

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES

MODELACIÓN MICROMECAÁNICA DE SUELOS CEMENTADOS

TESIS

Para obtener el título de:

MASTER EN INGENIERÍA CIVIL

Elaborada por:

EDWIN SIBEL MORENO CEDIEL

Asesor:

Ph.D. ARCESIO LIZCANO PELAEZ

Universidad de Los Andes
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental
Grupo de Investigación en Geotecnia
Bogotá - 2009

Agradecimientos

Agradezco a mi madre y hermanos por todo su apoyo y comprensión, a Dios quien nos dió su amor y sabiduria para descubrir y tratar de entender el comportamiento de la naturaleza, agradecimiento muy especial al profesor Arcesio Lizcano y al grupo de Investigación en Geotécnia de la Universidad de Los Andes por todo su apoyo; y a todas aquellas personas que de una u otra forma ayudaron al realización de este proyecto.

Tabla de Contenido

1..	<i>Introducción</i>	1
2..	<i>Suelos Cementados</i>	4
2.1.	Introducción	4
2.2.	Suelos Cementados	7
2.3.	Formación	8
2.4.	Identificación	8
2.5.	Características del Comportamiento de Suelos Cementados	9
2.6.	Localización de Suelos Volcánicos	10
3..	<i>Características Físicas y Propiedades Mecánicas de Suelos Cementados</i>	12
3.1.	Estructura	12
3.2.	Peso	13
3.3.	Tamaño	13
3.4.	Propiedades Mecánicas	13
3.4.1.	Resistencia al Corte	13
3.5.	Compresión Triaxial	13
3.6.	Todas Las Partículas Están Cementadas?	13
3.7.	Cúales Son las Propiedades del Cementante?	13
4..	<i>Dinámica Molecular</i>	14
4.1.	Dinámica Molecular de Partículas Duras	14
4.2.	Dinámica Molecular de las Partículas Blandas	15
4.2.1.	Fuerzas de Interacción	15
4.2.1.1.	Fuerza Normal	15
4.2.1.2.	Fuerza Tangencial	16
4.2.2.	Integración de las Ecuaciones del Movimiento	18
4.3.	Método del Recocido o Temple Simulado (Simulated Annealing SA)	19
4.3.1.	Definiciones	19
4.3.2.	Algoritmo de Cálculo	21
4.3.3.	Convergencia	21
5..	<i>Dinámica de Contactos</i>	25
5.1.	Leyes No Suaves	26
5.1.1.	Condición Dinámica del Contacto	26
5.1.2.	Ley de Fricción de Coulomb	28
5.2.	Dinamica No Suave	29

5.2.1. Ecuaciones Dinámicas	29
5.2.2. Ecuaciones de Transferencia	30
6.. <i>Simulaciones</i>	33
6.1. Modelos Constitutivos	33
6.1.1. Modelo Elastoplástico para Suelos Cementados ?	34
6.2. Modelación Numérica	40
6.2.1. Generación de Partículas	41
6.2.2. Propiedades Geométricas	42
6.2.3. Caracterización de la Muestra	43
6.2.4. Fabricación de la Muestra	46
6.2.5. Cementación entre las Partículas	47
6.2.6. Dinámica Molecular	48
6.2.7. Identificación de Contactos	50
6.3. Implementación del Modelo	52
6.3.1. Validación del Modelo	53
7.. <i>Conclusiones</i>	56
 <i>Apéndice</i>	 57

Lista de Figuras

1.1. Horizonte de suelo cementados. Pasto, Colombia	1
1.2. Horizontes de Suelos Cementados. Pasto, Colombia	2
1.3. Imgen de microscopio electrónico de suelos cementados. (Fuente: A. James Clarck, School of Engineering. Microbiologically Mediated Soil Improvement. University of Meryland)	2
2.1. Figura	5
2.2. Comportamiento idealizado de suelos cementados. Trayectoria de esfuerzos efectivos, Schnaid et al. (2001)	5
2.3. Microfotografía de una muestra de sulo cementada (Fuente:A. James Clarck, School of Engineering. Microbiologically Mediated Soil Improvement. Univer- sity of Meryland)	9
2.4. ejemplos de suelos cementados: (a) Conglomerado. (b) Fotografía de micro- scopia electrónica de barrido. (Fuente: Topin et al. (2007))	9
5.1. Contacto potencial entre dos partículas	27
5.2. Ley de fricción de Coulomb	29
5.3. Geometría de un contacto α	32
6.1. Trayectoria típica de compresión de un suelo cementado balndo (Louiseville Clay, Lapierre et al. 1989)	36
6.2. Trayectoria de esfuerzos dreanada y no drenada de un suelo cementado y trayec- toría de esfuerzos de la componente no cementada en el espacio e vs $\log p$ Vastala et al. (2001)	37
6.3. Trayectoria de esfuerzos dreanada y no drenada de un suelo cementado y trayec- toría de esfuerzos de la componente no cementada en el espacio q vs p Vastala et al. (2001)	38
6.4. Representación de la acción compuesta de las fuerzas friccionales y de contacto en suelos cementados Vastala et al. (2001)	38
6.5. Variación de la resistencia del cementante p_B con la relación de vacios (Datos de la Arcilla de Osaka, Adachi et al. 1991) Vastala et al. (2001)	39
6.6. Resistencia del cementante q_B en corte con deformación por corte (Ensayo no drenado en arcilla de Osaka a presión de confinamiento de 0.20 kg/cm^2) Vastala et al. (2001)	40
6.7. Curva de fluencia para la componente cementada Vastala et al. (2001)	40

6.8. Determinación del tamaño de la partícula. En (a) se observa una partícula de forma circular cuyo área es la misma del polígono, en (b) el tamaño de la partícula es determinado por el disco que la circunscribe y en (c) el tamaño es determinado por disco inscrito. Moreno and Pelaez (2009)	45
6.9. Determinación del tamaño de la partícula. Metodología propuesta	46
6.10. Curva granulométrica generada	47
6.11. Leyes de resistencia contactos cementados. (a) Resistencia en la dirección normal, (b) Resistencia en la dirección tangencial	49
6.12. Sistema de varias partículas, contactos con diferentes resistencias	49
6.13. Representación esquemática del contacto entre partículas	50
6.14. Ejemplo del algoritmo de Jordan para detección de contactos	51
6.15. Algoritmo radial	52
6.16. definición de distancias y convención de signos de un punto a un plano. Nezami et al. (2004)	52
6.17. Curva granulométrica muestra 1. Con línea discontinua se presentan los datos de obtenidos en el laboratorio, la línea continua corresponde a los resultados de las lodelaciones.	55
6.18. Curva granulométrica muestra 2. Con línea discontinua se presentan los datos de obtenidos en el laboratorio, la línea continua corresponde a los resultados de las lodelaciones.	56
6.19. Curva granulométrica muestra 3. Con línea discontinua se presentan los datos de obtenidos en el laboratorio, la línea continua corresponde a los resultados de las lodelaciones.	56

Lista de Tablas

6.1. Datos Ensayo Granulométrico	45
6.2. Muestra 1. Clasificación USC: GC, Prof: 0.20-1.00 m, localización: Transversal 45 No. 40-11 Bogotá. Número de partículas 500. Fuente: Soitech S.A.	54
6.3. Muestra 2. Clasificación USC: SC, Prof: 0.20-0.60 m, localización: Transversal 45 No. 40-11 Bogotá. Número de partículas 1000. Fuente: Soitech S.A.	55
6.4. Muestra 3. Clasificación USC: SC, Prof: 1.20-2.00 m, localización: Isla de Providencia. Número de partículas 5000. Fuente: Soitech S.A.	55
6.5. Coeficientes de uniformidad y curvatura de las muestras simuladas	56

Capítulo 1

Introducción

Suelos provenientes de la descomposición de cenizas volcánicas presentan un comportamiento muy especial, como resultado de las características de su formación y mineralogía. La cementación entre las partículas es la característica más importante de este tipo de suelos, la cual controla su comportamiento mecánico. Estos suelos constituyen la mayor parte del territorio colombiano.



