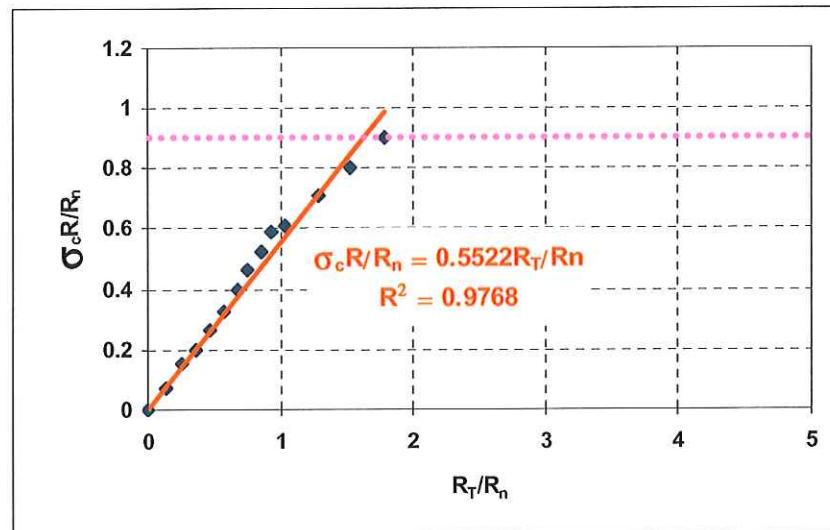


Figura 49: Ajuste de una función que relación $\sigma_c R/R_n$ vs R_T/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{nc}=K_{nt}$, $K_n R/R_n=1000$ y $\mu=0.839$).

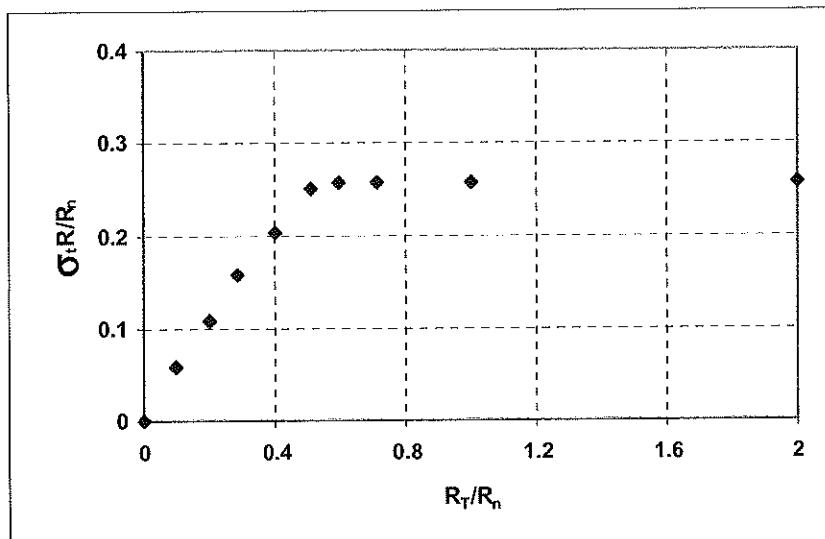


Figura 50: Comportamiento de la relación $\sigma_t R/R_n$ en función de R_T/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{ne}=K_{nt}$, $K_n R/R_n=1000$ y $\mu=0.839$).

En la figura 48 se ilustra el comportamiento de la $\sigma_c R/R_n$ función de R_T/R_n donde se observa que el mismo presenta un comportamiento lineal entre estas dos variables hasta que alcanza un valor límite donde la recta cambia de pendiente y permanece prácticamente constante. El valor de $\sigma_c R/R_n$ se estabiliza alrededor de 0.9, valor para el cual, a pesar de aumentar la relación R_T/R_n , el parámetro macro de resistencia a compresión (σ_c) no aumenta. Estos resultados evidencian la correspondencia física entre los parámetros macro y micro (elásticos y plásticos) y entre los valores de las rigideces elásticas y los parámetros de roturas plásticos. En la figura 49 se subdivide el dominio en dos, uno en una recta con pendiente y otra prácticamente constante. Se observa (figura 49) un ajuste de regresión de los datos que siguen un comportamiento lineal. Un análisis de los errores de pronósticos y el valor de coeficiente de correlación múltiple ($R^2=0.97$) indican un comportamiento adecuado del modelo. El dominio que presenta un comportamiento prácticamente constante implica, desde el punto de vista físico, que para los valores de rigideces elásticas microestructurales no puede existir valores de parámetros de roturas superiores.

En la figura 50 se representan los valores del estudio realizado con los ensayos virtuales de tracción. Se ilustran las relaciones existentes $\sigma_t R/R_n$ y la variación de R_T/R_n . El comportamiento, similarmente al caso de compresión, tiene una tendencia lineal que se subdivide en dos dominios, ya el para cierto valor ($\sigma_t R/R_n$), a pesar de que la relación R_T/R_n aumenta, dicho valor permanece constante. El valor para el cual se estabiliza la variable $\sigma_t R/R_n$ está en el orden de 0.25-0.26 (Figura 51). Este comportamiento y estabilización de la relación $\sigma_t R/R_n$ vs R_T/R_n análogamente al caso de compresión presenta un sentido físico muy marcado. Desde el punto de vista físico este resultado demuestra las relaciones existentes entre los parámetros elásticos y los plásticos, lo que implica una correspondencia con el rango y orden de comportamiento de dichas variables. En la figura 51 se refleja el ajuste de regresión realizado entre las dos variables estudiadas en este caso. El comportamiento del coeficiente de correlación múltiple ($R^2= 0.96$) y un análisis del comportamiento de los errores de pronostico

indican una buena correspondencia entre las variables y además un buen comportamiento del ajuste.

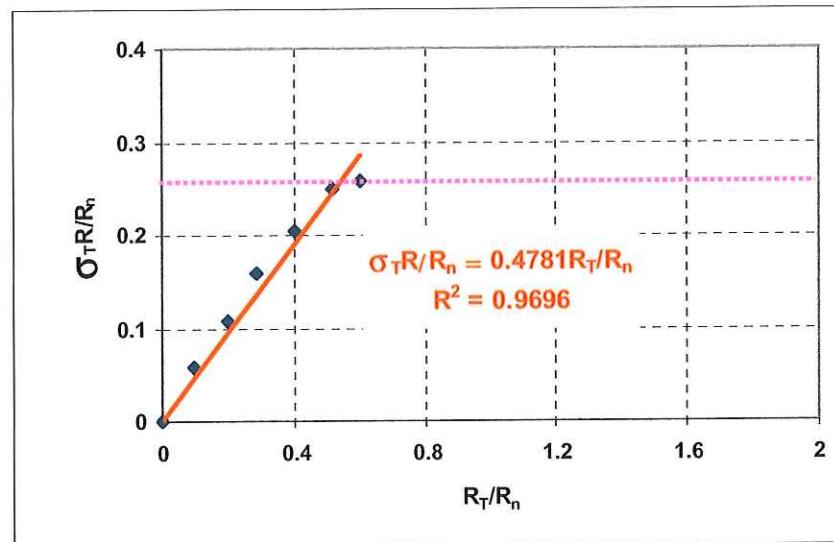


Figura 51: Ajuste de una función que relación $\sigma_c R/R_n$ vs R_T/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{nc}=K_{nt}$, $K_n R/R_n=1000$ y $\mu=0.839$).

La figura 52 muestra Un estudio combinado de los resultados de los ensayos virtual de compresión y tracción. En la misma (figura 52) se evidencia que existe una cota inferior y otra superior para la cual los valores de σ_c/σ_t permanecen constantes a pesar de la variación que existe entre R_T/R_n . Este resultado (Figura 52) guarda estrecha relación con las implicaciones físicas ya enunciadas en el análisis de los resultados de compresión y tracción de forma aislada.

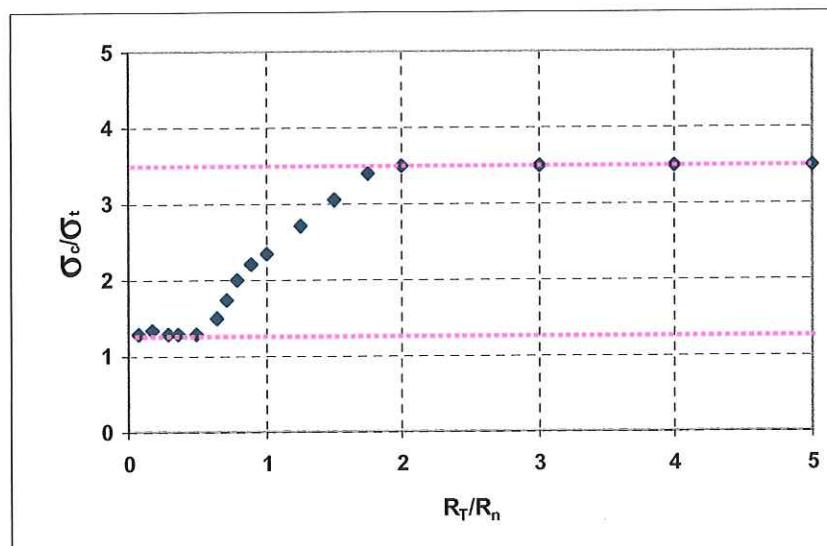


Figura 52 : Comportamiento de $\sigma_c R/R_n$ en función del ángulo de fricción interna que caracteriza cada contacto entre esferas ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{nc}=K_{nt}$, $K_n R/R_n=1000$).

Otras de las variables que se toman en cuenta en el estudio adimensional es la influencia del coeficiente de fricción de Coulomb, la cual guarda una estrecha relación con el ángulo de fricción interna del material ($\phi = \arctan(\mu)$). Los resultados de este primer estudio exploratorio se reflejan en la figura 53.

En las figuras 54 y 55 se observa un estudio puntual de la variación de σ_c/σ_t en función de R_T/R_n . En este exploración inicial se han mantenido constantes los valores de $K_{nc}=K_{nt}=K_T$ y se ha fijando el valor de R_n , lo que implica ir variando solamente el valor de R_T .

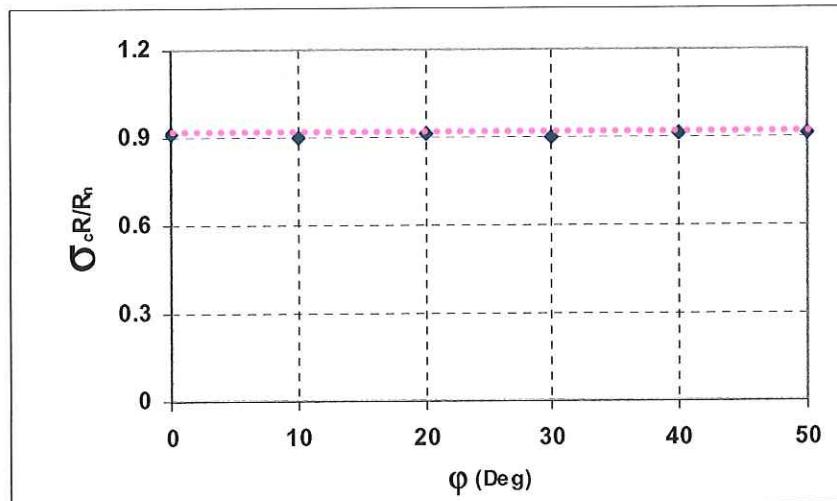


Figura 53 : Comportamiento de la relación σ_c/σ_t en función de R_T/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{nc}=K_{nt}$, $K_n R/R_n=1000$ y $\mu=0.839$).

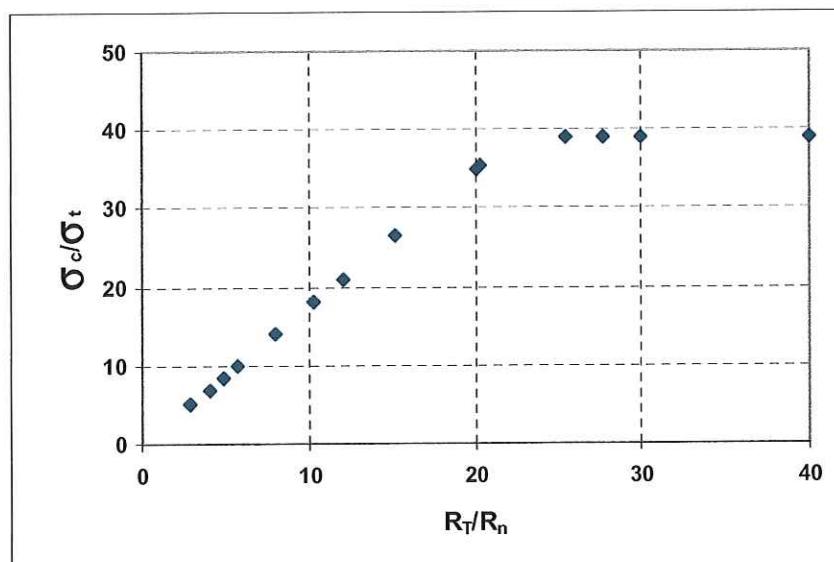


Figura 54 : Comportamiento de la relación σ_c/σ_t en función de R_T/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{nc}=K_{nt}$, $K_n=80E+0.9$ N/m $R_n=0.1$ MN/m).

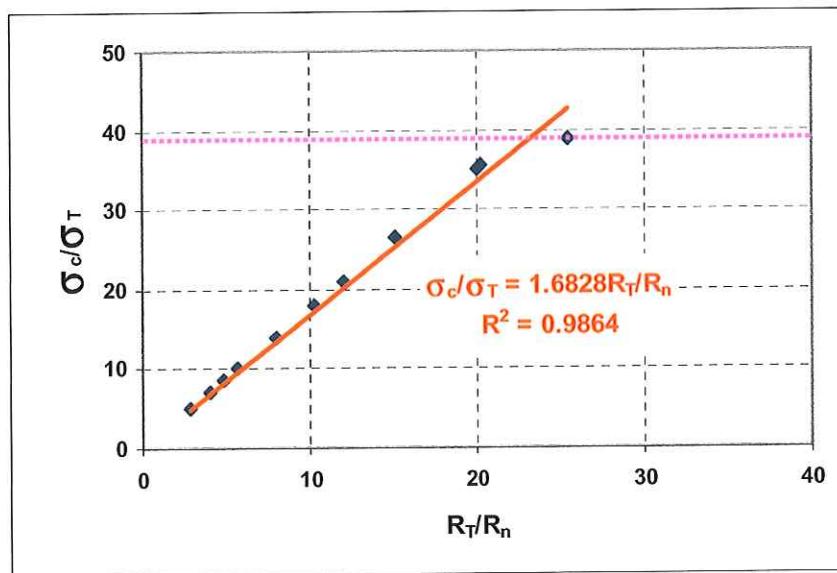


Figura 55 : Ajuste de relación σ_c/σ_t en función de R_T/R_n ($K_T/K_{nt}=1$, $K_{nc}=K_{nt}$, $K_n=80E+0.9$ N/m).

En la figura 54 se observa una dependencia lineal entre los parámetros macro y microestructurales de rotura. El dominio de comportamiento de esta variable (σ_c/σ_t vs R_T/R_n) presenta dos fases que se distinguen por el cambio de pendiente de las rectas. Como estas relaciones entre los parámetros macro y micro están realizadas para determinados valores de K_{nc}, K_{nt}, K_T , existe un valor para el cual a pesar de aumentar la relación R_T/R_n la relación σ_c/σ_t se mantiene constante. Este aspecto está propiciado por razones de índole física ya explicadas con anterioridad, las cuales están vinculadas con las relaciones existentes entre los parámetros elásticos y plástico a nivel micro y macro. Se ha realizado un ajuste de un modelo lineal (figura 55), evidenciándose que el coeficiente de correlación $R^2=0.98$ y el comportamiento de los errores de pronósticos son adecuados.

Otro de los estudios exploratorios realizados fue suponer que $K_{nc} \neq K_{nt}$ y estudiar los parámetros microestructurales de rotura. En este caso se fijaron dos conjuntos de parámetros microestructurales elásticos y se mantuvo siempre constante la relación R_T/R_n . Las variables de control R_T y R_n (manteniendo constante la relación $R_T/R_n=6.06$ o $R_T/R_n=10.2$) se fueron cambiándole de orden de magnitud. Los datos empleados en este estudio se reflejan en la tabla 2 y 3. Al igual que en los estudios realizados con anterioridad, existe un punto en el cual a pesar de aumentar los parámetros microestructurales de rotura, los parámetros macroestructurales de rotura permanecen estables, es decir no cambian de valor.

