



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA

SIMULACIÓN DE MEDIOS GRANULARES

DAVID ALEJANDRO APONTE ROJAS

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería, Área Curricular de Ingeniería Civil y Agrícola
Bogotá, Colombia
2018

SIMULACIÓN DE MEDIOS GRANULARES

DAVID ALEJANDRO APONTE ROJAS

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ingeniería Geotecnia

Director (a):
Ingeniero Félix Hernández Rodríguez

Línea de Investigación:
Simulación del comportamiento del suelo

Universidad Nacional de Colombia
Facultad Ingeniería, Departamento de Ingeniería Civil y Agrícola
Bogotá, Colombia

2018

Resumen

La resistencia al corte en medios granulares es producto de las interacciones internas que se desarrollan entre las partículas que lo conforman. Dichas interacciones están en función de la forma de los elementos que componen el medio y de sus propiedades físicas. El análisis de la resistencia al corte, en términos generales, no estudia de forma detallada las múltiples interacciones que se pueden desarrollar entre los elementos que conforman el medio granular; esto es debido a que dicho análisis no implica la simulación de dichas interacciones. El presente estudio aborda el tema de resistencia al corte como resultado de la interacción de los elementos que conforman el medio y, simulando las múltiples interacciones entre las partículas frente a deformaciones controladas, logra obtener propiedades equivalentes de resistencia.

Palabras clave: Resistencia al corte, medios granulares, dinámica molecular

Abstract

The shear strength resistance of granular materials is due the interactions between the particles of the granular medium. These interactions are a function of the shape and the physical properties of the particles. The shear strength analysis does not study in a detailed way, the multiple interactions that can be developed between the elements of the granular material. The present document addresses the issue of resistance to shear as a result of the interaction of the elements that make up the medium to obtain equivalent properties of resistance.

Keywords: Shear strength resistance, granular media, molecular dynamics

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
1. DINÁMICA DE CUERPOS RÍGIDOS	17
2. MÉTODO DE SIMULACIÓN	38
3. CÓDIGO PARA LA SIMULACIÓN DE ELEMENTOS DISCRETOS	47
4. SIMULACIÓN DE LA RESISTENCIA AL CORTE	63
5. CONCLUSIONES.....	96
6. BIBLIOGRAFÍA.....	101

LISTA DE FIGURAS

Figura No. 1 : Esquema del proceso de impacto entre dos partículas	18
Figura No. 2 Esquema para el cálculo del desplazamiento normal dentro del área circular generada por esfuerzos normales	25
Figura No. 3: Esquema de Contacto entre una esfera y un semi-espacio infinito	27
Figura No. 4: Esquema del proceso de impacto entre dos partículas (a) Condiciones pre-impacto (b) Deformación durante el impacto (c) Condiciones pos-impacto (d) Longitud de traslapo (e) Modelo de contacto	29
Figura No. 5 Esquema de análisis del coeficiente de restitución para el modelo de Kelvin-Voigt ..	29
Figura No. 6 Variación del Coeficiente de Restitución-Modelo de Kelvin-Voigt	35
Figura No. 7 Coeficiente de restitución como función de la velocidad, según los datos experimentales de Bridges et al. 1996 (R corresponde a los radios y T a la temperatura)	36
Figura No. 8 Esquema-Longitud de traslapo. (a) Fase inicial de la modelación, contacto inminente (b) Traslapo (c) Detalle del traslapo y longitud del traslapo	42
Figura No. 9: Modelo de Contacto-Fc	43
Figura No. 10 Esquema general del Algoritmo de Verlet	44
Figura No. 11 Esquema de ciclos conjugados	51
Figura No. 12 Estructura del vector B	54
Figura No. 13 Simulación de un sistema de energía total constante-Condición inicial	56
Figura No. 14 Simulación de un sistema de energía total constante-Movimiento de los elementos para diferentes intervalos de tiempo	57
Figura No.15 Simulación de un sistema de energía total constante-Variación de la energía total del sistema en función del tiempo	58
Figura No. 16 Análisis de la variación de los valores de energía total en función del tiempo	59
Figura No. 17 Variación de la energía mecánica total para una partícula rebotando sobre una superficie plana con un modelo de contacto tipo Hertz-Oquendo, 2007 [19]	59
Figura No. 18 Análisis de Consistencia-Ensayo 1	60
Figura No. 19 Fuerza de Contacto en Función del Tiempo- Análisis de Consistencia-Ensayo 1	61
Figura No. 20 Análisis de Consistencia-Ensayo 2	61

Figura No. 21 Fuerza de Contacto en Función del Tiempo-Tres partículas en contacto con otra igual- Análisis de Consistencia-Ensayo 2.....	62
Figura No. 22 Condiciones de las fronteras móviles y su relación de escala con los elementos que conforman la muestra	64
Figura No. 23 Inicialización del Código-Condiciones Iniciales para la Simulación: Disposición de las partículas en función del tiempo.-Ensayo 1 (cada imagen corresponde a un tiempo determinado)	67
Figura No. 24 Simulación de Corte-Ensayo 1: Disposición de las partículas en función del tiempo (m).-Velocidad de Corte: 0,005 m/s- Cantidad de Elementos: 40	68
Figura No. 25 Partículas de la superficie de falla-Las unidades que se presentan en los ejes vertical y horizontal son metros.....	69
Figura No. 26 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 1 masa de cada partícula: 0,0625 kg.....	70
Figura No. 27 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 2 masa de cada partícula: 0,125 kg	70
Figura No. 28 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 3 masa de cada partícula: 0,1875 kg.....	71
Figura No. 29 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 4 masa de cada partícula: 0,25 kg	71
Figura No. 30 Fuerza Cortante-Ensayo 1	72
Figura No.31 Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 1	73
Figura No. 32 Inicialización del Código-Condiciones Iniciales para la Simulación: Disposición de las partículas en función del tiempo (m).-Ensayo 2	74
Figura No. 33 Simulación de Corte-Ensayo 2: Disposición de las partículas en función del tiempo(m).-Velocidad de Corte: 0,005 m/s- Cantidad de Elementos: 40.....	75
Figura No. 34 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 1 masa de cada partícula: 0,0625 kg.....	76
Figura No. 35 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 2 masa de cada partícula: 0,125 kg	76
Figura No. 36 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 3 masa de cada partícula: 0,1875 kg.....	77
Figura No. 37 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 4 masa de cada partícula: 0,25 kg	77
Figura No. 38 Fuerza Cortante-Ensayo 2	78
Figura No. 39 Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 2	78
Figura No. 40 Inicialización del Código-Condiciones Iniciales para la Simulación: Disposición de las partículas en función del tiempo(m).-Ensayo 3	80
Figura No. 41 Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal 1 masa de cada partícula: 0,0625 kg.....	81
Figura No. 42 Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal 2 masa de cada partícula: 0,125 kg	81

Figura No. 43	Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal	3	masa de cada partícula: 0,1875 kg.....	82
Figura No. 44	Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal	4	masa de cada partícula: 0,25 kg	82
Figura No. 45	Fuerza Cortante-Ensayo 3			83
Figura No. 46	Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 3			84
Figura No. 47	Simulación de Corte-Ensayo 4: Disposición de las partículas en función del tiempo (m).-Velocidad de Corte: 0,005 m/s- Cantidad de Elementos: 40			85
Figura No. 48	Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal	1	masa de cada partícula: 0,0625 kg.....	86
Figura No. 49	Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal	2	masa de cada partícula: 0,125 kg	86
Figura No. 50	Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal	3	masa de cada partícula: 0,1875 kg.....	87
Figura No. 51	Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal	4	masa de cada partícula: 0,25 kg	87
Figura No. 52	Fuerza Cortante-Ensayo 4			88
Figura No. 53	Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 4			88
Figura No. 54	Resumen de Envoltentes de Falla-Valores Pico			89
Figura No. 55	Resumen de Envoltentes de Falla-Valores Residuales.....			90
Figura No. 56	Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 1			91
Figura No. 57	Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 2			92
Figura No. 58	Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 3.			93
Figura No. 59	Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 4			94

LISTA DE TABLAS

Tabla No. 1 Definición de Variables	49
Tabla No. 2 Datos de entrada.....	50
Tabla No. 3 Cálculos Iniciales	51
Tabla No. 4 Ciclo general – Algoritmo de Verlet.....	53
Tabla No. 5 Ciclo general – Almacenamiento de Datos.....	55

INTRODUCCIÓN

En toda teoría física, las relaciones de causalidad que se proponen para la descripción de fenómenos se generan a partir de las observaciones directas o indirectas del mundo natural. Dichas aproximaciones a los comportamientos observados son las que permiten formular problemas y construir modelos que simulan, con cierto grado de veracidad, la realidad medida.

En la actualidad, algunos estudios del comportamiento del suelo se centran en el análisis de su estructura granular. Dicho enfoque considera al material como un todo y estudia la respuesta global a interacciones externas. Lo anterior, sin detallar, la microestructura y las interacciones entre los elementos que lo conforman. Las teorías de comportamiento con este enfoque, se basan en ecuaciones constitutivas de carácter tensorial; y han logrado predecir, con gran éxito, su comportamiento bajo la influencia de cargas o deformaciones.

Los parámetros utilizados en estas teorías se obtienen a partir de ensayos de laboratorio estandarizados. Ensayos triaxiales, de corte directo y pruebas edométricas son algunos de los cuales se han propuesto para la obtención de parámetros, insumos básicos de los modelos. Estas teorías han sido exitosas para el estudio de ciertos fenómenos y su aplicación en la práctica es ampliamente aceptada.

Ahora bien, los suelos no son propiamente un material continuo y homogéneo. Su estructura y comportamiento se acerca más al de un medio granular. Un sistema compuesto de granos dispersos, claramente diferenciados que chocan e interactúan entre sí, siguiendo leyes de comportamiento no lineales y cuya interacción hacen que el medio sea ampliamente disipativo, lo que genera comportamientos colectivos muy complejos.

El estudio de medios granulares, cuenta con amplios y profundos desarrollos en ingeniería y en la actualidad en la física. Los medios granulares, los cuales están formados por partículas con características, formas y tamaños diversos, que además, suelen contener agua y aire en los espacios que se forman entre ellas, requieren de un estudio más profundo con el objetivo de analizar la relación entre las interacciones microscópicas con el comportamiento macroscópico. No obstante, su dificultad, estos análisis son de gran interés, ya que partiendo de estos se puede llegar a una simulación más precisa de procesos de histéresis, comportamiento frente a cargas cíclicas, así como la simulación de fenómenos como avalanchas y deslizamientos.

Habiendo definido al suelo como un medio granular, el enfoque micromecánico, propio de la física, busca explicar el comportamiento global del material a partir de la simulación de las interacciones de los elementos que lo conforman. La compleja interacción entre partículas hace muy difícil la predicción analítica. Por lo tanto, el enfoque se apoya en la simulación computacional. De esta forma, se inicia proponiendo modelos de interacción entre granos, que luego se iteran para simular el movimiento usando algoritmos y técnicas de computación y así obtener el comportamiento global del material. Diferentes métodos avanzados de simulación han sido aplicados con éxito en estudios de medios granulares, entre los que se destacan time-driven y event-driven [1, 2, 3] y los cálculos de contact dynamics [4, 5, 6].

Otros trabajos han estudiado la posibilidad de obtener relaciones constitutivas a nivel de la macro escala partiendo de propiedades de la microestructura, no obstante, su aplicación es muy restringida y depende de condiciones y simplificaciones muy específicas [7, 8, 9]. En otras investigaciones, se ha estudiado la generación de expresiones tensoriales macroscópicas como promedios sobre el material [10, 11, 12]; y se ha estudiado la aplicación de los métodos de simulación como el DEM (Discrete Element Method) para reproducir valores macroscópicos del material [13]. Efectos globales que dependen de la microdinámica, como la propagación de ondas sonoras, también se han estudiado [14]. En general, cada uno de los trabajos que se realizan para tratar de conectar la macromecánica con la micromecánica se realizan bajo el estudio de fenómenos específicos. Aun no existe una forma general para encontrar las relaciones entre lo micro y lo macro.

El ensayo de corte directo se realiza para determinar los parámetros de resistencia, cohesión y ángulo de fricción interna de los materiales. Durante el desarrollo del mismo se presentan

fenómenos que con frecuencia no se evalúan, pero que afectan en gran medida los valores de esfuerzo cortante que arroja el ensayo. En arenas densas, el aumento de volumen en el desarrollo del ensayo de corte directo es común. Allí, como producto de la deformación sobre el plano de corte, las partículas cabalgan unas sobre otras generando un aumento del volumen de la muestra; esto a su vez arroja lecturas mayores en los datos de esfuerzo cortante durante el ensayo. Simulaciones de la microestructura, muestran que la fricción individual de los elementos que conforman el material, tiene una influencia muy pequeña en el desarrollo de la resistencia a escala macro, dicha resistencia se asocia en mayor medida al arreglo de las partículas y a las condiciones geométricas de las mismas [8].

Otros fenómenos, como la formación de taludes homogéneos, tras la liberación y apilamiento de materiales granulares, se han estudiado con el método en cuestión. Obteniendo características como el ángulo de reposo de masas homogéneas de materiales y analizándolos en función de la forma de las partículas, fricción entre las mismas y tamaño de estas [15]. Lo anterior, ha sido útil para el análisis de avalanchas en silos que contienen granos; pues dicha fricción entre granos, una característica micro, tiene una relación con el fenómeno a mayor escala.

El presente estudio se centra en complementar y aportar al entendimiento de la resistencia al corte de la macroestructura del suelo, al analizar las condiciones individuales de las partículas por medio de la simulación computacional usando métodos extraídos de la dinámica molecular [16 17 18]. Se construyó el código necesario para la simulación de medios granulares, mediante el cual se realizan los análisis correspondientes.

En primera medida, se presentan las características del método de simulación utilizado (time-drive event) y las condiciones, justificación y limitaciones del Algoritmo de Verlet, el cual es la secuencia de análisis para la simulación del comportamiento macro de los materiales. Los capítulos posteriores se centran en la definición y justificación de las leyes de fuerza micro, las cuales actúan al momento del contacto entre las partículas, las condiciones y limitaciones también serán tema en este capítulo. Siguiendo, se analiza el código generado para la simulación macro del sistema, paso a paso se desglosan las diferentes características del mismo, definiendo las funciones y explicando el porqué de cada una de las líneas de código utilizadas en la simulación. El capítulo referente a la simulación, recoge las modelaciones realizadas con el código generado, sus condiciones,

características y datos obtenidos. Finalmente, se presentan las conclusiones, recomendaciones y la visión a futuro de esta investigación.

1. DINÁMICA DE CUERPOS RÍGIDOS

El término partícula hace referencia a un elemento muy pequeño que forma parte de un material de mayor tamaño, el término no se usa para describir su forma ni las propiedades físicas que esta pueda tener. No obstante, lo anterior, en este caso, el término partícula se usará para referirse a uno de los elementos que conforman un material y cuya forma es esférica y la única propiedad física que este término acuña, es que en dichas partículas no se presentan deformaciones plásticas ni elásticas.

Una primera aproximación al estudio de las colisiones es analizar la velocidad de las partículas antes y después del contacto. La colisión en sí misma se considera instantánea y lo que sucede durante el proceso no se estudia. Otra posibilidad es seguir las trayectorias de las partículas durante la colisión solucionando las ecuaciones de movimiento de Newton; no obstante, es necesario especificar las fuerzas que se desarrollan durante el contacto. Como consecuencia, el contacto ya no se considera instantáneo por lo cual tiene un tiempo finito.

Los algoritmos de dinámica molecular, usados para la modelación del comportamiento de medios particulados, se centran en el análisis de dos clases de cuerpos: los primeros correspondientes a cuerpos deformables, en los cuales se deben generar leyes de contacto que simulan las fuerzas interparticulares y las deformaciones. Los segundos, los cuerpos considerados rígidos, en cuyo caso, las deformaciones se consideran nulas; al punto de que las leyes de contacto solo se aplican para la simulación de las fuerzas durante la interacción.

El presente capítulo se centra en el estudio y análisis de partículas rígidas. En primera medida se describe un modelo de contacto instantáneo, donde no se modela el contacto como tal, sino la influencia del mismo antes y después del impacto. El segundo modelo parte de la suposición de que el contacto se presenta en un tiempo pequeño pero finito y durante dicho tiempo se desarrollan las fuerzas de contacto; dicho tiempo y la forma como se desarrollan las fuerzas son foco de estudio.

1.1 MODELOS DE CONTACTO INSTANTÁNEO

Para el estudio de impactos centrales mediante los modelos de impacto instantáneo, solo es necesario conocer la velocidad justo antes del contacto y el valor del coeficiente de restitución en dirección normal (ξ_n).

La dirección normal al contacto corresponde a la dirección de la línea que une los centros de las dos partículas. El coeficiente de restitución en dirección normal, describe el cambio relativo del momentum del centro de masas en esa dirección.

En la Figura No. 1 (a) se muestra las condiciones antes de la colisión, donde se conocen las masas de las partículas y sus velocidades V_a y V_b respectivamente. La Figura No. 1 (b) muestra el proceso de colisión, donde las partículas se deforman transmitiéndose energía una a otra y la Figura No. 1 (c) presenta las condiciones post impacto en donde la velocidad resultante se altera producto de la interacción.

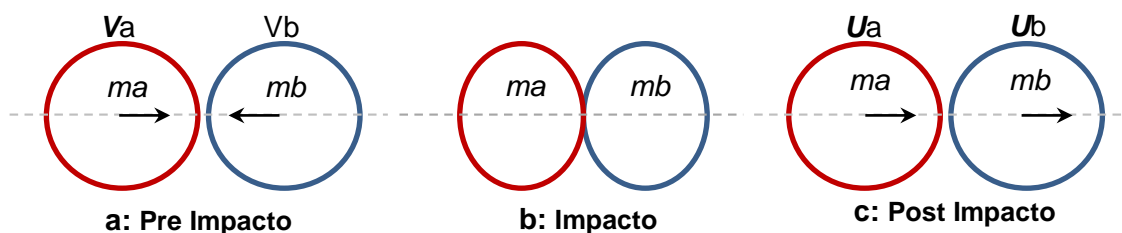


Figura No. 1 : Esquema del proceso de impacto entre dos partículas

Si llamamos a las partículas que colisionan **a** y **b**, **m** a las masas de cada partícula, **V** la velocidad antes del contacto y **U** la velocidad después del contacto, el coeficiente de restitución está definido por la Ecuación 1, a saber:

$$\xi_n = \frac{U_b - U_a}{V_a - V_b} \text{ (Eq. 1)}$$

El coeficiente de restitución puede tener valores entre 0 y 1, donde 1 corresponde a una colisión elástica perfecta, y 0 corresponde a una colisión plástica.

Como consecuencia, siempre que se especifique el valor del coeficiente de restitución y la velocidad antes del impacto, es posible obtener la velocidad de las partículas después del impacto al igualar la cantidad de movimiento antes y después de la interacción.

El método permite, en función de las posiciones y velocidades antes del impacto, conocer las velocidades justo después. No obstante, no permite evaluar de forma precisa el proceso de impacto y en el caso de tener múltiples partículas interactuando, el análisis es bastante complejo.

1.2 MODELOS DE CONTACTO CON TIEMPO FINITO

Con el fin de simular la interacción entre partículas, un potencial repulsivo es requerido. La fuerza repulsiva tiene efecto durante periodos muy cortos y solo tiene efecto durante el contacto. Dicha fuerza depende, por ejemplo, del módulo de Young, de la relación de Poisson del material y de las dimensiones de la partícula. Estas cantidades definen la duración del contacto y describen el proceso de pérdida de energía durante la interacción.

En términos generales la mecánica del contacto corresponde a una serie de interacciones muy complejas y diversos modelos se han utilizado para simular estas interacciones. Los modelos parten de relaciones simples, que permitan reducir a su mínima expresión la cantidad de parámetros necesarios para la modelación. Estas interacciones durante el contacto han sido estudiadas, a tal punto que la Tribología se dedica de forma exclusiva a su análisis [17, 27, 28].

Los modelos se definen y estudian en función de la necesidad de reproducir ciertos comportamientos observados en la experimentación. Es de esta forma que se han propuesto

modelos de contacto elásticos, los cuales no generan pérdidas de energía, modelos de contacto elastoplásticos, los cuales permiten simular pérdidas de energía durante el contacto, otros modelos se han utilizado para la modelación de flujo plástico, endurecimiento por deformación, etc.

Es común que dichos modelos se analicen en función de fuerzas en dirección normal y cortante, no obstante, no hay consenso respecto de cuál es el mejor para cada uso y debido a que se usan indistintamente para modelar fuerzas normales y cortantes según sea el caso, este capítulo no hará distinción respecto a la dirección de la fuerza; más adelante se desarrollarán los capítulos correspondientes a fuerzas normales y cortantes a la vez que se tocarán nuevamente los temas tratados en este numeral.

Como componente fundamental del presente capítulo se analizarán el modelo de contacto elástico simulado por un resorte lineal y el modelo de contacto de Hertz el cual también es un modelo de contacto elástico. Respecto a los modelos plásticos, se estudiará el modelo de contacto de Kelvin-Voigt y el modelo Hertz Mindlin.

1.3 MODELOS DE CONTACTO ELÁSTICO

1.3.1 MODELO DE RESORTE LINEAL

Una primera aproximación al problema de contacto es suponer que el mismo se presenta en un rango elástico perfecto, esto respecto a la transmisión de energía durante el proceso, es decir, que durante la interacción de los elementos no se presentan pérdidas de energía. En términos del coeficiente de restitución descrito anteriormente, significa que este es igual a la unidad.

De suponer que se deja caer una esfera perfecta, cuya ley de contacto está definida por un resorte con una constante lineal k , al momento de impactar con una superficie, la masa de la esfera se supone puntual y la interacción se simula como la de un resorte con una masa m y una velocidad definida. La esfera es infinitamente rígida y es por tal motivo que el resorte solo simula las fuerzas de contacto y no tiene relación alguna con la deformación del elemento.

Sabiendo que la fuerza que se desarrolla es igual a la deformación del elemento elástico por la constante k del resorte, así pues, se obtiene la siguiente expresión.

$$-m * \frac{d^2x}{dt^2} = k * x$$

Reorganizando se obtiene la Ecuación 2

$$m * \frac{d^2x}{dt^2} + k * x = 0 \quad (Eq. 2)$$

Dividiendo la Ecuación 2 sobre la masa tenemos que

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m} * x = 0 \quad (Eq. 3)$$

Esta ecuación representa una ecuación diferencial homogénea de segundo orden y corresponde a la descripción de un movimiento armónico simple.

Teniendo las siguientes condiciones iniciales, donde la posición en el tiempo cero es igual a x_0 y la velocidad para el mismo tiempo es v_0 .

$$x(0) = x_0; \dot{x}(0) = v_0$$

La solución de la Ecuación 3 es de la forma

$$x(t) = A1 * \cos(w * t) + A2 * \sin(w * t)$$

donde

$$w = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$$

Donde A1 y A2 son constantes que dependen de las condiciones iniciales del problema, por lo cual

$$x(t) = x_0 * \cos(w * t) + \frac{v_0}{w} * \sin(w * t)$$

Para el caso particular que estamos estudiando, donde la velocidad en el tiempo inicial es v_0 y la posición es cero, se tiene que las ecuaciones que describen el movimiento del sistema son las ecuaciones 4, 5 y 6.

$$x(t) = \frac{v_0}{w} * \sin(w * t) \text{ (Eq. 4)}$$

$$\dot{x}(t) = v_0 * \cos(w * t) \text{ (Eq. 5)}$$

$$\ddot{x}(t) = -v_0 * w * \sin(w * t) \text{ (Eq. 6)}$$

Ahora bien, teniendo claro que la velocidad post impacto se presenta al momento en que la aceleración del sistema es nula, al hacer la Ecuación 6 igual cero y despejar el tiempo se obtiene el valor de t^* . t^* corresponde al tiempo en el que se puede considerar la velocidad post impacto.

$$-v_0 * w * \sin(w * t) = 0$$

$$t^* = \frac{\pi}{w}$$

Evaluando la velocidad en t^* se puede obtener la velocidad del sistema tras la interacción

$$\dot{x}(t^*) = v_0 * \cos(\pi)$$

$$\dot{x}(t^*) = -v_0$$

Teniendo claro que el modelo representa un contacto elástico perfecto, donde no hay pérdidas durante la interacción, se puede notar que la velocidad en el tiempo t^* al ser igual a v_0 , pero con el signo contrario se muestra que la relación se cumple. Con lo anterior queda probado que dicho modelo sirve para el análisis de un impacto elástico perfecto.

1.3.2 MODELO DE HERTZ

En elasticidad, el problema de dos cuerpos en contacto es conocido como “el problema de contacto” y fue resuelto por primera vez por H. Hertz en 1882 [29]. La ley que lleva su nombre ha sido foco de múltiples investigaciones y ha sido aplicada de forma exitosa en el estudio de las

interacciones de cuerpos en contacto. Así mismo, esa formulación ha servido de base para el estudio de sistemas más complejos;

adicionalmente se ha observado que los resultados experimentales arrojan valores muy aproximados a los teóricos. Por ello la ley de Hertz ha sido un avance importante no solo para la ingeniería, que lo usa como insumo básico para sus análisis, sino también para la física ya que corresponde a una solución rigurosa al problema planteado.

Si se considera a un elemento esférico rígido que ejerce una fuerza sobre un semi-espacio. Bajo la influencia de esta fuerza el medio se deforma. Se sitúa el plano xy en la cara libre del medio, la zona que lo contiene corresponde a la dirección z positiva. Por lo anterior, las deformaciones en el semi-espacio se pueden obtener de forma analítica bajo las condiciones de la teoría elástica [30].

Los desplazamientos generados por esta fuerza se calculan usando las siguientes ecuaciones. Os subíndices x, y y z hacen referencia a las direcciones en que se presentan.

$$U_x = \frac{1 + \nu}{2\pi E} \left[\frac{XZ}{r^3} - \frac{(1 - 2\nu) * X}{r * (r + Z)} \right] * Fz$$

$$U_y = \frac{1 + \nu}{2\pi E} \left[\frac{YZ}{r^3} - \frac{(1 - 2\nu) * Y}{r * (r + Z)} \right] * Fz$$

$$U_z = \frac{1 + \nu}{2\pi E} \left[\frac{Z^2}{r^3} + \frac{2 * (1 - \nu)}{r} \right] * Fz$$

$$r = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$$

En el caso particular donde Z=0, las anteriores expresiones se reescriben como sigue

$$U_x = \frac{(1 + \nu) * (1 - 2\nu)}{2\pi E} * \frac{X}{r^2} * Fz$$

$$U_y = \frac{(1 + \nu) * (1 - 2\nu)}{2\pi E} * \frac{Y}{r^2} * Fz$$

$$U_z = \frac{1 + \nu}{\pi E} * \frac{1}{r} * Fz$$

$$r = \sqrt{X^2 + Y^2}$$

Para problemas de contacto donde no haya fricción, sólo la componente z del desplazamiento es de interés en el análisis, especialmente en el caso de deformaciones debidas a presiones normales y continuas $P(x,y)$. El desplazamiento de la superficie se calcula como sigue

$$U_z = \frac{1}{\pi E^*} * \iint P(X', Y') * \frac{dx' dy'}{r} \quad (Eq. 7)$$

$$r = \sqrt{(X - X')^2 + (Y - Y')^2} \quad \text{y} \quad E^* = \frac{E}{1-\nu^2}$$

Un paso previo, antes de abordar el problema de contacto, es hacer mención a la solución del siguiente problema: Asumiendo que una presión con una distribución de $p = p_0 * (1 - \frac{r^2}{a^2})^n$ se ejerce sobre una superficie formando un área circular de radio a ; se busca una expresión que permita encontrar el desplazamiento vertical de la superficie dentro del área donde actúa la presión.

Teniendo que la distribución de presiones es de forma esférica de radio a , debido a la simetría de la distribución de esfuerzos, el desplazamiento normal en un punto cualquiera, depende únicamente de la distancia r desde el origen. Por lo cual, es suficiente calcular los desplazamientos sobre los puntos del eje x para extrapolar la respuesta a toda el área.