Fig. 1.1: Horizonte de suelo cementados. Pasto, Colombia

La cementación entre las partículas, ocasionada por procesos físicos y químicos como la descomposición de minerales puede llegar a darle al suelo estructuras bastante especiales como por ejemplo la presencia de macro poros.

Este trabajo presenta una metodología para la fabricación de muestras granulares cementadas para ser empleadas en la modelación micromecánica. La metodología propuesta permite obtener una muestra de tamaño deseado, siguiendo una distribución granulométrica dada, así como una determinada relación de vacíos inicial de la muestra.

La metodología propuesta considera las partículas mediante polígonos de formas irregulares, esto permite tener una mejor aproximación al comportamiento real de materiales granulares. Trabajos como los presentados por Holubec (1973), o más recientes como Peña (2007) entre



Fig. 1.2: Horizontes de Suelos Cementados. Pasto, Colombia

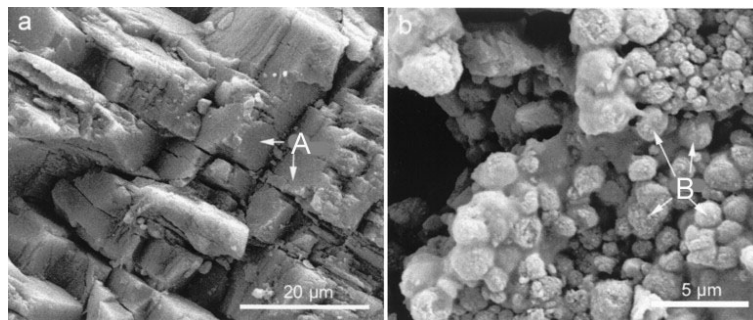


Fig. 1.3: Imagen de microscopio electrónico de suelos cementados. (Fuente: A. James Clarck, School of Engineering. Microbiologically Mediated Soil Improvement. University of Meryland)

otros, han proporcionado evidencia experimental y teórica acerca del efecto de la forma de las partículas en el comportamiento de materiales granulares.

Holubec (1973) presenta resultados experimentales donde se demuestra que arenas angulares bajo compresión estática presentan una mayor recuperación elástica ante la liberación de la carga que la obtenida con partículas arena equidimensionales. Ensayos realizados en bases granulares para pavimentos asfálticos revelaron que partículas angulares tienen mayores deformaciones elásticas y permanentes bajo condiciones de cargas repetitivas que partículas redondeadas bajo las mismas condiciones.

Koerner (1968) sugiere que el ángulo de fricción interna de de suelos granulares no cohesivos varía inversamente con la esfericidad y directamente con la angulosidad de las partículas, inversamente con el tamaño efectivo del espécimen de suelo y no muestra cambios apreciables con la uniformidad de la gradación de la muestra. Asimismo, ensayos realizados en arenas medias a finas, variando la forma de las partículas indican que suelos granulares a la misma densidad relativa pueden tener diferencias drásticas en sus propiedades geomecánicas.

La distribución de las partículas en la muestra se logra mediante el método de enfriamiento o recocido simulado (simulated annealing), el cual es un algoritmo de optimización de búsqueda meta-heurística empleado en problemas clásicos de optimización. Este método consiste en alcanzar una solución adecuada de una función objetivo, la cual se estableció como una suma ponderada de las áreas de solapamiento de las partículas y el número de coordinación promedio.

Puentes de material que conectan las partículas simulan la cementación entre partículas. Asimismo, la metodología propuesta permite establecer de forma independiente o global la resistencia del cementante entre partículas, en el primer caso dicha resistencia es considerada proporcional al área de solapamiento involucrada en el contacto de las partículas en su configuración inicial.

Capítulo 2

Suelos Cementados

2.1 Introducción

Con frecuencia son observados taludes naturales y cortes verticales en condiciones estables por largos periodos de tiempo. Esta estabilidad es atribuida a los efectos de la cementación del suelo en su resistencia al corte. Asimismo, cimentaciones sobre suelos de estructura ligada presentan menores asentamientos y mayor capacidad de carga. Suelos de baja capacidad de carga son mejorado mediante tratamientos especiales, como las inyecciones de cementante que reducen significativamente la compresibilidad del suelo. Estos pocos ejemplos resaltan la necesidad de mejorar la comprensión sobre el comportamiento de los suelos cementados (Schnaid et al. (2001)).

Los efectos de la baja a moderada cementación en el comportamiento esfuerzo-deformación de suelos naturales y artificialmente cementados ha sido objeto de estudio de varios investigadores como: Saxena y Lastrico (1978), Clough et al. (1979, 1981), Dupas y Pecker (1979), Chang y Woods (1992), Airey (1993), Coop y Atkinson (1993), Gens y Nova (1993), Lagiogia y Coop (1997), entre otros. En casi todos los programas experimentales muestras artificialmente cementadas han sido utilizadas para comprender el comportamiento de suelos naturales cementados y para desarrollar métodos adecuados de estabilización.

Varios autores han propuesto algunas características importantes acerca del comportamiento de suelos cementados. Clough et al. (1981) sugirieron que la naturaleza y cantidad del cementante, el esfuerzo de confinamiento, la densidad, la gradación y estructura son variables gobernantes en el comportamiento. Gens and Nova (1993) establecieron que el comportamiento del suelo esta afectado por su historia geológica y de esfuerzo-deformacion y que además depende de la tasa de deformación, temperatura, y dirección de los esfuerzos principales. Otros autores proponen la tasa de carga (Clough et al. 1979), la trayectoria de esfuerzos (Bressani and Vaughan 1989, Reddy and Saxena 1992, Bressani et al. 1994), la microestructura y la liga entre las particulas (Chang and Wood 1992) como factores determinantes en el comportamiento de suelos cementados.

Existe un concenso general que para ciertos rangos de esfuerzos la resistencia al corte de suelos cementados puede ser representada adecuadamente por la envolvente de Mohr-Coulomb, definida por la cohesion c' , la cual es únicamente función de la cementación, y el ángulo de fricción ϕ' el cual no parece ser afectado por el contenido del cementante. En cuanto a la deformabilidad, los suelos cementados muestran un comportamiento bastante rígido antes de llegar a su estado de fluencia, la cual es gobernada casi que exclusicvamente por la cementación.

Leroueil and Vaughan (1990) propusieron una aproximación conceptual para describir el comportamiento esfuerzo-deformación de suelos que muestran características similares debido a la existencia común de una estructura ligada. Los efectos de la estructura en el comportamiento de suelos cementados presentan similitudes con los obtenidos de arcillas sobreconsolidadas. Ésto comprende un comportamiento rígido inicial seguido por un incremento en las deformaciones plásticas hasta llegar a la falla.

Los modelos clásicos de la mecánica de suelos involucran el concepto de la densidad inicial y sus cambios subsecuentes debido a la historia de esfuerzos. Sin embargo, se ha reconocido que la resistencia al corte y la rigidez natural de suelos y rocas blandas no puede ser explicada considerando solamente este concepto; de acuerdo con Leroueil y Vaughan (1990), la estructura y sus efectos en el comportamiento del suelo deben considerarse como un concepto fundamental en la mecánica de suelos así como la densidad inicial y la historia de esfuerzos.