No.	COULOMB	$E[N/m^2]$	Poisson	$\sigma_c [N/m^2]$	K_{nc} [N/m^2]	E/K_{nc}	K_T [N/m^2]	K_{nt} [N/m^2]	R_t/R_n	R_n [N/m]	R_t [N/m]	$\sigma_c R/R_n$
		comp	Comp									
1.00	0.90	3863679872.73	0.14	279491900.00	5279945609.33	0.73	4937115836.94	4112747787.29	6.06	4.1702786507E+09	25281904420.98	0.00008
2.00	0.90	3863679872.73	0.14	279491900.00	5279945609.33	0.73	4937115836.94	4112747787.29	6.06	4.1702786507E+08	2528190442.10	0.00084
3.00	0.90	3863679872.73	0.14	279491900.00	5279945609.33	0.73	4937115836.94	4112747787.29	6.06	4.1702786507E+07	252819044.21	0.00838
4.00	0.90	3863679872.73	0.14	279491900.00	5279945609.33	0.73	4937115836.94	4112747787.29	6.06	4.1702786507E+06	25281904.42	0.08377
5.00	0.90	3835084397.73	0.14	262452900.00	5279945609.33	0.73	4937115836.94	4112747787.29	6.06	4.1702786507E+05	2528190.44	0.78668
6.00	0.90	3621505000.87	0.16	18868120.00	5279945609.33	0.69	4937115836.94	4112747787.29	6.06	4.1702786507E+04	252819.04	0.56555
7.00	0.90	2104674097.58	0.17	3064474.00	5279945609.33	0.40	4937115836.94	4112747787.29	6.06	4.1702786507E+03	25281.90	0.91855

Tabla 2: Resultados del estudio exploratorio de parámetros de rotura de compresión y tracción asumiendo $K_{nc} \neq K_{nt}$ y variando el orden de magnitud de los parámetros de rotura R_T y R_n ($R_T/R_n = 6.06$ y $K_T/K_{nc} = 0.935$)

No.	COULOMB	$E[N/m^2]$	Poisson	$\sigma_c [N/m^2]$	K_{nc} [N/m^2]	E/K_{nc}	K_T [N/m^2]	K_{nt} [N/m^2]	R_t/R_n	R_n [N/m]	R_t [N/m]	$\sigma_c R/R_n$
		comp	Comp									
1.00	0.70	50649287028.13	0.118	3637646000.00	66577620821.84	0.76	7.7751157E+10	5.1859807E+10	10.24	2.3168214726E+11	2.3715769E+09	0.00002
2.00	0.70	50649287028.13	0.118	3637646000.00	66577620821.84	0.76	7.7751157E+10	5.1859807E+10	10.24	2.3168214726E+10	2.3715769E+09	0.00020
3.00	0.70	50649287028.13	0.118	3637646000.00	66577620821.84	0.76	7.7751157E+10	5.1859807E+10	10.24	2.3168214726E+09	2.3715769E+09	0.00196
4.00	0.70	50649287028.13	0.118	3637646000.00	66577620821.84	0.76	7.7751157E+10	5.1859807E+10	10.24	2.3168214726E+08	2.3715769E+09	0.01963
5.00	0.70	50649287028.13	0.118	3637646000.00	66577620821.84	0.76	7.7751157E+10	5.1859807E+10	10.24	2.3168214726E+07	2.3715769E+08	0.19626
6.00	0.70	46084945946.02	0.117	1537241000.00	66577620821.84	0.69	7.7751157E+10	5.1859807E+10	10.24	2.3168214726E+06	2.3715769E+07	0.82939
7.00	0.70	37754270560.16	0.136	133631500.00	66577620821.84	0.57	7.7751157E+10	5.1859807E+10	10.24	2.3168214726E+05	2.3715769E+06	0.72999

Tabla 3: Resultados del estudio exploratorio de parámetros de rotura de compresión y tracción, suponiendo $K_{nc} \neq K_{nt}$ y variando el orden de magnitud de los parámetros de rotura R_T y R_n ($R_T/R_n = 10.24$ y $K_T/K_{nc} = 1.17$)

4.6.4 – Deducciones y demostraciones de las relaciones entre los parámetros macroscópicos y microscópicos.

Un análisis de contrastes de las figuras 42 y 48 donde se ilustra el comportamiento de $\sigma_c R / R_n$ vs $K_{nc} R / R_n$ y $\sigma_c R / R_n$ vs R_T / R_n , con los resultados obtenidos en el estudio de los parámetros elásticos (figura 23), permite enunciar como hipótesis que existe cierta relación física entre estos dos comportamiento. En ambos casos (figuras 23, 42 y 48) se puede apreciar que los valores de $\sigma_c R / R_n$ y de E / K_{nc} tiende a un entorno cercano a 0.9-0.95. Como se conoce que desde un punto de vista físico existen relaciones entre los parámetros de rotura y los parámetros elásticos, ya que en función de la magnitud de rigidez de los mismos, así será el orden de magnitud de los parámetros de rotura, se puede expresar que la hipótesis tiene cierto nivel de lógica. De forma análoga, si se observan los resultados de la figura 32 y se comparan con los del análisis de los parámetros de rotura (Figura 47 y 51), se puede observar que los valores tienden a un valor próximo a 0.25-0.26 que es muy similar en magnitud al que presenta la diferencia $\left(\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} \right)$ (figura 32). Si estos resultados o magnitudes se vinculan como en la

figura 45 y 50 (σ_c / σ_T) se observa que existe una tendencia al valor 3.5-3.6, ahora bien si se analiza la tendencia del comportamiento elástico a compresión y tracción (figura 32)

$$\text{se aprecia que } \frac{\frac{E_{comp}}{K_{nc}}}{\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}}} \approx 3.5 - 3.6$$

Este análisis permite enunciar un grupo de hipótesis que son necesarias demostrar desde el punto de vista analítico y después mediante el empleo de simulaciones numéricas. Estas hipótesis son:

- $\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \frac{\sigma_c R}{R_n}$
- $\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} = \frac{\sigma_t R}{R_n}$
- $\frac{\frac{E_{comp}}{K_{nc}}}{\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{comp}}{K_{nt}}} = \frac{\sigma_c}{\sigma_t}$
- Deducción analítica que relaciona R_{n-2D} con R_{n-3D}

➤ *Demuestra analíticamente de* $\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \frac{\sigma_c R}{R_n}$

Desde el punto de vista microestructural la relación constitutiva para el caso de la componente normal es:

$$F_{nc} = K_{nc} \Delta$$

donde:

F_{nc} - Fuerza de compresión normal.

K_{nc} - Rígidez a compresión en al dirección normal

Δ - Desplazamiento.

El valor de F_{nc} máximo queda delimitado por R_n , entonces:

$$F_{nc-max} = R_n = K_{nc} \Delta_{max}$$

Desde el punto de vista macroscópico se puede expresar que:

$$\sigma_c = E_{comp} \epsilon$$

pero

$$\epsilon = \frac{\Delta_{max}}{L}$$

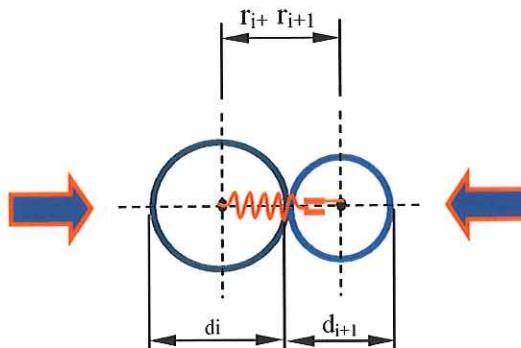


Figura 56: Contacto microestructural entre dos esferas sometidas a compresión.

En el caso del contacto entre dos elementos esféricos (figura 56), $L=R$, entonces:

$$\epsilon = \frac{\Delta_{max}}{L} = \frac{\Delta_{max}}{R}$$

donde:

R - radio

dividiendo $\frac{\sigma_c}{F_{nc-max}}$ se obtiene:

$$\frac{\sigma_c}{F_{nc-max}} = \frac{\sigma_c}{R_n} = \frac{E_{comp} \epsilon}{K_{nc} \Delta_{max}} = \frac{E_{comp} \frac{\Delta_{max}}{R}}{K_{nc} \Delta_{max}}$$

entonces:

$$\frac{\sigma_c R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}}$$

Esta relación tendrá más veracidad desde el punto de vista físico mientras más frágil sea el comportamiento del material. En el caso de materiales dúctiles, es mejor emplear el modelo de contacto viscoso donde se introduce una variable más en el estudio, es decir, el efecto de la viscosidad (microscópicamente). La introducción en el contacto de un nuevo elemento (pistón) genera o describe el efecto de fluencia que se manifiesta microscópicamente en diversos materiales.

➤ *Demostración analítica de* $\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} = \frac{\sigma_t R}{R_n}$

Desde el punto de vista físico la relación entre la resistencia a compresión y tracción macroscópicamente se puede expresar por:

$$\sigma_t = (1-a)\sigma_c$$

donde

a – es un escalar $0 < a \leq 1$.

Como hay que demostrar que:

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}}$$

Sustituyendo σ_t en función de σ_c se obtiene:

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{(1-a)\sigma_c R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}}$$

lo que implica que:

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{(1-a)\sigma_c R}{R_n} = \frac{\sigma_c R}{R_n} - a \frac{\sigma_c R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - a \frac{E_{comp}}{K_{nc}}$$

Como $\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \frac{\sigma_c R}{R_n}$, entonces:

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - a \frac{\sigma_c R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - a \frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}}$$

Estableciendo que:

$$K_{nc} = c K_{nt}$$

$$E_{comp} = b E_{tracc}$$

y asumiendo que:

$$a = \frac{c}{b}$$

se deduce que:

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - a \frac{b E_{tracc}}{c K_{nt}} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}}$$

lo que implica que:

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}}$$

De esta forma queda demostrada la segunda hipótesis. Colateralmente se puede establecer una expresión que defina físicamente la relación entre el parámetro K_{nc} y K_{nt} con los parámetros macro en función de la formulación analítica establecida.

Como se parte de:

$$K_{nc} = c K_{nt}$$

$$E_{comp} = b E_{tracc}$$

entonces:

$$c = \frac{K_{nc}}{K_{nt}}$$

$$b = \frac{E_{comp}}{E_{tracc}}$$

Desde el punto de vista físico se puede establecer que la relación tensión de rotura a compresión y tracción es:

$$\frac{\sigma_t}{\sigma_c} = (1 - a)$$

Transformando y sustituyendo a por sus correspondientes relaciones con c y b , se obtiene:

$$\frac{\sigma_t}{\sigma_c} + a = \frac{\sigma_t}{\sigma_c} + \frac{c}{b} = 1$$

sustituyendo b y c por sus correspondientes relaciones con los parámetros mecánicos macro y micro respectivamente se obtiene:

$$\frac{\sigma_t}{\sigma_c} + \frac{\frac{K_{nc}}{K_{nt}}}{\frac{E_{comp}}{E_{tracc}}} = 1$$

Despejando la relación se obtiene:

$$\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = \left(1 - \frac{\sigma_t}{\sigma_c}\right) \frac{E_{comp}}{E_{tracc}}$$

De esta forma queda demostrado la relación física que existe entre los parámetro macro y la relación $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$.

➤ *Demostración analítica de*
$$\frac{\frac{E_{comp}}{K_{nc}}}{\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{comp}}{K_{nt}}} = \frac{\sigma_c}{\sigma_t}$$

Esta demostración es trivial ya que ha quedado demostrado con las deducciones anteriores como:

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \frac{\sigma_c R}{R_n}$$

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{comp}}{K_{nt}} = \frac{\sigma_t R}{R_n}$$

Entonces es evidente que:

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_t} = \frac{\frac{E_{comp}}{K_{nc}}}{\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{comp}}{K_{nt}}}$$

➤ *Deducción analítica de R_{n-2D} y R_{n-3D} cuando $v \rightarrow 0$.*

En este caso se realizan dos deducciones analíticas que relacionan R_{n-2D} y R_{n-3D} una en función de la resistencia a compresión y otra a través de la resistencia a tracción.

Además se determina una relación entre la resistencia a compresión y tracción $\left(\frac{\sigma_c}{\sigma_t}\right)$ en función de los parámetros micromecánicos.

Tracción.

Conociendo que existen relaciones entre los parámetros de rotura macroestructurales de tracción con los microestructurales que describen el fallo se puede encontrar una expresión que relacione R_{n-2D} con R_{n-3D} . Conociendo que:

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} = \frac{\sigma_t R}{R_n}$$

Como las ecuaciones que relaciona el modulo de deformación y coeficiente de Poisson en 2D y 3 D son:

$$E' = \frac{E}{2};$$

$$1-v$$

$$v' = \frac{v}{1-v}$$

donde:

E' - Modulo de deformación en 2D

v' - Coeficiente de Poissson en 2D

E - Modulo de Deformación en 3D

v - Coeficiente de Poisson en 3D

Sustituyendo las expresiones anteriores se puede expresar la ecuación de la forma:

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} = \frac{E'_{comp} (1-v_{comp}^2)}{K_{nc}} - \frac{E'_{tracc} (1-v_{tracc}^2)}{K_{nt}}$$

$$\frac{\sigma_t R}{R_n} = \frac{E'_{comp} (1-v_{comp}^2)}{K_{nc}} - \frac{E'_{tracc} (1-v_{tracc}^2)}{K_{nt}}$$

$$R_{n-2D} = \frac{\sigma_t R}{\frac{E'_{comp} \left[1 - \left(\frac{v'_{comp}}{1+v'_{comp}} \right)^2 \right]}{K_{nc}} - \frac{E'_{tracc} \left[1 - \left(\frac{v'_{tracc}}{1+v'_{tracc}} \right)^2 \right]}{K_{nt}}}$$

que simplificando términos se llega a:

$$R_{n-2D} = \frac{K_{nc} K_{nt} (1+v'_{tracc})^2 (1+v'_{tracc})^2 \sigma_t R}{E'_{comp} K_{nt} (1+2v'_{comp})(1+v'_{tracc})^2 - E'_{tracc} K_{nc} (1+2v'_{tracc})(1+v'_{tracc})^2}$$

o en función de E' y v

$$R_{n-2D} = \frac{\sigma_t R K_{nc} K_{nt}}{K_{nc} E'_{tracc} (v'_{tracc} - 1) - K_{nt} E'_{comp} (v'_{comp} - 1)}$$

que en el caso de 3D se expresa por:

$$R_{n-3D} = \frac{\sigma_t R}{\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}}}$$

y trasformando la expresión adecuadamente se llega a:

$$R_{n-3D} = \frac{\sigma_t R K_{nc} K_{nt}}{E_{comp} K_{nt} - E_{tracc} K_{nc}}$$

Realizando un análisis de las ecuaciones anteriores de R_n para el caso 2D - 3D y conociendo que $E' > E$ y $v' > v$ (E' , v' - 2D y E , v - 3D) se puede expresar que los valores de R_n y R_T en 3D presentan ordenes de magnitud menores que los de 2D.

Compresión

Desde el punto de vista de la formulación del modelo esta deducción no tiene sentido ya que el modelo constitutivo a nivel de contacto en el caso de compresión no tiene valores que definan la compresión máxima en la dirección normal. No obstante se incluye aquí esta deducción por si en futuras implementaciones se quiere incluir en el modelo microestructural este aspecto.

Conociendo que existe la siguiente relación directa entre los parámetros macro y micro:

$$\frac{\sigma_c R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}}$$

y despejando la variable R_n para el caso de 3D se obtiene:

$$R_{n-3D} = \frac{\sigma_c R K_{nc}}{E_{comp}}$$

Adicionalmente se conoce que existen relaciones entre los parámetros elásticos en 2D y 3D que quedan definidas por:

$$E' = \frac{E}{2};$$

$$v' = \frac{v}{1-v}$$

donde:

E' - Modulo de deformación en 2D

v' - Coeficiente de Poisson en 2D

E - Modulo de Deformación en 3D

v - Coeficiente de Poisson en 3D

lo que implica que el modulo de deformación y el coeficiente de Poisson en 3D se determine por:

$$E = E'(1-v^2)$$

$$v = \frac{v'}{1+v'}$$

Sustituyendo el valor de modulo de deformación ($E_{comp}=E$) por sus relaciones en 3D con 2D se obtiene:

$$\frac{\sigma_c R}{R_n} = \frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \frac{E'_{comp} (1-v')^2}{K_{nc}} = \frac{E'_{comp} \left[1 - \left(\frac{v'}{1+v'} \right)^2 \right]}{K_{nc}}$$

Transformado adecuadamente y despejando las variables R_n se obtiene:

$$R_{n-2D} = \frac{\sigma_c R K_{nc} (1+v')^2}{E'_{comp} (1+2v')}$$

o en función de E' y v'

$$R_{n-2D} = \frac{\sigma_c R K_{nc}}{E'_{comp} (1+v')^2}$$

que para el caso de 3D es:

$$R_{n-3D} = \frac{\sigma_c R K_{nc}}{E_{comp}}$$

Realizando un análisis de las ecuaciones anteriores de R_n para el caso 2D - 3D y conociendo que $E' > E$ y $v' > v$ (E' , v' - 2D y E , v - 3D) se puede expresar que los valores de R_n y R_T en 3D presentan ordenes de magnitud menores que los de 2D.

Relación $\frac{\sigma_c}{\sigma_t}$ en 2D y 3D en función de los parámetros microestructurales.

Se conoce y ya se ha demostrado que la relación entre la resistencia a compresión y tracción $\left(\frac{\sigma_c}{\sigma_t} \right)$ se expresa en función de los parámetros microestructurales por:

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_t} = \frac{\frac{E_{comp}}{K_{nc}}}{\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{comp}}{K_{nt}}}$$

Además existen relaciones entre los parámetros macro estructurales elásticos en 2D y 3D :

$$E' = \frac{E}{2};$$

$$v' = \frac{v}{1-v}$$

donde:

E' - Módulo de deformación en 2D

v' - Coeficiente de Poisson en 2D

E - Modulo de Deformación en 3D

v - Coeficiente de Poisson en 3D

Sustituyendo estas relaciones se obtiene la relación $\frac{\sigma_c}{\sigma_t}$ para el caso de 2D:

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_t} = \frac{E'_{comp}(1+2v'_{comp})}{(1+2v'_{comp})^2 \left[\frac{E'_{comp}(1+2v'_{comp})}{(1+v'_{comp})} - \frac{K_{nc}E'_{tracc}(1+2v'_{tracc})}{K_{nt}(1+2v'_{tracc})^2} \right]}$$

o en función de E' y v

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_t} = \frac{E'_{comp} K_{nt} (v_{comp}^2 - 1)}{E'_{tracc} (K_{nc} - K_{nc} v_{tracc})^2 + E'_{comp} K_{nt} (v_{comp}^2 - 1)}$$

que para el caso de 3D se expresa por:

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_t} = \frac{K_{nt} E_{comp}}{K_{nt} E_{comp} - K_{nc} E_{tracc}}$$

4.7 – Estudio estocástico preliminar empleando método de Monte Carlo.