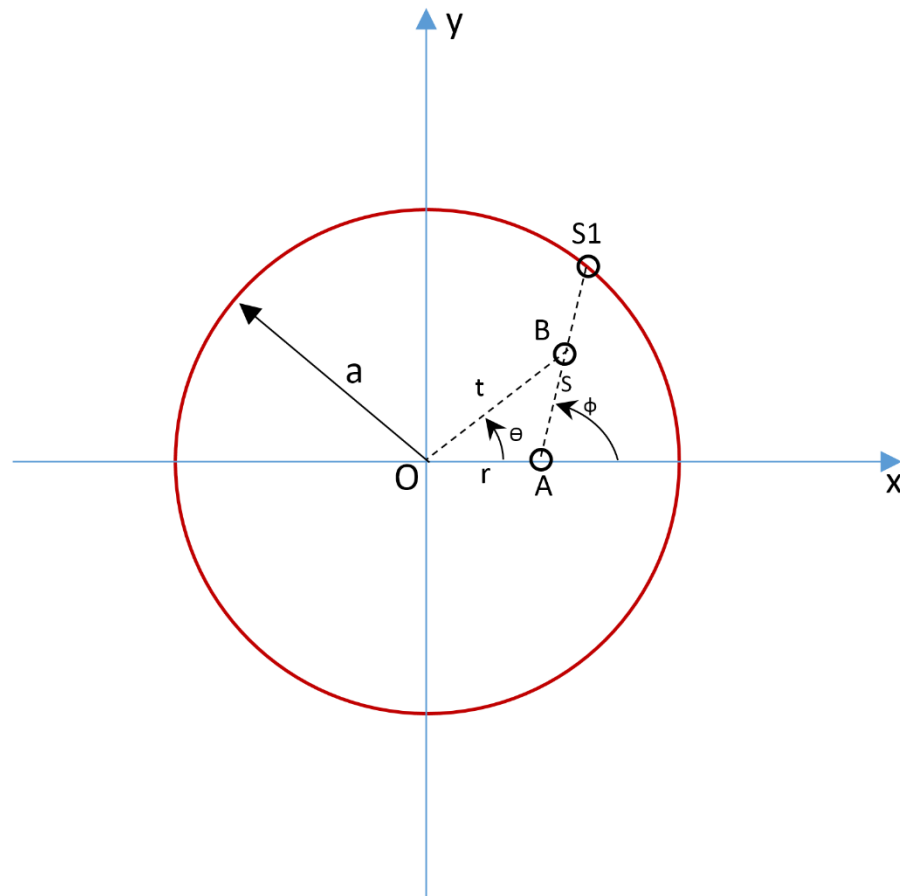


Figura No. 2 Esquema para el cálculo del desplazamiento normal dentro del área circular generada por esfuerzos normales

La Figura No. 2 muestra una región circular cargada y se requiere encontrar el desplazamiento en el punto **A** debido a los esfuerzos en **B**. por ley de cosenos se tiene que

$$t^2 = r^2 + s^2 + 2 * r * s * \cos(\varphi)$$

Si la presión corresponde a una distribución de presión Hertziana, entonces el exponente **n** será igual a 1/2, la expresión para la presión estaría dada por

$$p(s, \varphi) = p_0 * \left(1 - \frac{r^2 + s^2 + 2 * r * s * \cos(\varphi)}{a^2} \right)^{1/2}$$

$$p(s, \varphi) = \frac{p_0}{a} * (a^2 - r^2 - s^2 - 2 * r * s * \cos(\varphi))^{1/2}$$

Si llamamos

$$\alpha^2 = a^2 - r^2 \quad \gamma \quad \beta = r * \cos(\varphi)$$

$$p(s, \varphi) = \frac{p_0}{a} * (\alpha^2 - 2\beta * s - s^2)^{1/2}$$

Ahora, reescribiendo la Ecuación 7 se obtiene

$$U_z(r) = \frac{1 - \nu^2}{\pi E} * \frac{p_0}{a} * \int_0^{2\pi} \int_0^{s_1} (\alpha^2 - 2\beta * s - s^2)^{1/2} ds d\varphi$$

Integrando alrededor de ds se obtiene

$$\int_0^{s_1} (\alpha^2 - 2\beta * s - s^2)^{1/2} ds = -\frac{1}{2}\alpha * \beta + \frac{1}{2}(\alpha^2 + \beta^2) * \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{\beta}{\alpha}\right)$$

Integrando alrededor de $d\varphi$, los términos $\alpha * \beta$ y $\arctan \frac{\beta}{\alpha}$ desaparecen, obteniendo

$$U_z(r) = \frac{1 - \nu^2}{\pi E} * \frac{p_0}{a} \int_0^{2\pi} \frac{\pi}{4} * (\alpha^2 + \beta^2) d\varphi$$

$$U_z(r) = \frac{1 - \nu^2}{\pi E} * \frac{p_0}{a} \int_0^{2\pi} \frac{\pi}{4} * (a^2 - r^2 + r^2 * \cos^2(\varphi)) d\varphi$$

$$U_z(r) = \frac{1 - \nu^2}{E} * \frac{\pi p_0}{4a} (2a^2 - r^2), \quad r \leq a \quad (\text{Eq. 8})$$

Y la fuerza total se expresa de la siguiente forma

$$F = \int_0^a p(r) * 2 * \pi * r * dr = \frac{2}{3} P_0 * \pi * a^2$$

Si una esfera rígida entra en contacto con un semi-espacio elástico como el mostrado en la Figura No. 3. El desplazamiento vertical de la superficie de contacto como una función de r se está dado por

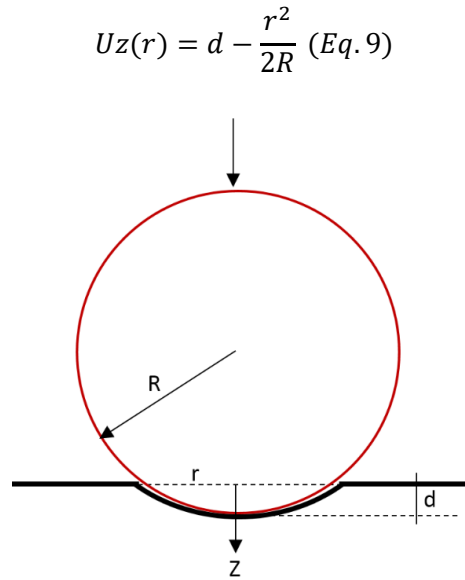


Figura No. 3: Esquema de Contacto entre una esfera y un semi-espacio infinito

Anteriormente, se observó que si se tiene una presión de la forma $p = p_0 * (1 - \frac{r^2}{a^2})^n$ se obtiene un desplazamiento como el descrito en (8). Si se igualan (8) y (9) y se buscan los valores de **a** y **p₀** que hagan cumplir la igualdad, se obtiene

$$\frac{\pi * p_0}{4E^* a} (2a^2 - r^2) = d - \frac{r^2}{2R}$$

$$a = \frac{\pi * p_0 * R}{2E^*} \quad y \quad d = \frac{\pi * p_0 * a}{2E^*}$$

Por lo cual, el radio de contacto está dado por $a^2 = Rd$ y para la máxima presión

$$p_0 = \frac{\pi}{2} * E^* * \left(\frac{d}{R}\right)^{1/2}$$

Si se toma lo anterior y se analiza la fuerza se obtiene la siguiente expresión

$$F = \frac{4}{3} * E^* * R^{\frac{1}{2}} * d^{\frac{3}{2}} \quad (\text{Eq. 10})$$

Si extendemos la aproximación a dos esferas en contacto la Ecuación 10 se reescribe como sigue

$$F = \frac{4}{3} * \left(\frac{E}{1 - \nu'^2} + \frac{E'}{1 - \nu'^2} \right) * \left(\frac{R * R'}{R + R'} \right)^{\frac{1}{2}} * d^{\frac{3}{2}} \quad (Eq. 11)^1$$

La Ecuación 11 representa la relación de la fuerza desarrollada en función de la deformación y de las propiedades de los materiales de los elementos en contacto. Es fácil darse cuenta de la similitud de la forma de la fuerza de contacto de Hertz con la fuerza expresada como un resorte con constante lineal. De forma resumida se podría expresar la fuerza de Hertz como sigue

$$F = k * d^{3/2}$$

Se observa que el desarrollo de la fuerza de Hertz, al contrario de la del resorte con coeficiente fijo, no es una función lineal de la deformación. La fuerza de Hertz, aun cuando corresponde a un modelo elástico perfecto se relaciona con el desplazamiento como una parábola cóncava hacia arriba y para las condiciones del modelo, donde las deformaciones son infinitesimales, la fuerza de este modelo es menor a la desarrollada por el resorte lineal.

1.4 MODELOS DE CONTACTO ELASTOPLÁSTICO

1.4.1 MODELO DE KELVIN-VOIGT

A diferencia de los modelos elásticos perfectos, el modelo de Kelvin-Voigt permite simular procesos de pérdida de energía durante el contacto de dos elementos. El modelo está compuesto por un resorte elástico con constante k y un amortiguador viscoso con coeficiente de amortiguamiento η ; al simular la fuerza durante el contacto genera una pérdida de energía, esta pérdida de energía es una función de las variables del modelo. La Figura No. 4 muestra que la fuerza que se desarrolla durante el proceso de contacto está en función de la longitud del traslapo y la velocidad con que el contacto se presenta. No obstante; no es del todo evidente que el modelo por si solo pueda simular una pérdida de energía durante la interacción.

¹ La ecuación 11 describe la fuerza cuando dos elementos, a y a' están en contacto.

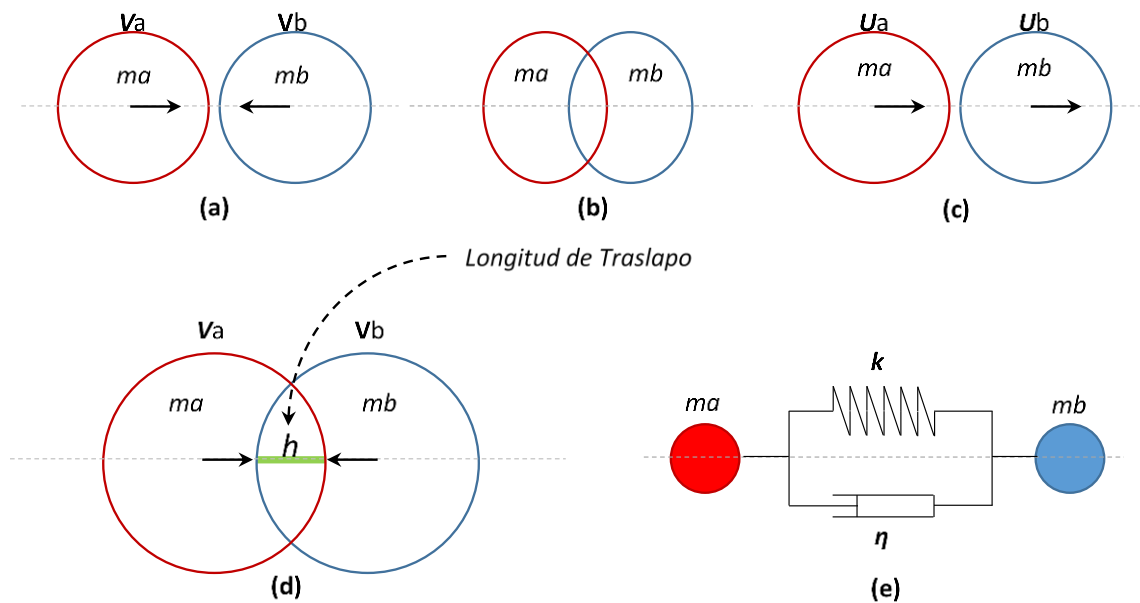


Figura No. 4: Esquema del proceso de impacto entre dos partículas (a) Condiciones pre-impacto (b) Deformación durante el impacto (c) Condiciones pos-impacto (d) Longitud de traslape (e) Modelo de contacto

Como se mencionó anteriormente, el coeficiente de restitución es una relación de la pérdida de impulso antes y después de un impacto. Es necesario encontrar una expresión que relacione la velocidad antes y después del impacto y en función estas encontrar una expresión que nos permita relacionar las variables del modelo de kelvin-Voigt con el coeficiente de restitución.

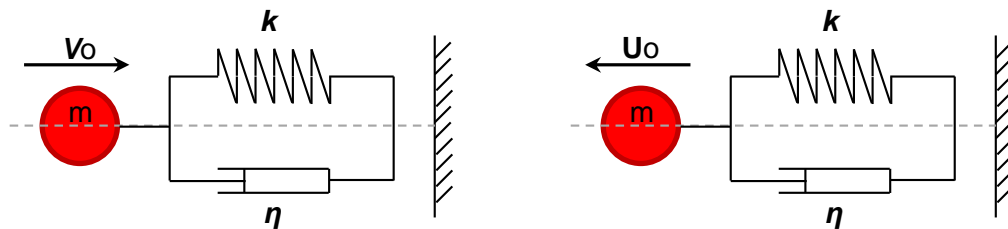


Figura No. 5 Esquema de análisis del coeficiente de restitución para el modelo de Kelvin-Voigt

Supóngase una masa adherida a un sistema de Kelvin-Voigt como el mostrado en la Figura No. 5. La masa y el sistema impactarán contra una superficie a una velocidad \mathbf{V}_0 (velocidad pre impacto). Al impactar, el sistema empieza a comprimirse y tras alcanzar el límite de deformación, éste empieza a elongarse. No obstante, la fuerza interna del sistema no es suficiente para desprenderse de la superficie y esto es debido a que la resultante de fuerzas sigue en dirección de la velocidad \mathbf{V}_0 . Solo en el instante en que la fuerza total sea igual a cero se dirá que el sistema, descrito en la Figura No.5, está rebotando y es en ese momento en que se obtiene la \mathbf{U}_0 (velocidad pos impacto).

La fuerza que se desarrolla en el modelo es igual a la suma de la fuerza en el elemento elástico más la del elemento viscoso, como se expresa en la ecuación 12.

$$-m * \frac{d^2x}{dt^2} = k * x + \eta \frac{dx}{dt} \quad (Eq. 12)$$

Reorganizando la Ecuación 12 se obtiene la siguiente expresión

$$m * \frac{d^2x}{dt^2} + k * x + \eta \frac{dx}{dt} = 0 \quad (Eq. 13)$$

La Ecuación 13 es la ecuación del sistema y es en función de ésta que se encontrará la expresión que define, de forma analítica, el coeficiente de restitución. Si se divide sobre la masa se obtiene la siguiente expresión.

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m} * x + \frac{\eta}{m} \frac{dx}{dt} = 0$$

Si

$$2\delta = \frac{k}{m}; \quad \omega^2 = \frac{\eta}{m}$$

Entonces

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\delta * x + \omega^2 \frac{dx}{dt} = 0 \quad (Eq. 14)$$

En la Ecuación 14 el término ω corresponde a la frecuencia de oscilación elástica, δ es la viscosidad efectiva. La solución general de la Ecuación 14 es de la siguiente forma

$$x = e^{-\delta * t} * [C1 * f1(t) + C2f2(t)]$$

Donde **C1** y **C2** son constantes que dependen de las condiciones iniciales del problema, las funciones **f1** y **f2** dependen del tiempo y están en función de los coeficientes 2δ y $w\omega^2$. Debido a que el coeficiente de amortiguamiento se espera que sea mucho menor que el coeficiente elástico entonces

$$4\delta^2 - 4w\omega^2 < 0$$

Y **f1** y **f2** serán de la forma

$$f1(t) = \cos \left[\frac{1}{2} * \sqrt{-4\delta^2 + 4w\omega^2} * t \right]$$

$$f2(t) = \sin \left[\frac{1}{2} * \sqrt{-4\delta^2 + 4w\omega^2} * t \right]$$

Teniendo en cuenta que en el momento de impacto el tiempo se tomará como cero y la velocidad está definida por **Vo**, entonces la solución de la Ecuación No.14 Se escribe en función de la componente de posición, velocidad y aceleración del elemento, Ecuación 15, 16 y 17.

$$x(t) = \frac{Vo}{w} * e^{-\delta * t} * \sin(wt) \quad (Eq. 15)$$

$$\dot{x}(t) = \frac{Vo}{w} * e^{-\delta * t} * [-\delta * \sin(wt) + w * \cos(wt)] \quad (Eq. 16)$$

$$\ddot{x}(t) = -\frac{Vo}{w} * e^{-\delta * t} * [(-2\delta^2 + w\omega^2) * \sin(wt) + 2\delta * w * \cos(wt)] \quad (Eq. 17)$$

Donde

$$w = \sqrt{w\omega^2 - \delta^2}$$

Y corresponde a la frecuencia de oscilación amortiguada siempre que $\delta < w\omega$.

² Los coeficientes 2δ y $w\omega^2$ son constantes y son una función de la masa de los elementos y de las variables del modelo, los mismos se construyen de esta forma para mayor facilidad en los despejes posteriores.

El rebote en el sistema presentado en la Figura No. 5 se presentará solo cuando la resultante de fuerzas esté en la dirección contraria a la de incidencia. Por lo cual, para obtener la velocidad de rebote del elemento es necesario determinar el tiempo t^* que se obtiene al igualar la Ecuación 17 a cero.

$$-\frac{V_0}{w} * e^{-\delta * t} * [(-2\delta^2 + w\omega^2) * \sin(wt) + 2\delta * w * \cos(wt)] = 0$$

$$(-2\delta^2 + w\omega^2) * \sin(wt) + 2\delta * w * \cos(wt) = 0$$

$$\tan(wt^*) = -\frac{2\delta w}{w\omega^2 - 2\delta^2}$$

$$t^* = -\frac{1}{w} \tan^{-1}\left(\frac{2\delta w}{w\omega^2 - 2\delta^2}\right) \quad (Eq. 18)$$

Como el coeficiente de restitución (ξ_n) es la relación entre la velocidad final e inicial.

$$\xi_n = \frac{\dot{x}}{V_0} \quad (Eq. 19)$$

Reemplazando la ecuación 18 en 16 y el resultado en la ecuación 19 se obtiene

$$\xi_n = \frac{\frac{V_0}{w} * e^{-\delta * t^*} * [-\delta * \sin(wt^*) + w * \cos(wt^*)]}{V_0}$$

$$\xi_n = \frac{1}{w} * e^{-\delta * t^*} * [-\delta * \sin(wt^*) + w * \cos(wt^*)] \quad (Eq. 20)$$

Anteriormente se había encontrado que

$$\tan(wt^*) = \frac{2\delta w}{w\omega^2 - 2\delta^2}$$

Por lo cual

$$\sin(wt^*) = \frac{\tan(wt^*)}{\sqrt{1 + \tan^2(wt^*)}} \quad \text{y} \quad \cos(wt^*) = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2(wt^*)}}$$

Ahora

$$\sqrt{1 + \tan^2(wt^*)} = \frac{w\omega^2}{w\omega^2 - 2\delta^2}; \quad -\delta * \sin(wt^*) = \frac{2\delta^2 * w}{w\omega^2}; \quad w * \cos(wt^*) = \frac{w * (w\omega^2 - 2\delta^2)}{w\omega^2}$$

Por lo cual

$$-\delta * \sin(wt^*) + w * \cos(wt^*) = w$$

Al reescribir la ecuación 20 se obtiene

$$\xi n = e^{-\delta * t^*} \quad (Eq. 21)$$

Ahora, la ecuación 18 permite calcular el valor del tiempo en que se presenta el rebote. Sabiendo que

$$\tan\left(\frac{wt^*}{2}\right) = \frac{\sin(wt^*)}{1 + \cos(wt^*)}$$

Y que

$$\tan(wt^*) = -\frac{2\delta w}{w\omega^2 - 2\delta^2}; \quad \sin(wt^*) = \frac{\tan(wt^*)}{\sqrt{1 + \tan^2(wt^*)}}; \quad \cos(wt^*) = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2(wt^*)}}$$

Entonces

$$\tan\left(\frac{wt^*}{2}\right) = \frac{\tan(wt^*)}{1 + \sqrt{1 + \tan^2(wt^*)}}$$

Anteriormente se había definido $\tan(wt^*)$ como

$$\tan(wt^*) = \frac{2\delta w}{w\omega^2 - 2\delta^2}$$

Entonces

$$\tan\left(\frac{wt^*}{2}\right) = \frac{2\delta w}{2(w\omega^2 - \delta^2)} = -\frac{\delta}{w}$$

Que al despejar el valor del tiempo se obtiene

$$t^* = -\frac{1}{w} * 2 * \tan^{-1}\left(\frac{\delta}{w}\right)$$

Al reemplazar el nuevo valor de t^* en la ecuación 21 se obtiene

$$\xi_n = e^{-\frac{\delta}{w}\left[\pi - 2 \tan^{-1}\left(\frac{\delta}{w}\right)\right]} \quad (Eq. 22)$$

La Figura No. 6 es la gráfica que describe la Ecuación 22. Como se observa, el valor del coeficiente de restitución parte de 1, lo cual corresponde a que el modelo de contacto es elástico perfecto, así mismo, el valor del coeficiente de restitución igual a la unidad corresponde a la relación δ/w igual a cero, lo cual significa que el coeficiente de amortiguamiento es cero.

Ahora bien, el dominio de la Ecuación 22 no corresponde a todos los reales, esto debido a que la solución de la ecuación diferencial, se solucionó teniendo como premisa que $\delta < w_0$. Así mismo, el valor mínimo del coeficiente de restitución es inferior a 0.1, este valor es muy bajo respecto a los valores esperados en la experimentación con partículas muy rígidas.

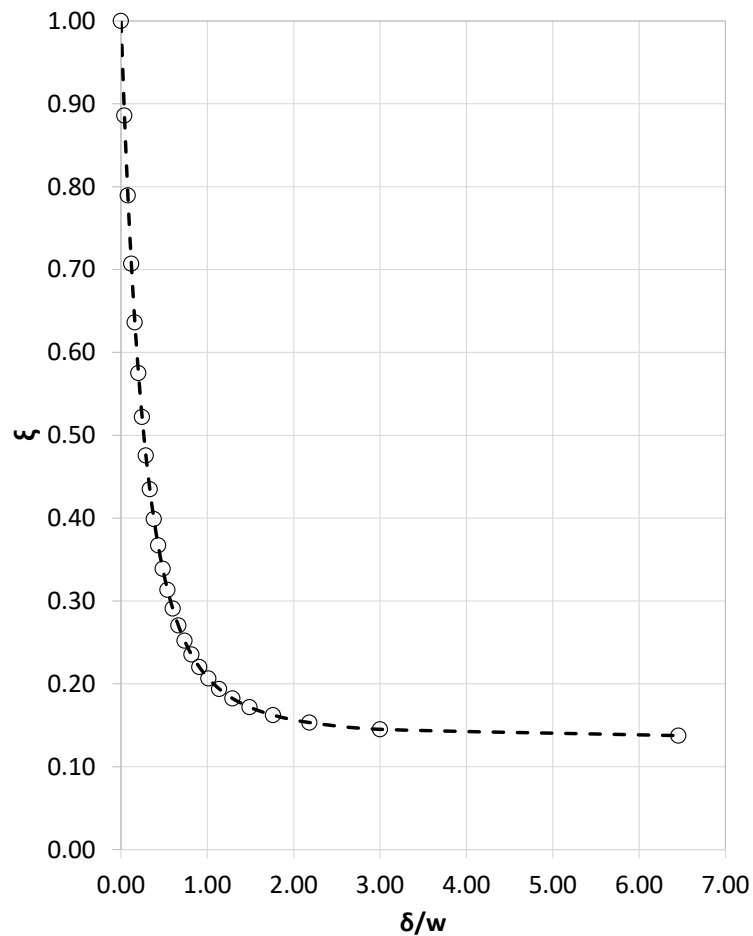


Figura No. 6 Variación del Coeficiente de Restitución-Modelo de Kelvin-Voigt

1.4.2 MODELO HERTZ MINDLIN

De forma análoga al modelo de Kelvin-Voigt, se puede suponer que la ley de fuerzas que controla el comportamiento de las partículas en contacto está definida por un arreglo en paralelo de un modelo de amortiguador viscoso y un resorte elástico no lineal. La fracción elástica está descrita por la ley de contacto de Hertz y la fracción disipadora de energía corresponderá a un modelo de amortiguador viscoso idéntico al del modelo de kelvin-Voigt.

Este tipo de modelo se ha utilizado con éxito en el estudio de las fuerzas de contacto en dirección normal y el coeficiente de restitución se ha calculado de forma analítica siguiendo el mismo procedimiento empleado en el numeral anterior hasta obtener

$$F = \frac{4}{3} * \left(\frac{E}{1 - \nu'^2} + \frac{E'}{1 - \nu'^2} \right) * \left(\frac{R * R'}{R + R'} \right)^{\frac{1}{2}} * x^{\frac{3}{2}} + \eta * \frac{dx}{dt} \quad (Eq. 23)$$

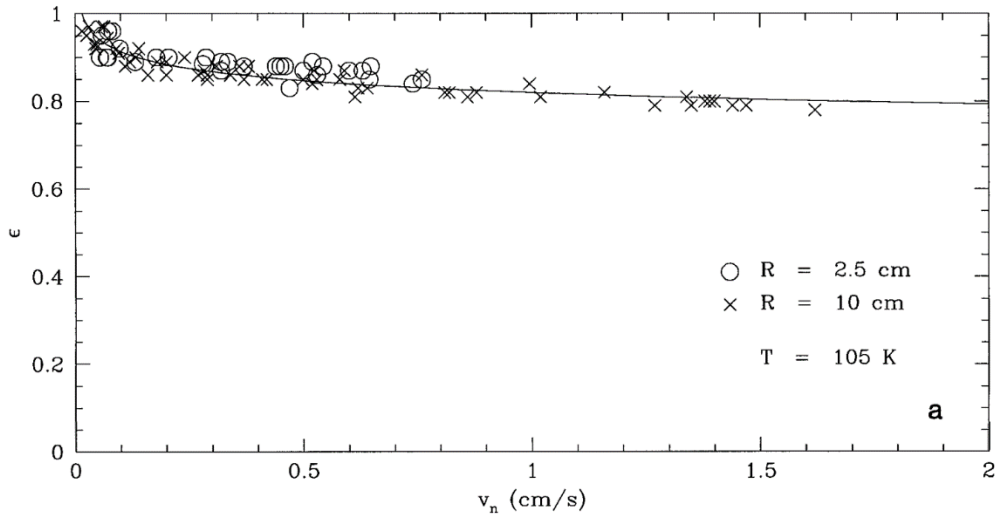


Figura No. 7 Coeficiente de restitución como función de la velocidad, según los datos experimentales de Bridges et al. 1996 (R corresponde a los radios y T a la temperatura)

Este modelo se ha usado con gran éxito en la simulación de ciertos comportamientos de medios granulares. A diferencia del modelo de contacto de Kelvin-Voigt, el modelo ya no predice un coeficiente de restitución constante en función de la velocidad de impacto; no obstante, el valor obtenido, en los experimentos realizados no es del todo correcto [30, 31].

Los experimentos realizados por Bridges et al. [32-34] sobre esferas de hielo con superficie muy lisas que se hicieron chocar con una superficie de las mismas características, mostraron la dependencia del coeficiente de restitución de los materiales con la velocidad de impacto. La Figura No. 7 agrupa los resultados de la experimentación realizada por Bridges et al., en ésta se observa que las variaciones en el coeficiente de restitución se presentan cuando el cambio de la velocidad es considerable.

Lo anterior fue analizado de forma similar por Brilliantov 1994 [33], obteniendo la solución analítica a las condiciones evaluadas por Bridges. Brilliantov, supuso un modelo de contacto del

tipo acá estudiado y obtuvo curvas muy similares a las encontradas en la experimentación de Bridges.