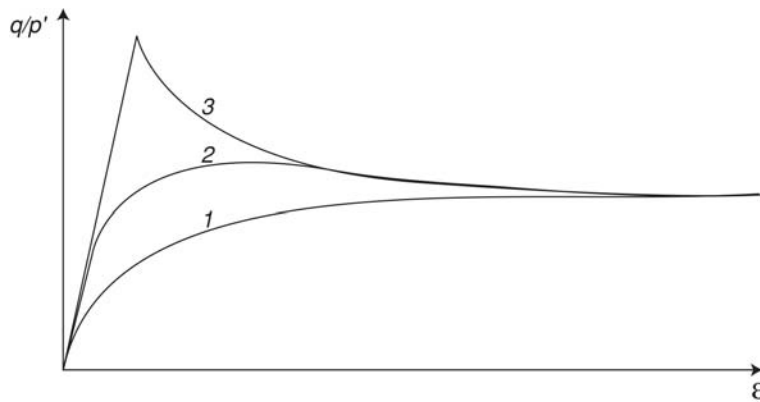


Fig. 2.1: Comportamiento idealizado de suelos cementados. Curvas Esfuerzo-Deformación, Schnaid et al. (2001)

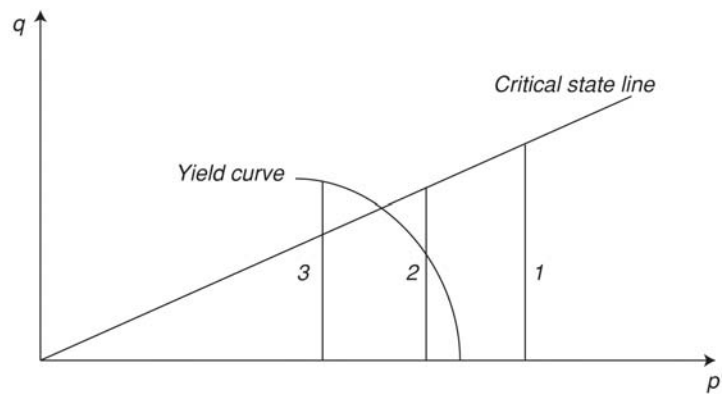


Fig. 2.2: Comportamiento idealizado de suelos cementados. Trayectoria de esfuerzos efectivos, Schnaid et al. (2001)

Leroueil and Vaughan (1990) demostraron que el comportamiento esfuerzo deformación de suelos natural y artificialmente cementados depende básicamente de su estado inicial, y su posición respecto a la curva de fluencia y la línea del estado crítico de suelos remoldeados. Siguiendo el mismo concepto, Coop and Atkinson (1993) describieron el comportamiento idealizado de suelos cementados, el cual está dividido en tres clases diferentes tal como se ilustra en la Figura 2.1 y Figura 2.2. La primera clase (1 en la Figura 2.1) ocurre cuando el suelo alcanza su esfuerzo de fluencia durante una compresión isotrópica; en este caso, el cortante producirá un comportamiento similar al observado para un suelo no estructurado equivalente. La segunda clase (2 en la Figura 2.1) ocurre para estados de esfuerzos intermedios, en los cuales la liga entre las partículas se romperán durante el corte; la resistencia es controlada por la componente friccional equivalente de un suelo no estructurado y la curva esfuerzo deformación muestra un punto de fluencia bien definido después de un aparente comportamiento lineal. En la tercera clase (3 en la Figura 2.1) el suelo es cortado a un bajo esfuerzo de confinamiento, respecto a la resistencia de liga; un pico en la curva esfuerzo deformación ocurre a bajas deformaciones y esfuerzos exteriores a la superficie del estado límite de un suelo equivalente no estructurado.

Del trabajo teórico de Leroueil y Vaughan (1990), Gens y Nova (1993) propusieron una discusión respecto a los conceptos fundamentales para el desarrollo de un modelo constitutivo para rocas blandas y suelos cementados, en el marco del endurecimiento de la teoría de la plasticidad. La propuesta basada en (1) el rol fundamental del fenómeno de fluencia y (2) la necesidad de considerar el comportamiento de materiales cementados relacionados con el comportamiento de un material no cementado equivalente. La aproximación sugerida por Gens y nova (1993) empezó desde una ley constitutiva para materiales no cementados, la cual es modificad de acuerdo con la cantidad de cementante. La degradación del material es simulada a través de la reducción del grado de cementación como una función del nivel de esfuerzos.

Zaki (1965) presenta varias conclusiones acerca de los suelos cementados:

- El principio del esfuerzo efectivo aplicado a la resistencia de suelos saturados estabilizados, como por ejemplo, la envolvente de Mohr-Coulomb en términos de esfuerzos efectivos es esencialmente independiente de las condiciones de drenaje, mientras que la envolvente de esfuerzos totales es dependiente de las condiciones de drenaje durante el corte.
- La adición de un material cementante como un limo hidratado o cemento pueden incrementar substancialmente el intercepto de la cohesión efectiva Mohr-Coulomb, c , tanto de suelos granulares gruesos como de suelos granulares finos. c se incrementa con el incremento del contenido del cementante.
- La cementación no tiene ningún efecto en el ángulo de fricción interna, ϕ , de un suelo granular denso. La cementación puede incrementar ϕ de un suelo granular fino hasta en 10° .
- A cualquier nivel de deformación axial, la resistencia total al corte de cualquier suelo cementado se puede considerar que tiene dos componentes: una resistencia cohesiva, la cual independiente del esfuerzo efectivo, y una resistencia friccional la cual depende del

esfuerzo efectivo y por lo tanto es función de la presión de poros desarrollada durante el corte.

- La máxima resistencia cohesiva de un suelo cementado ocurre a deformaciones más pequeñas que la envolvente efectiva de Mohr-Coulomb. \bar{c} es menor que la máxima resistencia cohesiva porque la ruptura de la cementación ha ocurrido al momento que la envolvente es alcanzada y puede ser menor que el 30 % de su valor máximo. Cuando la condición última es alcanzada la resistencia cohesiva en la zona de corte es completamente destruida y la resistencia al corte es netamente friccional.
- La máxima resistencia friccional ocurre a grandes deformaciones que al envolvente de Mohr-Coulomb es completamente movilizada en su condición última cuando el esfuerzo efectivo y el esfuerzo cortante permanecen constantes con deformaciones mayores.

2.2 Suelos Cementados

En general puede decirse que los suelos cementados son aquellos en los cuales gran parte de sus partículas se encuentran ligadas entre sí por un material cementante, formando grumos y/o aglomeraciones de partículas.

Algunos autores presentan gráficas que permiten una comprensión clara entre lo que son suelos cementados y no cementados. Nagaraj, S. F. representa el suelo como un conjunto de partículas de tamaño infinitesimal separadas una cierta distancia, unidas mediante un resorte que ejerce un esfuerzo liga σ_b . Este modelo puede describirse como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}\sigma' &= \sigma_b + \sigma'_r \\ \sigma'_r &= \sigma_t - U\end{aligned}$$

Donde:

σ' : Esfuerzo promedio inducido en el suelo.

σ_r : Esfuerzo efectivo en el suelo.

σ_t : Esfuerzo total en el suelo.

U : Presión de poros.

Para el caso de suelos no cementados el esfuerzo de liga valdrá cero ($\sigma_b = 0$) y en consecuencia $\sigma' = \sigma'_r$

Para poder entender la naturaleza y comportamiento de los suelos cementados es necesario definir que es un cementante. Un material cementante es aquel que permita unir varias partículas que mediante procesos químicos produciendo un endurecimiento e incremento de la resistencia del suelo [Nilson, Winter, 1992].

La interacción de los cementantes con las partículas del suelo es un proceso que se inicia desde la formación del mismo, en el cual la presencia de compuestos químicos rodeando las

partículas generan meniscos entre éstas generando atracción entre las partículas. Posteriormente ocurre la cementación en la cual estos compuestos presentan un endurecimiento y liga de las partículas.

2.3 Formación

Los suelos cementados se forman por agregación de sus partículas a través de un sistema de enlaces, el cual es resultado de procesos químicos, físicos, térmicos y biológicos que transforman el material original. A este proceso se le conoce como floculación y cementación.

La manera como las partículas del suelo se agrupan depende principalmente de la distribución de tamaños, de su composición química y de los fluidos involucrados en el proceso de formación [Imeson y Vis, 1982].