4.7.1 - Bases Teóricas.

Las simulaciones realizadas aplicando el Método de Monte Carlos (MMC) son una forma muy elegante de pasar de una metodología de análisis determinista a una metodología más racional y completa, como lo es un análisis estocástico.

Es importante recalcar que las simulaciones estocásticas con el MMC presentan una gran cantidad de ventajas respecto a las simulaciones tradicionales:

- 1.- No existe limitación al tipo de análisis, i.e. linear, no linear, multifísica.
- 2.- No existe limitación en la cantidad de los parámetros de muestreo.
- 3.- Cualquier programa de solución puede ser usado.
- 4.- Cualquier usuario utiliza la herramienta que le resulte más cómoda; el uso del MMC no requiere el aprendizaje de un nuevo código.

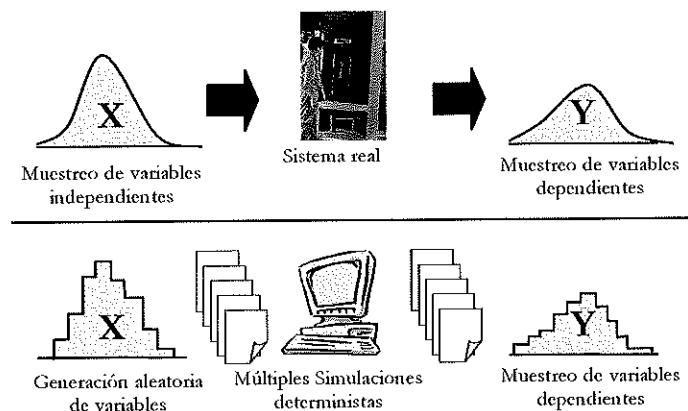


Figura 57 – Simulación estocástica por el método de Monte Carlo

La idea más general del MMC dentro de la mecánica computacional se puede resumir como sigue (figura 57): Sean las variables de respuestas y de un sistema, dependientes de un grupo de variables aleatorias x cuya descripción probabilística sea conocida. Es posible obtener mediante algoritmos de generación de números aleatorios un muestreo de variables x lo suficientemente grande, de manera que sus histogramas se aproximen a la descripción probabilística conocida de forma más exacta cuanto mayor sea el tamaño de la muestra. Mediante el uso de un código de análisis del sistema, utilizado de forma determinística (cada ejecución con un grupo de variables aleatoria como entrada) es posible generar una población de variables dependientes y del mismo tamaño que el muestreo.

Generación de números aleatorios

La generación de variables aleatorias ocupa un lugar importante en las aplicaciones modernas de la Teoría de Probabilidades, en aquellas situaciones en que se requiera conocer el comportamiento estocástico de un sistema por medio de simulación por ordenador. El objetivo de la generación es obtener una muestra sintética (es decir, artificial) de valores de una variable cuya función de densidad empírica se ajuste lo más fielmente posible a la dada como modelo probabilista de ella.

Números aleatorios con distribución uniforme de probabilidad.

Debido a que los métodos actuales de generación de números aleatorios con distribuciones no uniformes se basan en la generación previa de números aleatorios con una distribución uniforme dentro del rango de $(0,1)$, es importante mencionar la forma en que esta generación previa se realiza.

La técnica más comúnmente utilizada se denomina *el método de congruencia lineal* el cual genera las variables aleatorias X_i de forma secuencial

$$X_{i+1} = aX_i \bmod m$$

donde a es un multiplicador y la operación **mod** representa el residuo al dividir por m .

Existen dos métodos generales para generar números aleatorios a partir de su función de distribución, estos son: el *método de inversión* y el *método de rechazo*.

Método de inversión.

El método de inversión se puede resumir en los siguientes pasos:

1. Generar un número con distribución uniforme entre 0 y 1, el cual representa un valor de la función de distribución $F_x(x) = u$
2. Calcular la función inversa de la distribución.

$$x = F_x^{-1}(u)$$

Tanto este método como el de rechazo parten de la generación de números con distribución uniforme, ya que se puede demostrar que si se toma la función de distribución como una variable aleatoria, su rango resulta $U(0,1)$.

Nótese en la figura siguiente (figura 58) que debido a la forma de la curva de distribución, su mayor pendiente se encuentra en las zonas en que la densidad es mayor, por lo que se generarán valores muy cercanos entre sí en tales zonas y separados en las colas, donde la densidad tiende a cero. Por tanto, al hacer el histograma de los valores, se debe obtener algo cercano a la densidad dada como dato. La aproximación es mejor en la medida en que aumente el número de puntos.

El método de inversión requiere conocer la función inversa de la función de distribución. Esta es su mayor desventaja, pues no siempre es posible invertir dicha función; en contrapartida es un método muy económico.

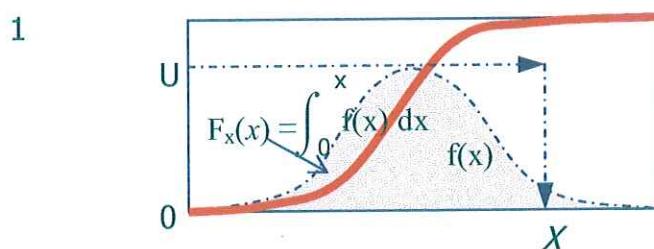


Figura 58 – Generación de valores aleatorios por el método de la inversión.

Método del rechazo.

Este método se encuentra enfocado a la generación de números aleatorios con una función de distribución no invertible directamente. El mecanismo de cálculo se resume en la figura 59. Se genera una variable aleatoria con una distribución de densidad ficticia $g(x)$ tal que mayorice la función $f(x)$ buscada. En realidad $g(x)$ no es una función de densidades pues es mayor que 1, sin embargo $h(x) = g(x) / a$ si que lo es. La densidad $h(x)$ debe escogerse de forma que sea sencillo obtener números aleatorios (Y) que satisfagan dicha función.

$$a = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)dx > \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$$

De acuerdo con esto, es posible escribir la función de distribución de X como una probabilidad condicionada sobre Y de la forma

$$P(X \leq x) = P(Y \leq x / A)$$

donde A denota el evento que Y sea aceptado como un valor aleatorio válido para X . Esto ocurre dado que es fácilmente demostrable que

$$P(Y \leq x / A) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx$$

El algoritmo para el método del rechazo se puede resumir como:

1. Generar un número Y con densidad $h(x)$
2. Generar $U \sim U(0,1)$ independiente de Y
3. Si $U \leq f(Y) / g(Y)$ se regresa $X=Y$. En caso contrario repetir el proceso.

Éste método depende de la selección de una densidad ficticia $g(x)$ cercana a $f(x)$ de manera que se reduzca el número de iteraciones.

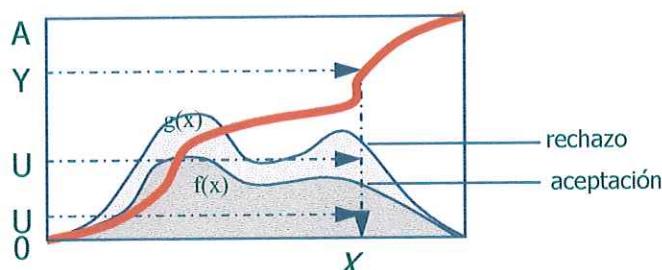


Figura 59– Generación de valores aleatorios por el método del rechazo

Combinación de números aleatorios.

Los números aleatorios generados, asociados a las variables independientes del problema, deben ser combinados entre ellos para poder formar un conjunto de datos capaz de alimentar las simulaciones deterministas. De un adecuado procedimiento de muestreo sobre los números generados, se puede optimizar el tiempo total de cálculo asociado a la simulación.

Muestreo aleatorio simple.

El algoritmo mas simple consiste en combinar los distintos números generados sin restricciones y sin un orden aparente. En éste muestreo no se aplica ninguna optimización a la población generada. En la figura 60 se observa una típica nube de puntos obtenidas mediante este muestreo. Obsérvese que existe un gran número de puntos alrededor de los valores medios, ello implica una gran cantidad de análisis a

realizar en dicha zona, con resultados muy similares entre ellos; por lo que resulta un muestreo computacionalmente muy costoso.

Muestreo estratificado.

Con el objeto de poder generar una población de muestreo que cubra todo el rango de posibilidades combinatorias de las variables aleatorias, se ha propuesto un método que consiste en dividir el espacio de cada variable aleatoria en rangos de igual probabilidad de ocurrencia. El análisis estocástico se lleva acabo con un punto perteneciente a cada rango generado, como se muestra en la figura 60.

Muestreo mediante el Hipercubo Latino.

Éste método y otros métodos similares representa una reducción mas drástica de la población a analizar. Basándose en el muestreo estratificado, cada uno de los rangos de igual probabilidad para una variable (identificado con una letra latina, de aquí el nombre del algoritmo) se combina con otros rangos de las variables independientes, de forma única y aleatoria. Otro muestreo bastante similar es el *Muestreo Descriptivo*; se diferencia en la forma que es generada la matriz de permutaciones de los rangos.

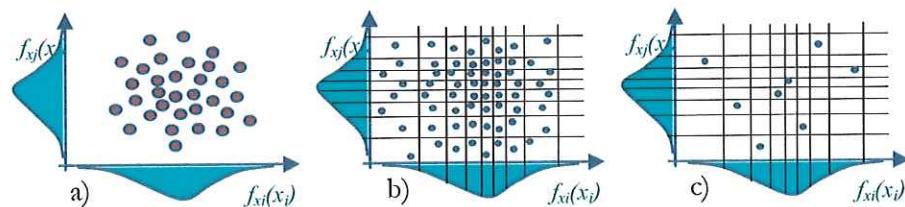


Figura 60: Muestreos. a) Muestreo aleatorio simple, b) Muestreo Estratificado
c) Muestreo Descriptivo

4.7.2 - Resultados de la aplicación de los estudios estocásticos.

Se han realizado un total de 443 ensayos virtuales a compresión y 359 a tracción. De los cuales se ha extraído la información que se presenta a continuación.

Para un valor dado del coeficiente adimensional $\frac{k_{nt}}{k_{nc}}$ se obtienen las siguientes relaciones entre los parámetros macroscópicos elásticos E' y v' y los coeficientes adimensionales presentados en el apartado de estudio adimensional.

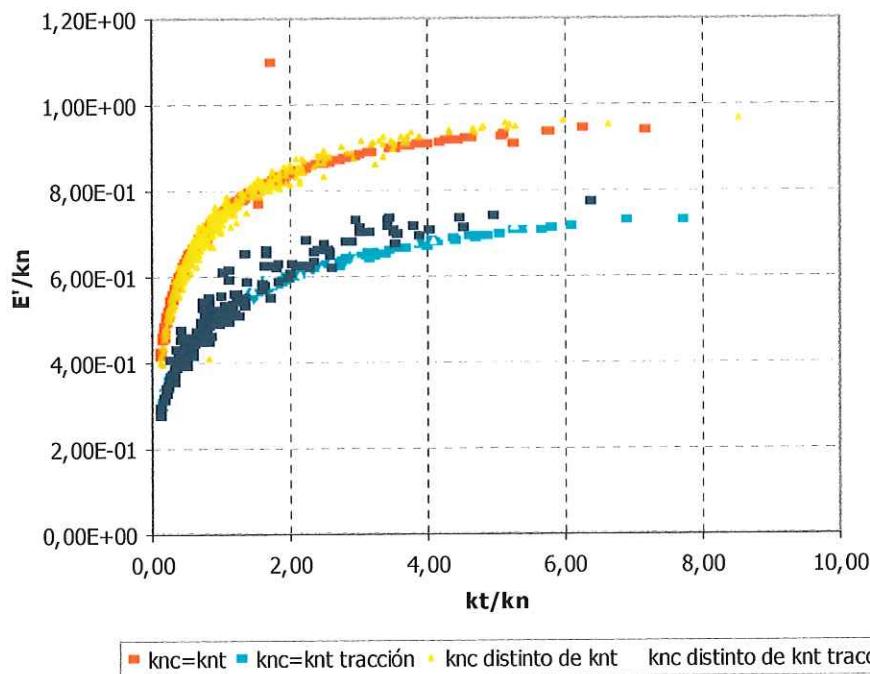


Figura. 61: Relación entre el módulo de Young aparente E' y el parámetro adimensional $\frac{k_t}{k_n}$

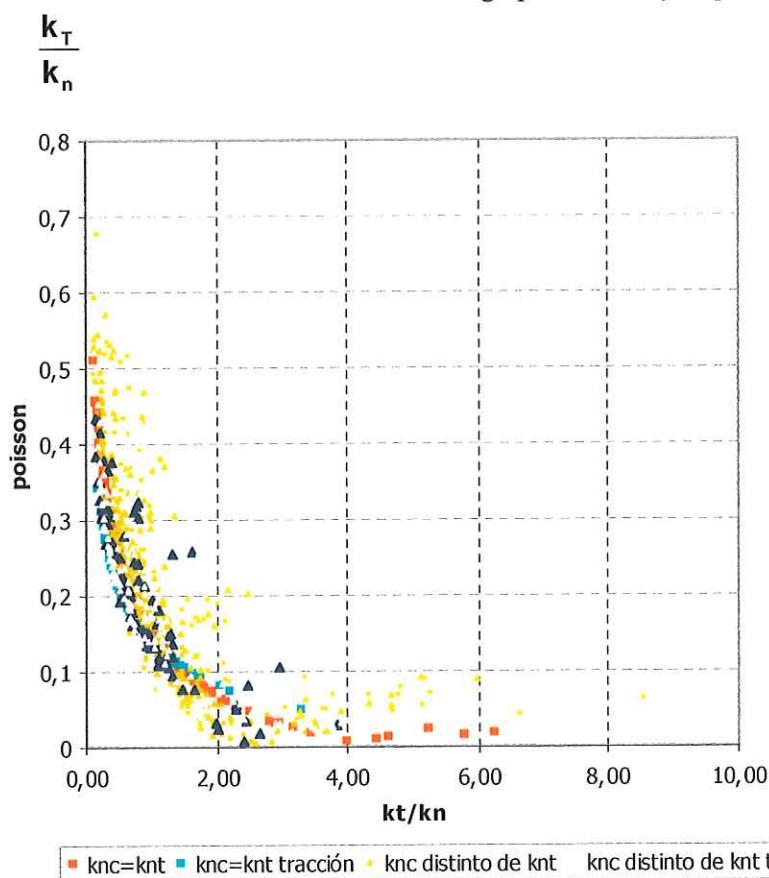


Figura. 62: Relación entre el coeficiente de Poisson aparente ν' y el parámetro adimensional $\frac{k_t}{k_n}$

Haciendo una serie de transformaciones se pueden hallar las siguientes relaciones, estas tienen la peculiaridad de ser lineales en un rango de valores amplio.

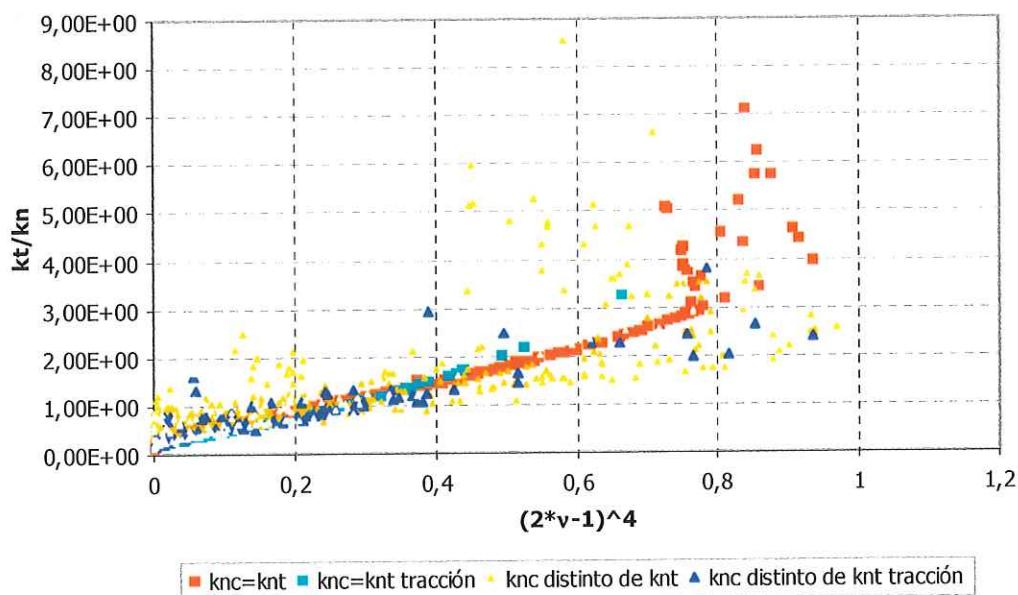


Figura. 63: Relación entre el coeficiente de Poisson aparente ν' y el parámetro adimensional $\frac{k_t}{k_n}$ linealizada.