Las diferencias entre la predicción analítica y la experimentación es más clara a altas velocidades, condición contraria a las que se espera simular en este trabajo. Por lo anterior, se considera el modelo de Hertz Mindlin apropiado para el análisis de las fuerzas.

2. MÉTODO DE SIMULACIÓN

La elección del método de simulación es de vital importancia, pues es en función de las características típicas de cada fenómeno estudiado, que se puede elegir el más apropiado. Lo anterior quiere decir, que todos los métodos utilizados para la simulación parten de suposiciones y solo un estudio detallado del fenómeno y de los diferentes métodos puede llevar a la elección del óptimo.

Ahora bien, la dinámica molecular es un método de simulación computacional, el cual permite el estudio y análisis del comportamiento o evolución de un sistema físico, químico o biológico en función del tiempo. El mismo, calcula las fuerzas entre las partículas, elementos que componen el sistema, mediante la integración sucesiva de las ecuaciones de movimiento de Newton.

La dinámica molecular tiene dos líneas principales, si a métodos de simulación se refiere. La primera considera que el contacto entre elementos que colisionan es instantáneo y la interacción de los elementos durante el contacto no es foco de estudio, no así su condición pre y post impacto. El otro método, el cual es el que nos atañe, define el contacto durante una fracción finita de tiempo y la interacción durante este tiempo es de especial interés, así como los fenómenos que se desarrollan durante el contacto.

Para el primer caso, donde se asume que la colisión es instantánea y no se evalúa la colisión en sí, sino su influencia en los cuerpos, el método de simulación asociado es el de Event-Driven Simulation por su nombre en inglés. En el otro caso, donde se estudian las trayectorias de las partículas, incluso durante la colisión, y donde es necesario el uso de métodos computacionales para el análisis del comportamiento conjunto de los elementos, el método de simulación asociado es el Time-Driven Simulation por su nombre en inglés.

Este capítulo se centra en el análisis del segundo método y se usará el algoritmo de Verlet para la solución de las ecuaciones de movimiento de Newton. Cabe destacar que hay varios algoritmos de dinámica molecular, el algoritmo de Verlet es solo uno de ellos, la eficiencia de los mismos solo se puede determinar al contrastar la simulación numérica con la experimentación. Teniendo claro que este algoritmo se ha utilizado de forma reiterada en estos análisis, arrojando datos consistentes y fiables [19], se considera apropiado su uso para los análisis que se presentan en los capítulos posteriores.

2.1 ALGORITMO DE VERLET

El algoritmo de Verlet se presentó por primera vez en 1967, en el artículo presentado por Loup Verlet [20]. El algoritmo usa la expansión de Taylor para la integración numérica de las ecuaciones de movimiento de Newton, obteniendo así los valores de posición y velocidad de los elementos que forman el medio como una función de la posición, la velocidad y la aceleración previa de cada partícula. El artículo mencionado aplica el método para la simulación de fluidos partiendo desde el comportamiento de las moléculas que lo componen. Posteriormente se observó que el método utilizado podía ser replicable para la simulación de otros sistemas complejos donde se requería de la evaluación detallada del comportamiento de los elementos que los conforman. Así pues, el algoritmo de Verlet se ha utilizado de forma satisfactoria en la simulación de medios granulares de todo tipo, descarga de silos que contienen semillas, pilas de arena, gases particulados, fluidos, entre otros.

Dadas las posiciones y velocidades iniciales para un tiempo t_0 , la función del algoritmo es obtener las posiciones y velocidades en el tiempo $t_0 + \Delta t$, siendo Δt una fracción de tiempo muy pequeña.

De esta forma, el algoritmo de Verlet se describe así:

$\vec{r}(t)$: Vector posición del centro de masa de las partículas en un marco de referencia fijo

$\vec{V}(t)$: Vector velocidad en el tiempo t

$\vec{a}(t)$: Vector aceleración en el tiempo t

$\mathbf{b}(t)$: Tercera derivada del vector posición

Δt : Fracción de tiempo en que se realiza la simulación

O : Error

La idea básica del algoritmo es escribir el vector posición $\vec{r}(t)$ como una expansión de Taylor

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{V}(t) * \Delta t + \frac{1}{2} * \vec{a}(t) * \Delta t^2 + \frac{1}{6} * \vec{b}(t) * \Delta t^3 + \mathbf{O}(\Delta t^4) \quad (Eq. 24)$$

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \vec{V}(t) * \Delta t + \frac{1}{2} * \vec{a}(t) * \Delta t^2 - \frac{1}{6} * \vec{b}(t) * \Delta t^3 + \mathbf{O}(\Delta t^4) \quad (Eq. 25)$$

Si se suma vectorialmente las ecuaciones (24) y (25) se obtiene la siguiente expresión

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t) * \Delta t^2 + \mathbf{O}(\Delta t^4) \quad (Eq. 26)$$

Como se observa, con la Ecuación 26 se puede obtener el valor del vector posición en un tiempo $t + \Delta t$ a partir del vector posición en el tiempo $t - \Delta t$, el vector posición y aceleración en el tiempo t . Adicionalmente se obtiene un error local de cuarto orden y la tercera derivada del vector posición $\vec{b}(t)$, la cual no tiene un significado físico; por tanto se elimina al realizar la adición antes descrita.

Como se mencionó anteriormente, el objetivo de los algoritmos de integración de las ecuaciones de Newton, es obtener el valor del vector posición y velocidad de las partículas analizadas, la Ecuación 26 suple la primera solicitud, pero falta una que permita obtener el valor de la velocidad.

Si se resta la Ecuación 24 y 25 se obtiene.

$$\vec{V}(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathbf{O}(\Delta t^3) \quad (Eq. 27)$$

La Ecuación 27 permite obtener el valor de la velocidad en el tiempo (t) conociendo el vector posición ($t + \Delta t$) y ($t - \Delta t$). Esta ecuación presenta un error de tercer orden, mayor que el de la Ecuación 26, el cual es de cuarto orden. Lo anterior implica que la precisión en el cálculo de la velocidad siempre es menor que la de la posición de las partículas.

2.2 IMPLEMENTACIÓN DEL ALGORITMO DE VERLET

Las ecuaciones (26) y (27) son las correspondientes al algoritmo de Verlet; no obstante, por si solas no pueden ser utilizadas. Es necesario de ecuaciones auxiliares que permitan su implementación.

Para simplicidad en la descripción de la implementación del algoritmo se supondrá que los elementos son perfectamente lisos, solo se tendrán en cuenta las fuerzas en dirección normal al impacto, las posiciones y velocidades iniciales en (t_0) son conocidas, posición justo antes del impacto.

Conociendo $\vec{r}_{a,b}(t_0)$ y $\vec{v}_{a,b}(t_0)$ es posible calcular la posición en el tiempo $(t_1 = t_0 + \Delta t)$ usando la Ecuación 1 la cual se reescribe y se obtiene

$$\vec{r}_{a,b}(t_0 + \Delta t) = \vec{r}_{a,b}(t_0) + \vec{v}_{a,b}(t_0) * \Delta t + \frac{1}{2} * \vec{a}(t_0) * \Delta t^2 + \mathbf{O}(\Delta t^3)$$

Las fuerzas que afectan a las partículas que se encuentran en contacto corresponden a la gravedad como una fuerza externa y las fuerzas de interacción. Debido a que este numeral pretende dar las bases para la implementación del algoritmo, las siguientes expresiones solo toman en cuenta el efecto de las fuerzas de contacto sobre los elementos que interactúan, la aceleración $\vec{a}(t_0)$ se supone nula. Posteriormente, en la implementación, donde es claro que la gravedad ejerce una fuerza sobre los elementos, se usa la segunda ley de Newton que permite asociar la fuerza con el producto de la masa y la aceleración. La anterior expresión se reescribe y se obtiene.

$$\vec{r}_{a,b}(t_0 + \Delta t) = \vec{r}_{a,b}(t_0) + \vec{v}_{a,b}(t_0) * \Delta t + \mathbf{O}(\Delta t^3) \quad (Eq. 28)$$

Teniendo el valor de $\vec{r}_{a,b}(t_0)$ y $\vec{r}_{a,b}(t_0 + \Delta t)$ es posible aplicar la Ecuación 26 y así obtener que

$$\vec{r}(t_0 + 2\Delta t) = 2\vec{r}(t_0 + \Delta t) - \vec{r}(t_0) + \vec{a}(t_0 + \Delta t) * \Delta t^2 + \mathbf{O}(\Delta t^4) \quad (Eq. 29)$$

Ahora, el valor de $\vec{a}(t_0 + \Delta t) * \Delta t^2$ debe ser evaluado a la luz de lo obtenido tras el análisis de la Ecuación 28. Debido a que se supone que el contacto es inminente al aplicar la Ecuación 28, se mueven los elementos generando un pequeño traslape, esta distancia de traslape es indispensable para evaluar la fuerza de contacto.

En la Figura No. 8 se puede ver que la longitud de traslape, se define en función de la posición del centro de masa de los elementos y su radio. El vector \vec{nab} , es el vector unitario que apunta en la dirección que une el centro de masa de la partícula **a** con la partícula **b**.

$$\vec{nab} = \frac{\vec{rb} - \vec{ra}}{|\vec{rb} - \vec{ra}|} \quad (Eq. 30)$$

Ahora bien, la longitud de traslapo está definida por

$$hab = hba = Ra + Rb - |\vec{rb} - \vec{ra}|$$

$$hab = Ra + Rb - (\vec{rb} - \vec{ra}) \cdot \vec{nab} \quad (Eq. 31)$$

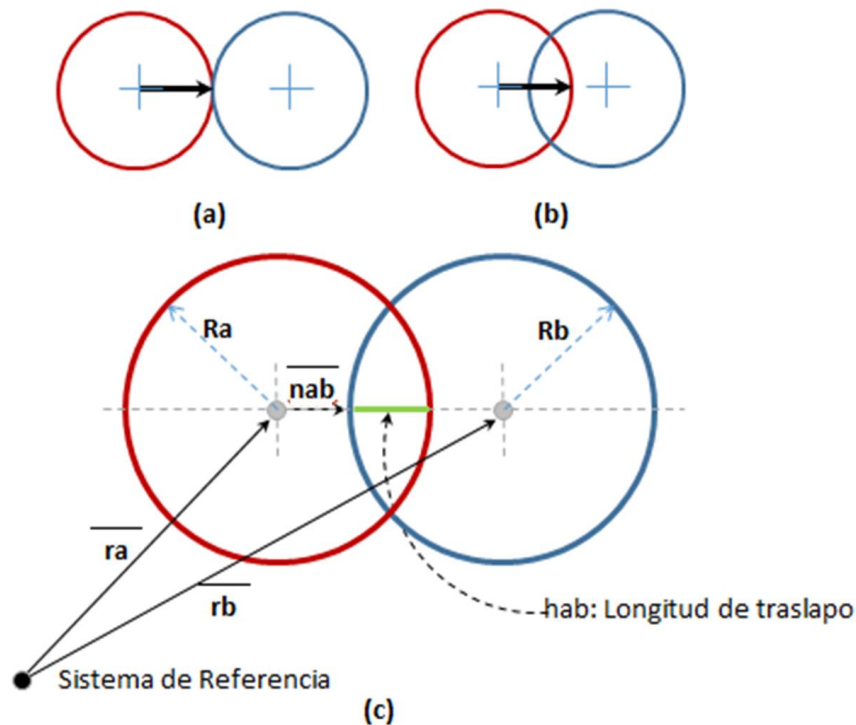


Figura No. 8 Esquema-Longitud de traslapo. (a) Fase inicial de la modelación, contacto inminente
(b) Traslado (c) Detalle del traslapo y longitud del traslapo.

Por lo cual, si $hab < 0$ entonces hay penetración y las fuerzas intergranulares y los elementos interactúan, de lo contrario no hay penetración, por lo cual las partículas no interactúan y ninguna fuerza de contacto se desarrolla.

2.3 ALGORITMO DE VERLET-INTERACCIÓN ENTRE PARTÍCULAS

Durante la simulación se generaron pequeños traslapos que se definieron con la Ecuación 31. Debido a esos traslapos, se generarán las fuerzas de contacto entre partículas. Para poder evaluar dichas fuerzas de interacción, es necesario definir un modelo de fuerzas, que teniendo en cuenta dicho traslapo y tiempo definido, pueda evaluarlas.

Sea \vec{F}_c una fuerza generada por un modelo de interacción cualquiera, el cual está en función de la longitud de traslapo, la velocidad relativa de impacto y el tiempo.

$$\vec{F}_c = f(hab, \vec{V}Ra, b, fi) \quad (Eq. 32)$$

Teniendo la longitud de traslapo, Ecuación 31 y el modelo de contacto descrito mediante la Ecuación 32, que describe la fuerza en el modelo, se puede obtener el valor de $\vec{a}(to + \Delta t)$ relacionando (31) y (32) según la segunda ley de Newton.

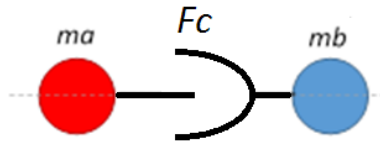


Figura No. 9: Modelo de Contacto-Fc

$$m * \vec{a}(to + \Delta t) = \vec{F}_c$$

Despejando $\vec{a}(to + \Delta t)$ se obtiene

$$\vec{a}(to + \Delta t) = \frac{\vec{F}_c}{m} \quad (Eq. 33)$$

De (29) y (33)

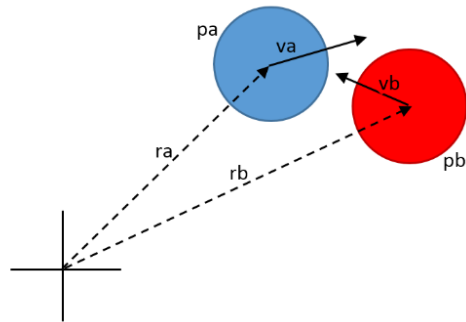
$$\vec{r}(to + 2\Delta t) = 2\vec{r}(to + \Delta t) - \vec{r}(to) + \frac{\vec{F}_c}{m} * \Delta t^2 + \mathbf{O}(\Delta t^4) \quad (Eq. 34)$$

La Ecuación 34 se puede aplicar de forma directa y con la misma se obtiene el vector posición en el tiempo $(t_0 + 2\Delta t)$.

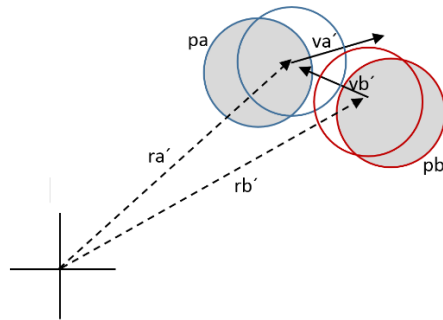
2.4 ESQUEMA GENERAL DEL ALGORITMO DE VERLET

Los siguientes pasos representan el algoritmo de aplicación del método de cálculo para la implementación del método de mención.

Paso 1: Teniendo las posiciones, velocidades y aceleraciones en el tiempo t_0 , se calculan las posiciones para el tiempo $t_0 + \Delta t$. Este cálculo, debido a que se realiza de forma independiente para los elementos p_a y p_b , hace que se genere un traslapo entre ellos. Ecuación 28.



Paso 2: Las posiciones calculadas en el paso 1 se denotan como r_a' y r_b' y de forma similar para las velocidades y aceleraciones de las mismas. Se calcula la longitud de traslapo con la Ecuación 31 y se calculan las fuerzas correspondientes en función de la ley definida. Ecuación 32.



Paso 3: Teniendo definidas las fuerzas de interacción en el sistema, se aplica la Ecuación 33 para definir las posiciones de las partículas en función de la interacción generada y con la Ecuación 27 se calculan las velocidades.

Paso 4: Volver al paso 2, calcular nuevamente los traslapos y seguir el proceso de forma iterativa hasta completar el tiempo de simulación definido.

Figura No. 10 Esquema general del Algoritmo de Verlet

2.5 OTROS MÉTODOS DE SIMULACIÓN

El algoritmo de integración utilizado en el presente trabajo es el algoritmo de Verlet, el mismo se eligió por su simplicidad, facilidad en la implementación y estabilidad numérica al momento de trabajar con gran cantidad de elementos. No obstante, este procedimiento no es el único y cada algoritmo de integración tiene sus características particulares, ventajas y desventajas. Ahora bien, estudios realizados en los últimos años han comparado la precisión, eficiencia computacional y estabilidad de diferentes algoritmos de integración y no han encontrado cambios considerables, si a precisión se refiere. La elección del algoritmo que mejor se adecúa a la dinámica de un sistema en particular no se puede realizar a priori [19 21 22].

Teniendo claro lo anterior, es importante destacar que no es menester del presente estudio el análisis de los diferentes métodos de integración que existen, pues requiere el desarrollo del código necesario para el análisis de cada método en particular. A continuación se describen brevemente los métodos de Velocidad de Verlet y Leapfrog, que junto con el Algoritmo de Verlet, son los métodos más utilizados en este tipo de análisis. Si se requiere profundizar en estos temas se sugiere consultar [23 24 25].

2.5.1 ALGORITMO DE VELOCIDAD DE VERLET

Teniendo en cuenta que el algoritmo de Verlet Clásico calcula la posición para un tiempo $t + \Delta t$ y la velocidad para un tiempo t lo cual supone una limitante, el algoritmo de Velocidad de Verlet es una versión mejorada. Éste permite calcular la posición y velocidad en el mismo tiempo $t + \Delta t$. Su implementación no supone costos computacionales mayores, ni tampoco el uso de variables adicionales.

La expresión general del método se presenta a continuación [19]

$$\vec{r}(t_0 + \Delta t) = \vec{r}(t_0) + \vec{V}(t_0) * \Delta t + \frac{1}{2} * \vec{a}(t_0) * \Delta t^2$$

$$\vec{v}(t_0 + \Delta t) = \vec{v}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2} * \Delta t * \vec{a}(t_0 + \Delta t)$$

$$\vec{v}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}(t_0) + \frac{1}{2} * \Delta t * \vec{a}(t_0)$$

2.5.2 ALGORITMO LEAPFROG

El algoritmo Leapfrog evalúa las posiciones y velocidades en puntos alternados (o intercalados), separados equidistantes. Estos cálculos van alternándose de forma tal, que las posiciones se calculan en los pasos enteros, mientras que las velocidades se evalúan en los pasos intermedios (posiciones no enteras). Este algoritmo tiene un error local de tercer orden, no obstante, es necesario que las fuerzas dependan únicamente de la posición, de lo contrario el error será mayor y tendrá que ser analizado para encontrar el orden en función del modelo de fuerza definido [26]. La expresión general del método se presenta a continuación

$$\vec{r}(t_0 + \Delta t) = \vec{r}(t_0) + \Delta t * \vec{v}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) + \mathbf{O}(\Delta t^3)$$

$$\vec{v}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}\left(t_0 - \frac{\Delta t}{2}\right) + \Delta t * \vec{a}(t_0) + \mathbf{O}(\Delta t^3)$$

3. CÓDIGO PARA LA SIMULACIÓN DE ELEMENTOS DISCRETOS

El Código para la Simulación de Elementos Discretos (CoSED) se desarrolló utilizando elementos circulares para la simulación del comportamiento discreto de la masa de las partículas. El mismo, utiliza leyes de contacto, que pueden variar según la necesidad del usuario, en dirección normal y usa un esquema de integración explícita de Verlet o Algoritmo de Verlet para la integración numérica, de las ecuaciones de movimiento de Newton.

El CoSED fue escrito en lenguaje C++, utiliza Matlab o SCILAB para la compilación. De forma estructural, CoSED está compuesto de tres bloques: el archivo de entrada de datos, el código base, que corresponde a la columna vertebral del análisis y es el responsable de los cálculos y de la implementación del Algoritmo de verlet, y la parte gráfica, la cual, tras la ejecución del código principal, muestra los resultados de forma gráfica según se requiera.

Los datos de entrada corresponden a las posiciones, velocidades y aceleraciones que el programador defina como condiciones iniciales, adicionalmente se definen las dimensiones de los elementos a modelar, geometría y características de las condiciones de frontera y propiedades de los materiales, así como las leyes de contacto a utilizar. Estos datos deben ser ingresados como una cantidad vectorial o escalar según corresponda. Los Datos de entrada se digitan desde una hoja de cálculo (archivo con extensión .xls) la cual es el insumo básico para el análisis.

Los datos de salida corresponden a posiciones, velocidades, aceleraciones, fuerzas y su evolución en función del tiempo. Adicionalmente, los valores se representan de forma gráfica y una animación se genera en función de la evolución de los datos.

La capacidad del código, en función de su tiempo de iteración, permite simular hasta 100 partículas con un tiempo de iteración de un día. Es posible simular mayor cantidad de elementos y geometrías de las fronteras más complejas, pero esto se traduciría en una mayor cantidad de tiempo en la iteración. Teniendo en cuenta lo anterior, si el tiempo no es una limitante, el CoSED permite simular cualquier arreglo requerido.

3.1 CONDICIONES GENERALES DEL CÓDIGO

Una primera fase de análisis durante la modelación es decidir si el modelo se realizará en dos o en tres dimensiones. Conceptualmente, la simulación en dos dimensiones debe ser vista, si corresponde a elementos circulares, como la simulación de discos planos o de barras cilíndricas. Es claro que los materiales granulares corresponden a arreglos tridimensionales, sin embargo, las simulaciones en dos dimensiones siguen siendo útiles ya que al tener tres grados de libertad menos, respecto a los análisis en tres dimensiones, el tiempo de simulación se reduce a una fracción del total y puesto que en la actualidad el tiempo de simulación es una limitante, los arreglos en dos dimensiones son pertinentes para las aproximarse a las respuestas requeridas.

3.2 DEFINICIÓN DE VARIABLES

En esta parte se definen todas las variables que se utilizarán, las mismas comprenden a los datos de entrada como escalares, vectores, matrices en dos y tres dimensiones y contadores utilizados para el cálculo.

Los escalares definidos se introducen como valores digitados directamente en el entorno del código, tales como el delta de tiempo utilizado en el análisis, el valor del coeficiente elástico del resorte en el modelo de contacto, el coeficiente de amortiguamiento y la masa de los elementos. Otros valores escalares, como el radio de los elementos a modelar y las fronteras, se introducen como un vector que se ingresa en la hoja de cálculo adjunta.

Las matrices bidimensionales corresponden al espacio vectorial donde se guardarán las posiciones, velocidades, aceleraciones y a los vectores de fuerzas que se calculan tras cada iteración. Las matrices en tres dimensiones son matrices para guardar los datos para cada iteración.

Tabla No. 1 Definición de Variables

Definición de Variables	
Comentarios	Código
clear all=Limpieza de memoria	clear all
close all=Cierre de ventanas	close all
format long=Formato datos	format long
t= Fracción de tiempo para las iteraciones	t=0.000001;
k= Coeficiente de elasticidad	k=400;
n= Coeficiente de amortiguamiento	n=1;
mas=masa de los elementos	mas=0.0002;
L=Contador	L=1;
N= Número de elementos+Fronteras	R=zeros(N,1);
NE= Número de Elementos	r=zeros(N,2);
DG=Número de datos guardados	rt=zeros(N,2);
	v=zeros(N,2);
	a=zeros(N,2);
R (N,1)= Radios de los elementos	
	H=zeros(N,N,2);
r (N,2)=Posiciones de los elementos to	VR=zeros(N,N,2);
rt (N,2)=Posiciones de los elementos t1	FN=zeros(N,N,2);
v (N,2)=Velocidades elementos to	
a (N,2)=aceleraciones elementos to	POS=zeros(N,2,DG);
FT(N,2)=Fuerzas totales	FT=zeros(N,2);
FTAN(N,2)=Fuerzas tangenciales	FTAN=zeros(4N,2);
	X=zeros(N,N,2);
H (N,N,2)= Matriz 3D de traslapos	V=zeros(N,N,2);
VR (N,N,2)= Matriz 3D de velocidad relativa	Ax=zeros(N,N,2);
FN (N,N,2)= Matriz 3D de fuerzas	RR=zeros(N,N);
POS(N,2,DG)= Posiciones a guardar	

3.3 DATOS DE ENTRADA

Los datos de entrada corresponden a la posición inicial de cada partícula y frontera definida, a las velocidades, aceleraciones y radios de los elementos y de las fronteras. Esos datos se importan desde una hoja de cálculo la cual debe ser llenada y cerrada con posterioridad a la ejecución del código.

Tabla No. 2 Datos de entrada

Datos de Entrada	
Comentarios	Código
<p>La función xlsread importa los datos desde el archivo "Datos de Entrada" de la hoja que corresponda:</p> <p>Pos: Posición Vel: Velocidad Ace: Aceleración Rad: Radios</p> <p>ii y jj: Contadores para el llenado de la matriz R(i): radio para el elemento i</p> <p>Como se observa RR es una matriz cuadrada de dimensión N, por lo cual guarda los radios de los elementos y las fronteras.</p>	<pre>r=xlsread('DatosEntrada','Pos'); v=xlsread('DatosEntrada','Vel'); a=xlsread('DatosEntrada','Ace'); R=xlsread('DatosEntrada','Rad'); for ii=(N-NE):N for jj=1:N if ii~=jj RR(ii,jj)=R(ii)+R(jj); end end end</pre>

Posteriormente a la lectura de los datos de entrada, es necesario que los datos, llenen la matriz **RR**, la cual contiene la suma de los radios de los elementos. Esta matriz permitirá calcular la longitud de traslapo en los pasos posteriores.

3.4 CÁLCULOS INICIALES

Como se comentó anteriormente, se debe generar una corrida inicial de forma tal que se generen, por primera vez, las nuevas posiciones de los elementos, y partiendo desde este punto se inicie a ejecutar el código que describe el Algoritmo de Verlet.

Tabla No. 3 Cálculos Iniciales

Comentarios	Código
Teniendo que los vectores \mathbf{r} , \mathbf{v} , \mathbf{a} y el escalar \mathbf{t} . Se calcula el valor del vector \mathbf{ra} el cual define las nuevas posiciones.	$\mathbf{ra} = \mathbf{r} + \mathbf{v} * \mathbf{t} + 0.5 * (\mathbf{t}^2) * \mathbf{a};$

3.5 ALGORITMO DE VERLET

La estructura general del algoritmo de Verlet hace necesario que se genere una gran cantidad de ciclos para el cálculo de las fuerzas interparticulares y así mismo del movimiento; todo en función de la variable \mathbf{t} y del total del tiempo que se pretenda simular. Los datos de las posiciones, velocidades y aceleraciones, cantidades vectoriales que definen la posición y condición actual de la partícula, se guardan en matrices. Una primera aproximación a la arquitectura del código es generar ciclos internos, dentro de un ciclo mayor, para recorrer las posiciones de las matrices e ir realizando los cálculos. Lo anterior implica el uso de tres ciclos conjugados como mínimo.

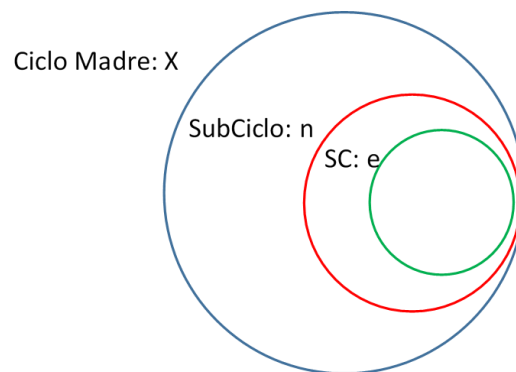


Figura No. 11 Esquema de ciclos conjugados

Los ciclos conjugados generan un aumento del tiempo total de iteración. Esta estructura conduce a un alto consumo de memoria ya que requiere de guardar datos flotantes en cada sub-ciclo. Si se pretende simular un total de 10 minutos (reales), con un intervalo de tiempo de 10^{-7} segundos, el ciclo mayor deberá ser de 6000 millones de iteraciones. Si se generan ciclos conjugados, este valor no aumenta, pero sí el tiempo de ejecución de cada ciclo, pues requiere que de forma interna se realicen subrutinas. Por lo anterior, el número de ciclos totales aumenta en función del número de subrutinas requeridas y el tiempo de ejecución aumenta de forma exponencial.