La floculación es producida por fenómenos electrocinéticos de dos tipos. El primero es el acercamiento de partículas cargadas negativamente a través de puentes de carga contraria o agentes floculantes tales como Ca_2^+ , Mg_2^+ , Fe_3^+ y Al_3^+ . El segundo fenómeno ocurre por la atracción electrostática entre los bordes positivos y las caras negativas de los minerales arcillosos. Este proceso es electrostáticamente más estable que el primero y ocurre comúnmente en suelos con pH ácidos, que favorecen el incremento de cargas positivas.

Posterior a la floculación se presenta el fenómeno de cementación consistente en el enlace de partículas floculadas por acción de diferentes materias coloidales o sustancias denominadas cementantes. Estos cementantes pueden ser materia orgánica, partículas de arcilla, coloides inorgánicos (Al, Fe), carbonatos y óxidos.

Reeves (1976) presentó un estudio acerca de la composición química de los suelos cementados en diferentes regiones, encontrando el predominio de cementantes a base de carbonato de calcio en una proporción cercana al 80 % de las muestras examinadas; así mismo, encuentro que el óxido de calcio y dióxido de sílice se encuentran en proporciones del 43 % y 12 % de las muestras, respectivamente. Otros cementantes incluyen partículas de limo y arcilla y óxidos de magnesio, aluminio y hierro. Adicionalmente, en suelos ubicados en regiones semiáridas y tropicales se encuentran minerales levemente cristalizados de Silicio (Si) que producen cementación [Walsh, 1997].

2.4 Identificación

Suelos originarios de cenizas volcánicas pueden identificarse por métodos de clasificación empleados para suelos de regiones tropicales, como la granulometría, límites de Atterberg e índices de consistencia, aunque es recomendable un análisis mineralógico que no deja de ser una expresión cualitativa de las muestras usadas. Tateishi, propuso el uso del índice de agregación para determinar la tendencia de un suelo a cambiar después de la deshidratación Giraldo and Morales (2004).

Técnicas como la difracción rayos X, imágenes de microscopio electrónico e indicadores de

suelos alofánicos han sido empleados para la identificación de este tipo de suelos (Figuras 2.3 y 2.4).

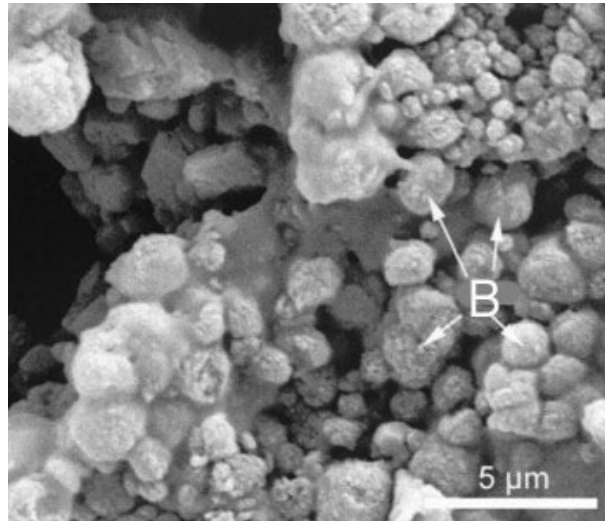


Fig. 2.3: Microfotografía de una muestra de suelo cementado (Fuente: A. James Clarck, School of Engineering. Microbiologically Mediated Soil Improvement. University of Maryland)

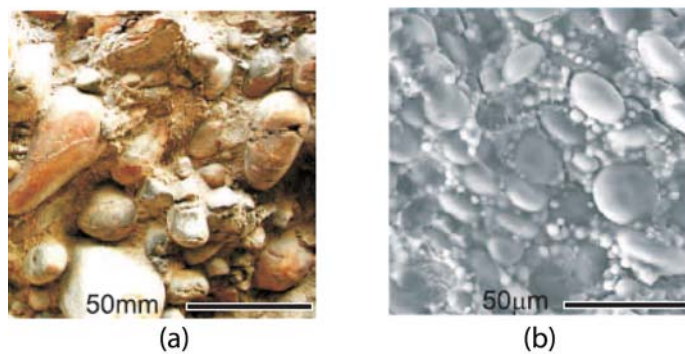


Fig. 2.4: ejemplos de suelos cementados: (a) Conglomerado. (b) Fotografía de microscopía electrónica de barrido. (Fuente: Topin et al. (2007))

A continuación se presentan algunos de los indicadores más empleados Giraldo and Morales (2004):

- El material parental es de origen volcánico.
- El suelo tiene altos contenidos de agua.
- Los límites líquido y plástico son altos y se posicionan bajo la línea A de la carta de plasticidad.

- Al ser sometidas las muestras a secado el comportamiento del material deja de ser plástico y se convierte en no plástico.

2.5 Características del Comportamiento de Suelos Cementados

En la literatura se pueden encontrar algunas de las características más importantes de los suelos cementados, ventajas y desventajas desde el punto de vista de comportamiento mecánico. A continuación se presentan las conclusiones más relevantes presentadas por diversos autores acerca del comportamiento de los suelos cementados:

- Presentan un alta rigidez ante pequeñas deformaciones. Aunque estudios recientes han demostrado que pesar de la estructura cementada, estos suelos pueden presentar baja rigidez debido a la alta porosidad que pueden llegar a desarrollar.
- A una baja presión de confinamiento su comportamiento es dependiente de la resistencia del cementante, mientras que a una alta presión de confinamiento su comportamiento es dependiente del estado de esfuerzos.
- Presenta una pérdida de rigidez después de la descementación (normalmente irreparable).
- Tendencia a la dilatación bajo esfuerzo desviador.
- Mayor fragilidad y susceptibilidad a la localización.
- Disminución del potencial de licuación.
- Grandes efectos debidos al muestreo. Si el suelo no está saturado la cementación puede estar unida al bajo contenido de agua. (Rinaldi y Santamarina, 2003).

Ardila (2006) presenta algunas de las principales características de los suelos derivados de cenizas volcánicas en Colombia, los cuales presentan comportamientos muy particulares como los que se listan a continuación:

- La alta porosidad y el predominio de minerales de arcilla permite que el suelo presente alta humedad y que sea capaz de desarrollar elevadas succiones, permitiendo una alta contracción a medida que se incrementa la succión.
- Suelos resultantes de la meteorización están formados predominantemente por partículas de limo y de arcilla que alcanzan escala nanométrica y se organizan en arreglos muy porosos mantenidos mediante cementación.
- Algunas de las propiedades de los minerales de la fracción arcillosa tienen especial influencia en el comportamiento macroscópico del suelo. Estas propiedades incluyen alta superficie específica, alta capacidad de retención de agua, alta porosidad, carga negativa dependiente de la condición de pH y tendencia a agruparse. La influencia de estas características sobre las propiedades macroscópicas del suelo se observan en los altos límites de Atterberg, alta humedad y porosidad, alta conductividad térmica, porosidad dual (inter e intra-agregaciones) y la apariencia limosa por la formación de agregaciones (Ardila (2006)).

- La estabilidad de los taludes naturales es susceptible de perderse durante eventos sísmicos o después de intensas precipitaciones.

2.6 Localización de Suelos Volcánicos

Los principales depósitos de cenizas volcánicas en Colombia se encuentran localizados en el sector de la cordillera central, la cual se puede subdividir en tres grandes (Arango, 1993):

- Zona Norte: Departamento de Antioquia, Caldas, Quindío, Risaralda, Valle del Cauca y Tolima.
- Zona centro: Huila y parte del Tolima, Cauca y Valle del Cauca.
- Zona Sur: Cauca, Huila y gran parte de Nariño.

La localización de estos suelos alrededor del mundo están ubicados en zonas muy específicas de los continentes y especialmente en regiones montañosas como: Las costas del océano Pacífico, Los Andes, América Central, Montañas Rocosas, Alaska, Nueva Guinea, Nueva Zelanda, Japón, Filipinas, Indonesia, Italia Mediterránea, África Oriental y las islas Azores, Canarias, Cabo Verde y Hawaii Giraldo and Morales (2004).