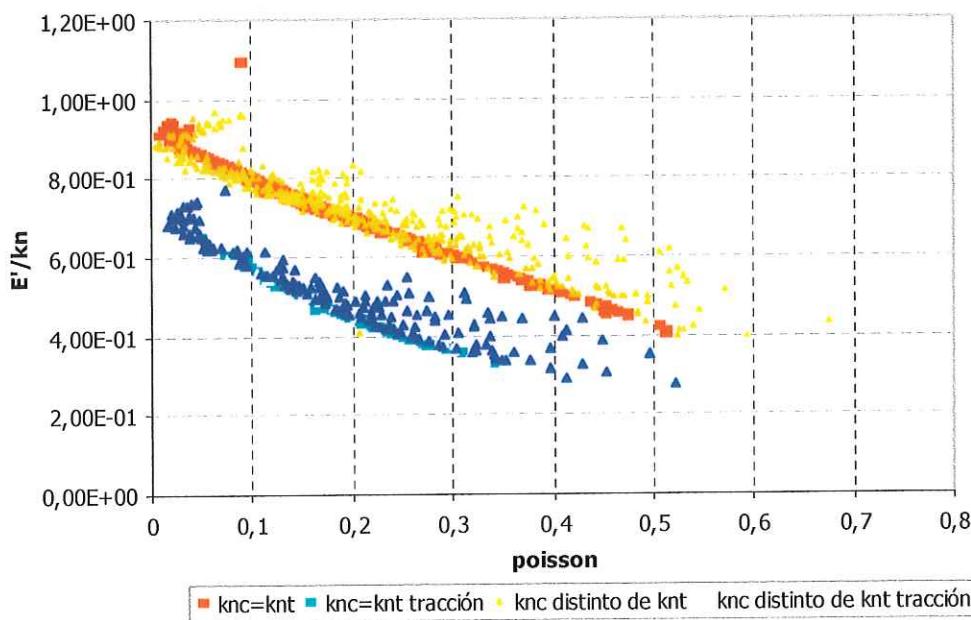


Figura. 64: Relación entre el Módulo de Young aparente E' y el coeficiente de Poisson aparente ν'

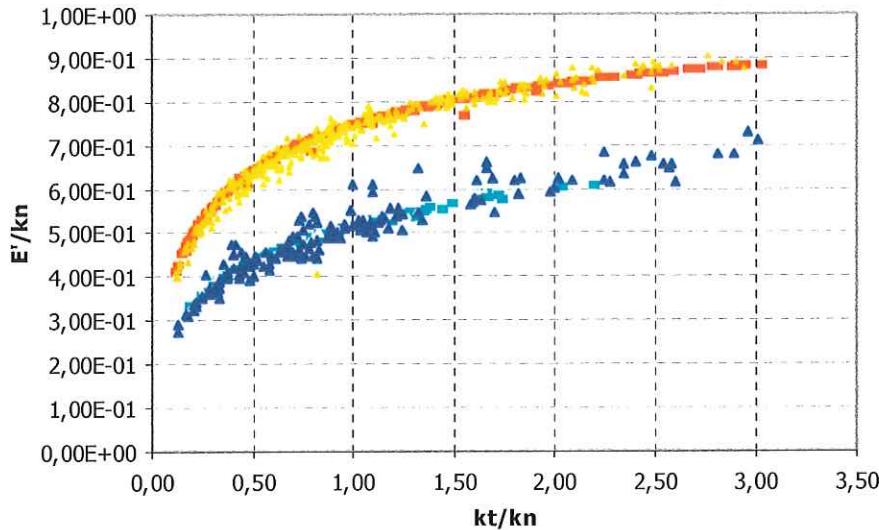


Figura. 65: Relación entre el Módulo de Young aparente E' y el parámetro adimensional

$$\frac{k_T}{k_n}$$

Se observa que para valores del parámetro adimensional $\frac{k_T}{k_{nc}}$ para ensayos a compresión $\frac{k_T}{k_{nt}}$ para ensayos a tracción mayores de 3 las relaciones obtenidas dejan de tener una tendencia clara. Este hecho coincide además con valores del coeficiente aparente de Poisson ν' muy pequeños y valores del módulo de Young aparente E' muy grandes. Si se eliminan estos valores singulares por no tener sentido físico, se cubre un rango muy amplio de materiales.

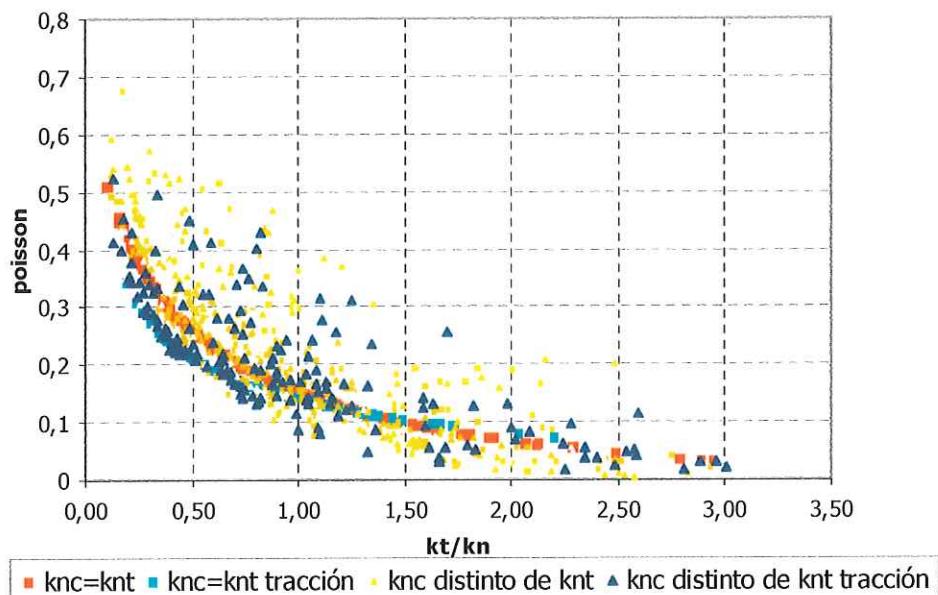


Figura. 66: Relación entre el coeficiente de Poisson aparente ν' y el parámetro

$$\text{adimensional } \frac{k_T}{k_n}$$

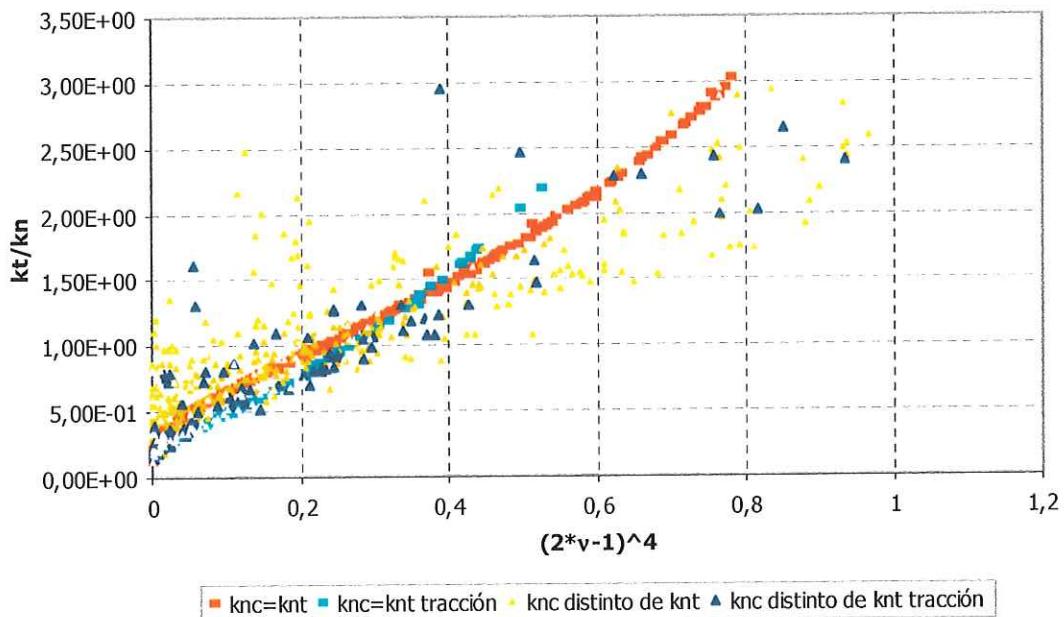


Figura. 67: Relación entre el coeficiente de Poisson aparente v' y el parámetro adimensional $\frac{k_t}{k_n}$ linealizado

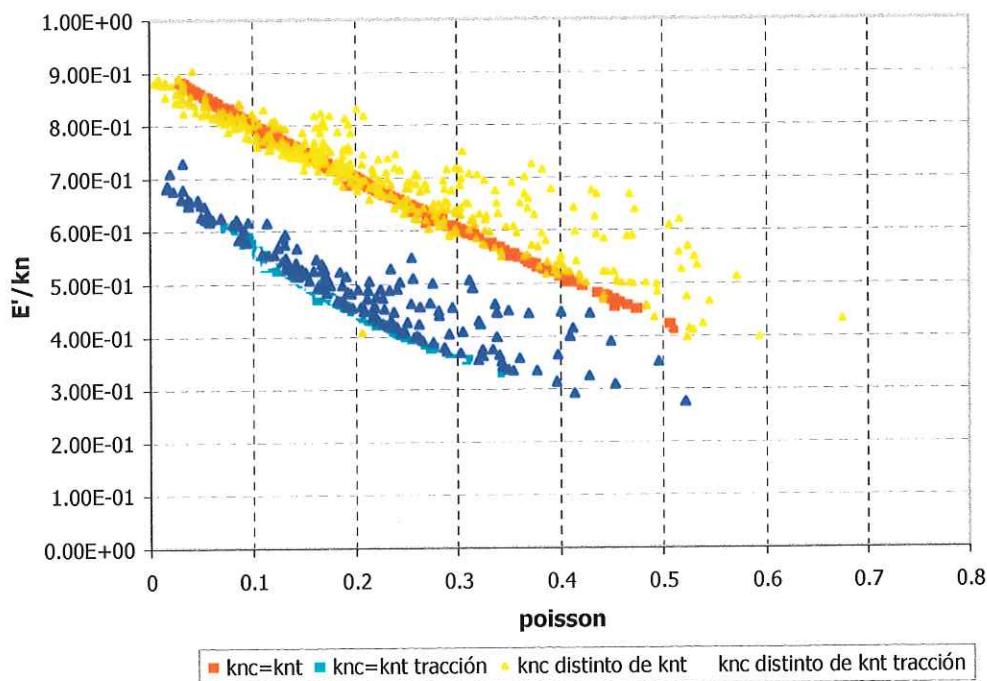


Figura. 68: Relación entre el módulo de Young aparente E' y el coeficiente de Poisson aparente v'

4.8 – Estudio preliminar para estimar las relaciones entre los parámetros macro-microestructurales considerando $K_{nc} \neq K_{nt}$.

En esta fase de la investigación se realizan varias simulaciones virtuales de ensayos a compresión y tracción considerando que $K_{nc} \neq K_{nt}$. Las relaciones de K_{nc}/K_{nt} estudiadas

son $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.4$, $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.35$, $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.25$, $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.25$, $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$, $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.05$.

Además de estos estudio es necesario analizar otras relaciones de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$ magnitudes

mayores para contar con una gama de relaciones que describan el comportamiento de un sin numero de materiales. Adicionalmente se hace necesario realizar un estudio estocástico aplicando método de Monte Carlo para obtener relaciones entre los parámetros macroscópicos y microscópicos más fiable al tener un mayor numero de corridas o tiros.

Resultados de las corridas deterministas para el caso de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.4$

Al igual que los estudios realizados con la relación $K_{nc}=K_{nt}$, en el caso de $K_{nc} \neq K_{nt}$, se realizaron diversos ensayos virtuales de compresión fijando diferentes relaciones entre estos parámetros. De igual modo se establecieron las relaciones entre los parámetros macroestructurales-microestructurales y se realizaron las graficas que los interrelacionan. Los resultados de estos ensayos de compresión considerando que

$\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.4$ se reflejan en las figuras 69, 70 y 71.

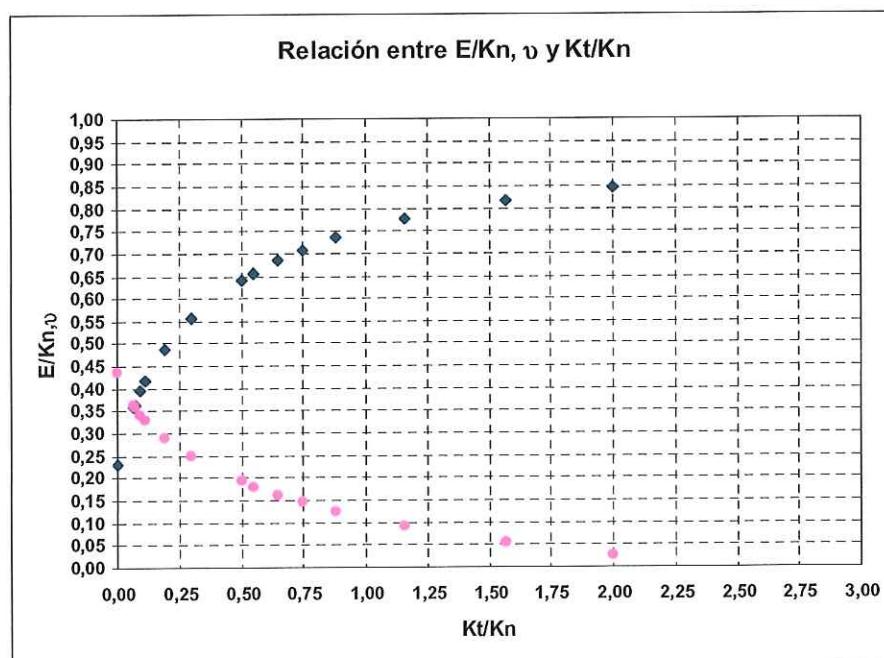


Figura 69: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.4$.

Relación de $E/K_{nc,comp}$, v vs $Kt/K_{nc,comp}$

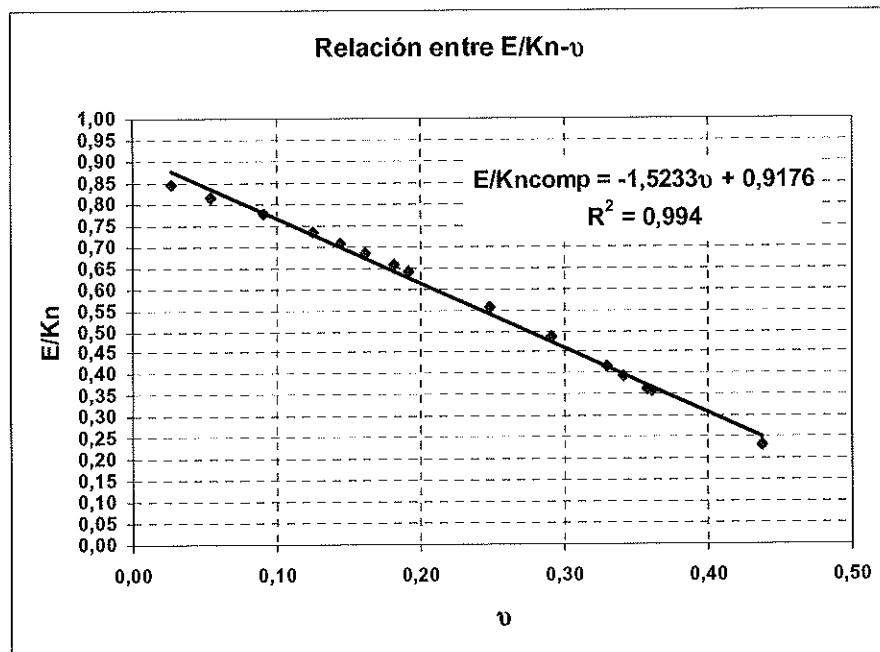


Figura 70: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1,4$.

Relación de E/K_{ncomp} vs ν .

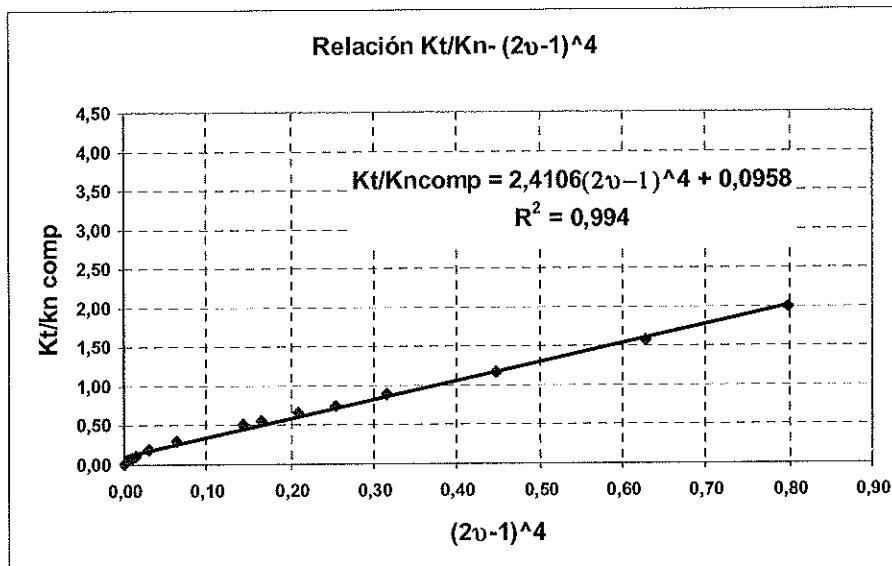


Figura 71: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1,4$.