De forma reiterada se ha comentado que los análisis como los realizados aquí, requieren de largos tiempos de simulación, por lo que es importante reducir el tiempo de ejecución.

Por lo anterior la estructura de CoSED parte de una estructura más simple y eficiente respecto al uso de ciclos internos, los omite por completo. Un solo ciclo general, domina el proceso iterativo y todos los cálculos se realizan guardando los datos en matrices de tres dimensiones. Esto reduce el tiempo de ejecución a una fracción del tiempo; no obstante, requiere de más pasos internos, configuración geométrica de matrices, extracción de datos de vectores y demás, todo con el objetivo de eliminar los sub-ciclos.

La Tabla 4 agrupa la fracción del código correspondiente al algoritmo de Verlet.

La estructura del código se centra en un ciclo de gran cantidad de iteraciones, que están en función del incremento de tiempo definido y del tiempo real que se pretende simular. Si se pretende simular 1 minuto real, y el delta de tiempo es de 10^{-7} segundos, el total de iteraciones requeridas será de 60^7 iteraciones.

En la fase anterior, se calculó el valor de **ra** para el primer incremento de tiempo; por lo cual, de los datos de entrada, se obtuvo el valor de **r** y **ra**. Es necesario disponer los valores de **ra** en un arreglo tridimensional. Por eso se definió la matriz **X** cuyas dimensiones son **(N,N,2)**.

Tabla No. 4 Ciclo general – Algoritmo de Verlet

Ciclo General de Análisis
Código
<pre> for T=1:10000000 X(1,;,1)=ra(1,1); . X(32,;,2)=ra(32,2); B=X-rot90(X); Norm=((B(:,;,1).*B(:,;,1)+B(:,;,2).*B(:,;,2)).^(0.5))+eye(32); DN(:,;,1)=B(:,;,1)./Norm; DN(:,;,2)=B(:,;,2)./Norm; Punto=(B(:,;,1).*DN(:,;,1)+B(:,;,2).*DN(:,;,2)); h=RR-Punto; AA=ones(32); AA(logical(eye(size(AA))))=0; h=h.*AA; h=h.*(h>=0); H(:,;,1)=DN(:,;,1).*h; H(:,;,2)=DN(:,;,2).*h; FN=k*H; FT=reshape(sum(FN,2),[],2); rf=2*ra-r+FT*(t^2)/mas+a*(t^2); rf(1,:)=r(1,:); rf(2,:)=r(2,:); rf(3,:)=r(3,:); rf(4,:)=r(4,:); r=ra; ra=rf; if mod(T,10000)==0 POS(:,;,L)=rf; L=L+1; end end </pre>

Es necesario obtener la norma de los vectores que unen los centros de cada par de los elementos. Al restar el vector posición del elemento **a** y del elemento **b** permite obtener el vector **B** que une los centros de cada elemento.

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c|ccc|ccc|ccc}
 & 1 & 2 & 3 & \dots & \dots & \dots & N \\
 \hline
 1 & r1(y) & r1(y) & r1(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 2 & r2(y) & r2(y) & r2(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 3 & r3(y) & r3(y) & r3(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \hline
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 N & rN(x) & rN(x) & rN(x) & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array} \\
 \\
 \begin{array}{c|ccc|ccc|ccc}
 & 1 & 2 & 3 & \dots & \dots & \dots & N \\
 \hline
 1 & r1(x) & r1(x) & r1(x) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 2 & r2(x) & r2(x) & r2(x) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 3 & r3(x) & r3(x) & r3(x) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \hline
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 N & rN(x) & rN(x) & rN(x) & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array} \\
 \\
 (-) \\
 \begin{array}{c|ccc|ccc|ccc}
 & 1 & 2 & 3 & \dots & \dots & \dots & N \\
 \hline
 1 & r1(y) & r1(y) & r1(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 2 & r2(y) & r2(y) & r2(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 3 & r3(y) & r3(y) & r3(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \hline
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 N & rN(x) & rN(x) & rN(x) & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array} \\
 \\
 (=) \\
 \begin{array}{c|ccc|ccc|ccc}
 & 1 & 2 & 3 & \dots & \dots & \dots & N \\
 \hline
 1 & 0 & r1(y)-r2(y) & r1(y)-r3(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 2 & r2(y)-r1(y) & 0 & r2(y)-r3(y) & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 3 & r3(y)-r1(y) & r3(y)-r2(y) & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \hline
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 N & rN(x)-r1(x) & rN(x)-r2(x) & rN(x)-r3(x) & \dots & \dots & \dots & 0
 \end{array} \\
 \\
 \begin{array}{c|ccc|ccc|ccc}
 & 1 & 2 & 3 & \dots & \dots & \dots & N \\
 \hline
 1 & 0 & r1(x)-r2(x) & r1(x)-r3(x) & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 2 & r2(x)-r1(x) & 0 & r2(x)-r3(x) & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 3 & r3(x)-r1(x) & r3(x)-r2(x) & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 \hline
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 N & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0
 \end{array}
 \end{array}$$

Figura No. 12 Estructura del vector B

Tras tener la longitud de traslapo guardada en la matriz **B**, se calcula la norma del vector. Debido a que la matriz **B** tiene ceros en la diagonal, es necesario para los cálculos posteriores que la matriz corresponda a una diagonal de unos. Teniendo la matriz **B** y la norma de los vectores correspondientes se construye la matriz **DN**, la cual agrupa los vectores unitarios de intersección.

Ahora bien, teniendo los vectores unitarios de intersección, se calcula el producto punto entre **B** y **DN**, de forma tal que se pueda obtener una matriz que agrupe las distancias que hay entre los centros de cada uno de los elementos.

Para el cálculo de la longitud de traslapo, se restan la matriz **RR**, la cual guarda las longitudes de los radios de cada elemento, y la matriz Punto. Las siguientes líneas de código toman los valores de la matriz **h** y, de ser negativos, los convierten en cero, de forma tal que **h** solo guarda valores positivos o nulos.

Las longitudes de traslape son las que, producto de las condiciones de la ley de contacto definida, permiten obtener las fuerzas que se desarrollan en los contactos. De igual forma, teniendo las fuerzas antes definidas, se calculan las nuevas posiciones. Se sigue lo indicado en el algoritmo de Verlet y se definen las nuevas posiciones para los centros de masa de los elementos.

3.6 ALMACENAMIENTO DE DATOS

Como último paso del código, la fase de almacenamiento de datos captura los valores de las posiciones, velocidades y aceleraciones de los elementos para cada intervalo de tiempo definido y los almacena en una hoja de cálculo para su posterior análisis.

La siguiente tabla agrupa la fracción del código correspondiente.

Tabla No. 5 Ciclo general – Almacenamiento de Datos

Ciclo General de Análisis
Código
<pre>BB(:,1)=reshape(POS(:,1,:),[],1); BB(:,2)=reshape(POS(:,2,:),[],1); save('BB'); xlswrite('Ensayo1.xlsx',BB);</pre>

3.7 ANÁLISIS ENERGÉTICOS

Debido a que la modelación de medios granulares implica el seguimiento de cada uno de los elementos que interactúan, la verificación del buen funcionamiento del código, en muchos casos, se centra en análisis cualitativos. Ahora bien, un análisis más preciso y de carácter cuantitativo corresponde a realizar análisis energéticos durante el proceso de simulación y de esta forma cuantificar el error global de la modelación.

Un primer análisis consiste en evaluar si la energía total del sistema se conserva. Con este fin se simula un sistema aislado formado por tres elementos esféricos de radio definido y cuatro fronteras. La única fuerza de campo presente es la gravedad y actúa en la dirección negativa del eje vertical. Los elementos no se encuentran en contacto y sus posiciones se muestran en la siguiente Figura No. 13.

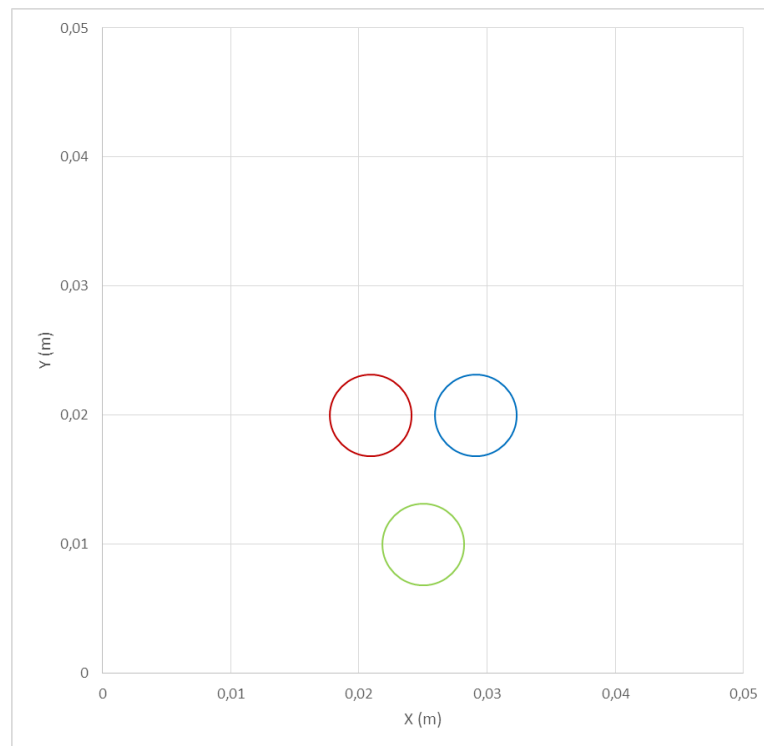


Figura No. 13 Simulación de un sistema de energía total constante-Condición inicial

La simulación se prolongará por 1 segundo, realizando un total de 10 000 000 de iteraciones, con intervalos de tiempo igual a 10^{-7} segundos. Debido a que las fuerzas de contacto definidas para este análisis corresponden a modelos conservativos, durante el transcurso de la simulación, no se deben generar pérdidas de energía en el sistema.

La condición inicial, donde los elementos tienen una velocidad inicial nula, la energía total, correspondiente a la energía potencial y es igual a 0,4905 Julios.



Figura No. 14 Simulación de un sistema de energía total constante-Movimiento de los elementos para diferentes intervalos de tiempo

Como se observa en la Figura No. 14, los elementos esféricos interactúan libremente. Debido a que el modelo de contacto es elástico y las pérdidas de energía no se contemplan, estos seguirán interactuando indefinidamente.

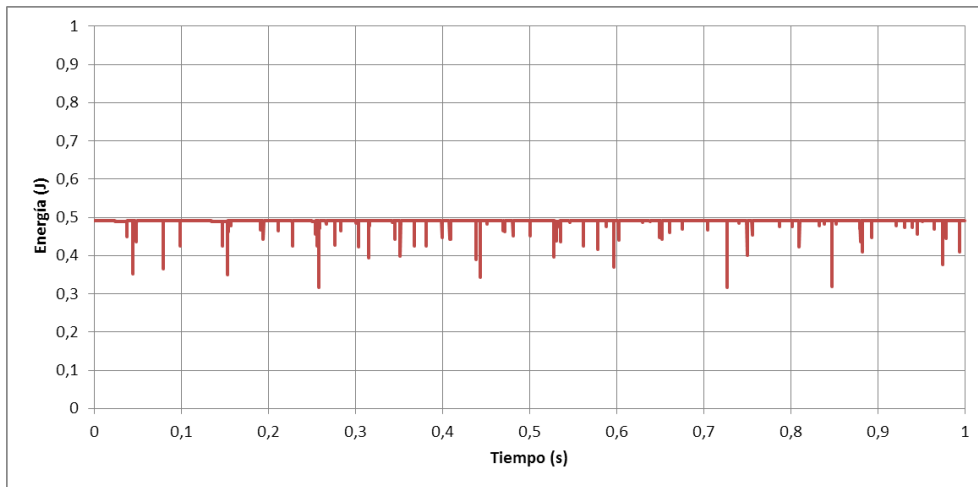


Figura No.15 Simulación de un sistema de energía total constante-Variación de la energía total del sistema en función del tiempo

En la Figura No. 15 se evidencia que la tendencia de la energía total del sistema permanece constante. Los saltos que se observan se generan durante la interacción de los elementos con las fronteras y entre ellos mismos. Los saltos en la energía del sistema no afectan la tendencia general durante la simulación, ya que la energía continúa su tendencia siguiendo un margen de tolerancia aceptable.

Si se analiza el error con un análisis de tendencia central como el de la Figura No. 16, suponiendo una tendencia con una distribución de campana de Gauss, se puede notar que la mayoría de los datos se encuentran con un error relativo menor del 5%. Además, la baja dispersión de los datos deja ver que la tendencia es clara, con una desviación estándar de 1.2% y una media de 0.4901 Julios.

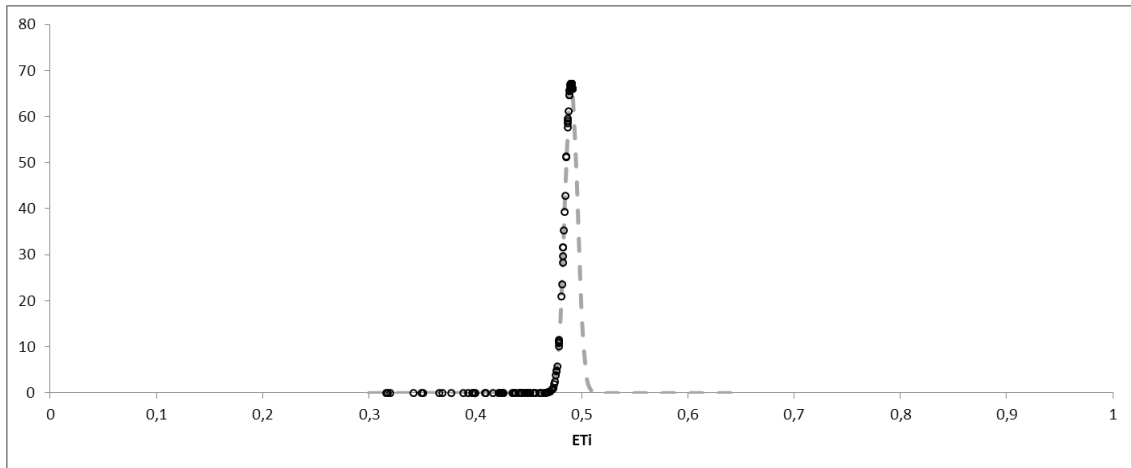


Figura No. 16 Análisis de la variación de los valores de energía total en función del tiempo

Este análisis muestra que el código simula de forma correcta lo esperado y que la tendencia del error es muy baja, por lo cual el algoritmo planteado y los cálculos realizados son fiables y serán la base para los análisis posteriores.

Trabajos como el realizado por Oquendo en 2007 [19], muestra que la tendencia de los errores no se analiza de forma puntual para cada paso de la simulación, sino de forma global. Analizando la tendencia de la energía total del sistema. La Figura No 17 muestra lo obtenido en la simulación de sucesivos rebotes de un elemento esférico interactuando con una superficie lisa.

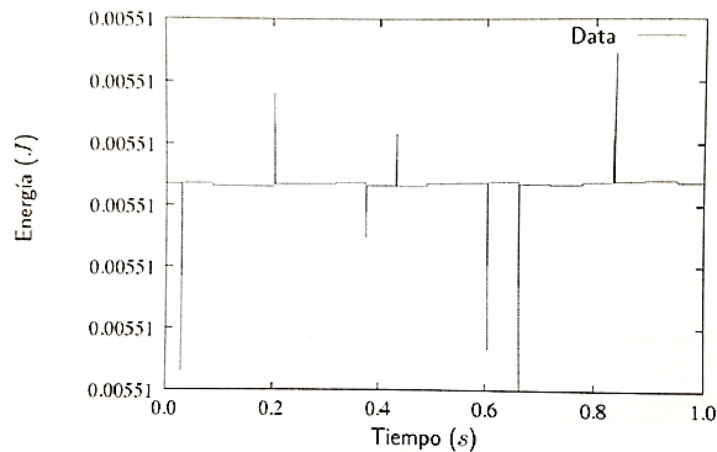


Figura No. 17 Variación de la energía mecánica total para una partícula rebotando sobre una superficie plana con un modelo de contacto tipo Hertz-Oquendo, 2007 [19]

Partiendo de lo anterior se puede dar validez al proceso de iteración del código y con esta base se podrán analizar fenómenos más complejos.

3.8 ANÁLISIS DE CONSISTENCIA

Con el objetivo analizar la consistencia del modelo, se simula el comportamiento de una partícula que cae libremente y que entra en contacto con otra que se encuentra en un plano horizontal. Al medir la fuerza de contacto en la partícula que no se mueve, se observa que la fuerza se desarrolla en un periodo muy corto de tiempo. La fuerza que se simula con el modelo de contacto de Kelvin-Voigt debe alcanzar un valor constante igual al producto de la masa de la partícula incidente por la aceleración de la gravedad. Esto significa que al entrar en contacto los elementos y al estar en reposo uno sobre otro, el elemento que se encuentra en la parte baja percibe la presencia de la partícula sobre este. La Figura No. 18 muestra lo comentado anteriormente.

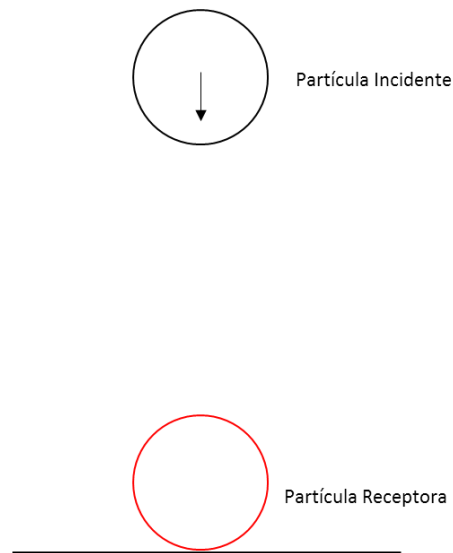


Figura No. 18 Análisis de Consistencia-Ensayo 1

En la Figura No. 19 se presenta la fuerza de la partícula receptora como una función del tiempo. La tendencia muestra que el sistema de Kevin-Voigt, elegido para la simulación de las fuerzas de

contacto, simula de forma correcta la fuerza que se genera al entrar en contacto dos elementos de una masa definida.

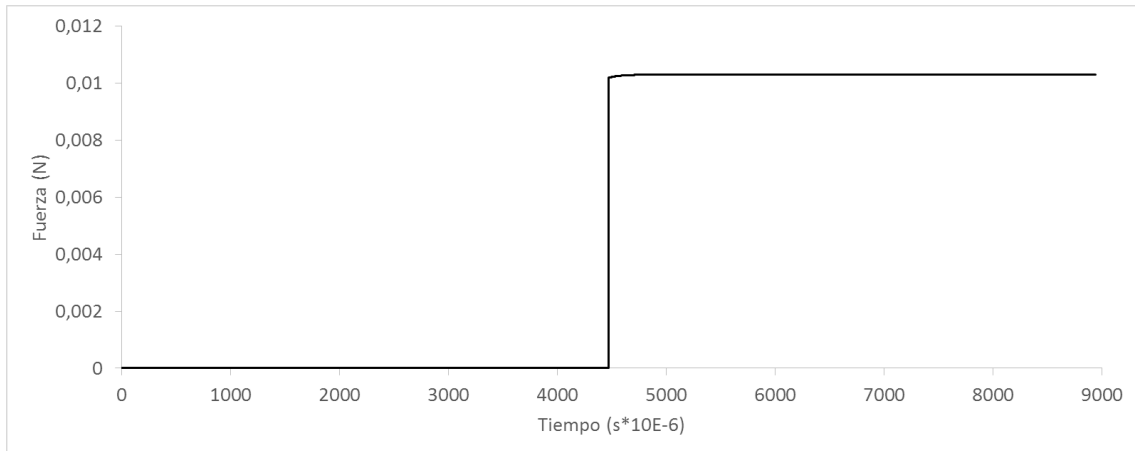


Figura No. 19 Fuerza de Contacto en Función del Tiempo- Análisis de Consistencia-Ensayo 1

El mismo experimento se realiza con tres partículas. Se midió la fuerza que desarrolló la partícula que no se mueve. En este caso, las partículas están alineadas una sobre otra, por lo cual la medida de la fuerza debería ser igual a tres veces la medida en el anterior experimento.

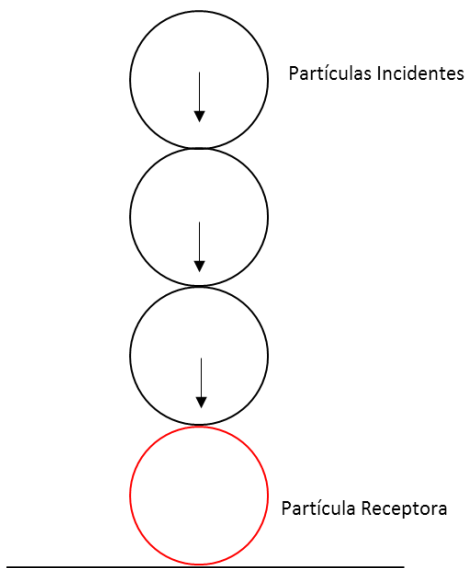


Figura No. 20 Análisis de Consistencia-Ensayo 2

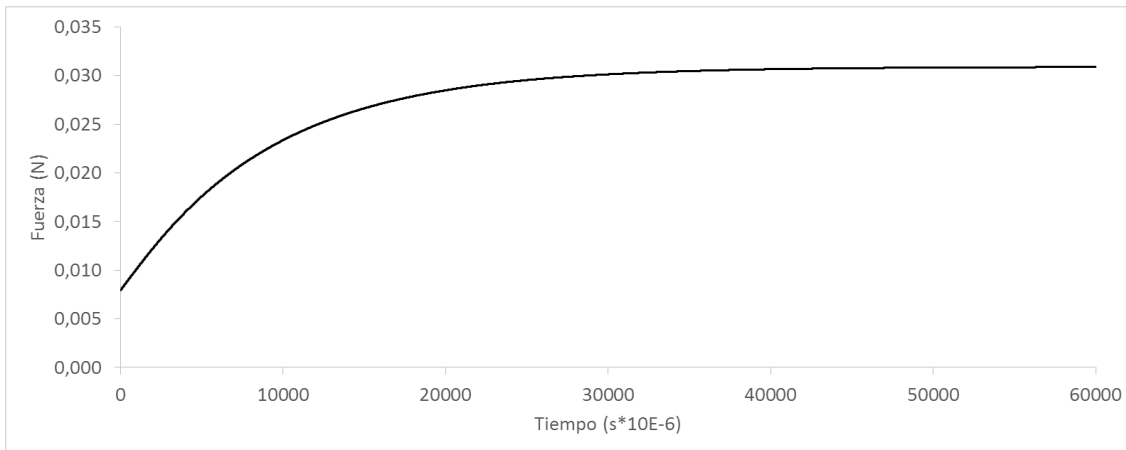


Figura No. 21 Fuerza de Contacto en Función del Tiempo-Tres partículas en contacto con otra igual- Análisis de Consistencia-Ensayo 2

La Figura No. 21 muestra que la fuerza que se registra sobre la partícula receptora tiende a ser igual a tres veces la registrada en el Ensayo 1. Los anteriores experimentos muestran la forma como el CoSED mide las fuerzas entre elementos y que las mismas son consistentes con valores reales esperados.

4. SIMULACIÓN DE LA RESISTENCIA AL CORTE

4.1 CONDICIONES GENERALES DE LA SIMULACIÓN

Uno de los objetivos generales del presente estudio consiste en la simulación de la resistencia al corte de materiales granulares para diferentes condiciones geométricas del arreglo de las partículas que los conforman. Con este fin, se diseñaron cuatro tipos de ensayos, teniendo como objetivo evaluar los valores de la fuerza normal y la cortante sobre una superficie de falla inducida. Dicha superficie de falla está compuesta por un conjunto de partículas fijas, alineadas en un plano horizontal y las fuerzas que se desarrollan sobre la superficie se obtienen por medio de los modelos de contacto. Debido a que se pretendía evaluar la influencia del tamaño de las partículas en el desarrollo de los valores de resistencia, las partículas se simulan perfectamente lisas.

El primer ensayo consiste en un arreglo homogéneo de partículas, todas de igual tamaño, geometría, peso y modelos de contacto. El arreglo se desliza sobre una superficie irregular y se miden los valores de la fuerza normal y cortante a lo largo de la superficie definida.

El segundo ensayo cambia las condiciones de la superficie de falla antes definida, se intercalan dos tamaños de partículas, de forma tal que se genera una superficie más irregular que la del primer ensayo. De igual forma, el arreglo de partículas se desliza sobre la superficie de falla generada y se miden los valores de la fuerza normal y cortante que se presentan en la superficie de falla.

El tercer ensayo toma las mismas condiciones del primero y agrega una partícula de mayor tamaño en el arreglo, esto con el objetivo de evaluar la influencia de partículas de mayor tamaño en los valores de la fuerza normal y cortante que se desarrollan sobre la superficie de falla. El cuarto ensayo toma la misma partícula de un tamaño mayor y evalúa su influencia sobre la superficie de falla.

4.1.1 GEOMETRÍA Y CONDICIONES DE FRONTERA

Se dispondrá una caja con una longitud de 5.0 cm, las paredes de la caja están formadas por partículas circulares cuyos radios son 200 millones de veces más grande que el radio de las partículas que conforman el material granular. Lo anterior brinda la posibilidad de disponer de paredes planas para ejercer de forma artificial un desplazamiento horizontal homogéneo. Lo anterior se puede observar en la Figura No. 22.

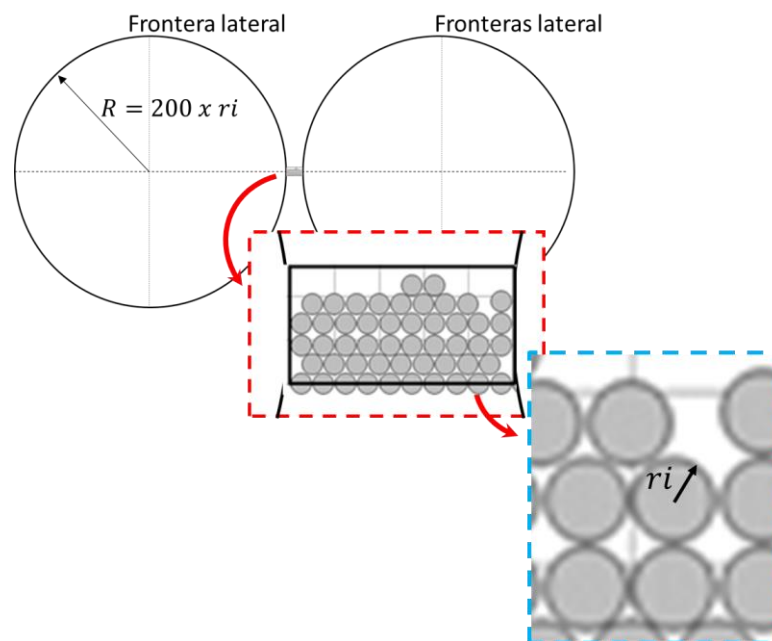


Figura No. 22 Condiciones de las fronteras móviles y su relación de escala con los elementos que conforman la muestra

La superficie de falla se encuentra en la parte baja de la caja; ésta está formada por un arreglo lineal de 10 partículas dispuestas una al lado de otra, formando una superficie con irregularidades sobre la cual se desplazarán los elementos que forman el medio granular.

Las partículas de la parte baja de la caja permanecen inmóviles en todo momento. En el código, esto se logra al no afectarlas ni por la gravedad en sí, ni por las interacciones con los demás elementos. Las paredes verticales se desplazan a una velocidad horizontal constante de 0,005 m/s.