Giraldo and Morales (2004) presentan algunas de las zonas con mayor abundancia en suelos de este tipo:

- Japón: El área de los depósitos de cenizas se ha calculado en aproximadamente 4 millones de Hectáreas.
- Indonesia: Todas las cenizas se originaron en erupciones del pleistoceno reciente y forman suelos de diferentes características. El área cubierta es de casi 2 millones de kilómetros cuadrados.
- Hawaii: La mitad de sus suelos son derivados de cenizas (alrededor de 80000 Hectáreas).
- Filipinas: La actividad volcánica, intermitente y explosiva, ha dado forma a la topografía (mesetas y montañas suaves). Los suelos tienen alto contenido de materia orgánica.
- Estados Unidos: Los mayores depósitos están en la zona de las Montañas Rocosas y en el centro del país. Sin embargo, todos los suelos de clima húmedo contienen dentro de sus materiales parentales cenizas volcánicas.
- Centroamérica: Casi todo este territorio está cubierto de depósitos piroclásticos, con gran contenido de vidrio volcánico.
- Suramérica: Se presentan cubriendo áreas extensas de Argentina, Chile, Ecuador y Colombia. Sus características son muy definidas y similares: Estratificación distintiva, presencia de materia orgánica, alta relación de vacíos, baja densidad, altos contenidos de agua, entre otras.

Capítulo 3

Características Físicas y Propiedades Mecánicas de Suelos Cementados

3.1 Estructura

A través de los años se han propuesto varias explicaciones de la estructura de las cenizas volcánicas basadas en sus altos contenidos de agua y alta relación de vacíos. Una explicación sencilla de la estructura se refiere a la unión química de las partículas y el agua del suelo, con ausencia de agua libre en los espacios vacíos. Otra explicación de la estructura de estos suelos suponen un tejido abierto, con las partículas minerales fuertemente adheridas por un cementante, y ocupando el espacio entre las partículas unos fragmentos semisólidos de aluminosilicatos, parecidos a un gel, con una estructura abierta que retiene agua en su interior. Giraldo and Morales (2004) El concepto de gel, contenido en los estudios de Fieldes y Claridge (1975), así como en el de Rourke y Crespo (1989); se genera de los cambios volumétricos y estructurales irreversibles sufridos por el suelo durante el secado. En el estado posterior al secado se comporta como un suelo arenoso y en estado húmedo tiene apariencia plástica. Estos geles de sílica contenidos en las cenizas volcánicas se forman a partir de fracciones de ácido silícico (H_4SiO_4) desconectadas, cuyo comportamiento es similar a un fluido. A partir de esto se inicia un proceso de polimerización junto con la unión de las partículas y la formación de enlaces siloxano (Si-O-Si) que producen agua. En esta reacción, el material amorfo pasa de un líquido a un semisólido (gel) cuyas características mecánicas se acercan a las de un sólido (Forero-Dueñas, 1998). Wallace (1973), lo mismo que De y Furdas (1973) presentaron otras estructuras (Figuras 1.4 y 1.5) basadas en un esqueleto de minerales en formación que contienen el gel alofánico entre ellos. Estudios realizados por Wada (1989) y Jacquet (1990) con microscopio electrónico mostraron una estructura de cenizas volcánicas consistente en partículas esféricas de alófana con fibras de imogolita flotando entre ellas o formando puentes (Wesley, 2002). En la figura 1.6 se muestra una fotografía de una ceniza volcánica. El remoldeo rompe esta estructura y convierte el material en una masa homogénea, lo que se traduce en la pérdida de resistencia y un incremento de la compresibilidad. Esta estructura explica además los altos valores de humedad natural por la capacidad de retención de agua y la naturaleza semisólida del gel alofánico. Esta estructura también puede relacionarse con la alta permeabilidad, la alta resistencia al corte no drenado y la baja compresibilidad de estos suelos. Sin embargo, al ser remoldeado como se dijo anteriormente, estas propiedades cambian drásticamente (Wesley, 2002). A pesar de ello, la alta resistencia efectiva y residual, parecen deberse más a la composición de las partículas de alófana e imogolita que a la estructura misma, al no verse afectadas por el remoldeo (Wan, 2001) Por otro lado, el gel alofánico al actuar como contacto entre las partículas de la fracción arena y de los demás minerales, lo incrementa con el aumento del esfuerzo de consolidación, resultando en una disminución del

esfuerzo cortante y el ángulo de fricción residual. Además, el esfuerzo cortante decrece con el aumento del esfuerzo normal (Wan, 2001)

La porosidad de los suelos derivados de cenizas volcánicas es en general elevada, pero puede variar en un rango amplio, entre $n=0.64-0.86$ (Java - Van Ranst et al., 2002) y $n=0.66-0.87$ (Colombia - Forero et al., 1999). El arreglo de las partículas controla esta propiedad física que ejerce importante influencia sobre el comportamiento mecánico y las propiedades de conducción hidráulica, térmica y eléctrica del suelo. En el caso de estos suelos, la porosidad está estrechamente relacionada con la presencia de haloisita, alofana e imogolita que se agrupan formando configuraciones muy abiertas. Por ejemplo, la haloisita por su forma cilíndrica puede formar estructuras de gran porosidad gobernadas por fuerzas electrostáticas entre las paredes positivamente cargadas y los extremos negativamente cargados de las partículas (Jacquet, 1990).

3.2 Peso

3.3 Tamaño

3.4 Propiedades Mecánicas

3.4.1 Resistencia al Corte

En general, los suelos volcánicos presentan resistencias al corte relativamente altas, y en todo caso, muy superiores a las que podrían predecirse a partir de sus índices de plasticidad y de sus relaciones de vacíos. Pero, la acción de factores externos (sismos y lluvias, principalmente) puede contribuir a la disminución súbita de dicha resistencia.

Las arcillas alofánicas presentan la particularidad de poseer altos ángulos de resistencia efectiva al corte, aún en índices aparentes de consistencia cercanos a la unidad. Esta fue la conclusión de L.D. Wesley (1966) del Imperial College of Science and Technology, Universidad de Londres, después de completar un buen número de estudios con suelo de Indonesia, los cuales son muy semejantes a los encontrados en la zona de Manizales. Esto reveló que para suelos carentes de contaminación y con bajo contenido de desperdicios, los ángulos de resistencia al corte estimados oscilaron entre 29 y 37% (Arango, 1993)

3.5 Compresión Triaxial

3.6 Todas Las Partículas Están Cementadas?

3.7 Cúales Son las Propiedades del Cementante?

Capítulo 4

Dinámica Molecular

4.1 Dinámica Molecular de Partículas Duras

Este método se caracteriza por que las partículas no se sobrelapan, de ahí que se las considere duras. Por otro lado el método no considera la existencia de fuerzas; es decir que cuando dos partículas chocan intercambian sus velocidades de acuerdo con una regla de colisión predefinida. El punto de partida consta de partículas con posiciones y velocidades conocidas. Las ecuaciones de Newton las obligan a seguir trayectorias balísticas perfectamente determinadas, pudiéndose calcular cuales partículas serán las primeras en colisionar y en qué instante de tiempo. Los constituyentes del medio avanzan sus posiciones hasta dicho instante, se detienen y tiene lugar la colisión entre las partículas involucradas. La colisión consiste en la actualización de las velocidades según una regla que tiene en cuenta la conservación del momento lineal y la energía cinética final difiere de la inicial de una manera que se supone conocida y medida por el coeficiente de restitución.