Relación de K_t/K_{ncomp} vs $(2\nu-1)^4$.

Los relaciones establecidas entre los parámetros macro-microestructurales concuerdan con los obtenidos en el estudio estocástico preliminar, pero en este caso si se puede llegar a establecer una relación directa entre los parámetros macroscópicos y microscópicos. Estas relaciones posibilitan obtener los parámetros micros constitutivos empleados en el método de los elementos discretos.

Resultados de las corridas deterministas para el caso de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.35$

Los resultados obtenidos de las corridas de los ensayos virtuales de compresión con unas relación $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.35$ se reflejan en las figuras 72, 73 y 74. Como se puede observa los resultados son muy similares a los ya obtenidos. Como se observa en la figura 72 a medida que aumenta la relación K_t/K_{ncomp} el valor de E/K_{ncomp} tiende al valor de 0.9, e igual modo que los resultados obtenidos cuando se consideró que $K_{nc}=K_{nt}$. El valor de el coeficiente de Poisson disminuye a medida que aumenta la relación K_t/K_{ncomp} .

El comportamiento de estas relaciones entre los parámetros elásticos macro-microestructurales (figura 72) y la tendencia que evidencia la variable ($E/K_{ncomp} \rightarrow 0.9$) a medida que aumenta K_t/K_{ncomp} consolidad las deducciones analíticas realizadas en cuanto a las relaciones entre los parámetro microscópicos elásticos y plásticos.

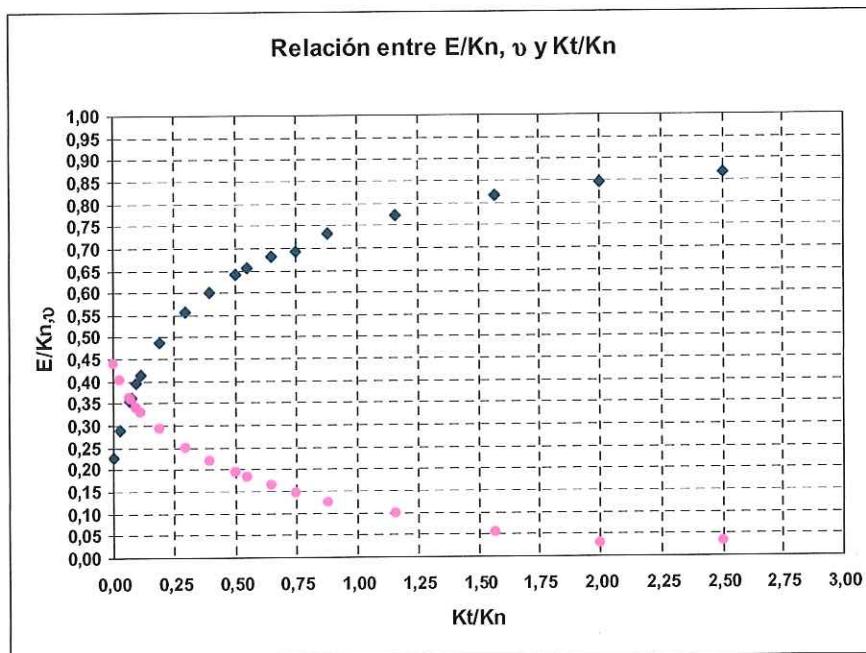


Figura 72: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.35$. Relación de E/K_{ncomp} , v vs Kt/K_{ncomp}

En las figuras 73 y 74 se observan las relaciones lineales obtenidas entre las variables macroestructurales y microestructurales. En ambos casos (figura 73 y 74) se evidencia un buen comportamiento de modelo de pronóstico obtenido por técnicas de regresión. El comportamiento del coeficiente de correlación R^2 y de los errores de pronóstico son muy buenos.

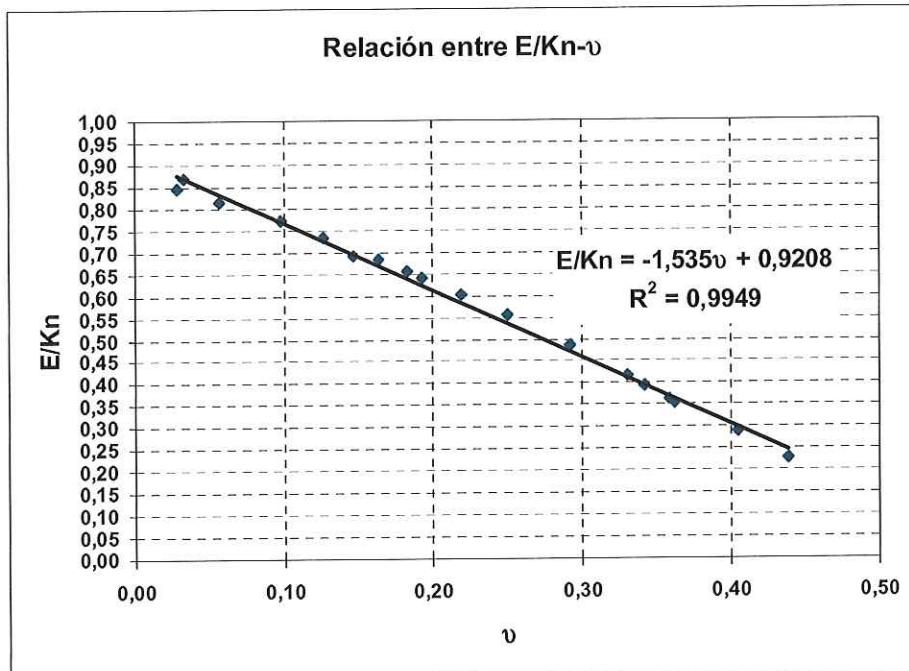


Figura 73: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1,35$. Relación de E/K_{ncomp} vs v .

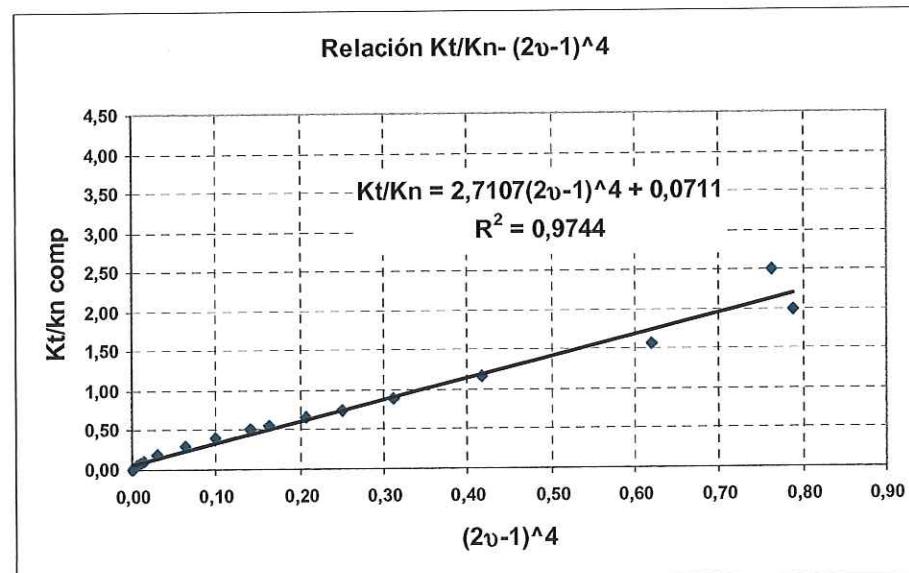


Figura 74: Resultados de los ensayos virtuales de compresión y tracción considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1,35$. Relación de K_t/K_{ncomp} vs $(2v-1)^4$.

Resultados de las corridas deterministas para el caso de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.25$

Los resultados obtenidos para las relaciones $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.25$ se reflejan en las figuras 75, 76 y 77.

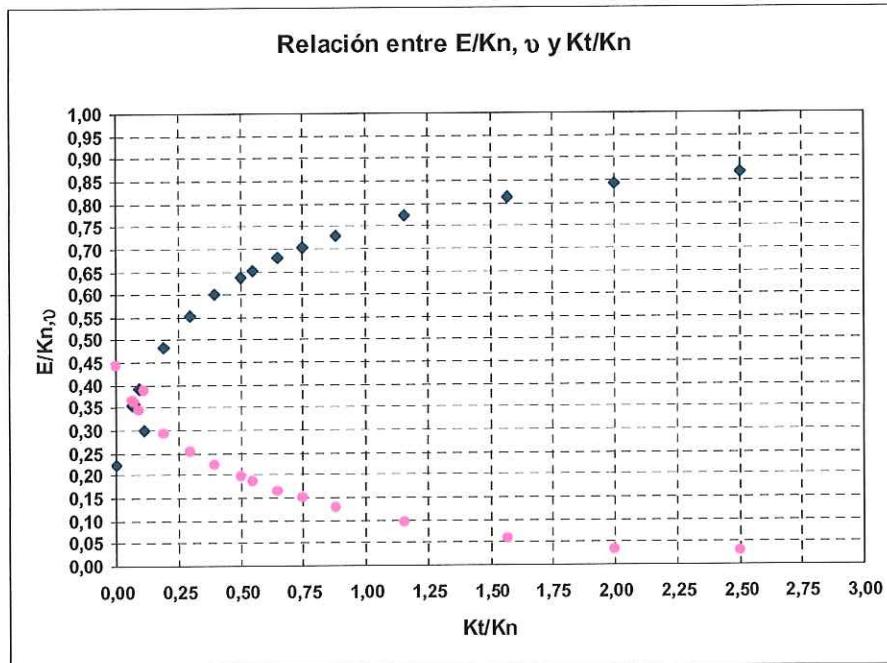


Figura 75: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.25$. Relación de E/K_{ncomp} , ν vs Kt/K_{ncomp}

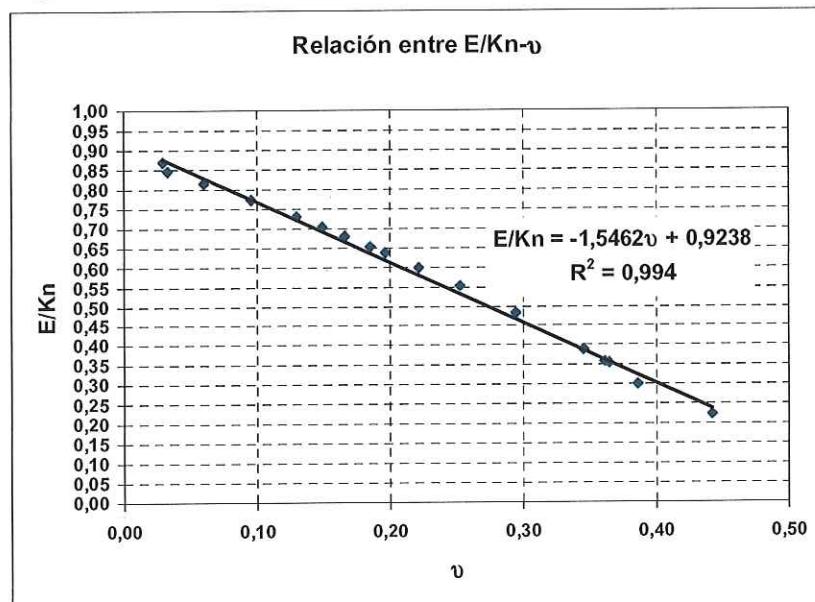


Figura 76: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.25$. Relación de E/K_{ncomp} vs ν .

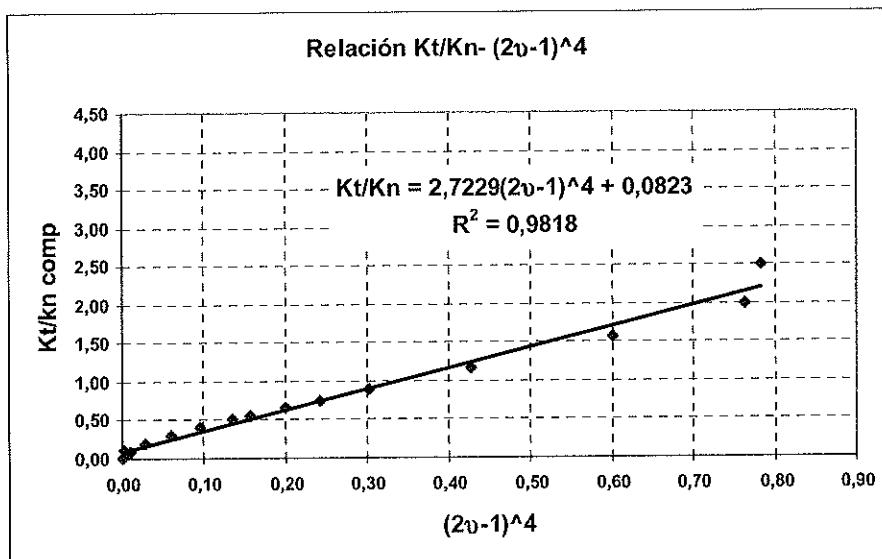


Figura 77: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.25$. Relación de $K_t/K_{n\text{comp}}$ vs $(2v-1)^4$.

Los resultados obtenidos en esta corrida determinista validan las hipótesis asumidas en el epígrafe 4.6.4. Los resultados evidencian una correspondencia similar a las relaciones anteriores.

Resultados de las corridas deterministas para el caso de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$

Los resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando una relación $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$ se reflejan en las figuras 78, 79 y 80. En la figura 78 se ilustra la

correspondencia de los resultados con las demás relaciones $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$ estudiadas hasta el momento. La relación $E/K_{n\text{comp}}$ tiende al valor de 0.9 igual que las demás relaciones $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$. El coeficiente de Poisson tiene un comportamiento similar a los casos anteriores y el mismo disminuye a medida que aumenta la relación $K_t/K_{n\text{comp}}$. La relación entre $E/K_{n\text{comp}}$ vs. v , mantiene una relación lineal y el coeficiente de correlación múltiple R^2 y los errores de pronósticos permiten afirmar que el modelo lineal ajustado por el método de mínimos cuadrados se ajusta adecuadamente.

Las relaciones entre las variables $K_t/K_{n\text{comp}}$ vs. $(2v-1)^4$ se comportan de modo similar a las demás relaciones $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$ estudiadas y evidencian una relación lineal entre ellas. De forma similar el ajuste de regresión realizado presenta excelentes comportamiento, lo que permite afirmar que el modelo de ajuste pronostico permite determinar la relación entre las variables macroestructurales-microestructurales.

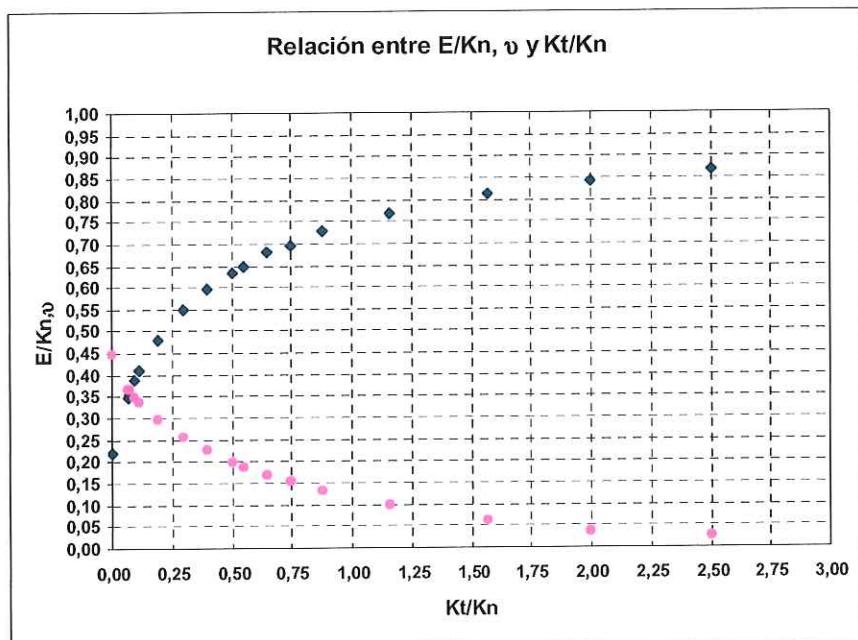


Figura 78: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$. Relación de E/K_{ncomp} , ν vs Kt/K_{ncomp}

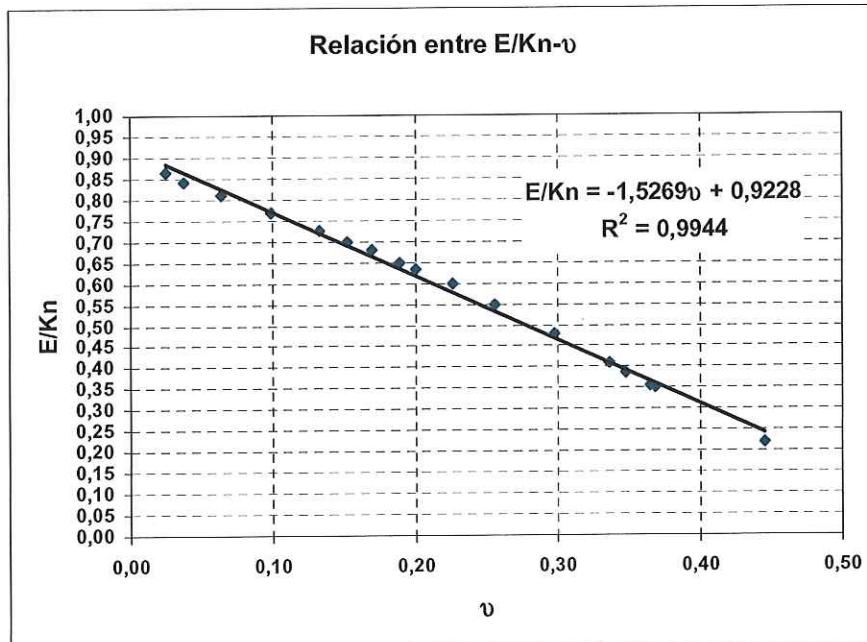


Figura 79: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$. Relación de E/K_{ncomp} vs ν .