4.1.2 PARÁMETROS DEL ENSAYO Y OBTENCIÓN DE DATOS

Las partículas que se simularán tendrán un radio de 0,0025 metros y una masa de 0,00105 kg. Debido a que el modelo de contacto utilizado es el de Kelvin-Voigt, los parámetros k y η son, respectivamente, 500000 N/m y 1000 N/(m/s). Todos los elementos que se simulan tienen estas mismas propiedades; no obstante, pueden ser cambiadas indistintamente según se requiera pues el código es lo suficientemente versátil para permitirlo.

La obtención de los valores de fuerza normal y cortante se realiza sobre las partículas fijas que forman la superficie de falla. Las fuerzas son producto de la interpretación de los modelos de contacto y como se vio en los capítulos anteriores, la medición con este método es consistente con los datos esperados.

4.1.3 INICIALIZACIÓN

Los suelos como medios granulares se ven sometidos a un proceso constante de erosión, transporte y depósito si están expuestos a la atmósfera. Por ese motivo la disposición espacial y la geometría de los granos que conforman el medio está ligado a estos procesos.

El proceso de sedimentación, de forma somera, describe un proceso mediante el cual las partículas movilizadas por un agente de transporte pierden energía y empiezan un descenso paulatino bajo la acción de la gravedad. Las partículas descienden dentro de una solución líquida o gaseosa hasta encontrar una configuración que les impida su movimiento. Posteriormente se genera la acumulación de capas sobre capas de material y con el tiempo, la formación de un estrato se hace evidente.

En la simulación de medios granulares, es de vital importancia definir las condiciones iniciales de los elementos a simular. Por lo anterior se llegó a la conclusión de la necesidad de generar aleatoriedad en la distribución de los granos dentro de la muestra. Por lo cual, la fase inicial del proceso de simulación tiene como objetivo generar las condiciones iniciales del problema y que las mismas no estén en función de la discrecionalidad del operador del código, sino de un proceso analítico que brinde condiciones óptimas para el análisis.

Si se dispone un sistema que permita simular la caída de materiales tras pasar por una abertura reducida, se genera un efecto de embudo y agrupación no homogénea. Dicho proceso es, en gran medida, similar a ciertos procesos de depósito por acción gravitacional. Este proceso se presenta al intentar disponer materiales granulares sueltos en recipientes. Las partículas, al verse sometidas a las fuerzas gravitacionales descienden. La apertura reducida genera una acomodación de los elementos para intentar superar el obstáculo dispuesto y la depósito posterior ya no obedecerá a una condición subjetiva sino a un proceso, donde se definen las leyes que controlan el fenómeno y se deja que el modelo, en función de las mismas, genere sus condiciones iniciales.

La fase de inicialización comprende una primera simulación, de la cual se obtienen las posiciones de los elementos al momento de tener una velocidad relativa nula.

4.2 ENSAYO CON PARTÍCULAS HOMOGÉNEAS

Este ensayo simuló el movimiento de un arreglo irregular de partículas, todas iguales, sobre una superficie formada por los mismos elementos circulares, dispuestos uno al lado del otro.

La fase de inicialización deja caer a los 40 elementos libremente sobre la superficie irregular y tras superar el obstáculo, estas se acomodan de forma aleatoria.

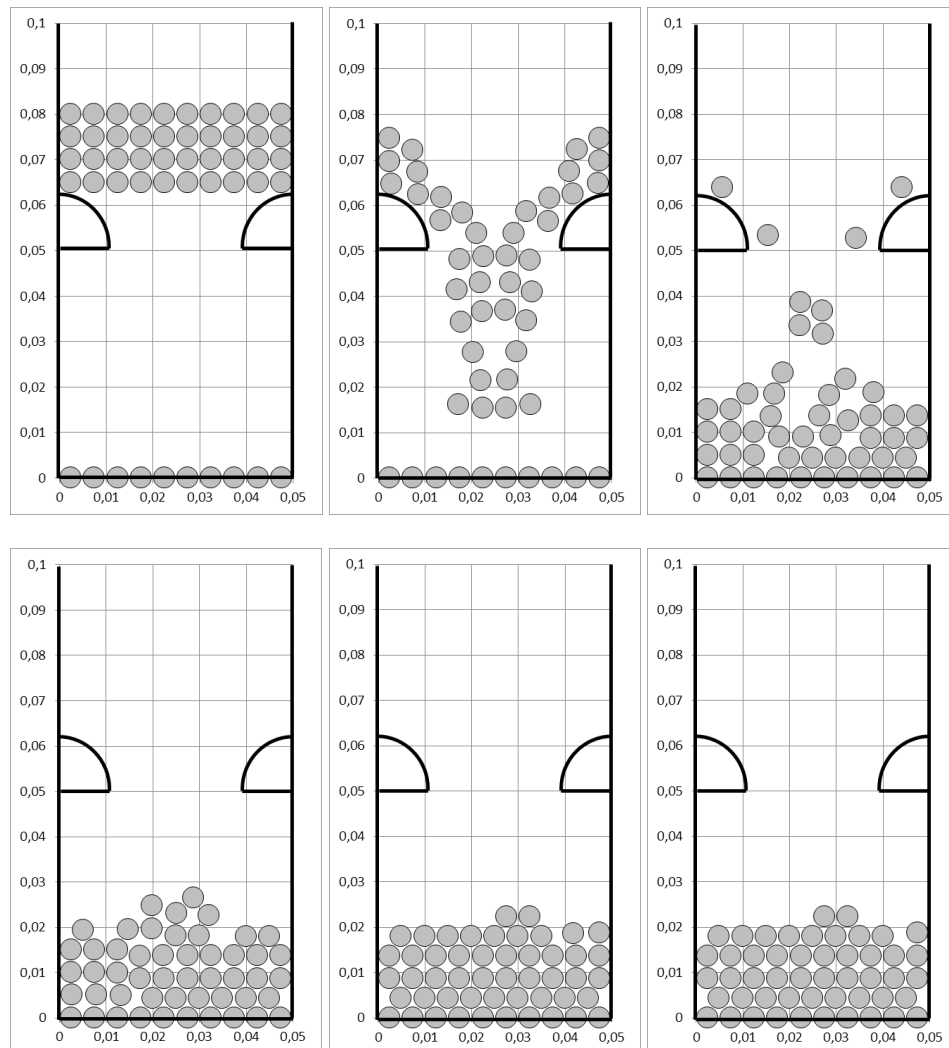


Figura No. 23 Inicialización del Código-Condiciones Iniciales para la Simulación: Disposición de las partículas en función del tiempo.-Ensayo 1 (cada imagen corresponde a un tiempo determinado)

La Figura No.23 muestra el proceso de inicialización donde se definen las condiciones iniciales que sirven de base para los procesos posteriores. La misma muestra seis pasos del proceso dinámico; partiendo desde el tiempo cero y hasta 0.5 segundos, tiempo en el cual las partículas se encuentran en equilibrio.

Tras la fase de inicialización, donde se definen las posiciones iniciales de los elementos, las partículas se someten a un desplazamiento horizontal controlado con una velocidad constante.

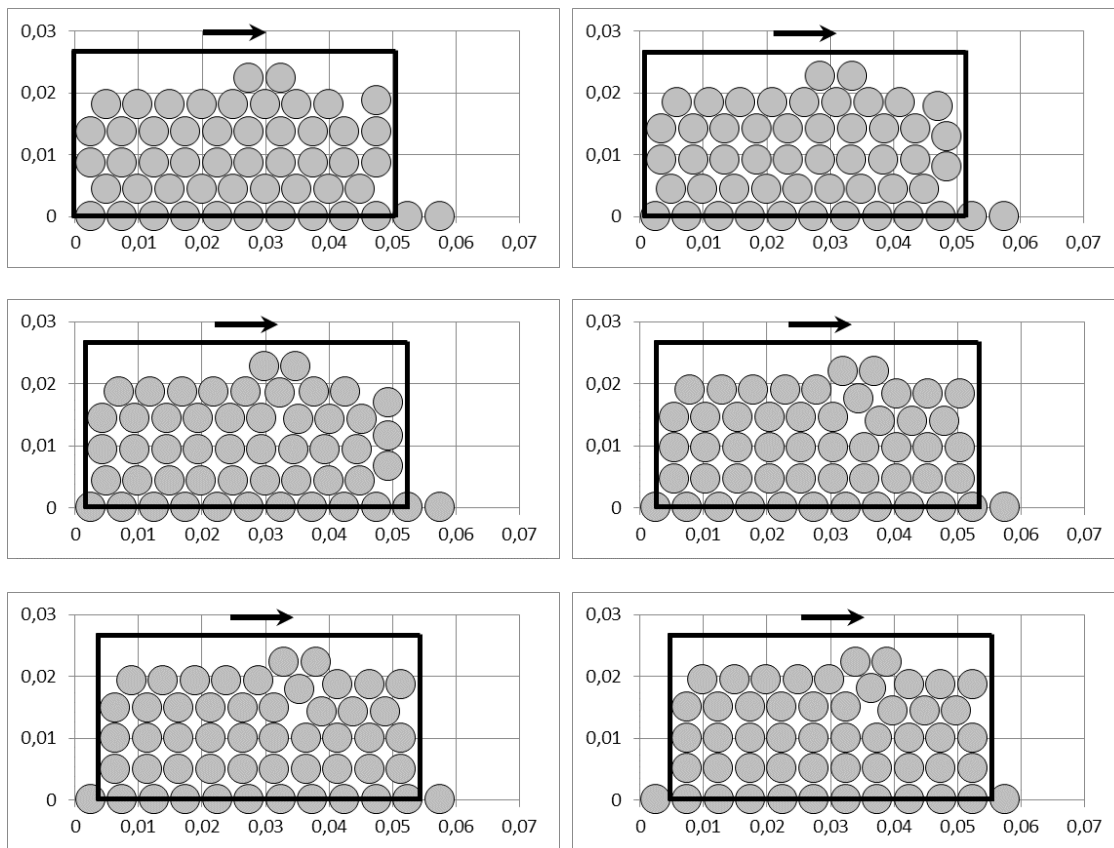


Figura No. 24 Simulación de Corte-Ensayo 1: Disposición de las partículas en función del tiempo (m).-Velocidad de Corte: 0,005 m/s- Cantidad de Elementos: 40

Como se observa en la Figura No. 24, a medida que la deformación horizontal aumenta, las partículas se acomodan de forma tal que unas cabalgan sobre las otras, interactuando entre sí. Adicionalmente, en función de la deformación, se puede observar cómo el arreglo de partículas pasa de un arreglo compacto hasta un arreglo más suelto, las partículas se apilan una sobre otra en un arreglo abierto. De esta forma se llega a una deformación crítica, para la cual el arreglo de partículas no desarrolla menor resistencia que la que obtiene en esta condición.

No todos los elementos que forman el medio granulado se ven afectados de forma homogénea por la deformación inducida, es así como las partículas que se encuentran sobre la “superficie de falla” no se ven afectadas, sino hasta bien avanzado el proceso de corte.

Con las condiciones iniciales presentadas, se realizaron cuatro simulaciones de la resistencia al corte del medio granular con diferentes valores de la fuerza normal aplicada sobre la superficie de falla.

Debido a que de forma arbitraria el ensayo de corte define una superficie de falla, y que en la simulación acá propuesta la superficie se simula con un arreglo de partículas, sobre éstas se midió la fuerza cortante y normal. La superficie de falla está formada por 9 partículas que no interactúan con las fronteras móviles, partículas A a I. La Figura No 25 muestra las partículas sobre las cuales se desplaza el arreglo generado.

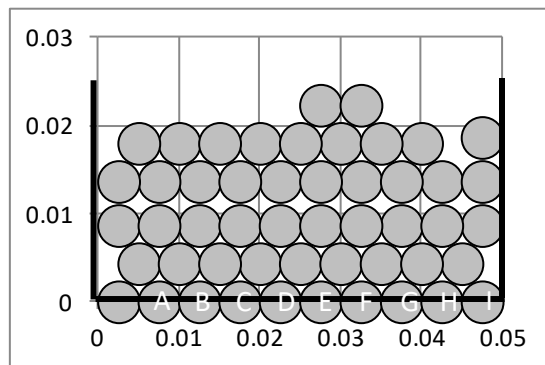


Figura No. 25 Partículas de la superficie de falla-Las unidades que se presentan en los ejes vertical y horizontal son metros

Es de suponer que durante la deformación inducida, las partículas interactúen de forma muy compleja, esto se traduce en que la fuerza normal y cortante no se desarrollan de forma homogénea ni igual para cada partícula. Es de esperar que por momentos, la resultante de fuerzas sobre algunas partículas sea nula, así como en algunos casos será la máxima. Por lo anterior, se analizó, no solo los valores de fuerza normal y cortante para cada partícula de la superficie, sino que también se analizó el valor promedio, la tendencia de los valores en función de la deformación.

Las Figuras No. 26 a 29 muestran los valores de las fuerzas cortantes para los diferentes niveles de fuerzas normales. En rojo se señalan los valores promedio registrados para el ensayo y en escala de grises los valores registrados para cada partícula.

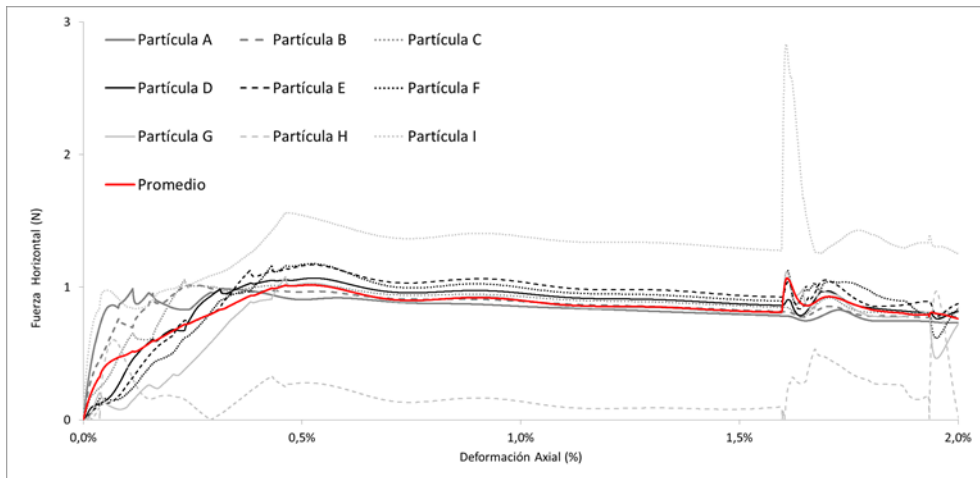


Figura No. 26 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 1
masa de cada partícula: 0,0625 kg

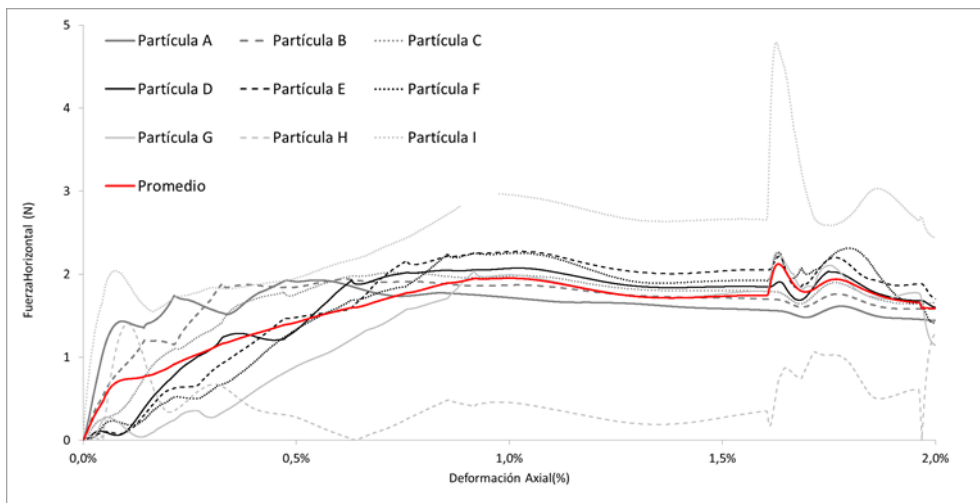


Figura No. 27 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 2
masa de cada partícula: 0,125 kg

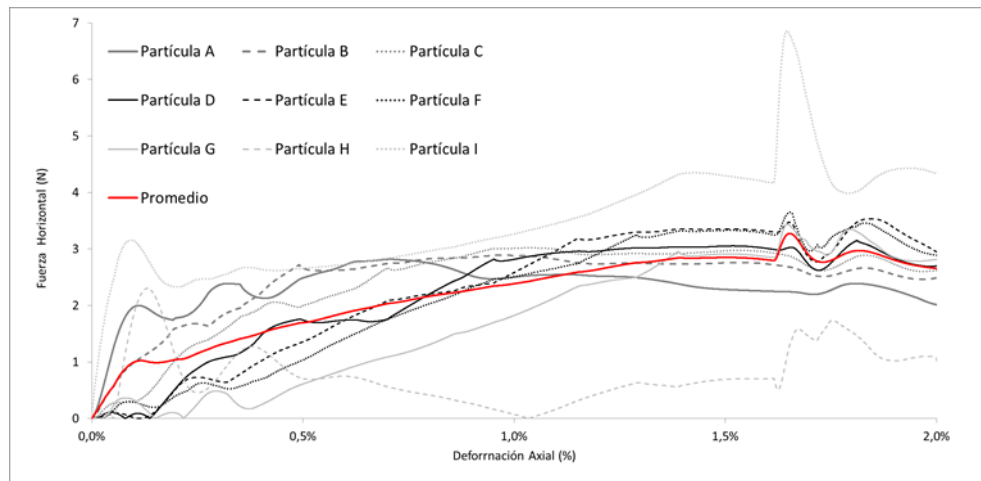


Figura No. 28 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 3
masa de cada partícula: 0,1875 kg

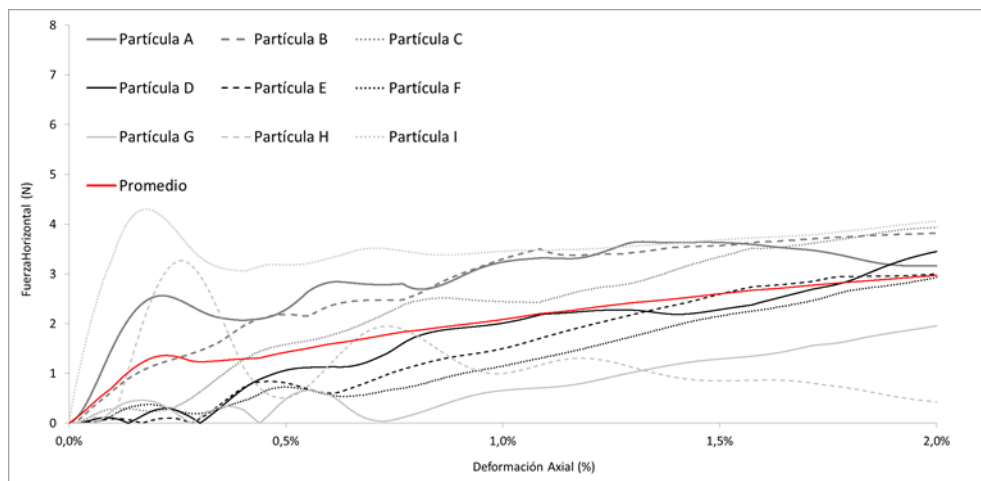


Figura No. 29 Fuerza Cortante-Ensayo 1-Nivel de fuerza normal 4
masa de cada partícula: 0,25 kg

Tomando los valores promedios para cada simulación de la resistencia al corte, se construyó la Figura No.30, la cual presenta la fuerza cortante promedio en función de la deformación horizontal para cada nivel de fuerza normal registrada sobre la superficie de falla definida. En la misma, se observa que los valores de fuerza horizontal promedio sobre cada elemento asciende

hasta alcanzar un valor máximo entre 0.5 % y 1.5% de deformación horizontal; posteriormente, el valor de fuerza horizontal desciende y su tendencia permanece constante.

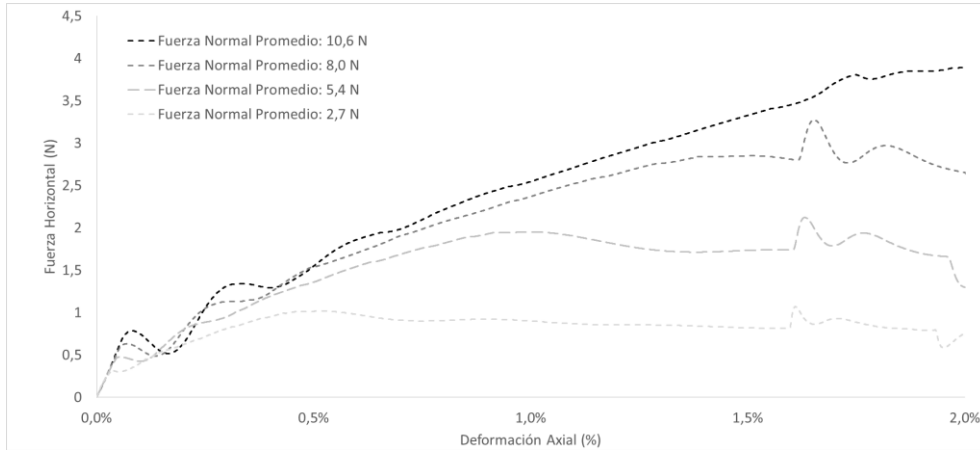


Figura No. 30 Fuerza Cortante-Ensayo 1

Teniendo los valores de la fuerza normal y cortante para cada nivel de fuerza sobre la superficie de falla, se construyó la Figura No.31, la cual presenta los valores máximos del promedio de las fuerzas cortantes registradas sobre las partículas **A** a **I** para cada nivel de fuerza normal.

El carácter oscilatorio de las curvas de la Figura no. 31 es debido a la alta heterogeneidad de la superficie de falla inducida. Los valores iniciales parten desde cero y rápidamente ascienden hasta adquirir la tendencia general. Los valores registrados forman pares de que ascienden en una relación constante en todo el ensayo hasta alcanzar un pico bien definido. En la Figura No. 31 se observa una clara tendencia de la fuerza normal y cortante durante la simulación. Si se analizan los valores máximos registrados y se construye la curva que mejor agrupa los valores pico, se puede observar que se genera una línea cuya inclinación con respecto a la horizontal es de 21 grados.

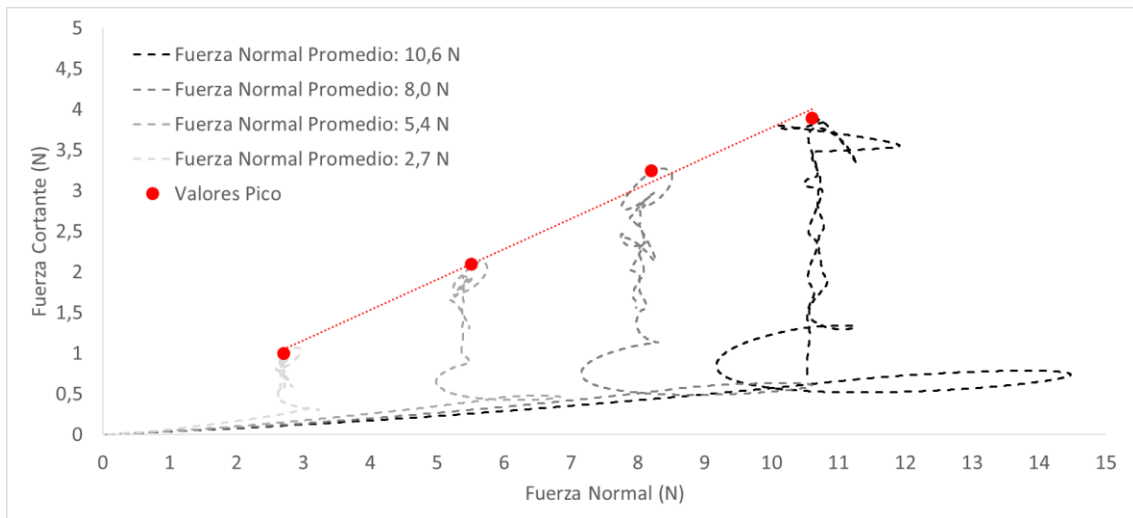


Figura No.31 Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 1

4.3 ENSAYO CON SUPERFICIE DE FALLA IRREGULAR

El ensayo con superficie de falla irregular se realizó con el objetivo de generar una zona de falla con condiciones geométricas distintas a las del primer ensayo. Esta superficie irregular se logró al reducir el diámetro de algunas partículas a la mitad.

En la Figura No. 32 se presenta la fase de inicialización; allí se observa como al tener una superficie más heterogénea, las partículas se reacomodan de forma muy distinta a lo observado cuando se tiene una superficie formada por elementos del mismo tamaño. Algunas partículas dejan de apoyarse sobre otras y sobre la superficie de falla ya no se apoyan la misma cantidad de elementos. Las partículas sobre la superficie de falla no tiene el mismo número de elementos interactuando, algunas tienen dos contactos, otras solo uno. Esta diferencia, en la disposición de los elementos en el inicio del ensayo muestra de que forma, el tamaño de las partículas por sí mismo, puede influir en el comportamiento mecánico de los materiales granulares.

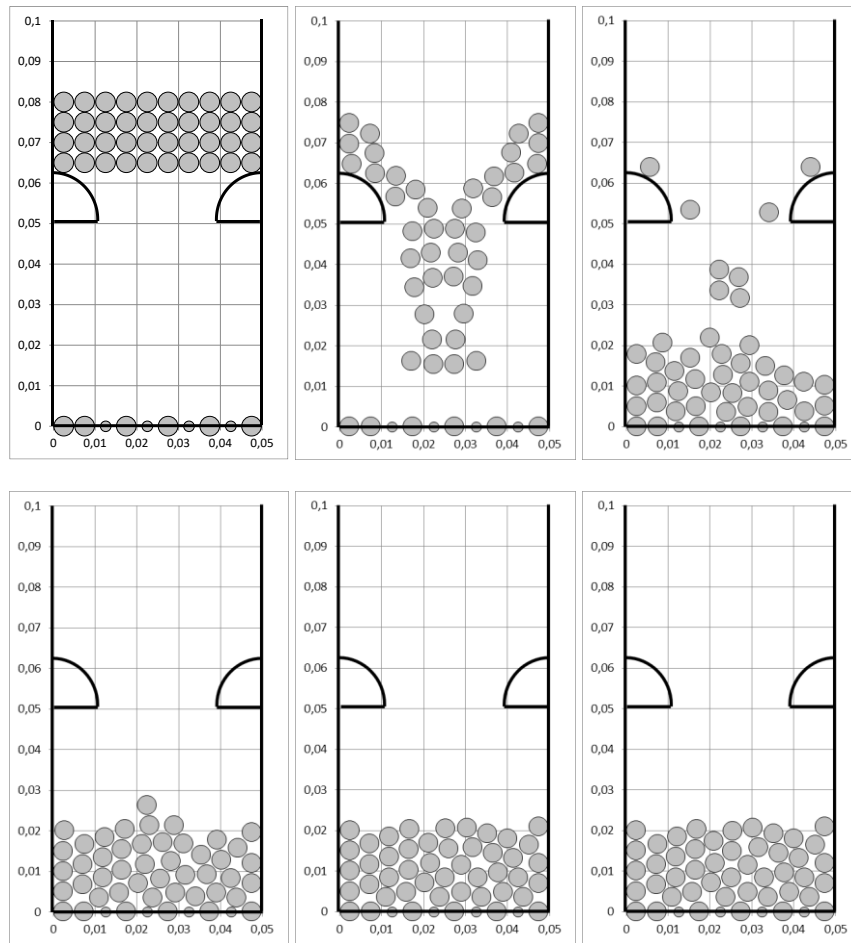


Figura No. 32 Inicialización del Código-Condiciónes Iniciales para la Simulación: Disposición de las partículas en función del tiempo (m).-Ensayo 2

La Figura No. 33 presenta la posición de las partículas para cuatro fracciones de tiempo iguales. Se observa que las partículas que están en contacto con la superficie de falla casi no cambian de posición, no así las que se encuentran sobre estas.