Una vez actualizadas las dos velocidades implicadas en el choque, puede volverse a calcular el instante en que tendrá lugar la siguiente colisión. Todos los granos se mueven balísticamente hasta ese momento, en que las velocidades de los granos implicados en el choque son actualizadas de acuerdo con la regla de colisión. El proceso de cálculo de las trayectorias continua así dirigido por eventos (colisiones). El caso más sencillo de regla de colisión sería el siguiente:

$$v'_1 = v_1 - \frac{1 + \varepsilon}{2} v_n \quad (4.1)$$

$$v'_2 = v_2 + \frac{1 + \varepsilon}{2} v_n \quad (4.2)$$

donde las velocidad v'_i son las posteriores a la colisión y las v_i las anteriores, v_n es la velocidad relativa de las partículas en la dirección de la colisión y ε el coeficiente de restitución. La pérdida de energía cinética en la colisión está dada por:

$$\Delta E = -\frac{m_{ij}}{2}(1 - \varepsilon^2)v_n^2 \quad (4.3)$$

siendo m_{ij} la masa reducida de las dos partículas. El caso más realista de regla de colisión usa un coeficiente de restitución dependiente de la velocidad relativa, aunque en muchas aplicaciones se toma constante. Cuando se toma en cuenta la rotación de las partículas, se necesita

una regla de colisión en la dirección perpendicular a la de choque. Esta regla implica a las velocidades de rotación de los granos y un coeficiente de restitución propio.

4.2 Dinámica Molecular de las Partículas Blandas

Este método se desarrolló originalmente para calcular la interacción entre moléculas de un gas o un líquido en aproximación newtoniana. Las ecuaciones a integrar son las de Newton con la fuerza dada por un potencial de interacción que consta de dos partes; una ligeramente atractiva a distancias mayores que el tamaño de un átomo o molécula, y otra fuertemente repulsiva a distancias menores, cuando las nubes electrónicas se solapan levemente. Este método se aplica a los medios granulares truncando el potencial de interacción, que conserva su parte repulsiva a distancias que ahora se interpretan como inferiores al diámetro del grano, mientras que es nulo a distancias superiores. La interacción es, por tanto, de contacto y consistente en un ligero solapamiento de los granos en colisión Turnes (2007).

Los detalles de la fuerza que experimentan las partículas dependen del modelo seleccionado. Sin embargo, todos comparten algunas características necesarias para modelar un medio granular:

- La fuerza repulsiva es proporcional al solapamiento de los granos.
- La fuerza disipativa es de carácter viscoso, proporcional a la velocidad de impacto relativa.
- Hay una fuerza perpendicular a la dirección de la colisión dada por el criterio de Coulomb.

Una vez conocidos los detalles de la fuerza, el método de dinámica molecular procede a la integración de las ecuaciones de Newton, para lo que será necesario conocer las posiciones y velocidades iniciales de todas las partículas. La integración numérica puede, en principio, efectuarse por cualquier método, como por ejemplo Euler, Runge-Kutta o métodos tipo predictor-corrector. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que no todos los métodos son igualmente óptimos a la hora de resolver un determinado problema.

4.2.1 Fuerzas de Interacción

4.2.1.1 Fuerza Normal

La fuerza que actúa sobre cada grano en la dirección que une sus centros puede considerarse dividida en dos contribuciones. Un término repulsivo que impide a los granos atravesarse mutuamente y que es proporcional al área de solapamiento de los mismos, y un término disipativo proporcional a la velocidad relativa de las partículas en la dirección del choque. En el caso más sencillo podemos escribir:

$$F_n = k_n \cdot \xi - \gamma_n \cdot \dot{\xi} \quad (4.4)$$

donde k_n y γ_n son coeficientes de proporcionalidad. El área de solapamiento para discos o esferas de radios R_i y R_j se encuentra como:

$$\xi = R_i + R_j - r_{ij} \quad (4.5)$$

siendo r_{ij} la distancia entre los centros. Este modelo puede visualizarse como un muelle amortiguado en el punto de contacto, con k_n y ξ_n como constantes de rigidez y amortiguamiento respectivamente. Con esta interpretación se puede calcular el tiempo de contacto y el coeficiente de restitución como:

$$t_c = \pi \left\{ \frac{k_n}{m_{eff}} - \left(\frac{\gamma_n}{2 \cdot m_{eff}} \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (4.6)$$

$$\varepsilon = -\frac{v_n^f}{v_n^i} = \exp\left(\frac{-\gamma_n}{2 \cdot m_{eff} t_c}\right) \quad (4.7)$$

donde m_{eff} es la masa reducida efectiva de los granos en colisión y v_n^f , v_n^i las velocidades relativas en la dirección normal posterior y anterior al choque respectivamente. El coeficiente de restitución mide la energía que se pierde durante el choque, por eso viene dado por la duración del mismo, así como por el coeficiente γ_n que determina la energía disipada por el muelle amortiguado durante su movimiento.

La teoría de Hertz del contacto elástico da lugar a un término repulsivo no lineal al que se añade una contribución disipativa como la anterior para tener:

$$F_n = k_n \cdot \xi^{3/2} - \gamma_n \cdot \dot{\xi} \quad (4.8)$$

En este caso el coeficiente de restitución no es constante sino que depende de la velocidad del impacto, así como el tiempo de colisión:

$$t_c = 3,21 \left(\frac{m_{eff}}{k_n} \right)^{2/5} v_n^i{}^{1/5} \quad (4.9)$$

4.2.1.2 Fuerza Tangencial

Esta fuerza está dada por la ley de Coulomb de la fricción, que nos dice que no hay deslizamiento de un cuerpo sobre otro a menos que la fuerza perpendicular a la línea de contacto sea superior a cierto umbral. Este umbral es la fuerza normal por el coeficiente de fricción estática. Si se supera este valor crítico, se produce deslizamiento y la fuerza tangencial pasa a ser la normal por el coeficiente de fricción dinámico. Podemos por lo tanto escribir, para la fricción dinámica como:

$$F_t = -\mu |F_n| \frac{v_t}{|v_t|} \quad (4.10)$$

donde v_t es la velocidad relativa de las superficies en contacto, donde v_t está dada por:

$$v_t = (\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{s} + \omega_1 \cdot R_1 + \omega_2 \cdot R_2 \quad (4.11)$$

siendo ω_1 y ω_2 las velocidades de rotación de los granos respecto de sus centros y \vec{s} un vector unitario perpendicular a la dirección que une sus centros. Esta implementación tiene el inconveniente de que F_t salta entre valores positivos y negativos cerca de $v_t = 0$, siendo discontinua en este punto. Aunque el valor medio de F_t será correcto, no es conveniente desde el punto de vista de la integración numérica el tener estos saltos discontinuos de signo. Una forma muy utilizada de evitar el anterior inconveniente es escribir:

$$F_t = -\gamma_t \cdot v_t \quad (4.12)$$

donde γ_t es una constante sin interpretación física. Teniéndose un comportamiento suave sin saltos. Sin embargo se presentan dos problemas, el primero es que se obtiene un coeficiente de restitución tangencial constante que impide alcanzar $v_t = 0$ (rodadura) y el segundo es que al no depender de la fuerza normal, no se obtienen resultados físicos para impactos casi totalmente normales u oblicuos.

La solución más extendida consiste en unir la Ecuación 4.9 y la Ecuación 4.11:

$$F_t = \min(\mu |F_n|, \gamma_t |v_n|) \frac{v_n}{|v_n|} \quad (4.13)$$

donde γ_t sigue siendo un parámetro sin interpretación física. Dándole un valor relativamente alto a este parámetro, la mayor parte del tiempo estaremos tomando el valor correcto para la fuerza tangencial $\mu \cdot |F_n|$. A medida que las velocidades se van haciendo pequeñas, debido a la disipación, y nos acercamos al régimen en que este término da problemas, la función mín hará que tomemos $\gamma_t |v_t|$ obteniendo un comportamiento regular.

Las expresiones de la fuerza tangencial presentadas hasta ahora proporcionan una fuerza de fricción dinámica, no estática. En efecto, si un cuerpo desliza sobre otro con una fricción dada por la Ecuación 4.11 o la Ecuación 4.12, esta se hará nula en el momento en que consiga frenar el deslizamiento, con lo que este podría volver a iniciarse. Tendríamos un comportamiento "a saltos" que, aunque pequeños, nunca sería estático. Una fuerza de fricción más realista debería poder tener un valor no nulo en situaciones estáticas para poder mantener la situación de no deslizamiento una vez que esta es alcanzada.