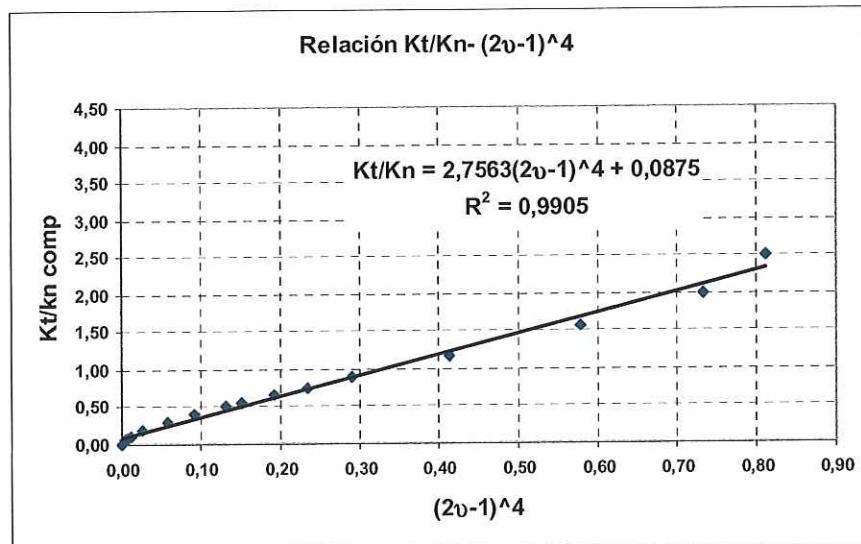


Figura 80: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$. Relación de $K_t/K_{n\text{comp}}$ vs $(2v-1)^4$.

Resultados de las corridas deterministas para el caso de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.05$

Los resultados obtenidos en la simulación virtual de ensayo de laboratorio a compresión con una relación $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.05$ se reflejan en la figura 81, 82 y 83.

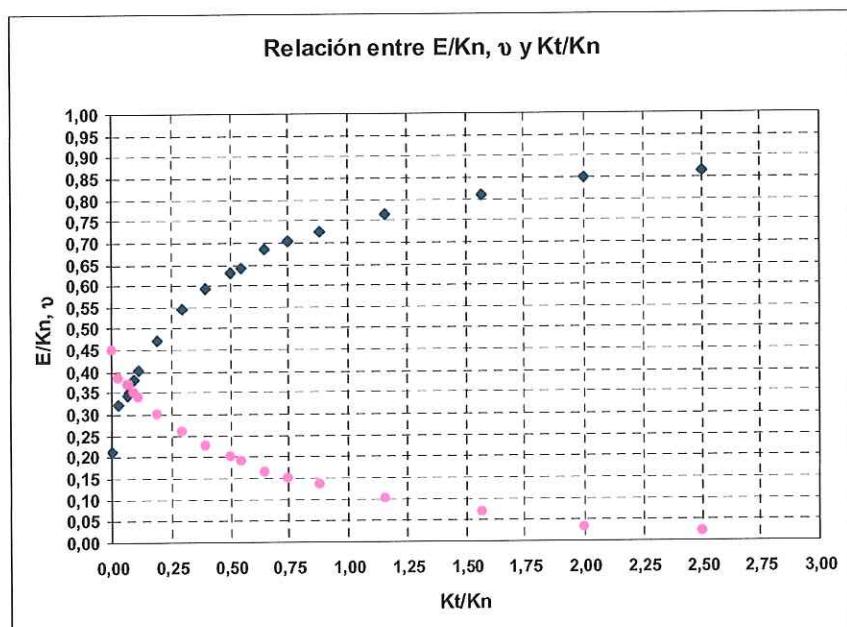


Figura 81: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$. Relación de $E/K_{n\text{comp}}, v$ vs $K_t/K_{n\text{comp}}$

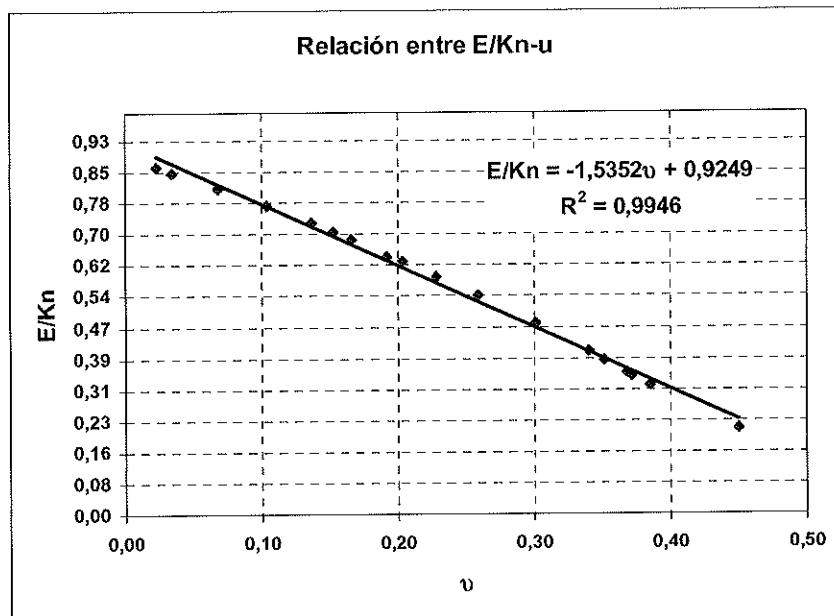


Figura 82: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$. Relación de E/K_{ncomp} vs u .

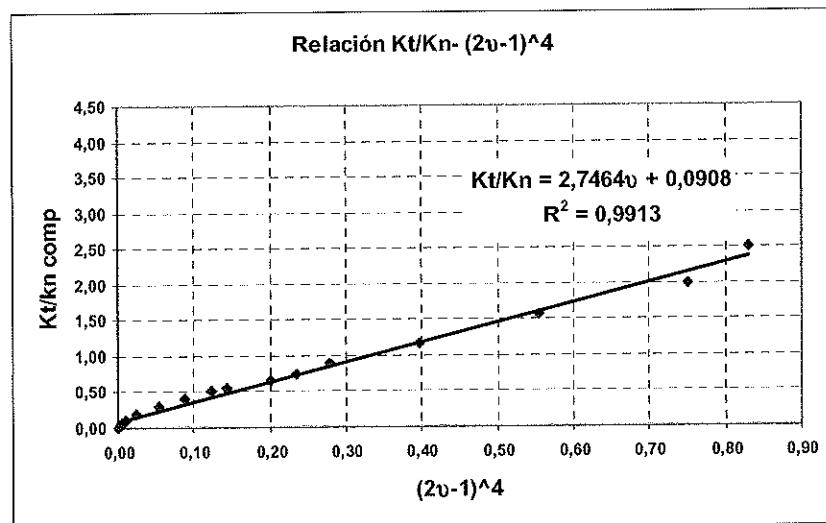


Figura 83: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$. Relación de K_t/K_{ncomp} vs $(2u-1)^4$.

Los resultados obtenidos en esta relación $\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = 1.15$, evidencia una total correspondencia con los resultados obtenidos con anterioridad.

Resultados globales de todas las corridas de ensayos virtuales deterministas.

Los resultados obtenidos para las diferentes relaciones $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$ se ilustran en conjunto en las figuras 84, 85 y 86.

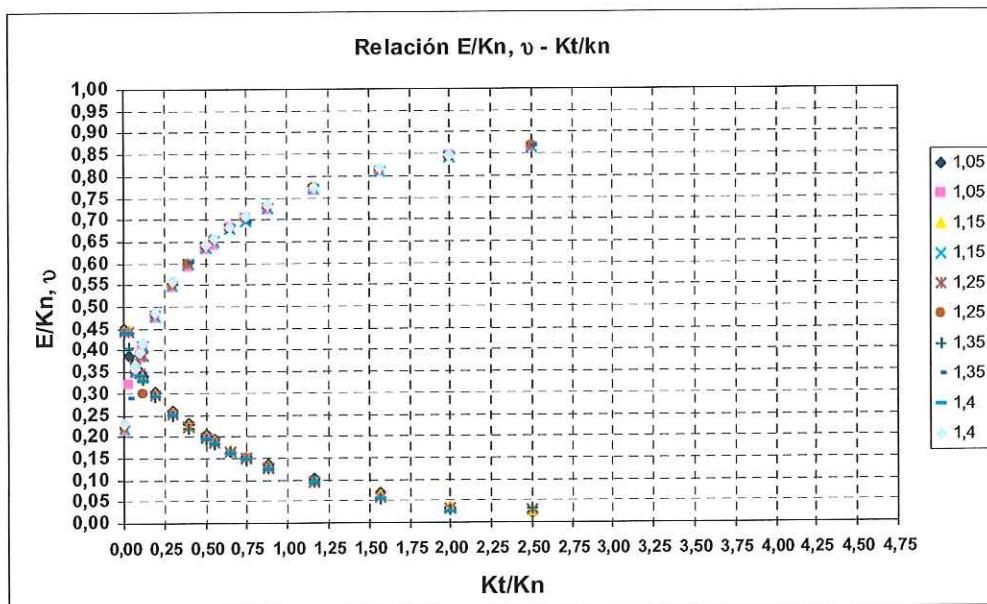


Figura 84: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando diferentes relaciones entre $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$. Relación de E/K_{ncomp} , v vs Kt/K_{ncomp}

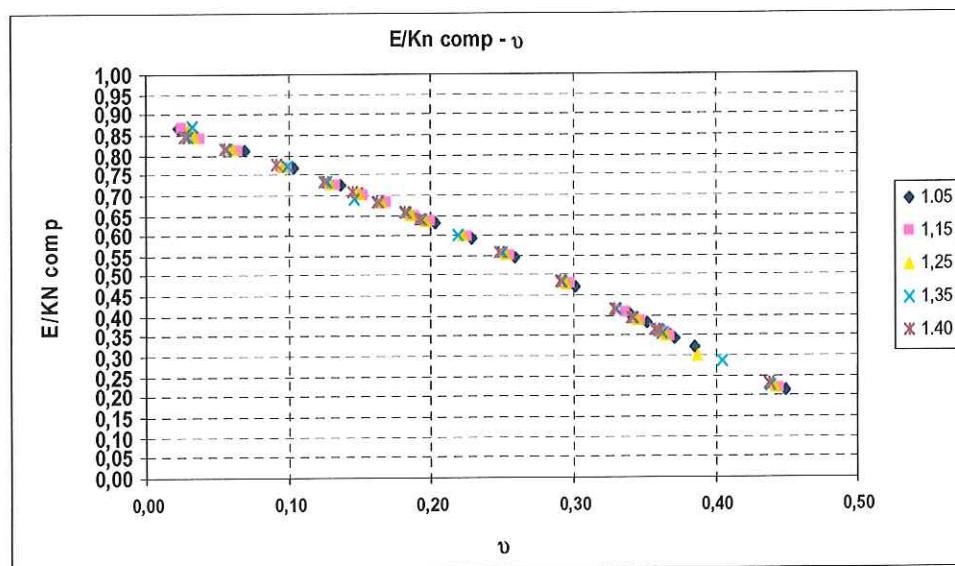


Figura 85: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando diferentes relaciones de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$. Relación de E/K_{ncomp} vs v .

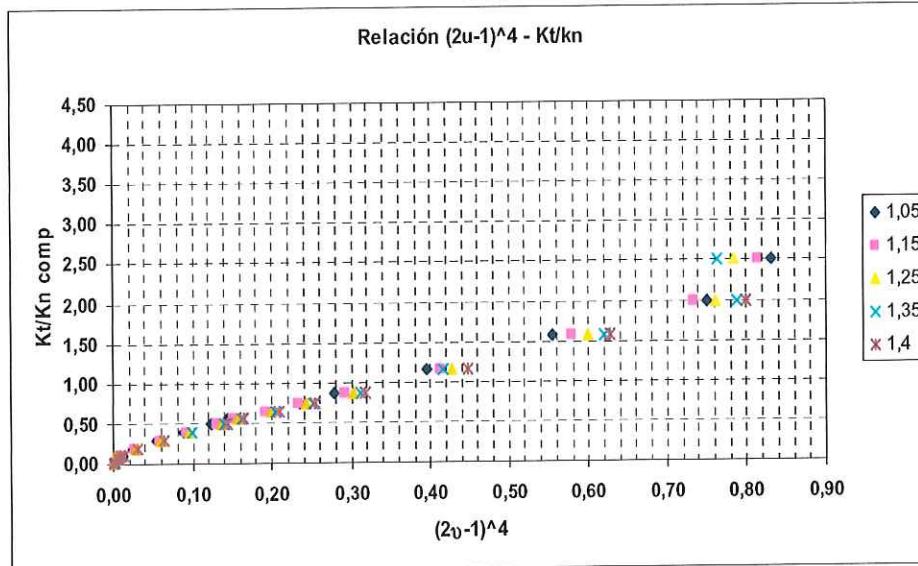


Figura 86: Resultados de los ensayos virtuales de compresión considerando diferentes relaciones de $\frac{K_{nc}}{K_{nt}}$. Relación de K_t/K_{ncomp} vs $(2v-1)^4$.

4.9 - Conclusiones Parciales del estudio preliminar para estimar las relaciones entre los parámetros macro-microestructurales considerando $K_{nc} \neq K_{nt}$.

El estudio preliminar para estudiar relaciones entre los parámetros macro y microestructurales considerando $K_{nc} \neq K_{nt}$ permitió llegar a un grupo de conclusiones:

- Independientemente de las relaciones entre $K_{nc} \neq K_{nt}$ la tendencia de comportamiento entre las relaciones: $E_{comp}/K_{nc} \sim v_{comp}$, $E_{tracc}/K_{nt} \sim v_{tracc}$, $E_{comp}/K_{nc} \sim K_t/K_{nc}$, $E_{tracc}/K_{nt} \sim K_t/K_{nt}$, $v_{comp} \sim K_t/K_{nc}$ y $v_{tracc} \sim K_t/K_{nt}$, son similares.
- La aplicación preliminar del Método de Monte Carlo permitió definir que para ciertas relaciones entre los parámetros macro y micro ($E_{comp}/K_{nc} \sim v_{comp}$ y $E_{tracc}/K_{nt} \sim v_{tracc}$) existen una tendencia lineal, la cual esta representada por una familia de rectas con pendiente y termino independiente diferentes en función de los parámetros constitutivos.

4.10 - Deducción analítica de las ecuaciones generales que relacionan los parámetros macro y micro.

Partiendo de las conclusiones anteriores se puede expresar que el comportamiento entre los parámetros macro y micro ($E_{comp}/K_{nc} \sim v_{comp}$ y $E_{tracc}/K_{nt} \sim v_{tracc}$) presenta una tendencia lineal, la cual se puede describir por una familia de rectas que tienen pendiente y término independiente diferentes en función de los parámetros constitutivos. Una representación esquemática de este aspecto se ilustra en la figura 87.

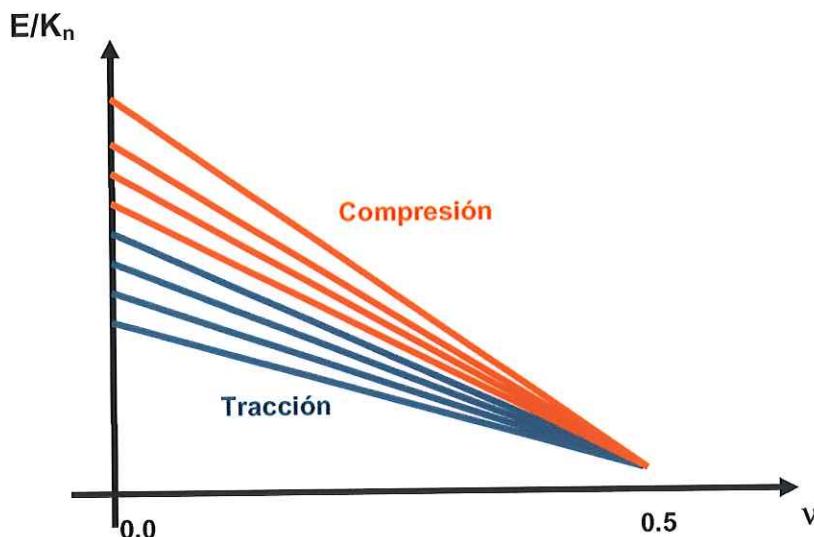


Figura. 88: Relación entre E/K_n y el coeficiente de Poisson v

Si se desean encontrar las ecuaciones que describan estas relaciones ($E_{comp}/K_{nc} \sim v_{comp}$ y $E_{tracc}/K_{nt} \sim v_{tracc}$) es necesario realizar una serie de deducciones analíticas. Para lograr lo anterior hay que trabajar con las ecuaciones constitutivas de las diferentes escalas (macro y micro).