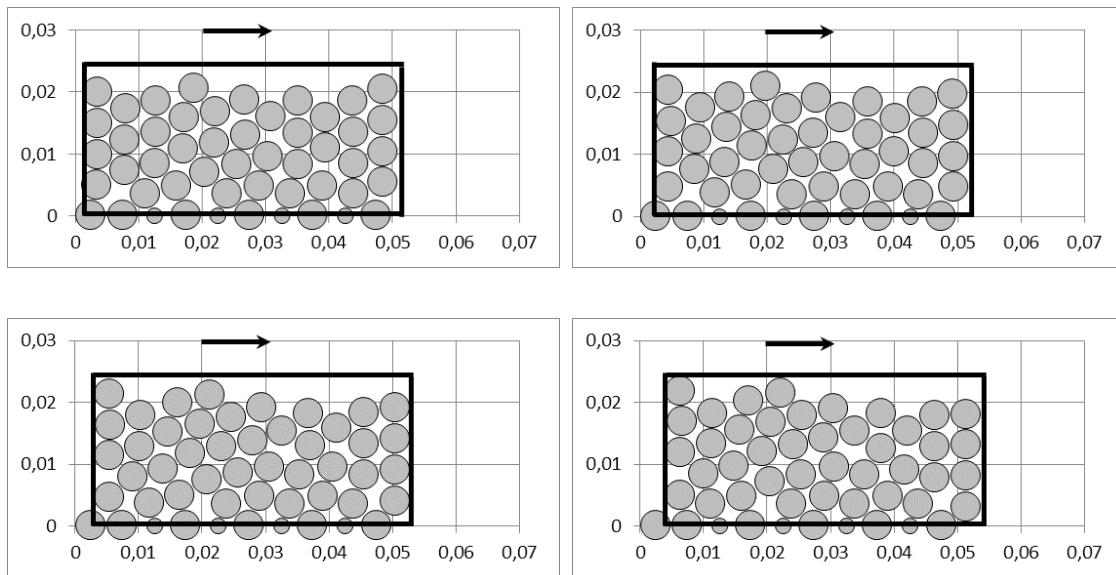


Figura No. 33 Simulación de Corte-Ensayo 2: Disposición de las partículas en función del tiempo(m).-Velocidad de Corte: 0,005 m/s- Cantidad de Elementos: 40

Tras iniciar la deformación horizontal, se observa cómo las partículas más cercanas a la superficie de falla presentan un movimiento relativo más bajo que las partículas sobre éstas. La nueva irregularidad, inducida sobre la superficie de falla, hace que las partículas se vean sometidas a mayores niveles de fuerza para ser movilizadas. La irregularidad sobre la superficie genera un control geométrico al movimiento y así mismo un cambio en la fuerza cortante registrada sobre la superficie de falla.

Ahora bien, los valores de fuerza cortante registrados sobre las partículas que conforma la superficie de falla, muestran valores considerablemente diferentes a los obtenidos en el ensayo con los elementos homogéneos. Esto hace ver que la fuerza cortante sobre la superficie de falla no es, en ningún caso, homogénea. También es evidente, al observar el movimiento de los elementos (Figura No. 33), que muchos se mueven con la masa de partículas y otros, los más cercanos a la superficie de falla, se mueven a una velocidad menor.

En las figuras No. 34 a 37 se presentan los valores de fuerza horizontal contra la deformación horizontal que se registró durante el ensayo realizado. En las mismas se puede notar que el pico de máxima fuerza horizontal se registra a bajas deformaciones. Un nuevo pico se presenta en

deformaciones cercanas entre el 1.0% y el 1.5%. Las oscilaciones registradas en los datos se hicieron más evidentes para los dos niveles de esfuerzos mayores (Figuras No. 36 y 37), dichas oscilaciones se relacionan de forma directa con los niveles de esfuerzos ya mencionados.

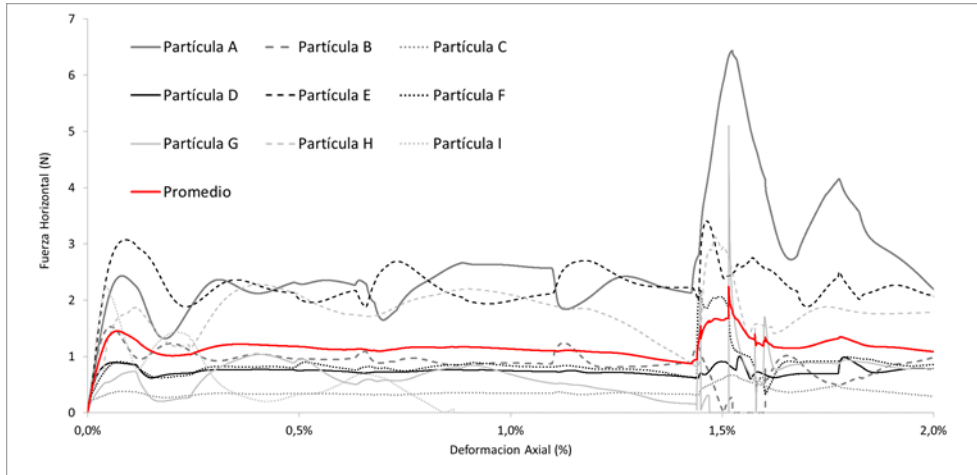


Figura No. 34 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 1
masa de cada partícula: 0,0625 kg

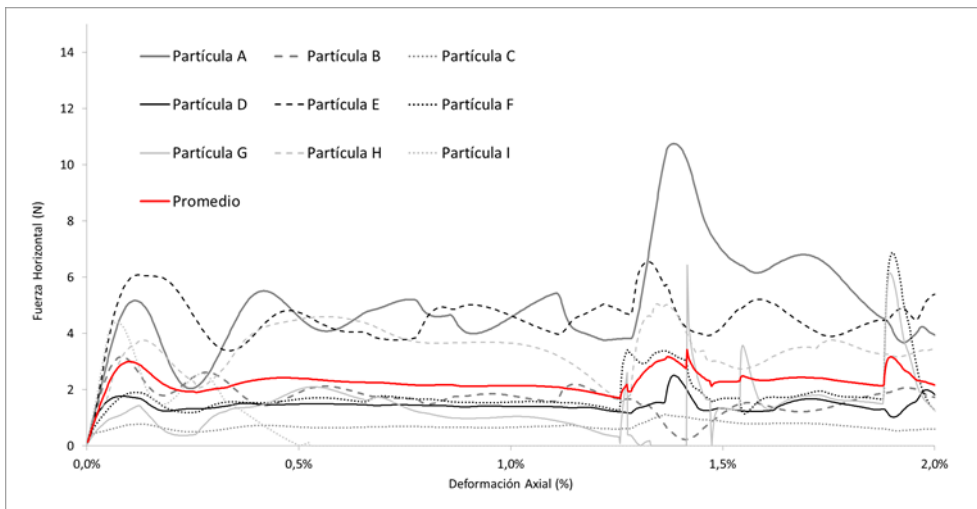


Figura No. 35 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 2
masa de cada partícula: 0,125 kg

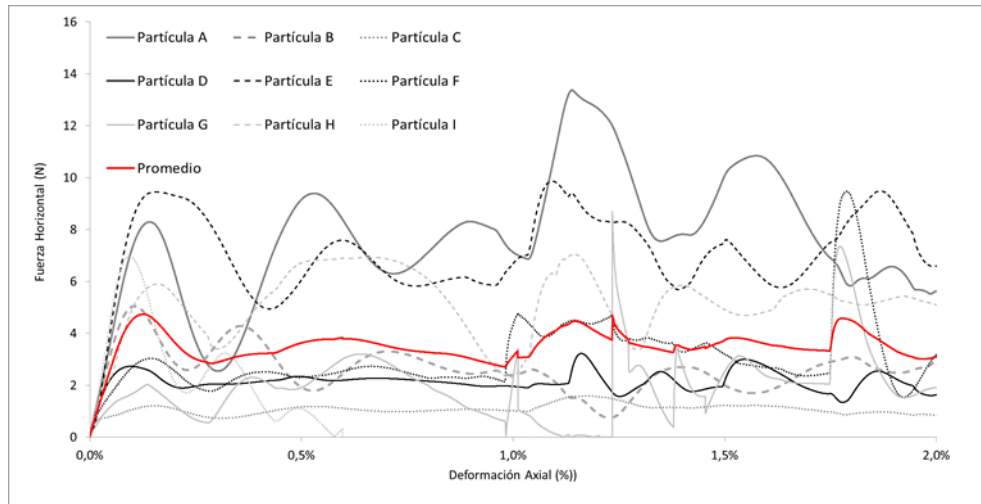


Figura No. 36 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 3
masa de cada partícula: 0,1875 kg

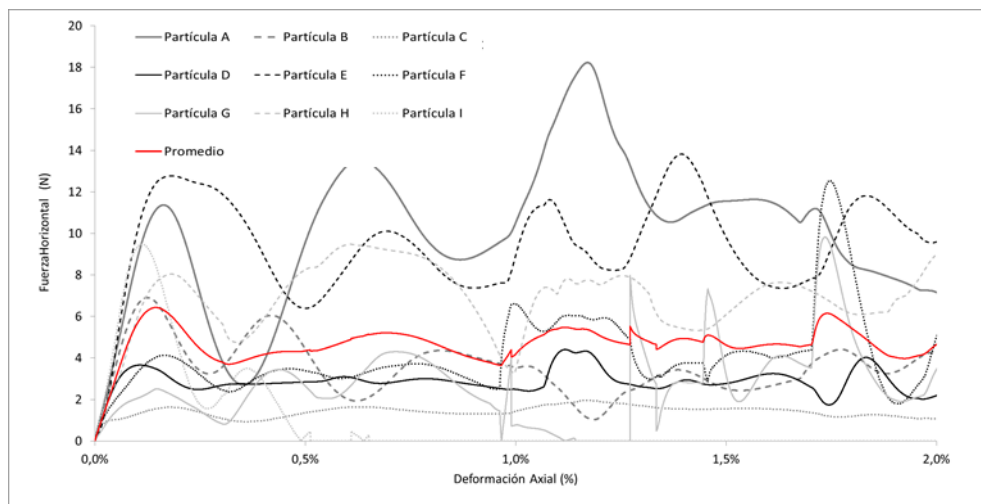


Figura No. 37 Fuerza Cortante-Ensayo 2-Nivel de fuerza normal 4
masa de cada partícula: 0,25 kg

A medida que la deformación aumenta se observa cómo se generan picos y valles en los valores de la fuerza cortante, esto es debido a la heterogeneidad de la superficie de falla y a la compleja interacción de los elementos que conforman el medio granular. El valor máximo de la fuerza cortante se alcanza a niveles muy bajos de deformación, esto debido a que si bien, la estructura en sí, tiene una resistencia al corte, las partículas de forma individual no la tienen. (Figura No. 38).

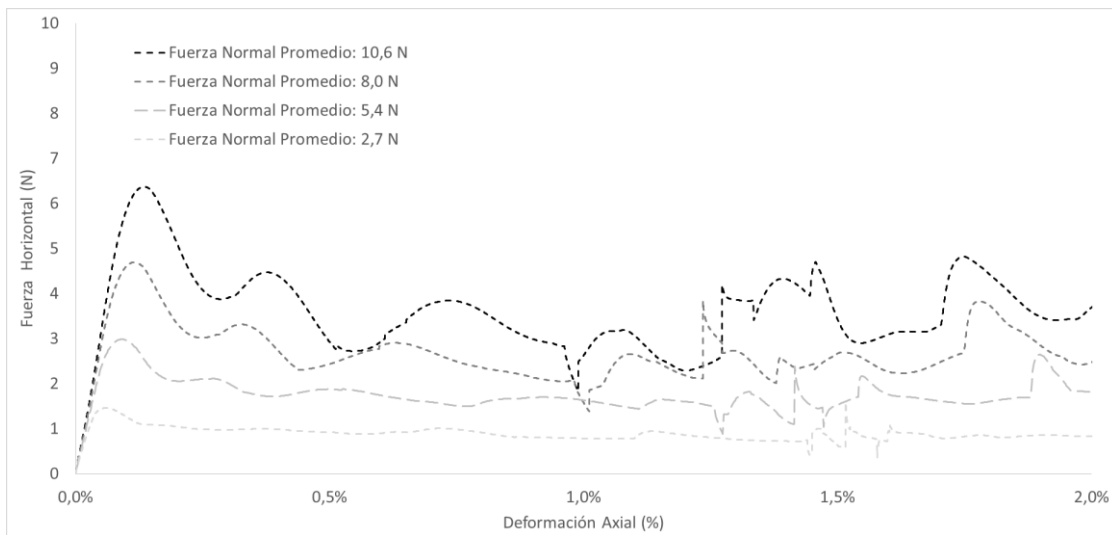


Figura No. 38 Fuerza Cortante-Ensayo 2

Por otro lado, los valores de la fuerza normal que se registraron sobre los elementos que conforman la superficie de falla, varían a medida que se desarrolla la deformación inducida, presentan variaciones mayores a las que se observaron en el primer ensayo realizado. Esto también deja claro que la fuerza normal no se distribuye de forma homogénea en medios particulados, se generan cadenas de fuerzas entre partículas y, en algunos casos, dichas fuerzas normales y cortantes son nulas.

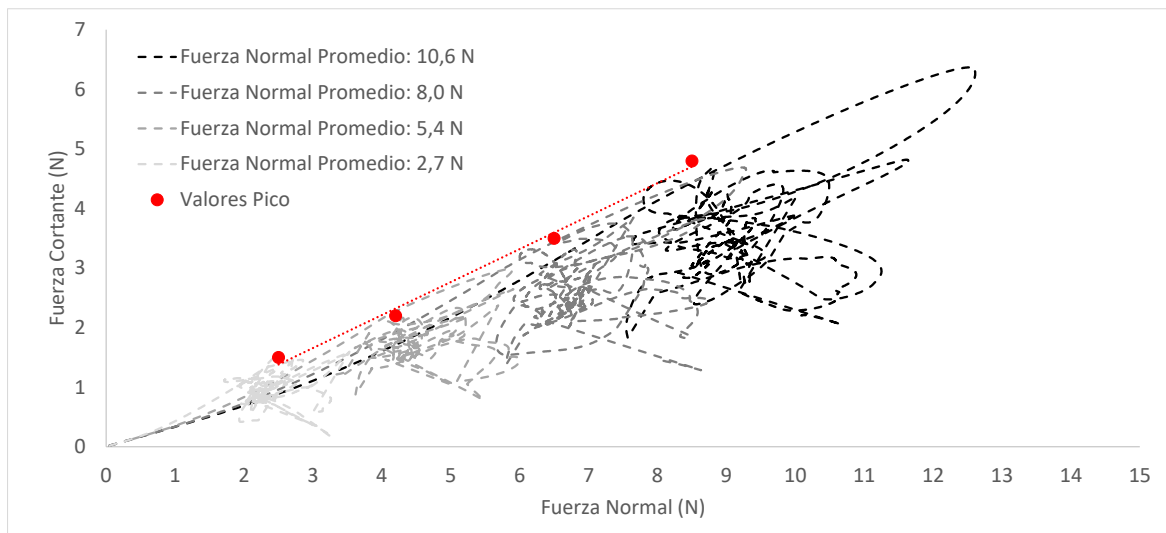


Figura No. 39 Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 2

Debido a la heterogeneidad de la superficie inducida de falla, los valores de la fuerza normal y cortante registrados cambian considerablemente, si se comparan con los del primer ensayo; No obstante, es clara la tendencia de los valores pico registrados. Se forma una envolvente que agrupa los valores máximos de la fuerza cortante. Al trazar la curva que mejor agrupa los valores pico registrados en el ensayo, se puede observar que la envolvente presenta una tendencia lineal cuya inclinación es de 29 grados. (Figura No. 39).

4.4 ENSAYO CON UN SOBRETAMAÑO DENTRO DE LA MASA MOVILIZADA

El tercer ensayo consistió en el análisis de la resistencia al corte cuando la masa de partículas movilizadas tiene un sobretamaño dentro, es decir, una partícula con un tamaño mayor a las otras y que tiene libertad de movimiento. Así, se aumentó el radio de una de las partículas al doble; ésta se moviliza libremente con la masa e interactúa según lo permita su nueva geometría.

En la fase de inicialización se llevó a cabo según como se describió en los capítulos anteriores. Debido a la partícula de mayor tamaño, la geometría inicial de toda la masa cambia en comparación con las otras condiciones iniciales. La partícula de mayor tamaño hace que en la estructura final se presenten mayores vacíos, por lo cual el volumen total de la muestra aumenta. Esto hace posible que algunos elementos de la superficie de falla no presenten valores de fuerza normal y cortante al iniciar el proceso de deformación y solo es cuando la deformación aumenta que los mismos registran valores. Hay que destacar que los modelos de contacto y demás propiedades permanecen constantes, las partículas siguen siendo lisas y con las características ya descritas. Lo anterior se puede notar en las Figuras No. 41 a 44 en donde se presentan los valores de fuerza cortante en función de la deformación horizontal inducida.

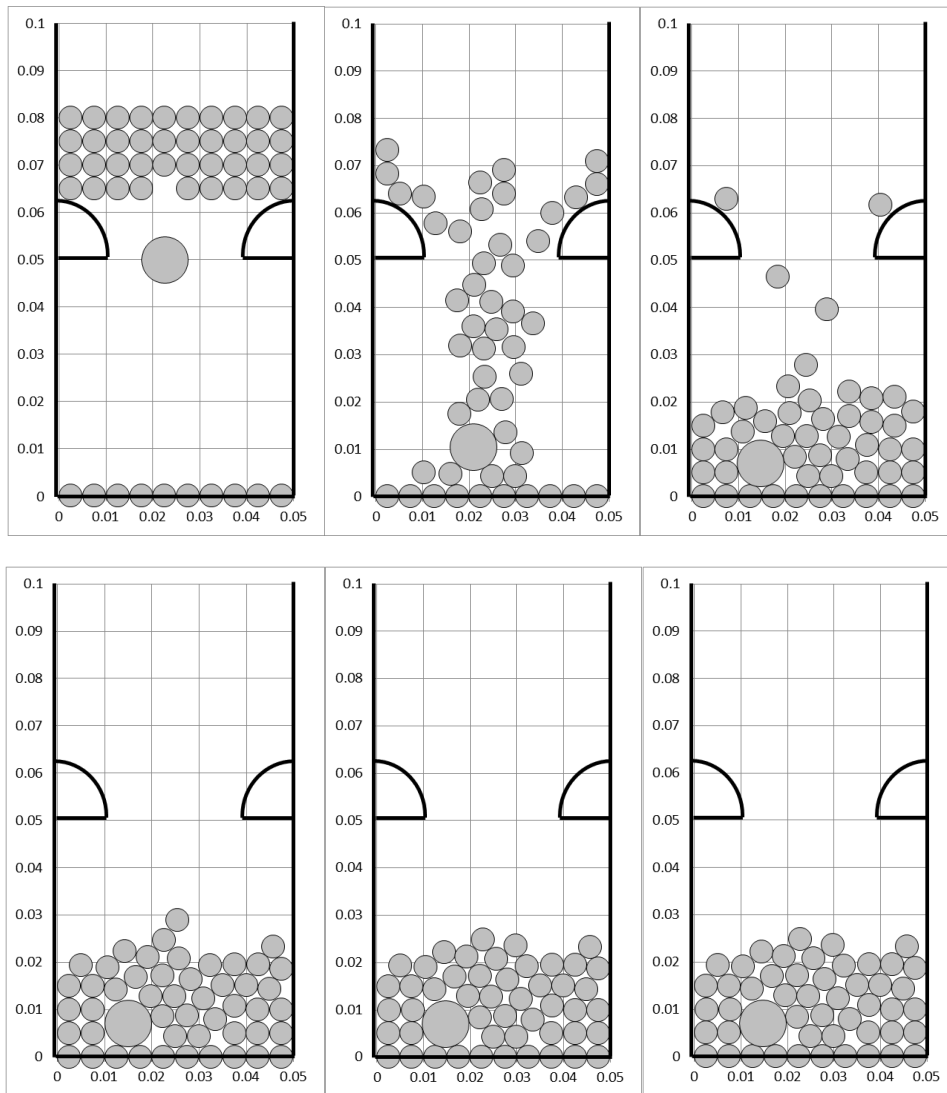


Figura No. 40 Inicialización del Código-Condiciones Iniciales para la Simulación: Disposición de las partículas en función del tiempo(m).-Ensayo 3

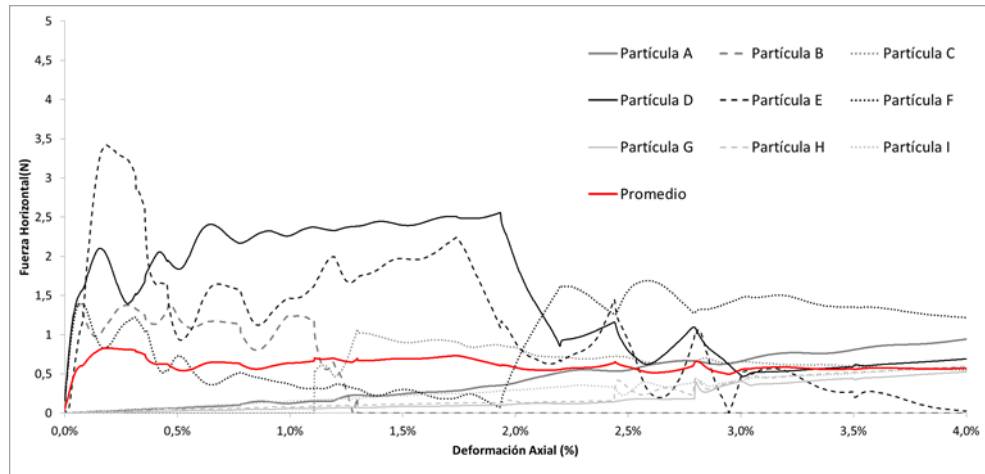


Figura No. 41 Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal 1
masa de cada partícula: 0,0625 kg

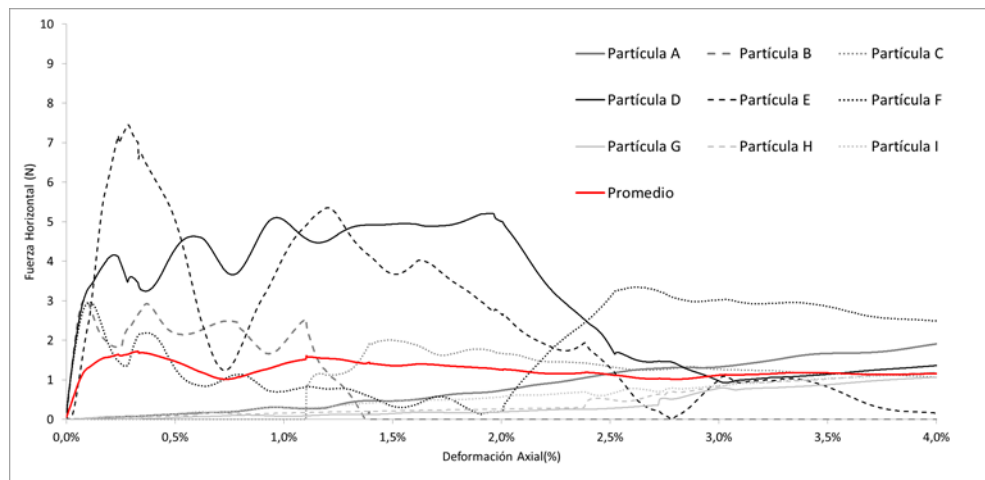


Figura No. 42 Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal 2
masa de cada partícula: 0,125 kg

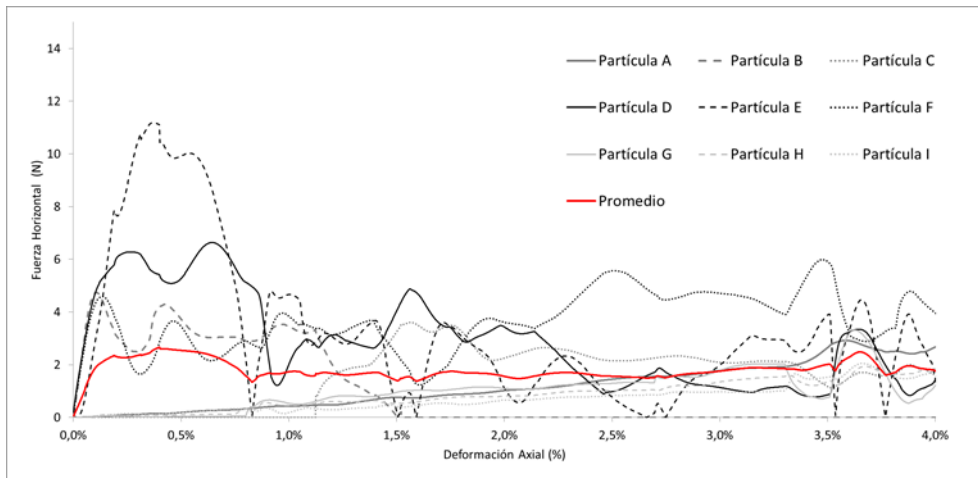


Figura No. 43 Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal 3
masa de cada partícula: 0,1875 kg

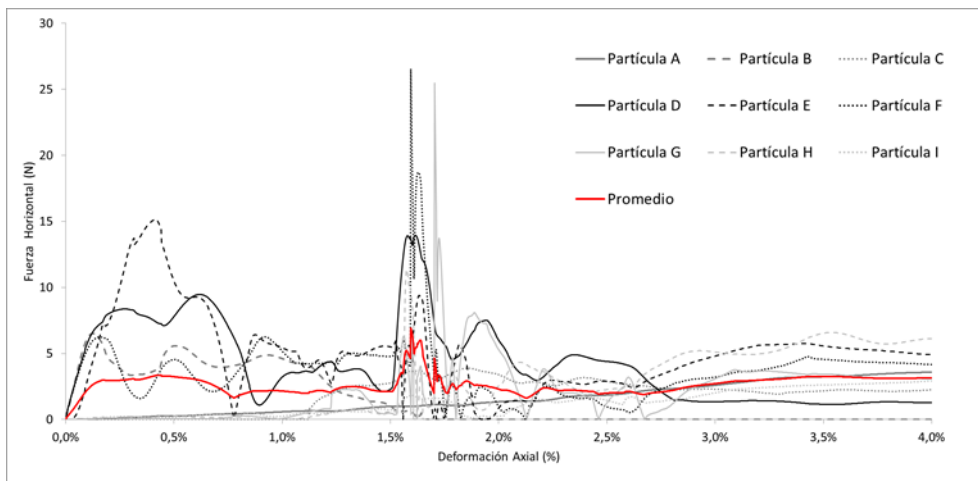


Figura No. 44 Fuerza Cortante-Ensayo 3-Nivel de fuerza normal 4
masa de cada partícula: 0,25 kg

Partiendo de las condiciones obtenidas en el proceso de inicialización, se generó la deformación horizontal inducida, obteniendo los valores de la fuerza horizontal registrada sobre las partículas que componen la superficie de falla. En este caso se observa que el sobretamaño altera la forma de las gráficas pero no así la magnitud de las fuerzas registradas, o lo que es lo mismo, genera que los valores registrados presenten más picos y valles pero la resistencia la corte no se ve alterada en gran medida por esta condición.