Implementando una fuerza de fricción estática como la propuesta por Silver et al. (2002):

$$F_t = \min(\mu |F_n|, |F_s|) \frac{\zeta}{|\zeta|} \quad (4.14)$$

$$F_s = k_t \cdot \zeta - \gamma_t \cdot v_t \quad (4.15)$$

$$\zeta(t) = \int_{t_0}^t v_t(t') dt' \quad (4.16)$$

La fuerza tangencial de la Ecuación 4.14 contiene un término elástico proporcional al desplazamiento de deslizamiento ζ y un término disipativo proporcional a la velocidad relativa en la dirección tangencial v_t . El desplazamiento ζ se calcula integrando v_t desde el instante que las dos partículas entran en contacto t_0 hasta que dicho contacto finaliza. De esta forma cuando el deslizamiento termina y v_t se anula, la fuerza tangencial retiene un valor distinto de cero debido a que ζ tiene un valor constante a partir de ese instante.

4.2.2 Integración de las Ecuaciones del Movimiento

Una vez que hemos elegido un modelo de contacto podemos calcular la aceleración de cada partícula y, de ella, la nueva velocidad y posición. Para llevar a cabo este cálculo disponemos de múltiples métodos de distinta complejidad y precisión. En principio, podemos usar tanto el método de Euler como el de Runge-Kutta en función de nuestras necesidades de precisión y velocidad. Sin embargo, cuando tratamos con sistemas hamiltonianos, una familia de métodos destaca como particularmente apropiada: los denominados métodos simplécticos. Se dice que las ecuaciones de movimiento tienen estructura simpléctica si se verifica:

$$\dot{\Gamma} = \mathbf{J} \nabla_{\Gamma} \mathcal{H} \quad (4.17)$$

donde $\Gamma = (p_i, q_i)$ es un punto del espacio de fases, \mathcal{H} el hamiltoniano del sistema y \mathbf{J} está definido por:

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

siendo $\mathbf{1}$ la matriz identidad con número de filas y columnas igual al número de grados de libertad del sistema. La evolución temporal está dada por el operador de Liouville

$$\dot{\Gamma} = \hat{L} \Gamma \quad (4.19)$$

$$\hat{L} \equiv -\nabla_{\Gamma} \mathcal{H} \cdot \mathbf{J} \quad (4.20)$$

La razón para preferir un método simpléctico frente a uno ordinario estriba en que los sistemas hamiltonianos no son estables frente a perturbaciones no hamiltonianas, que es precisamente lo que hacemos si aproximamos el hamiltoniano mediante un integrador genérico. El resultado es que el hamiltoniano se vuelve disipativo, con un comportamiento a largo plazo completamente diferente del esperado. Las principales propiedades de los métodos simplécticos son:

- Conservan la estructura simpléctica del hamiltoniano, verifican el teorema de Liouville, son más estables que los métodos ordinarios.

- Conservan la energía y el momento angular.
- Son reversibles en el tiempo.

Existen muchos métodos de integración numérica de las ecuaciones de movimiento, los cuales se diferencian en la precisión y estabilidad que ofrezcan según la naturaleza de las fuerzas que se manejen. El costo de la precisión influye dramáticamente en el tiempo de cómputo, que se traduce finalmente en el tamaño máximo del sistema que se va a simular. Por lo tanto, para realizar una simulación es necesario optimizar la relación precisión-tiempo de cómputo. Los integradores simplécticos más utilizados son los denominados Verlet, Leap-Frog y Velocidad-Verlet. Estudios recientes han mostrado que estas dos Leap-Frog y Velocidad-Verlet se comportan muy bien, conservando la energía mecánica para sistemas de partículas que chocan elásticamente.

Velocidad-Verlet es un método que corrige los errores en velocidad y es ideal para sistemas en los que los choques tipo Hertz predominen. Esta corrección equivale a un tiempo de cómputo levemente mayor respecto al método Leap-Frog. En el método de Velocidad-Verlet la posición y la velocidad se actualizan según las expresiones:

$$x(t + \delta t) = x(t) + v(t) \delta t + \frac{1}{2} a(t) \delta t^2 \quad (4.21)$$

$$v(t + \delta t) = v(t) + \frac{1}{2} [a(t) + a(t + \delta t)] \delta t \quad (4.22)$$

Para su implementación es necesario dividir el paso en dos de la Ecuación 4.21:

$$v\left(t + \frac{1}{2} \delta t\right) = v(t) + \frac{1}{2} a(t) \delta t \quad (4.23)$$

$$v(t + \delta t) = v\left(t + \frac{1}{2} \delta t\right) + \frac{1}{2} a(t + \delta t) \delta t \quad (4.24)$$

4.3 Método del Recocido o Temple Simulado (Simulated Annealing SA)

Simulated Annealing (SA) o temple simulado es un algoritmo de búsqueda meta-heurística para problemas de optimización global, es decir, encontrar una buena aproximación al óptimo global de una función en un espacio de búsqueda grande.

SA es un método empleado para tratar de forma discreta y continua problemas de optimización. La característica clave del SA es que proporciona un medio para salir de óptimos locales en busca del óptimo global.

4.3.1 Definiciones

Para describir las características de un algoritmo del tipo SA para la optimización de problemas discretos, es necesario establecer algunas definiciones básicas. Definiendo a Ω como el espacio de solución, $f : \Omega \rightarrow \Re$ como la función objetivo definida en el espacio de solución. La

meta es encontrar un mínimo global, ω ($\omega \in \Omega$, tal que $f(\omega) \geq f(\omega)$ para todo $\omega \in \Omega$).

La función objetivo debe establecerse de tal forma que se garantice la existencia de ω . Definiendo $N(\omega)$ como la función de vecindad para $\omega \in \Omega$, se tiene que por cada solución existente $\omega \in \Omega$ existen soluciones vecinas, $N(\omega)$ que pueden ser alcanzadas en una sola iteración de un algoritmo de búsqueda local.

SA comienza con una solución inicial $\omega \in \Omega$. Una solución vecina $\omega' \in N(\omega)$ es generada (de forma aleatoria o usando alguna función predeterminada). SA está basado en el criterio de aceptación de Metrópolis (Metropolis et al., 1953), el cual modela como un sistema termodinámico se mueve de la solución actual (estado actual) $\omega \in \Omega$ a un candidato de solución $\omega' \in N(\omega)$, en la cual el contenido energético es minimizado. La solución candidata ω' , es aceptada como la solución actual basada en la probabilidad de aceptación:

$$P\{\omega' \text{ si es solución}\} = \begin{cases} \exp[-(f(\omega') - f(\omega))/t_k] & \text{si } f(\omega') - f(\omega) > 0 \\ 1 & \text{si } f(\omega') - f(\omega) \leq 0 \end{cases} \quad (4.25)$$

Esta probabilidad de aceptación es el elemento básico del mecanismo de búsqueda en Simulated Annealing. Si la temperatura se reduce lo suficientemente despacio, entonces el sistema puede alcanzar el equilibrio (estado estable) en cada iteración k . Denotando por $f(\omega)$ y $f(\omega')$ las energías (valores de la función objetivo) asociadas con las soluciones $\omega \in \Omega$ y $\omega' \in N(\omega)$, respectivamente. Este equilibrio sigue la distribución de Boltzmann, la cual puede ser descrita como la probabilidad de que un sistema se encuentre en el estado $\omega \in \Omega$ con energía $f(\omega)$ a la temperatura T como:

$$P\{\text{Sistema este en } \omega \text{ a temperatura } T\} = \frac{\exp(-f(\omega)/t_k)}{\sum_{\omega'' \in \Omega} \exp(-f(\omega'')/t_k)} \quad (4.26)$$

Si la probabilidad de generar una solución candidata ω' de los vecinos de la solución $\omega \in \Omega$ es $g_k(\omega, \omega')$, donde:

$$\sum_{\omega'' \in N(\omega)} g_k(\omega, \omega'') = 1 \text{ para todo } \omega \in \Omega, k = 1, 2, \dots, \quad (4.27)$$

entonces una matriz estocástica cuadrada no negativa P_k puede ser definida mediante una transición de probabilidades:

$$P_k(\omega, \omega') = \begin{cases} g_k(\omega, \omega') \exp(-\Delta_{\omega, \omega'}/t_k) & \omega' \in N(\omega), \omega' \neq \omega \\ 0 & \omega' \notin N(\omega), \omega' \neq \omega \\ 1 - \sum_{\substack{\omega'' \in N(\omega) \\ \omega'' \neq \omega}} P_k(\omega, \omega'') & \omega' = \omega \end{cases} \quad (4.28)$$

para todas las soluciones $i \in \Omega$ y todas las iteraciones $k = 1, 2, \dots$, y $\Delta_{\omega, \omega'} \equiv f(\omega') - f(\omega)$. Estas probabilidades de transición definen una secuencia de soluciones generadas de una cadena heterogénea de Markov¹.