Desde el punto de vista microestructural se conoce que:

$$F_{nmax} = R_n = K_{nc} u_{nmax} \quad (86)$$

Macroestructuralmente se tiene:

$$\sigma_c = E_{comp} \varepsilon \quad (87)$$

Dividiendo ambas expresiones (37 y 38) y asumiendo que:

$$\sigma_t = (1-a)\sigma_c \quad (88)$$

$$K_{nc} = c K_{nt} \quad (89)$$

$$E_{comp} = b E_{tracc} \quad (90)$$

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \frac{\sigma_c R}{R_n} \quad (91)$$

cuando ($v_{comp} \rightarrow 0$ y $v_{tracc} \rightarrow 0$) y a es un escalar ($0 \leq a < 1$).

Conociendo la expresión 91 y tomando como base las suposiciones anteriores 88, 89 y 90 se llega a demostrar analíticamente que:

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} \rightarrow \frac{\sigma_t R}{R_n} \quad (92)$$

cuando ($v_{comp} \rightarrow 0$ y $v_{tracc} \rightarrow 0$)

Si se divide la expresión 91 y 92 se obtiene:

$$\frac{\frac{E_{comp}}{K_{nc}}}{\frac{E_{comp}}{K_{nc}} - \frac{E_{comp}}{K_{nt}}} \rightarrow \frac{\sigma_c}{\sigma_t} \quad (93)$$

y colateralmente se obtiene:

$$\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = \left[1 - \frac{\sigma_t}{\sigma_c} \right] \frac{E_{comp}}{E_{tracc}} \quad (94)$$

cuando ($v_{comp} \rightarrow 0$ y $v_{tracc} \rightarrow 0$)

Con el objetivo de obtener relaciones analíticas generales (figura 87) entre los parámetros macro y micro se ha realizado un estudio estocástico preliminar. En el mismo se han realizado estocásticamente un total de 443 ensayos virtuales a compresión y 359 a tracción (figura 88 y 89). De los cuales se ha extraído la información que se presenta a continuación.

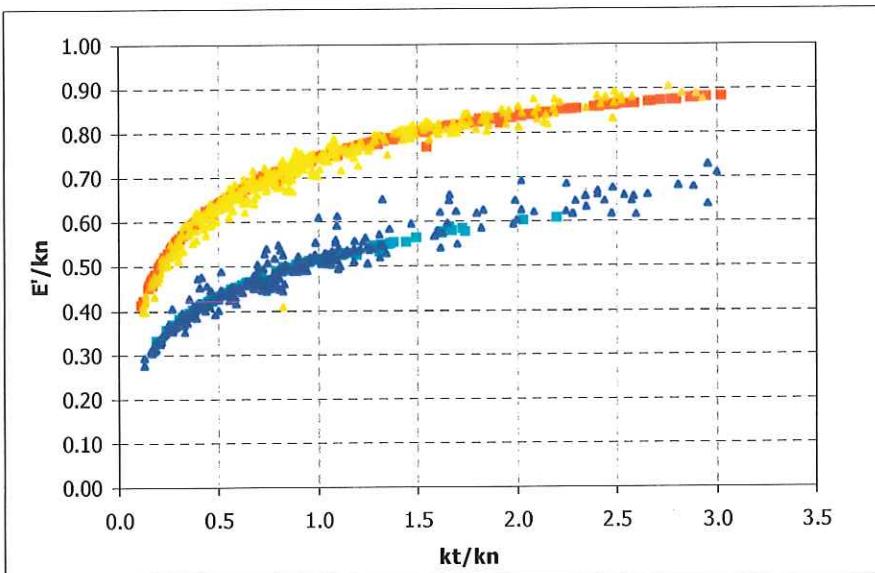


Figura. 88: Relación entre el módulo de Young aparente E' y el parámetro adimensional

$$\frac{K_t}{K_n} \text{ (compresión y tracción) donde } E' = \frac{E}{(1-v)} \text{ y } v = \frac{v}{(1-v)}.$$

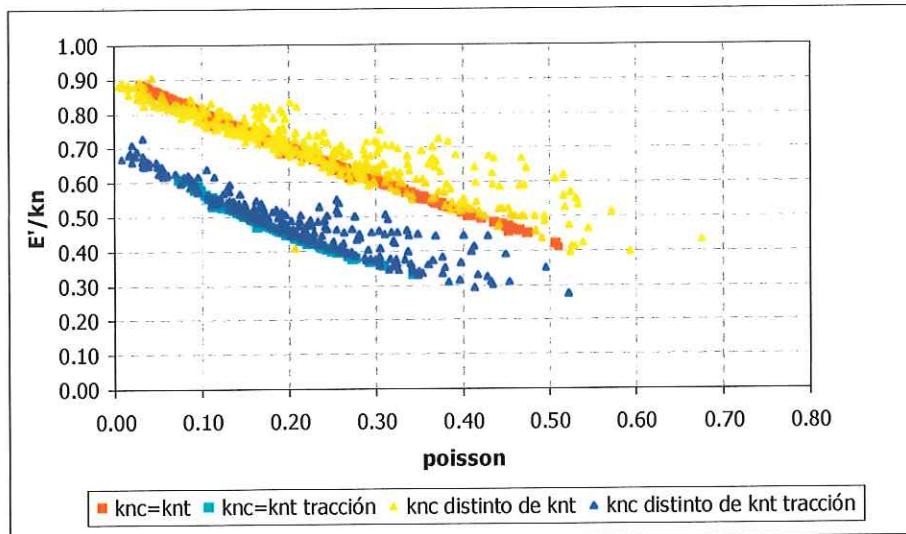


Figura. 89: Relación entre el módulo de Young aparente E' y el coeficiente de Poisson

$$\text{aparente } v' \text{ (compresión y tracción) donde } E' = \frac{E}{(1-v)} \text{ y } v' = \frac{v}{(1-v)}.$$

En las figuras 88 y 89 se refleja un estudio estocástico entre las relaciones adimensionales macro y micro para diferentes relaciones entre K_{nc} y K_{nt} . Se demuestra que la tendencia del comportamiento es la misma que las obtenidas en el estudio preliminar ($K_{nc}=K_{nt}$), solo que las variables que las interrelacionan toman valores diferentes para las diversas relaciones entre K_{nc}/K_{nt} . En la figura 89 se puede evidenciar que para cada K_{nc}/K_{nt} , existe una tendencia lineal que caracteriza las relaciones entre las variables adimensionales (E_{comp}/K_{nc} vs v_{comp} y E_{tracc}/K_{nt}). Este aspecto permiten afirmar que las ecuaciones de las diferentes rectas y los coeficientes que la caracterizan son diferentes para cada relación (K_{nc}/K_{nt}), propiciando que exista una familia de rectas (figura 89) para describir su comportamiento. La anterior afirmación permite expresar desde el punto de vista matemático (figura 87) que:

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = -a_c v_{comp} + b_c \quad (95)$$

$$\frac{E_{tracc}}{K_{nt}} = -a_t v_{tracc} + b_t \quad (96)$$

si:

$$v_{comp} = 0.0 \rightarrow \frac{E_{comp}}{K_{nc}} \rightarrow 0.9 \rightarrow \frac{\sigma_c R}{R_n} \quad \therefore \quad b_c = \frac{\sigma_c R}{R_n}$$

$$v_{tracc} = 0.0 \rightarrow \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} \rightarrow 0.9 \rightarrow \frac{(\sigma_c - \sigma_t)R}{R_n} \quad \therefore \quad b_t = \frac{(\sigma_c - \sigma_t)R}{R_n}$$

y de mismo modo:

$$v_{comp} = \frac{1}{2} \rightarrow \frac{E_{comp}}{K_{nc}} \rightarrow 0.0 \quad \therefore \quad a_c = 2b_c = 2 \frac{\sigma_c R}{R_n}$$

$$v_{tracc} = \frac{1}{2} \rightarrow \frac{E_{tracc}}{K_{nt}} \rightarrow 0.0 \quad \therefore \quad a_t = 2b_t = 2 \frac{(\sigma_c - \sigma_t)R}{R_n}$$

lo que implica que:

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = (1 - 2v_{comp}) \frac{\sigma_c R}{R_n} \quad (97)$$

$$\frac{E_{tracc}}{K_{nt}} = (1 - 2v_{tracc}) \frac{(\sigma_c - \sigma_t)R}{R_n} \quad (98)$$

Dividiendo la ecuación 97 y 98 se tiene que:

$$\frac{K_{nc}}{K_{nt}} = \left[1 - \frac{\sigma_t}{\sigma_c} \right] \frac{(1 - 2v_{tracc}) E_{comp}}{(1 - 2v_{comp}) E_{tracc}} \quad (99)$$

que realizando $v_{comp} \rightarrow 0$ y $v_{tracc} \rightarrow 0$ se obtiene la ecuación 94 ($v_{comp} \rightarrow 0$ y $v_{tracc} \rightarrow 0$) como caso particular. Esta deducción demuestra que las deducciones generales son correctas ya que contemplan el caso particular (94) ya demostrado. La expresión 99 es válida para los casos en que $\sigma_c \neq \sigma_t$ y $\sigma_c \gg \sigma_t$, ya que cuando $\sigma_c = \sigma_t$ la expresión 96 o 98 se anula, porque se obtiene un caso particular donde $\sigma_c = \sigma_t = \sigma$, $v_c = v_t$ y $E_c = E_t = E$, por lo tanto $K_{nc} = K_{nt} = K_n$ ($K_{nc}/K_{nt} = 1$).

De forma análoga al estudio realizado en la dirección normal se realiza en la dirección tangencial. Desde el punto de vista microscópico se puede plantear que:

$$F_{Tmax} = R_T = K_t u_{Tmax} \quad (100)$$

Macroscópicamente se conoce que:

$$\tau = \mathbf{G} \gamma \quad (101)$$

partiendo de que la rotación de una partícula esférica se caracteriza en este caso por:

$$\theta = \operatorname{tg} \left[\frac{u_T}{R} \right] \approx \frac{u_T}{R} = \gamma \quad (102)$$

si $\theta \ll 0$

Dividiendo la expresión 100 por la 101 se obtiene:

$$\frac{\tau}{R_T} = \frac{\mathbf{G}_{comp}}{K_T R} \quad (103)$$

Asumiendo que: $\tau = (1 - a_o) \sigma_c$ y despejando $\sigma_c = (1 - 2v_{comp}) \frac{E_{comp} R_n}{K_{nc} R}$ de 97 y

conociendo que $\mathbf{G} = \frac{E}{2(1+v)}$ se obtiene:

$$\frac{R_T}{R_n} = (1 - a_o) \frac{2(1 + v_{comp}) K_t}{(1 - 2v_{comp}) K_{nc}} \quad (104)$$

Con el objetivo de buscar una expresión general (figura 90) que describa el comportamiento de la relación existente entre las variables adimensionales v_{comp} vs K_t/K_{nc} o v_{tracc} vs K_t/K_{nt} se parte de una expresión general de una hipérbola que se define de modo general por:

$$v_{comp} = \frac{1 + a_o \frac{K_t}{K_{nc}}}{a_1 + a_2 \frac{K_t}{K_{nc}}} \quad (105)$$

$$v_{comp} = \frac{1 + b_o \frac{K_t}{K_{nc}}}{b_1 + b_2 \frac{K_t}{K_{nc}}} \quad (106)$$

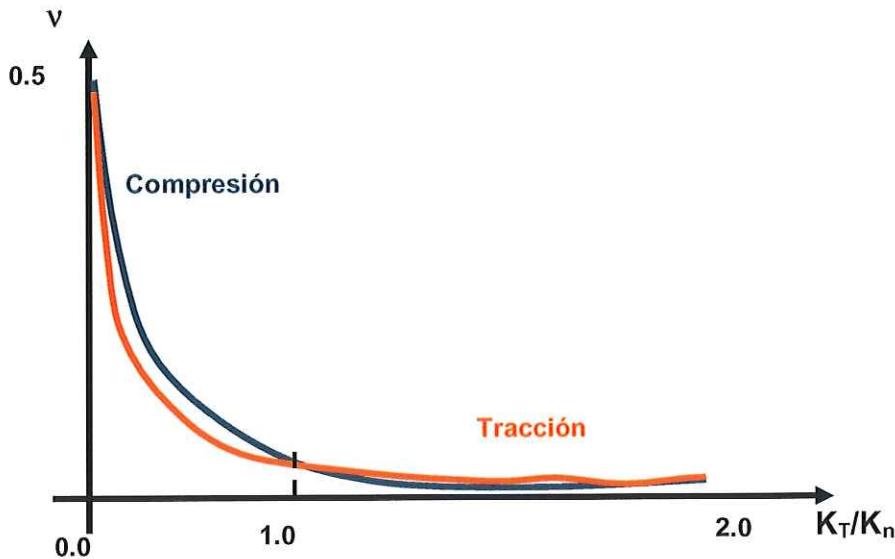


Figura. 90: Relación entre el coeficiente de Poisson v y K_T/K_n

Aplicando límite a la expresión anterior cuando $K_T/K_{nc} \rightarrow \infty$ o $K_T/K_{nt} \rightarrow \infty$ se demuestra que a_o y b_o son cero.

$$\lim_{\frac{K_T}{K_{nc}} \rightarrow \infty} [v_{comp}] = \lim_{\frac{K_T}{K_{nc}} \rightarrow \infty} \left[\frac{1 + a_o \frac{K_T}{K_{nc}}}{a_1 + a_2 \frac{K_T}{K_{nc}}} \right], \rightarrow \frac{a_o}{a_2} = 0.0 \therefore a_o = 0.0$$

$$\lim_{\frac{K_T}{K_{nt}} \rightarrow \infty} [v_{tracc}] = \lim_{\frac{K_T}{K_{nt}} \rightarrow \infty} \left[\frac{1 + b_o \frac{K_T}{K_{nt}}}{b_1 + b_2 \frac{K_T}{K_{nt}}} \right], \rightarrow \frac{b_o}{b_2} = 0.0 \therefore b_o = 0.0$$

lo que implica que 105 y 106 se exprese como:

$$v_{comp} = \frac{1}{a_1 + a_2 \frac{K_T}{K_{nc}}} \quad (107)$$

$$v_{comp} = \frac{1}{b_1 + b_2 \frac{K_T}{K_{nc}}} \quad (108)$$

Se pueden determinar algunos valores de las constantes arbitrarias de las ecuaciones 107 y 108 por:

$$\frac{K_T}{K_{nc}} = 0 \rightarrow v_{comp} = \frac{1}{2}, \therefore v_{comp} = \frac{1}{a_1 + a_2 \frac{K_T}{K_{nc}}}, a_1 = 2$$

$$\frac{K_T}{K_{nt}} = 0 \rightarrow v_{tracc} = \frac{1}{2}, \therefore v_{tracc} = \frac{1}{b_1 + b_2 \frac{K_T}{K_{nc}}}, b_1 = 2$$

realizando algunas transformaciones matemáticas con la ecuación 99, 107 y 108 se demuestra que:

$$a_2 = \frac{(\sigma_c - \sigma_t)}{E_t v_c}$$

$$b_2 = \frac{\sigma_c}{E_c v_t}$$

lo que implica que (figura 90):

$$v_{comp} = \left[\frac{1}{2} - \left(\frac{(\sigma_c - \sigma_t)}{2E_{tracc}} \right) \frac{K_T}{K_{nc}} \right] \quad (109)$$

$$v_{tracc} = \left[\frac{1}{2} - \left(\frac{\sigma_c}{2E_{comp}} \right) \frac{K_T}{K_{nt}} \right] \quad (110)$$

Despejando $\frac{K_T}{K_{nc}}$ y $\frac{K_T}{K_{nt}}$ de la expresión 109 y 110 se obtiene:

$$\frac{K_T}{K_{nc}} = (1 - 2v_{comp}) \frac{E_{tracc}}{(\sigma_c - \sigma_t)} \quad (111)$$

$$\frac{K_T}{K_{nt}} = (1 - 2v_{tracc}) \frac{E_{comp}}{\sigma_c} \quad (112)$$

Conociendo las expresiones 97, 98 y 109, 110 se puede determinar las expresiones que relacionan $E_{comp}/K_{nc} \sim K_T/K_{nc}$, $E_{tracc}/K_{nt} \sim K_T/K_{nt}$ (figura 91).