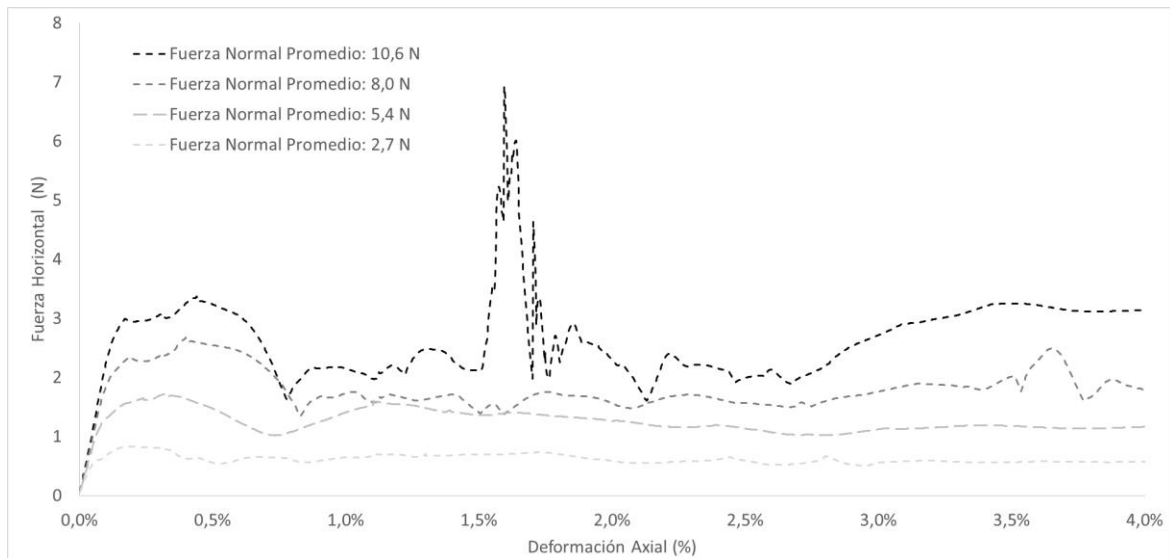


Figura No. 45 Fuerza Cortante-Ensayo 3

Los valores de fuerza horizontal alcanzan su pico con deformaciones muy bajas, casi al inicio del ensayo; ahora bien, es claro que tras el desarrollo del ensayo, nuevos picos se generan, en este caso relacionados solo con la interacción de las partículas entre sí. Durante lapsos muy cortos de tiempo los valores de fuerza horizontal se elevan haciendo a la gráfica muy aguzada, que rápidamente retorna a su tendencia normal.

Al construir la gráfica que agrupa la fuerza vertical y horizontal se puede observar las oscilaciones que se presentan en los valores; no obstante, la tendencia de los mismos se agrupa de forma tal que se puede construir una envolvente que una los valores máximos registrados. (Figura No. 46).

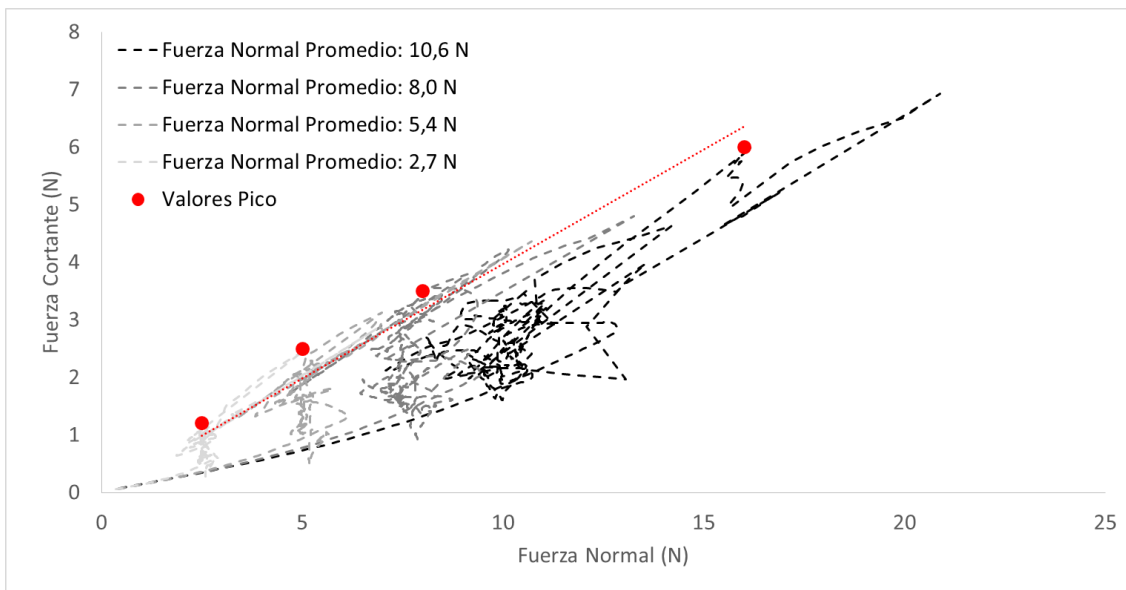


Figura No. 46 Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 3

4.5 ENSAYO CON UN SOBRETAMAÑO EN LA SUPERFICIE DE FALLA

El cuarto ensayo evaluó la resistencia al corte si la superficie de falla está compuesta por una partícula de mayor tamaño. La partícula tiene el doble del radio de las anteriores y está dispuesta de forma tangencial a las otras partículas que conforman la superficie de falla.

El proceso de inicialización se llevó a cabo conforme se ha explicado anteriormente y se generó el arreglo irregular en función de las nuevas condiciones de los elementos a ensayar. Posterior a este se generó la deformación horizontal. La Figura No. 47 muestra el movimiento del arreglo de partículas. En ésta se observa como la partícula de mayor tamaño genera un obstáculo que las demás partículas deben superar para continuar su movimiento.

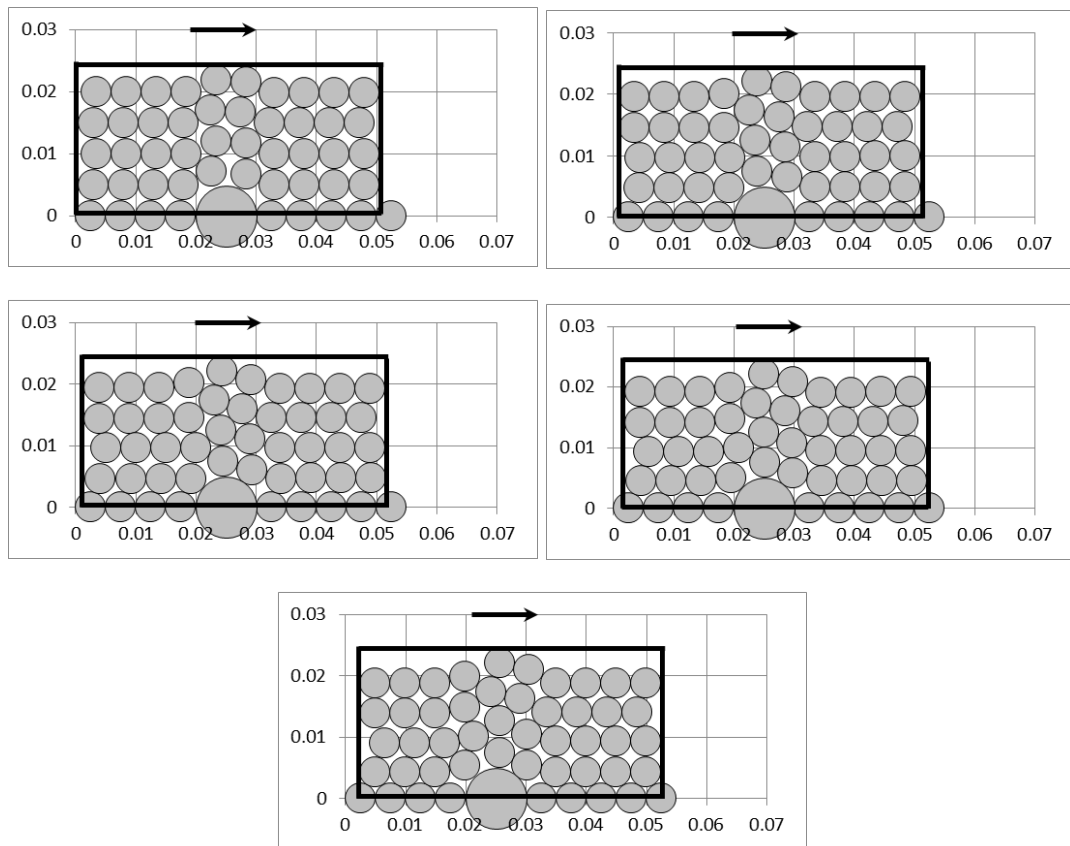


Figura No. 47 Simulación de Corte-Ensayo 4: Disposición de las partículas en función del tiempo (m).-Velocidad de Corte: 0,005 m/s- Cantidad de Elementos: 40

En este caso las deformaciones verticales son muy evidentes, y se observa como las partículas cabalgan intentado superar el obstáculo. Esta interacción es muy clara en las gráficas de fuerza horizontal, donde el desarrollo de la resistencia toma mucho más tiempo que para los otros ensayos y se generan picos muy aguzados, aumentos de la fuerza en lapsos muy pequeños de tiempo.

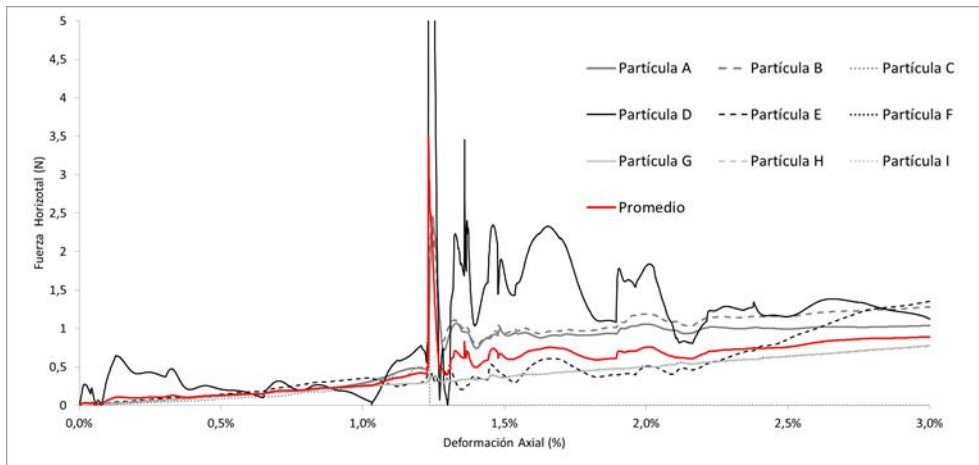


Figura No. 48 Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal 1
masa de cada partícula: 0,0625 kg

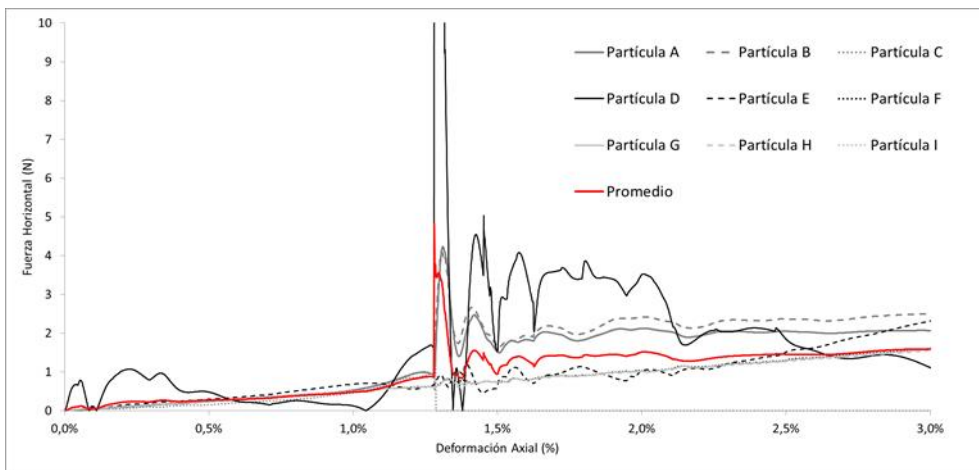


Figura No. 49 Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal 2
masa de cada partícula: 0,125 kg

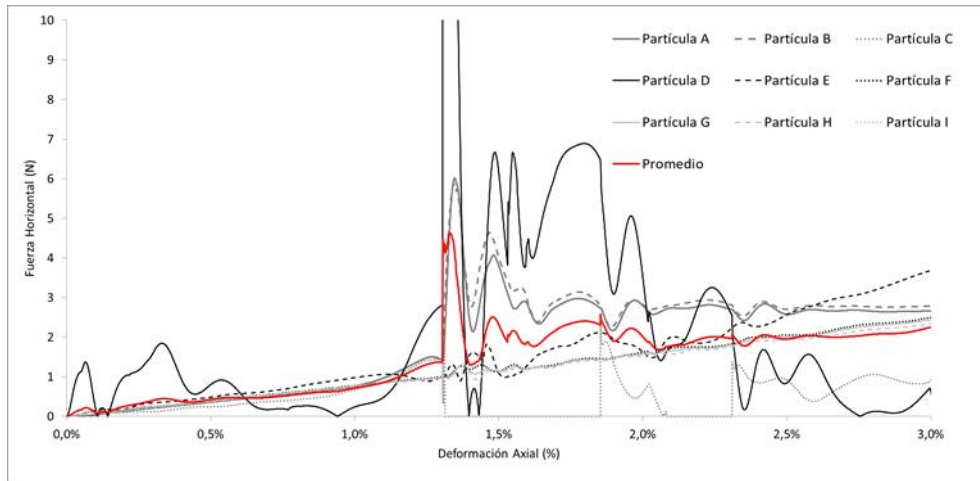


Figura No. 50 Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal 3
masa de cada partícula: 0,1875 kg

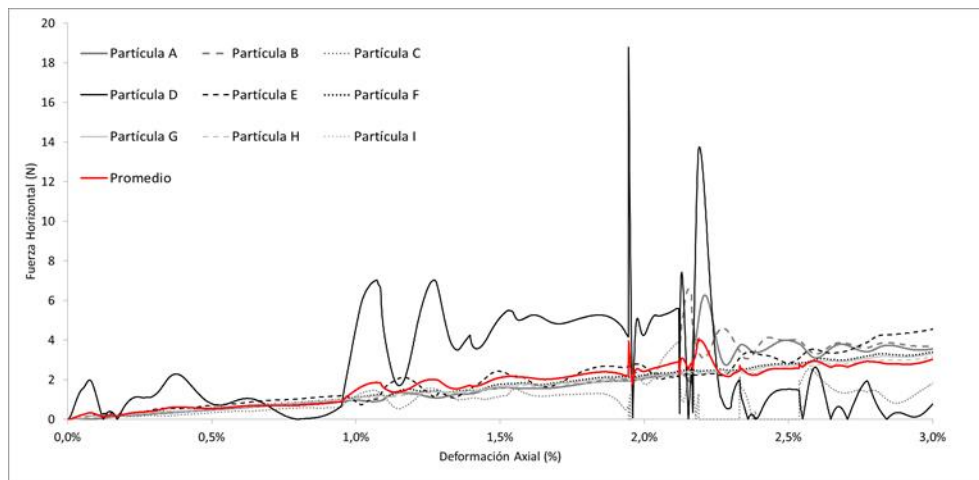


Figura No. 51 Fuerza Cortante-Ensayo 4-Nivel de fuerza normal 4
masa de cada partícula: 0,25 kg

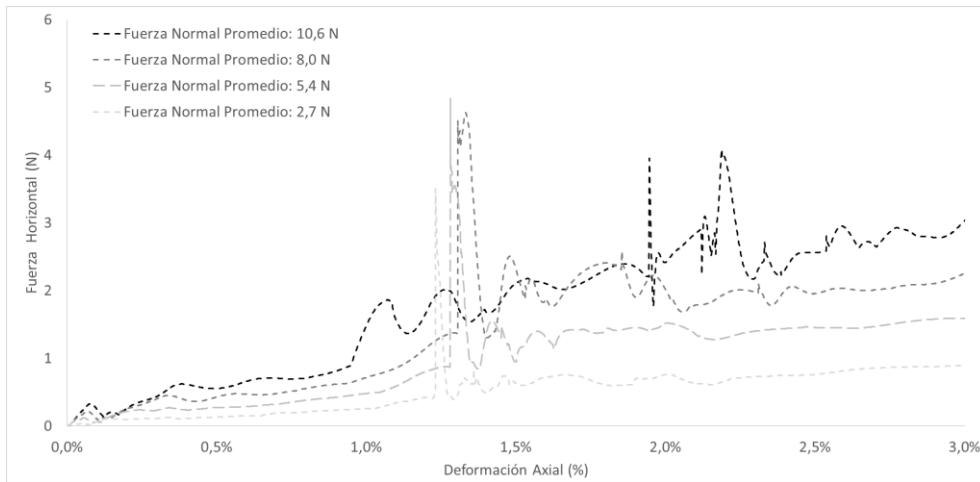


Figura No. 52 Fuerza Cortante-Ensayo 4

Al agrupar los valores promedio se puede observar el efecto de las partículas cabalgando sobre el sobretamaño y como, tras alcanzar los valores máximos de fuerza, la misma descende obteniendo los valores residuales. Este descenso se presenta tras la liberación de los elementos que se encuentran sobre la partícula de mayor tamaño y que para entonces ya empieza el descenso de la fuerza registrada.

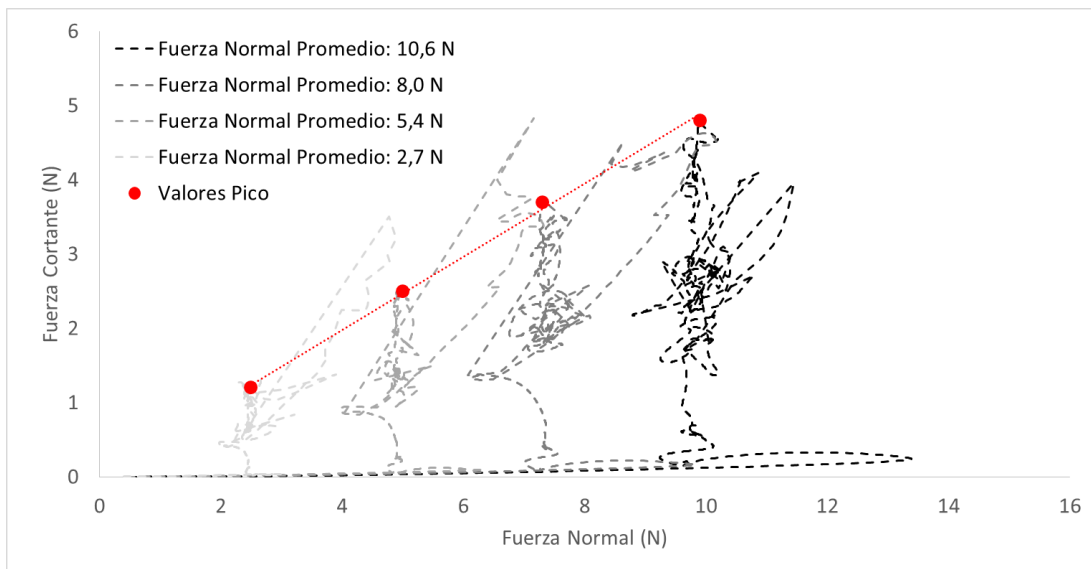


Figura No. 53 Fuerza Cortante y Normal-Ensayo 4

4.6 ANÁLISIS DE LAS CURVAS DE RESISTENCIA Y CONSTRUCCIÓN DE LAS ENVOLVENTES

El presente numeral recopila la información presentada en las figuras 31, 39 46 y 53. Las mismas corresponden a las curvas que relacionan la fuerza normal contra la fuerza cortante registrada sobre la superficie de falla definida. Tomando los valores pico registrado para los cuatro niveles de fuerza normal de cada ensayo se construyeron las envolventes de los cuatro ensayos propuestos.

Los valores pico registrados se presentan en la figura No.54. En ella se puede evidenciar que si bien, la diferencia entre el valor máximo y mínimo del ángulo de fricción es de 8° , los valores más altos 29° y 26° se relacionan de forma directa con el aumento de la heterogeneidad de la superficie de falla. El ensayo 2, el cual contemplaba la presencia de elementos de menor tamaño sobre la superficie, generaba una geometría un tanto más sinuosa, si se comparan con los ensayos 1 y 3. Si bien, la granulometría del ensayo 3 y 4 son las mismas, los valores del ángulo de fricción cambian considerablemente; este comportamiento es debido a que el elemento de mayor tamaño, en el primer caso hace parte del material movilizado y su interacción con la superficie de falla está restringida, mientras que en el segundo caso el elemento hace parte de la superficie de falla y la interacción con los otros elementos del medio es constante.

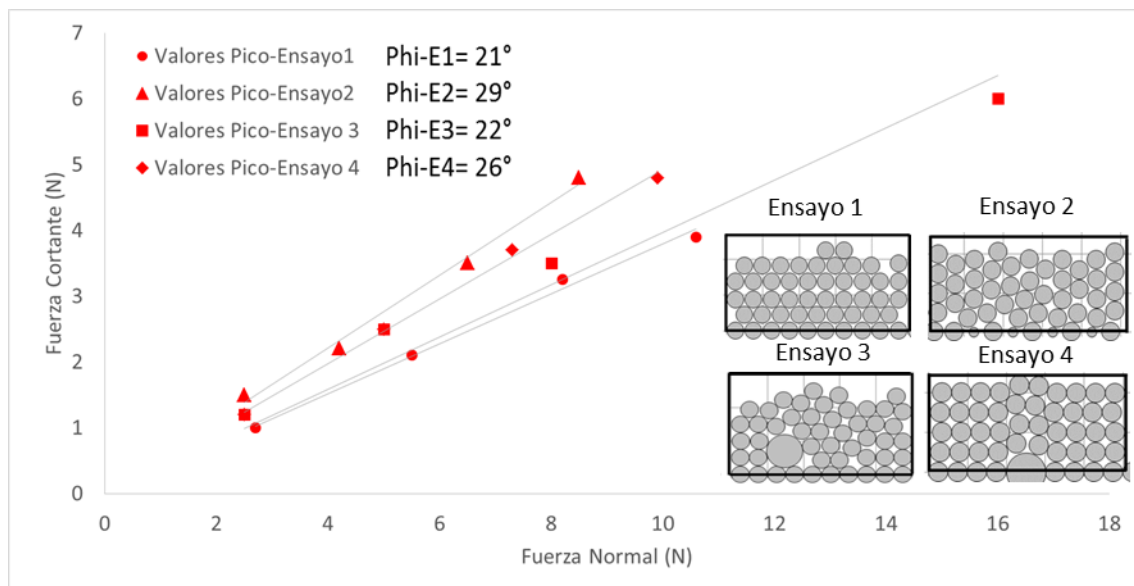


Figura No. 54 Resumen de Envolventes de Falla-Valores Pico

Lo propio sucede con los valores residuales de resistencia al corte. Dichos valores se obtuvieron al analizar la fase final de los ensayos, en donde se interpreta que se ha movilizadado toda la resistencia del material y los valores que se obtienen son los mínimos posibles que puede generar el medio. En este caso el máximo valor del ángulo de fricción obtenido está referido al ensayo 2, seguido del ensayo 4. No obstante estas diferencias, para el caso de los valores de resistencia residuales, la diferencia entre el valor máximo obtenido y el mínimo es de tan solo 6° .

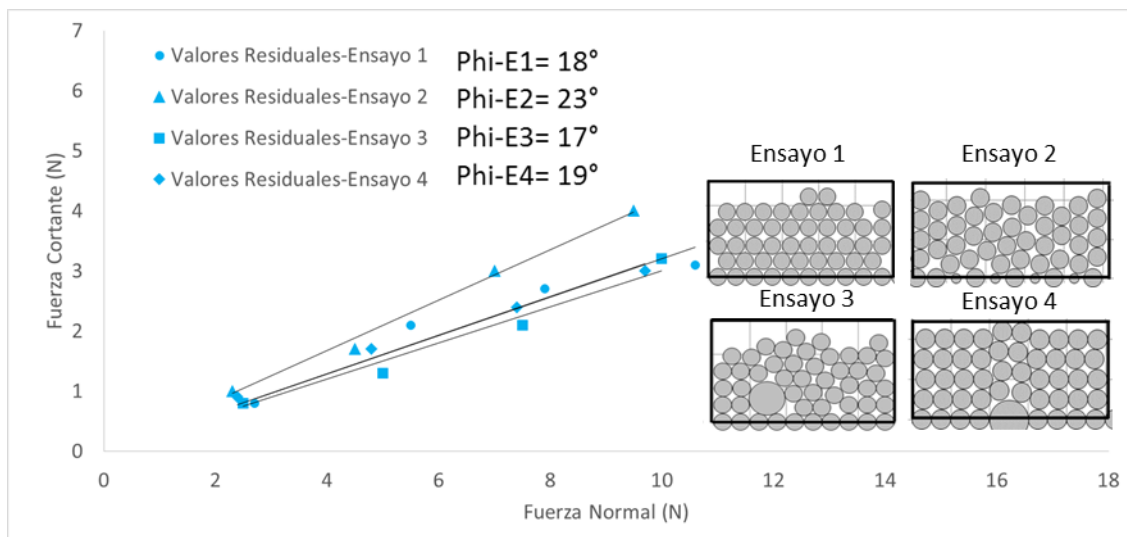


Figura No. 55 Resumen de Envoltentes de Falla-Valores Residuales

4.7 ANÁLISIS DE DEFORMACIONES

Los resultados que se mostraron en los numerales anteriores agrupaban los valores de fuerza horizontal y normal que se presentaron en la superficie de falla para los cuatro ensayos realizados. Los valores de fuerza horizontal registrados, debido a que las partículas son lisas, no son debidos a la fricción entre los elementos, son la respuesta de la estructura del medio frente a una deformación constante inducida.

En arenas de densidad media y alta el esfuerzo cortante se incrementa con el desplazamiento hasta llegar a un máximo o pico, posteriormente decrece hasta un valor aproximadamente constante. Este valor de esfuerzo cortante es la resistencia residual del material. De igual forma, el

volumen del espécimen inicialmente decrece y después incrementa con el desplazamiento. A valores grandes de desplazamiento, el volumen del espécimen permanece en promedio constante.

En la Figura No. 56 se presenta la fuerza horizontal promedio registrada en el ensayo 1 como una función de la deformación axial inducida y la deformación volumétrica relativa como una función de la deformación axial. En esta se puede observar que hay una primera fase donde la muestra se comprime, esta fase se presenta desde el inicio de la deformación axial hasta una deformación igual a 0.5%. Así mismo la fuerza horizontal registrada aumenta hasta alcanzar un pico en el momento en que los efectos dilatantes empiezan a hacerse evidentes.