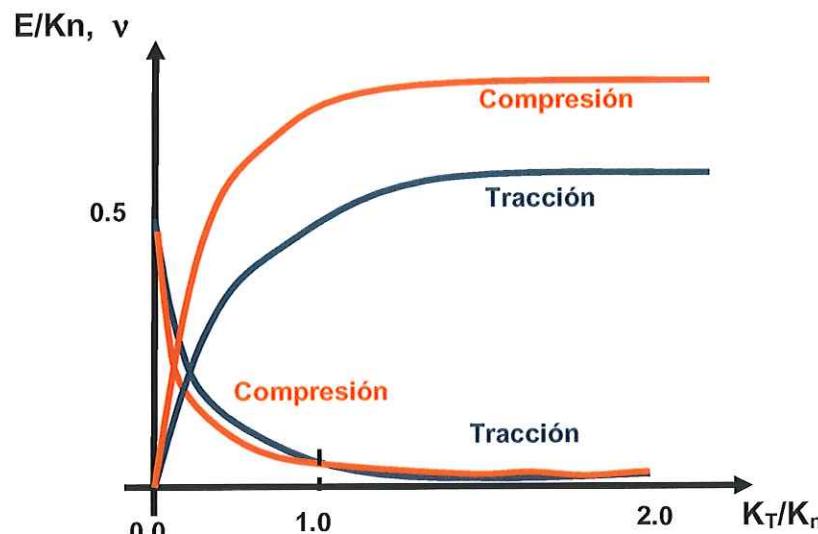


Figura. 91: Relación entre $E_{comp}/K_{nc} \sim K_T/K_{nc}$ y $v \sim K_T/K_n$

Si se sustituye en las expresiones 97 y 98 las ecuaciones 111 y 112 respectivamente se obtiene:

$$\frac{E_{comp}}{K_{nc}} = \left[\frac{(\sigma_c - \sigma_t)R}{R_n} \frac{\sigma_c}{E_{tracc}} \right] \frac{K_T}{K_{nc}} \quad (113)$$

$$\frac{E_{tracc}}{K_{nt}} = \left[\frac{(\sigma_c - \sigma_t)R}{R_n} \frac{\sigma_c}{E_{comp}} \right] \frac{K_T}{K_{nt}} \quad (114)$$

lo que implica que:

$$K_T = \frac{\frac{E_{comp}}{(\sigma_c - \sigma_t)R} - \sigma_c}{R_n - E_{tracc}} \quad (115)$$

Conclusiones

Conclusiones

Después de terminada esta investigación, llegan a conclusiones es la fase más compleja e importante. Si a esto se le añade utilidad de la temática abordada, hace de esta etapa la más significativa, ya que en ella se sintetizan los resultados relevantes obtenidos en dicho trabajo. Partiendo de esta base se llegan a las siguientes conclusiones:

- Se ha logrado definir la región acotada donde los valores y magnitudes de los parámetros microestructurales que caracterizan al modelo constitutivo de contacto, tiene sentido físico. Este aspecto facilita los futuros trabajos de investigación en esta temática cuando se realicen los estudios de estocasticidad por el método de Monte Carlo, o mediante la aplicación de técnicas de optimización multicriterial.
- Como primer resultado se establece una metodología para estimar los parámetros microestructurales, considerando que $K_{nc}=K_{nt}$. Esta metodología tiene un carácter general y posibilita obtener las propiedades constitutivas del contacto para cualquier material que cumpla con la relación establecida ($K_{nc}=K_{nt}$).
- Se han establecido relaciones analíticas que permiten conocer en función de los valores microestructurales, elásticos, qué valor deben tener sus correspondientes valores plásticos.
- Se ha establecido una metodología general para estimar los parámetros microestructurales considerando que $K_{nc} \neq K_{nt}$. Esta metodología tiene un carácter orgánico que posibilita obtener las propiedades de los parámetros microestructurales de cualquier material, a partir de las propiedades constitutivas macroestructurales conocidas.
- Se obtuvo una relación que permite definir qué relación K_{nc}/K_{nt} hay que emplear en función de las propiedades constitutivas macroestructurales, cuando se trabaja con el modelo que considera que $K_{nc} \neq K_{nt}$.
- Se definió que relación K_T/K_{nc} y K_T/K_{nt} es necesario emplear en función de los parámetros constitutivos macroestructurales.
- Se ha logrado establecer relaciones analíticas que relacionan los parámetros constitutivos macroestructurales con los parámetros constitutivos microestructurales plásticos en 2D y 3D.
- La aplicación preliminar del Método de Monte Carlo permitió definir que para ciertas relaciones entre los parámetros macro y micro ($E_{comp}/K_{nc} \sim v_{comp}$ y $E_{trace}/K_{nt} \sim v_{trace}$) existen una tendencia lineal, la cual esta representada por una familia de rectas con pendiente y término independiente diferentes en función de los parámetros constitutivos.

Recomendaciones

Recomendaciones

A partir de los resultados obtenidos y de las conclusiones enunciadas se considera oportuno realizar las siguientes recomendaciones:

- Realizar el mismo estudio de estimación de las propiedades microestructurales realizando ensayos virtuales en 3D. Definición de las relaciones de los parámetros constitutivos microestructurales en 2D y 3D.
- Obtener la mayor gama de curvas que relacionan los parámetros macroestructurales y microestructurales para un mayor número de relaciones K_{ne}/K_{nt} . Realización de estudios estocásticos para lograr este fin.
- Demostrar, mediante simulaciones numéricas, las deducciones analíticas obtenidas para estimar los parámetros constitutivos microestructurales plásticos.
- Realizar investigaciones dirigidas a la caracterización experimental de diferentes tipos de materiales. Establecer sistemas de instrumentación que posibiliten obtener el mayor número de parámetros de control que posibiliten con posterioridad realizar y calibrar las correspondientes simulaciones numéricas de los mismos.
- Aplicación del Método de los Elementos Discretos a la solución de problemas reales de la ingeniería civil y de minas entre otras aplicaciones.

Referencias

Referencias.

- [1] P.A. Cundall and O.D.L. Strack. A discrete numerical method for granular assemblies. *Geotechnique*, 2, 47–65, (1979).
- [2] C.S. Campbell. Rapid granular flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2, 57–92, (1990).
- [3] *Eng. Comput.*, 9(2), (1992). Special issue, Editor: G. Mustoe.
- [4] J. Williams and R. O'Connor. Discrete element simulation and contact problem. *Arch. Comp. Methods in Engineering*, 6(4), (1999).
- [5] J. Argyris. An excursion into large rotations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 32, 85–155, (1982).
- [6] D.J. Benson and J.O. Hallquist. A simple rigid body algorithm for structural dynamics programs. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 12, 723–749, (1986).
- [7] T.J.R. Hughes. *The Finite Element Method. Linear Static and Dynamic Analysis*. Prentice-Hall, (1987).
- [8] L.M. Taylor and D.S. Preece. Simulation of blasting induced rock motion. *Eng. Comput.*, 9(2), 243–252, (1992).
- [9] M. Raous, L. Cangemi, and M. Cocu. A Consistent Model Coupling Adhesion, Frictional Unilateral Contact. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 177, 383–399, (1999).
- [10] P.G. Underwood. Dynamic relaxation. In T. Belytschko and T.J.R. Hughes, editors, *Computational Methods for Transient Dynamic Analysis*, Amsterdam. North-Holland, (1983).
- [11] *SIMPACT. User Manual. A finite element code for structures under dynamic and impact loadings*. Report No. 236, CIMNE, Barcelona, (1997).
- [12] C. Thornton. Applications of DEM to process engineering problems. *Eng. Comput.*, 9(2), 289–297, (1992).
- [13] H. Huang. *Discrete Element Modeling of Tool-Rock Interaction*. PhD thesis, University of Minnesota, (1999).
- [14] J. Rojek, E. Oñate, F. Zarate and J.M. Canet. Modelling of rock, soil and granular materials using spherical elements. *European Conference on Computational Mechanics-2001*.

Bibliografía

Bibliografía

- Anandarajah A., "Discrete Element Method for Simulating Behaviour of Cohesive Soil". Journal of Geotechnical Engineering, vol. 120, n° 9, pp. 1593-1610 (1994).
- Arumugan A., Zaman M. y Laguros J., "Finite element algorithm for jointed concrete pavements subjected to moving aircraft". Computers and Geotechnics, vol. 14, n°3 pp. 121,-147 (1992).
- Bagi K., Bojtar I., y Galos M. "A note on the role of internal structure of rocks in the deviations of compression strength results" Reporte de investigaciones, 1999
- Bierowski L.G, Shiro Maeno, Hitoshi Gotoh, and Eiji Harada, "DEM-FEM model of the outflow of backfilling sand from behind a seawall under wave motion", Reporte de investigaciones, 2002
- Billaux D. and Cundall P. "Simulation des géomatériaux par la méthode des éléments Lagrangiens". Rev. Franc. Géotech. No. 63, pp.9-21 (1993)
- Brady B. and Lorig L., "Analysis of rock reinforcement using finite difference methods". Computers and Geotechnics, 5, pp. 123-149, England (1988).
- Brady H., "Dynamic performance and design of underground excavations in jointed rock". Static and dynamic considerations in rock engineering, Brummer (ed.), Balkema, Rotterdam (1990).
- Burman, B.C., "A numerical approach to the mechanics of discontinua". PhD Thesis, James Cook Univ. of N. Queensland, Townsville, Australia (1971).
- Burrel Sara, "Estudio del problema de desgaste empleando el Método de las Partículas". Trabajo de Diploma, Escuela Técnica Superior de Caminos Canales y Puertos de Barcelona, Universidad Politécnica de Cataluña, 2003. Tutor: Eugenio Oñate Ibañez de Navarra.
- Chang C.S. and Chao S.J., "Discrete Element Analysis for Active and Passive Pressure Distribution on Retaining Wall". Computers and Geotechnics. vol. 16, n° 4, pp. 291--'310 (1994).
- Chang C.S. and Chao S.J., "Discrete Element Method for Bearing Capacity Analysis". Computers and Geotechnics, vol. 12, n° 4, pp. 27-)288 (1991).
- Chang C.S., "Discrete Element Method for Slope Stability Analysis". Journal of Geotechnical Engineering, vol. 118, n° 12, pp. 1889-1905 (1992).

- Cleary P., **“Modelling comminution devices using DEM”**, Reporte de investigaciones, 2001
- Cundall P.A , Drescher A, Strack O.D.L., **“Numerical experiments on granular assemblies; Measurements and observations”**, Reporte de investigaciones, 1982
- Cundall P.A **“PFC^{2D}, Particle flow code in 2 dimensions”**, Reporte de investigaciones, 1995
- Cundall P.A, Strack O.D.L., **“A discrete numerical model for granular assemblies”**, Reporte de investigaciones, 1979.
- Cundall P.A., **“Computer simulations of dense sphere assemblies”**, Reporte de investigaciones ,1988
- Cundall, P. A., **“Distinct element models of rock and soil structure”**. Analytical and Computational Methods in Engineering Rock Mechanics, pp. 129-163. London (1987).
- Cundall, P. A., **“Formulation of a three-dimensional distinct element model-part II. Mechanical calculations for motion and interaction of a system composed of many polyhedral blocks”**. Int. J. Rock Mech. Sci. & Geomech Abstr. vol. 25, No. 3, pp. 107-116, England (1988).
- Cundall, P.A., **“A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems”**. Symposium Soc. Internat Mécanique des Roches, Nancy (1971), pp. 2-8.
- Cundall, P.A., **“UDEC A generalized distinct element program for modelling jointed rock”**. European Research Office, London, tech. report contract number DAJA37-79-C-0548 (1980).
- Cundall, P.A.. **“Computer modelling of jointed rock masses”**. U.S. Army Engineer Waterways Experiment Station, Vicksburg, Mississippi, Tech. Report N-78-4 (1978).
- Favier J.F, M.H. Abbaspour-Fard, M. Kremmer and A.O. Raji **“Shape representation of axisymmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles”**. Reporte de investigaciones ,1999
- Gethin D.T, R.S Ransing, R.W Lewis, M.Dutko, A.J.L Crook **“Numerical comparison of a deformable discrete element model and an equivalent continuum analysis for the compaction of ductile porous material”** 2001
- Gethin D.T, R.S Ransing, R.W Lewis, M.Dutko, A.J.L Crook **“Numerical comparison of a deformable discrete element model and an equivalent continuum analysis for the compaction of ductile porous material”**, Reporte de investigaciones, 2001

- Ghaboussi, L, "Fully deformable discrete element analysis using finite element approach". Computer and Geotechnics vol. 5. pp. 175-195, England (1988).
- Gilli J.A., E.E.Alonso "Discontinuous numerical model for partially saturated soils at low saturation" Reporte de investigaciones ,1988
- Goodman., R.E., R.L. Taylor and T. Brekke, "A model for the mechanics of jointed rock". Journal of Soil Mechanics and Foundation Division ASCE, v. 94, n. SM3 ,pp. 637-658 (1968).
- Graham G.W. Mustoe "A generalized formulation of the discrete element method". Reporte de investigaciones ,1992
- Han K. , Peric D., Crook A.J.L., y Owen D.R.J, "A combined finite/discrete element simulation of shot peening processes; Part one: studies on 2D interaction laws",, Reporte de investigaciones, 2000
- Hassen F.H, SpinnlerI. y FineI. "A new approach for rock mass cavability modelling", Reporte de investigaciones , 1995
- Hazzard,J.F. R.P. Young, S.J. Oates, "Numerical modelling of seismicity induced by fluid injection in a fractured reservoir", Reporte de investigaciones, 2003
- Hocking, G., "The discrete element method for analysis of fragmentation of discontinua". Engineering Computations, vol. 9, pp. 145-155 (1991).
- Homand F. y Rode N. "Block modelling of jointed cliffs". Mechanics of jointed and faulted rock, Rossmannith (ed.), Balkema, Rotterdam (1990).
- Huang H.. "Discrete Element Modeling of Tool-Rock Interaction". PhD thesis, University of Minnesota, (1999).
- Ishida T., "Application of distinct element analysis to three simple rock models aimed at practical application to toppling failure of fissured rock slopes", Reporte de investigaciones, 1990
- Krishnasamy J. and Jakiela M. J., "A method to resolve ambiguities in corner-corner interactions between polygons in the context of motion simulations". Engineering Computations, vol. 12, n° 2, pp. 135-144 (1995).
- Kuhn M.R "A flexible boundary for three dimensional DEM particles assemblies" Reporte de investigaciones, 1995
- Kuo-Neng, G.K.Chang, J.N.Meegoda "Micromechanical simulation of hot Mix asphalt" Reporte de investigaciones

- Kuwabara H., Aso T., Hironaka M. “**Pile driving analysis using Distinct Element Method**” Reporte de investigaciones
- Munjiza A., K.R.F. Andrews “**NBS Contact detection algorithm for bodies of similar size**” Reporte de investigaciones, 1998
- Murijiza A., Owen D. R. J., Bicanic N. “**A Combined Finite-Discrete Element Method in Transient Dynamics of Fracturing Solids**”. Engineering Computations, vol. 12, n° 2, pp. 145-174 (1995).
- Oñate,,J. Rojek, F.Zarate, et al. “**Computational modelling of mould manufacture for the lost foam process**” 2003
- Otsu M., K.Mori, K. Osakada “**Inclusion of pressure of liquid phase in three-dimensional distinct element simulation of mushy-state forming.**” Reporte de investigaciones, 1998
- *Otsu M., Mori K., Osakada K* “**Determination of optimum working conditions in mushy-state upsetting of magnet using distinct element simulation**”, Reporte de investigaciones, 1996
- Otsu M., Mori K., Osakada K., “**Determination of optimum working conditions in mushy-state upsetting of magnet using distinct element simulation**”, Reporte de investigaciones , 1996
- Pan D. and Reed B. “**A coupled distinct element-finite element method for large deformation analysis of rock masses**”. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech Abstr. vol. 28, No. 1, pp. 93-99, England (1991).
- Perkins E., and J.R. Williams “**A fast contact detection algorithm insensitive to object sizes**” Reporte de investigaciones, 2001
- Rojek R., E. Oñate, F.Zarate, J. Miguel “**El modelado de rocas, suelos, y materiales granulares usando elementos esféricos**” 2001
- Selvadurai A.P.S, K.Sepehr, “**Two-dimensional discrete element simulations of ice-structure interaction**”, Reporte de investigaciones, 1998
- Shi G. y Goodman R.E, “**Discontinuous deformation analysis . A new method for computing stress, strain and sliding of block systems**”, Reporte de investigaciones, 1988
- Shi, G. and Goodman R.E., “**Discontinuous deformation analysis-A new method for computin stress, strain and sliding of block systems**”. Key Questions in Rock Mechanics, Balkema, Rotterdam, pp. 381-391(1988).
- Swoboda G., Stumvoll M. and Beichuan H., “**Damage tensor theory and its applicaton to tunnelling**”. Mechanics of Jointed and Faulted Rock, Rossmanith (ed.), Balkema, Rotterdam (1990).

- Tang-Tat Ng., Petrakis E. "Small-strain response of random arrays of spheres using Discrete Element Method" Reporte de investigaciones, 1996
- Topping B.H.V. and Khan A.I., "Parallel Computation Schemes for Dynamic Relaxation". Engineering Computations, vol. 11, n° 6, pp. 513-548 (1994).
- Trent B.C., L.G.Margolin "A Numerical laboratory for granular solids" Reporte de investigaciones 1992
- Underwood P.G.. "Dynamic relaxation". In T. Belytschko and T.J.R. Hughes, editors, "Computational Methods for Transient Dynamic Analysis", Amsterdam. North-Holland, (1983).
- Vieira de Lemos, J., "A distinct model for dynamic analysis of jointed rock with application to dam foundations and fault motion". PhD thesis, University of Minnesota, U.S.A. (1987).
- Wilkins, M.L., "Calculation of elastic-plastic flow". Report UCRL-7322, Lawrence Radiation Laboratory, Livermore (1969).
- Williams JR. and O'Connor R. "A Linear Complexity Intersection Algorithm for Discrete Element Simulation of Arbitrary Geometries". Engineering Computations, vol. 12, n° 2, pp. 185-201 (1995).
- Zienkiewicz, O.C., B. Best, C. Dullage and K.G. Stagg, "Analysis of non-linear problems in rock mechanics with particular reference to jointed rock systems". Proc. 2nd. Cong. ISRM, Belgrade, V3, pp. 8-14 (1971).