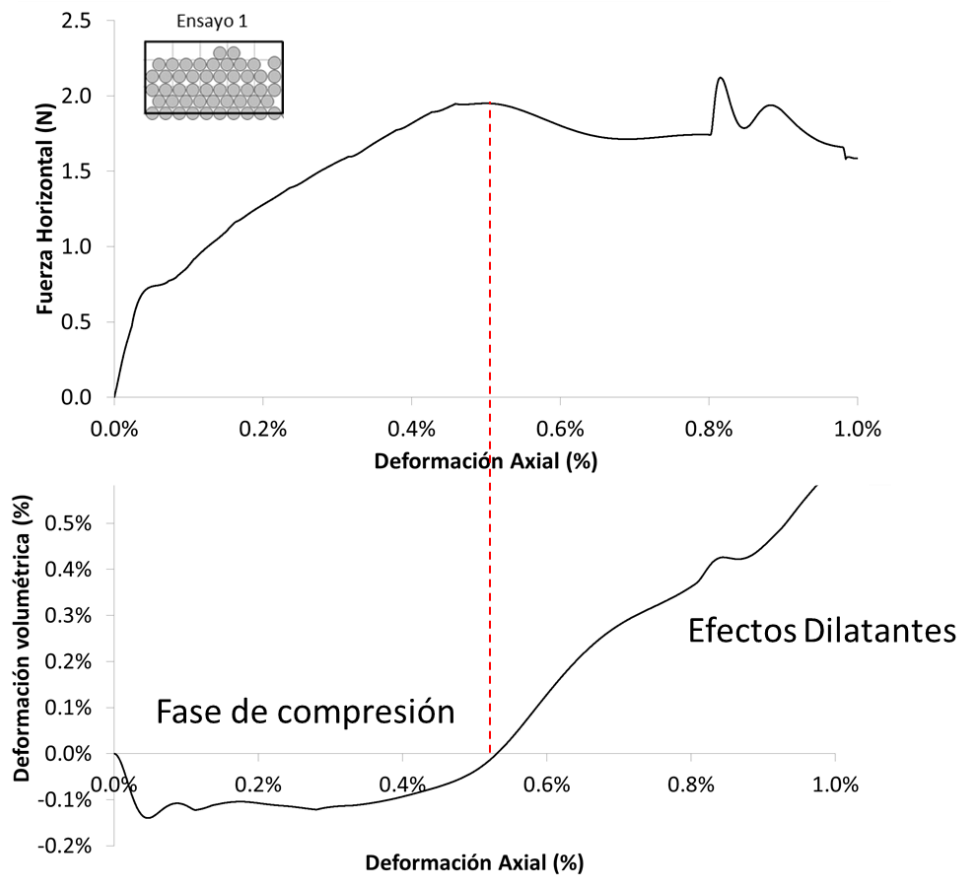


Figura No. 56 Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 1

En la figura No. 57 se presenta lo concerniente al ensayo 2. En la figura se puede notar que de forma muy rápida se alcanza el pico de resistencia. También se pueden notar los cambios sucesivos de volumen relacionado con el ascenso de los elementos y el descenso de los mismos sobre la superficie de falla inducida. En este caso el primer efecto delatante no coincide con el pico de resistencia, éste último se encuentra desplazado hacia la izquierda, coincidiendo con el momento de mínimo volumen.

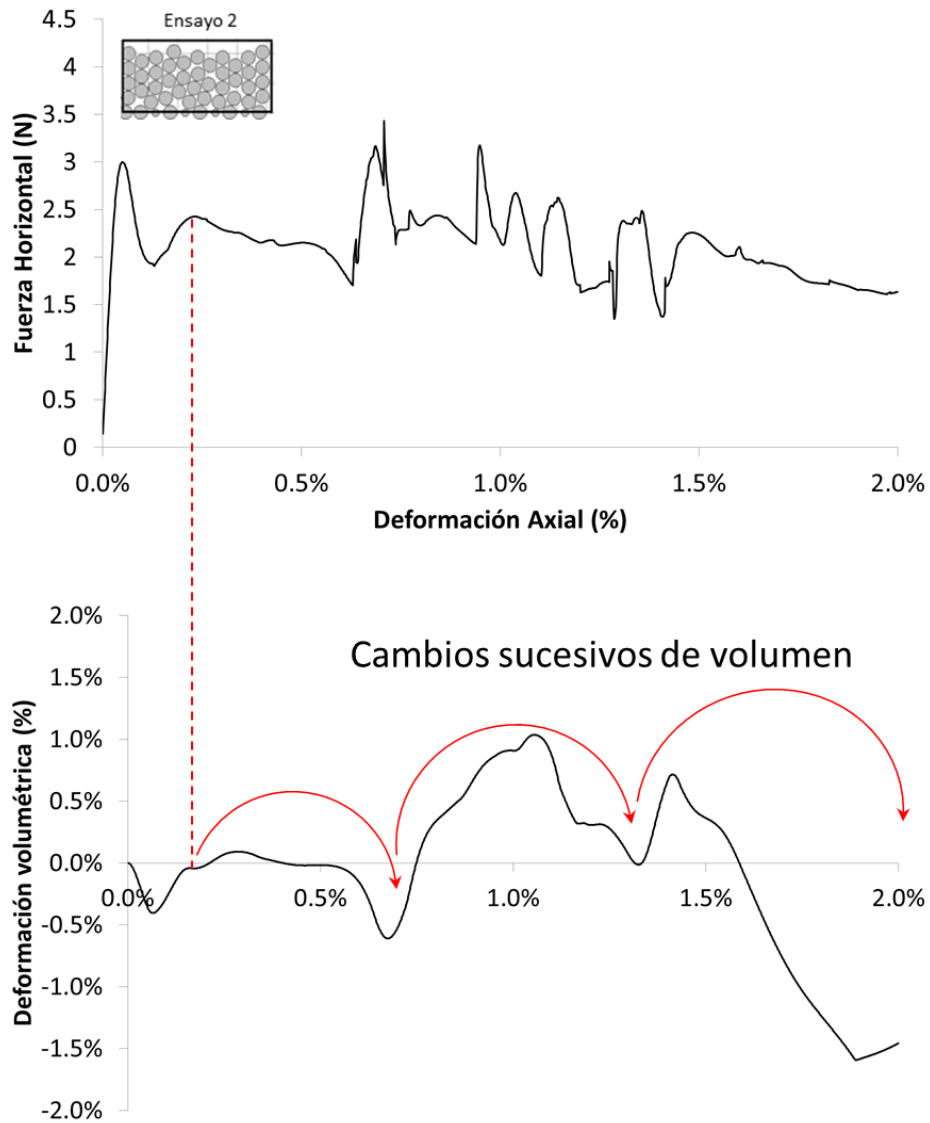


Figura No. 57 Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 2

En la figura No. 56 se puede observar que hay una primera fase de compresión de la muestra (donde esta pierde volumen). El valor de máxima compresión coincide con un primer pico en los valores de fuerza normal que se registraron. Ya con deformaciones superiores al 0.5%, la muestra sigue en un proceso de dilatación que alcanza un pico con una deformación de 0.9%. Entre 0.7% de deformación y 0.9% se registran valores pico anómalos y oscilaciones en los resultados; lo anterior se explica por la influencia de la partícula de gran tamaño interactuando con la superficie de falla.

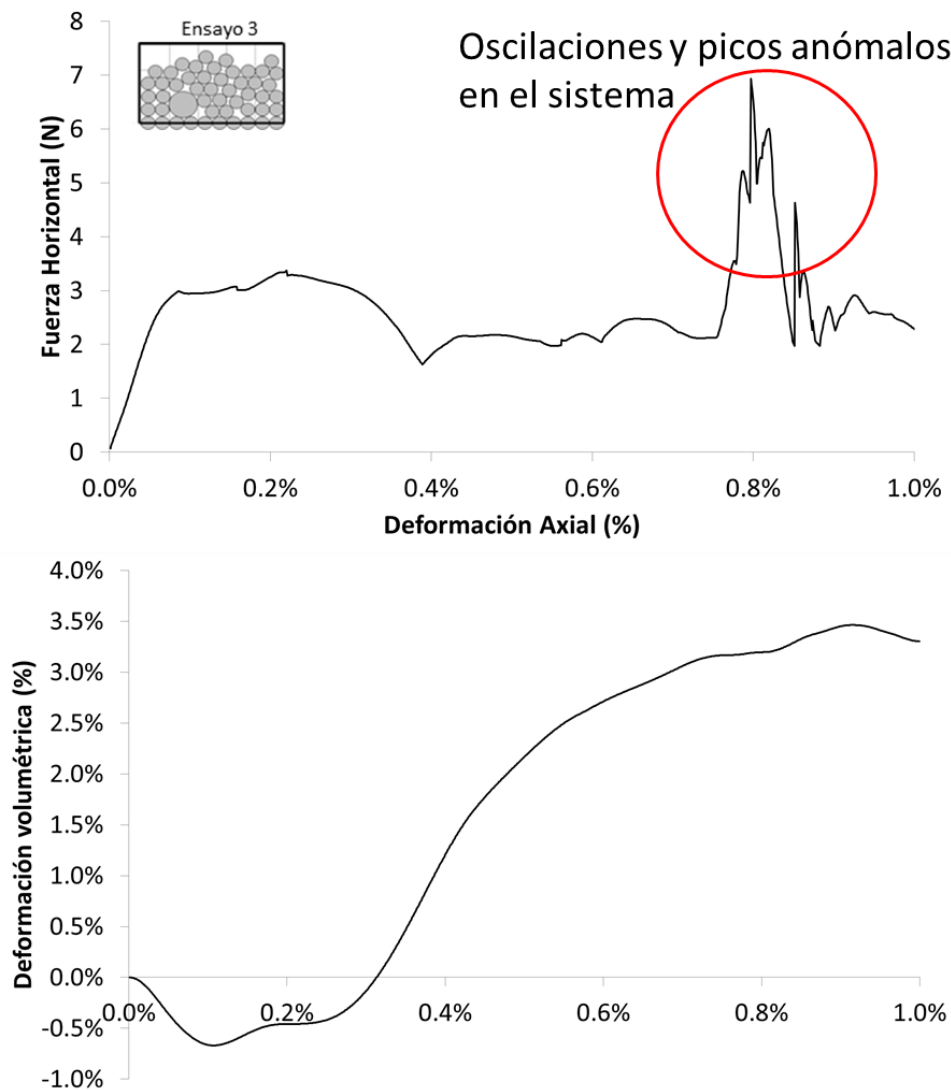


Figura No. 58 Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 3.

La figura No. 59 es la que presenta un comportamiento más difícil de interpretar. Respecto a la fuerza horizontal máxima registrada contra la deformación, la pendiente de esta curva impide registrar un pico como si lo permitieron las tres figuras anteriores. Aun así, se puede notar un comportamiento asintótico de la curva de fuerza horizontal a medida que se acerca a 15% de deformación.

Ahora bien hay una primera fase de compresión en la muestra (aspecto que se repite en los tres ensayos realizados), el cual termina con una deformación cercana al 0.5%, tras la cual el elemento dilata de forma constante y posterior a una deformación de 1.0% oscila siguiendo una tendencia.

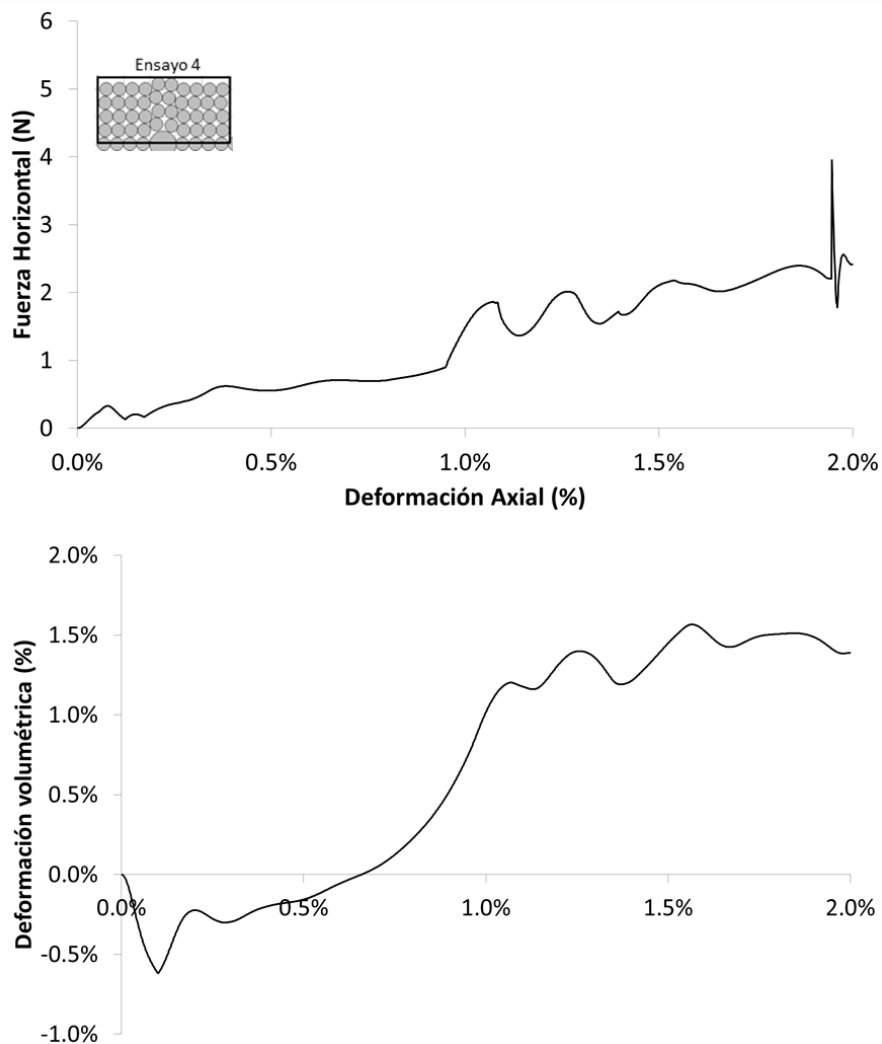


Figura No. 59 Análisis de Fuerza Horizontal y Deformación Volumétrica para el ensayo 4

Los valores que se obtuvieron en la simulación muestra que el medio generado de forma artificial se comporta como una arena densa, pues los valores máximos de fuerza cortante que se registraron se encuentran aproximadamente en el mismo nivel de deformación en que el medio empieza a dilatar.

La figura No. 56 a 59 agrupa los valores de fuerza horizontal y deformación volumétrica para los ensayos realizados. Aquí se puede observar cómo tras el inicio de la deformación horizontal el medio granular se comprime, las partículas se reagrupan formando un arreglo más denso. Posterior al punto de máxima densidad, el arreglo empieza a aumentar su volumen y el punto donde el elemento aumenta el volumen coincide con el pico de resistencia registrado. Estas figuras también dejan en evidencia algunas limitantes del modelo, relacionadas con la cantidad de elementos que se usaron para la simulación y que se traducen en el carácter oscilatorio de las curvas presentadas.

5. CONCLUSIONES

Para simular el comportamiento de un medio granular, tipo arena, en ensayos de corte directo, se recurrió a utilizar el programa de computador CoSED, diseñado por el autor. Este programa utiliza el método de análisis de medios discretos derivado de la Dinámica Molecular. De la observación de los resultados obtenidos se pueden extraer las siguientes conclusiones.

El método de dinámica molecular permite, por medio de la modelación del comportamiento de partículas individuales y su interacción, obtener comportamientos más complejos relacionados a sistemas dinámicos. El método en sí mismo requiere de una alta capacidad de cómputo, ya que éste pretende realizar múltiples iteraciones del sistema y el tiempo de ejecución está en función de la cantidad de elementos modelados, las leyes de contacto aplicadas y los algoritmos utilizados para la construcción del código computacional.

Al hacer referencia a la programación del algoritmo, es indispensable evitar el uso de ciclos concatenados porque exigen mayores capacidades computacionales e implican mayores tiempos de procesamiento. En procesos de cálculos que contemplan el uso de gran cantidad de elementos, estas limitaciones del método deben reducirse al máximo.

En el método utilizado, los traslapes que se generan se usan para simular las fuerzas de contacto entre elementos, estas fuerzas de contacto son análogas a las fuerzas de impacto entre partículas. Los métodos tradicionales en física utilizan, para este efecto, propiedades como el coeficiente de restitución o teorías de contacto como la de Hertz 1881 [29]. El método acá implementado utiliza unidades de Kelvin-Voigt para evaluar las fuerzas de contacto. Se puede observar que las propiedades de rigidez y viscosidad del modelo se definen más para garantizar la convergencia de los resultados antes que para duplicar las fuerzas físicas de contacto. Teniendo un coeficiente de

restitución definido se pueden encontrar diferentes pares de valores de k y η que satisfagan el requerimiento; por lo que el valor del módulo de elasticidad y el coeficiente de amortiguamiento del modelo de Kelvin-Voigt no necesariamente tienen que ver con las propiedades físicas de los materiales que se están analizando.

El método de cálculo exige el uso de intervalos de tiempo muy pequeños, pero que se deben calibrar con el objetivo de obtener correctos resultados. Valores muy altos o muy bajos de este intervalo de tiempo conducen a grandes errores que inevitablemente invalidan los resultados. Ahora bien, el valor utilizado en este análisis fue de 10^{-7} segundos. La forma más eficiente de obtener este valor es la ejecución de pruebas sencillas, en donde se simule la iteración de unas pocas partículas o el rebote de una sobre una superficie plana. Dichas pruebas salvan en gran medida las dificultades del método y permiten ahorrar tiempo al momento realizar simulaciones más complejas. Los análisis de las pruebas se centran en el equilibrio de energía potencial y cinética durante el experimento, la cual se debe conservar y cada pérdida de energía deberá estar relacionada con una pérdida debido al contacto entre elementos.

El análisis mecánico de los procesos de carga en sistemas de partículas requiere de dos cuidados esenciales: El primero relacionado con las condiciones de frontera y, el segundo, referido al proceso de carga en sí mismo; si es de carga controlada o de deformación controlada, por ejemplo. La simulación realizada se centra en un proceso de deformación controlada donde las paredes de la caja de corte se desplazan horizontalmente sin giros a una tasa constante. Respecto a las condiciones de frontera, el modelo utilizado tres tipos de fronteras: El bloque de carga, las paredes verticales de la caja de corte y la superficie de falla. La simulación de los dos primeros tipos de fronteras es similar para los cuatro ensayos propuestos, no así las condiciones de frontera para la superficie de falla, sobre la cual se hablará más adelante.

Tanto las paredes verticales como el bloque de carga se simularon con partículas circulares muy grandes, de diámetros tan amplios que para efectos de la simulación podrían ser consideradas como planas. El peso unitario del bloque de carga se hizo variar en concordancia con los cambios en el esfuerzo normal que se pretendía simular y su diámetro es el mismo que el de las paredes móviles ya descritas. Respecto a la superficie de falla, ésta está compuesta por elementos particulados; según cada experimento, el tamaño y cantidad de elementos que la componen

cambian. La superficie de falla constituye una frontera estática en el experimento planteado, sobre la cual se miden las fuerzas que se desarrollan y de la cual se extraen los valores que se analizan posteriormente.

Un aspecto que es esencial en la mecánica de los medios particulados, a diferencia de lo que se hace normalmente en mecánica de sólidos, es que la estructura inicial del conjunto de partículas debe ser estable, o auto estable. Es imposible, a priori, imaginar una estructura de esferas estables en la condición inicial; por el contrario, en mecánica de sólidos, no hay problema en suponer un estado inicial de esfuerzos. Por ese motivo, la condición inicial, se debe construir a partir de la simulación de la génesis y del devenir del sistema. En este trabajo, como en la mayoría de trabajos sobre el tema, la condición inicial se construye con base en el proceso de vertido de las partículas sobre el anillo de corte utilizado, para ese efecto, se utiliza el mismo programa ya mencionado, CoSED.

El entendimiento que se ha logrado sobre el comportamiento mecánico de los suelos se ha construido gracias a una observación cuidadosa de ensayos y de prototipos, y a su sistematización por medio de la mecánica del medio continuo, a pesar de tratarse de un material particulado. No obstante, se dispone de modelos constitutivos plausibles y precisos. Las nuevas herramientas de cálculo, y las teorías de los medios discontinuos tienen que mejorar los métodos de análisis y perfeccionar la precisión de los pronósticos. Para tal efecto, la simulación de las partículas y de su entramado requiere de un esfuerzo considerable que se equilibra por el poder computacional. En este trabajo se ha pretendido apropiarse esos métodos de cálculo, más que apuntarle a la simulación exacta de la estructura del sistema de partículas. Por ese motivo, se usaron muy pocas partículas, en total 56 elementos, cuando el ideal, dadas las dimensiones relativas entre el diámetro de la caja de corte y el diámetro de las partículas, exigiría de miles. En ese sentido los resultados obtenidos deben analizarse más por sus tendencias que por los valores puntuales obtenidos de cada variable.

Por otra parte, a diferencia de la mecánica de sólidos usada para estos propósitos, la mecánica de los medios particulados es una teoría basada en la dinámica Newtoniana, y en la posibilidad de modelar el comportamiento de sistemas complejos partiendo de la modelación del movimiento de los elementos que lo componen. Es bien conocido que el tratamiento numérico de los problemas dinámicos, dependientes del tiempo, suelen producir resultados inestables y oscilantes cuando la discretización en el tiempo y en el espacio no cumple detalladamente con ciertos requisitos y relaciones indispensables. Esto significa que las oscilaciones numéricas para un sistema de muchas

partículas son muy pequeñas comparadas con las tendencias generales. En el caso de pocas partículas, las oscilaciones numéricas y las discontinuidades cinemáticas se suman, dando lugar a grandes saltos en los valores obtenidos. Esto sucede precisamente con los resultados obtenidos como se evidencian en las gráficas de resistencia y compresibilidad. A pesar de todo lo anterior, los resultados son promisorios, siempre y cuando se puedan disponer de poderosos computadores que permitan modelar cientos de miles de partículas.

En el tratamiento de los medios particulados no son aplicables directamente los conceptos de esfuerzo y deformación, ya que en los contactos solo se pueden considerar fuerzas. Por ese motivo, al hacer validaciones y comparaciones con los resultados convencionales las fuerzas se calcularon como el promedio de las fuerzas sobre los elementos que conforman la superficie de falla. Desde el punto de vista del comportamiento mecánico de un sistema de partículas sometidas al corte directo, se advierten semejanzas y diferencias con el comportamiento real de suelos.

Si la superficie de falla es más uniforme, ensayos 1 y 3, se comprobó que a bajos esfuerzos normales se presentan efectos dilatantes y que las fuerzas resistentes crecen como una función de la fuerza normal, cuya pendiente promedio podría ser interpretada como el ángulo de fricción. Sin embargo el módulo inicial fue más o menos independiente del esfuerzo normal de los ensayos, cosa que no es común en suelos.

Por otra parte, si la superficie de falla es más rugosa, ensayos 2 y 4, por la presencia de partículas de diferente tamaño, se observó que se obtiene un comportamiento frágil y, si bien, los valores pico depende de la carga normal, los módulos iniciales no. Este comportamiento atípico en el sistema puede estar relacionado con la baja cantidad de elementos simulados y la pobre granulometría ensayada. Ensayos con mayor cantidad de elementos y con granulometrías más completas deberán ser ensayados para así comprobar las afirmaciones acá dispuestas.

A pesar del carácter oscilatorio de las curvas obtenidas, se logran evidenciar tendencias claras en los comportamientos al momento de construir las curvas de resistencia (Figura No. 31, 39, 46 y 53). Las curvas que relacionan la fuerza horizontal contra la fuerza vertical que se presenta en la superficie de falla (valores equivalentes al esfuerzo normal y cortante en un ensayo de corte directo típico), llegan a un claro valor pico en cada caso. Esto muestra que el método permite simular la resistencia al corte en materiales y es posible utilizar la analogía para la modelación de

comportamientos más complejos en donde la resistencia del medio requiera ser simulada y no necesariamente ser un parámetro de entrada en el problema.

La Figura No. 54 presenta los valores pico para los diferentes ensayos y se observaron los cambios de la geometría de la superficie de falla y su relación con a los parámetros de resistencia. La pendiente de la recta que mejor agrupa los valores obtenidos son muy similares para los ensayos 1 y 3, los cuales no alteran la superficie de falla; Ahora bien, los ensayos 2 y 4, los cuales cambian el tamaño de los elementos que componen la superficie de falla, presentan mayores inclinaciones. Este mismo comportamiento se registró al analizar los valores residuales. La Figura No. 55 muestra que para el ensayo 1 y 2 la inclinación de la curva que describe la envolvente de falla es muy similar, variando por apenas un grado. Respecto a los ensayo 2 y 4, lo cuales tienen condiciones diferentes sobre la superficie de falla, estos registran valores mayores de ángulo de fricción.

En los ensayos 1 y 4 muestran aumentos en la deformación vertical durante el desarrollo del ensayo, así mismo se obtuvo un aumento de la resistencia. Este fenómeno acá registrado se puede asociar con un aumento de resistencia debido a fenómenos de dilatancia y se observa que los mismos, no solos dependen de las propiedades micro de los materiales, sino también de la granulometría de los materiales ensayados. Una grava por si misma dentro de una muestra no necesariamente cambia el valor de los parámetros de resistencia registrados, es necesario que la misma interactúe con la superficie de falla para que se presenten cambios considerables en los valores de resistencia.

Al simular la resistencia al corte de un medio granular con partículas lisas, se pretendía obtener valores de resistencia que permitieran visualizar la naturaleza de lo que llamamos fricción. En materiales granulares, como los que conforman los coluviones, terrazas aluviales, arenas con gravas y estructuras como enrocados, jarillones y presas de piedra etc., la resistencia al corte no solo se debe a lo que llamamos fricción entre elementos. La interacción entre los mismos juega un papel fundamental en el desarrollo de una macro resistencia de los materiales; así mismo, dicha resistencia no es constante sobre una superficie de falla definida.

6. BIBLIOGRAFÍA

1. D.C. Rapaport. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge University Press. 2004 Molecular Dynamics.
- 2 M. P. Allen and D. J. Tildesley. Computer Simulations of liquids. Oxford University Press. 1987
3. D. Frenkel and Smith. Understanding Molecular Simulations from Algorithms to applications. Academic Press, Second edition. 2002.
4. M. Jean & J. J. Moreau. Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. In Proceedings of Contact Mechanics International Symposium, 1992. Lausanne, Switzerland.
5. J. J. Moreau. Eur J. Mech. A-Solids, 1994.
6. M. Jean. Comput. Methods Appl. Mech Engrg, 1999
7. Christian Mieche and Joachim Dettmar. A framework for micro-macro transitions in periodic particle aggregates of granular materials. 2004
8. Stefan Luding. Micro-macro transition for anisotropic, frictional granular packing. International Journal of Solids and Structures, 2004.
- 9 Stefan Luding. The micro-macro mechanics of granular materials.
10. Stefan Luding. Micro-macro models for anisotropic granular media.
11. Katalin Bagi. Analysis of microstructural strain tensors for granular assemblies. International Journal of Solids and Structures, 2006.
12. C.S. Shang and P. Y. Hicher An elasto-plastic model for granular materials with microstructural considerations. International Journal of Solids and Structures. 2005.
13. David M. Cole and John F. Peters. A physically based approach to granular media mechanics: grain scale experiments, initial results and implications to numerical modeling. Granular matter. 2007.
14. O Mouraille. W. A. Mulder, and S. Luding. Sound wave accelerations in granular materials. Journal of statical mechanics: Theory and experiment. 2006.
15. J. Lee and H.J. Herrmann. Angle of repose and angle of marginal stability: molecular dynamics of granular materials. 1992.
16. T. Pöschel. Computational Granular Dynamics. Springer,
17. K.L. Johnson. Contact Mechanics. Cambridge Press, 1996
- 18 V.L. Popov. Contact Mechanics and Friction. Springer, 2010
19. W. Oquendo. Simulación de la compresión edométrica de un material granular y determinación de la relación de vacíos. 2007.

20. L. Verlet. Computer "experiments" o classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones Molecules. 1967.
21. M. Levitt. Molecular dynamics of native protein. 1983.
22. R. Skeel. Integration methos for molecular dynamics. 1995.
23. R. Hockney. The potencial calculation and some applications. 1970.
24. A. Mazur. Common molecular dynamics algorithms revisited: Accuracy and optimal time steps of Störmer-Leapfrog Integrators. 1997.
25. D. Potter. Computational Physics. Wiley, 1972.
26. S. Bruzzone. LFN10, LFN10-OMP y el método de Leapfrog den el problema de N cuerpos. 2011.
27. V.L. Popov. Contact Mechanics and Friction. Springer, 2010
28. B. Bhushan. Introduction to Tribology. Wiley. 2013
- 29 H. Hertz. Über die berührung fester elastisches körper. 1881
30. L.D. Landau. Theory of elasticity. Oxford Press 1999
31. R. Sondergaard. Mesurements of solids spheres bouncing off flat plates. 1984
32. F.G. Bridges. .Energy loss and sticking mechanisms in particle aggregation in planetesimal formation.1996.
33. N. Brilliantov .A model for collisions in granular gases. 1994
34. F.G. Bridges. .Energy loss and sticking mechanisms in particle aggregation in planetesimal formation.1996.