¹ Una cadena de Markov, es una serie de eventos, en la cual la probabilidad de que ocurra un evento depende del evento inmediato anterior. En efecto, las cadenas de este tipo tienen memoria. -

4.3.2 Algoritmo de Cálculo

Henderson et al. (2006) presenta el psuedo código de SA, el cual se describe a continuación:

1. Seleccionar una solución inicial $\omega \in \Omega$
2. Seleccionar el contador del cambio de temperatura $k = 0$
3. Seleccionar un esquema de temperatura de enfriamiento, t_k
4. Seleccionar una temperatura inicial $T = t_0 \geq 0$
5. Seleccionar un esquema de repetición, M_k que define el número de iteraciones ejecutadas en cada temperatura, t_k
6. Repetir
7. Poner el contador de repetición $m = 0$
 - Repetir
 - Generar una solución $\omega' \in N(\omega)$
 - Calcular $\Delta_{\omega, \omega'} = f(\omega') - f(\omega)$
 - Si $\Delta_{\omega, \omega'} \leq 0$, entonces $\omega \leftarrow \omega'$
 - Si $\Delta_{\omega, \omega'} > 0$, entonces $\omega \leftarrow \omega'$ con la probabilidad $\exp(-\Delta_{\omega, \omega'} / t_k)$
 - $m \leftarrow m + 1$
 - Hasta $m = M_k$
8. $k \leftarrow k + 1$
9. Hasta que el criterio de detención es alcanzado

Esta formulación de SA resulta en $M_0 + M_1 + \dots + M_k$ total de iteraciones ejecutadas, donde k corresponde al valor para t_k en la cual el criterio de detención es alcanzado. Adicionalmente, si $M_k = 1$ para todo k , entonces la temperatura cambia en cada iteración.

4.3.3 Convergencia

Los resultados de convergencia para Simulated Annealing suelen tomar una de dos direcciones; o bien el algoritmo ha sido modelado como una secuencia de cadenas homogéneas de Markov o como una única cadena de Markov no homogénea.

El enfoque de la cadena homogénea de Markov supone que cada temperatura t_k se mantiene

acuerdan.^{el} último evento y esto condiciona las posibilidades de los eventos futuros. Esta dependencia del evento anterior distingue a las cadenas de Markov de las series de eventos independientes. [http : //es.wikipedia.org/wiki/Cadena_de_M%C3%A1rkov](http://es.wikipedia.org/wiki/Cadena_de_M%C3%A1rkov)

constante durante un número suficiente de iteraciones m , tal que la matriz estocástica P_k puede alcanzar su distribución estacionaria (estado estable) π_k . La existencia de una distribución estacionaria en cada iteración k como se indica en el teorema 4.3.1. Para garantizar que el teorema 4.3.1 es coherente con el algoritmo de SA sin pérdida de generalidad, t_k será función solamente de del ciclo externo de la iteración k y se dejará el mismo número de iteraciones del ciclo interior M_k y k iteraciones del ciclo externo.

Teorema 4.3.1: $P_k(\omega, \omega')$ es la probabilidad de movimiento desde la solución ω a la solución ω' en una iteración interna de un ciclo externo k , $P_k^{(m)}(\omega, \omega')$ es la probabilidad de ir de la solución ω a la solución ω' en m ciclos internos. Si la cadena de Markov asociada con $P_k^{(m)}(\omega, \omega')$ es irreducible y no periódica con un número finito de soluciones, entonces $\lim_{m \rightarrow \infty} P_k^{(m)}(\omega, \omega') = \pi_k(\omega')$ existe para todo $\omega, \omega' \in \Omega$ e iteraciones k . Además $\pi_k(\omega')$ es la única solución positiva de:

$$\pi_k(\omega') = \sum_{\omega \in \Omega} \pi_k(\omega) P_k(\omega, \omega'), \quad \text{para todo } \omega \in \Omega \quad (4.29)$$

$$\sum_{\omega \in \Omega} \pi_k(\omega) = 1 \quad (4.30)$$

Los requisitos para la existencia de distribuciones estacionarias y para la convergencia de la secuencia de π_k vectores incluye:

1. La matriz de transición irreducible (Para cada ciclo exterior finito k , la matriz de transición puede asignarse a una trayectoria de probabilidades diferentes de cero entre una y dos soluciones $\omega, \omega' \in \Omega$).
2. Aperiodicidad (empezando en la solución $\omega' \in \Omega$, es posible regresar a ω, ω' con periodo 1).
3. Una distribución de probabilidad fija diferente de cero, como el número de ciclos externos k , tiende a infinito.

Todas las pruebas de convergencia de SA basadas en la teoría de la cadena homogénea de Markov, implícitas o explícitas, usan la condición de reversibilidad definida como:

$$\pi_k(\omega) P_k(\omega, \omega') = \pi_k(\omega') P_k(\omega', \omega), \quad \text{para todos los } \omega, \omega' \in \Omega \text{ y todas las iteraciones } k \quad (4.31)$$

La condición de reversibilidad es suficiente para que exista una única solución para la Ecuación 4.29 y la Ecuación 4.30 en cada ciclo exterior de la iteración k . Ross (1997) muestra que una condición necesaria para la reversibilidad es la multiplicatividad, por ejemplo en tres soluciones cualquiera $\omega, \omega', \omega'' \in \Omega$ tal que $f(\omega) \leq f(\omega') \leq f(\omega'')$, y para todas las iteraciones k ,

$$a_k(\Delta_{\omega, \omega''}) = a_k(\Delta_{\omega, \omega'}) a_k(\Delta_{\omega', \omega''}) \quad (4.32)$$

donde $a_k(\Delta\omega, \omega')$ es la probabilidad de aceptación de transición desde la solución ω a la solución ω' en un ciclo externo de la iteración k . La reversibilidad es impuesta asumiendo condiciones de simetría en las probabilidades de generación de solución y directamente expresado en la probabilidad de aceptación usando una forma exponencial o por la condición de multiplicatividad de la Ecuación 4.32.

SA y la teoría de convergencia homogénea se basan en el trabajo de Metropolis et al. (1953), el cual trata problemas en equilibrio estático. Considerando un sistema en equilibrio térmico con su entorno, en un estado S con energía $F(S)$. La densidad de probabilidad en el espacio de fase en el punto representando S es proporcional a:

$$\exp\left(\frac{-F(S)}{b \cdot T}\right) \quad (4.33)$$

donde b es la constante de Boltzmann, y T es la temperatura absoluta del entorno. por lo tanto el tiempo que el sistema emplea en solucionar S es proporcional a la Ecuación 4.33, por lo tanto, la densidad de probabilidad de equilibrio para todo $S \in \Omega$ esta dada por:

$$\pi_S = \frac{\exp\left(\frac{-F(S)}{b \cdot T}\right)}{\int \frac{-F(S)}{b \cdot T} dS} \quad (4.34)$$

La esperanza de cualquier solución válida de la función $f(S)$ es de la forma:

$$E[f] = \frac{\int f(S) \exp(-F(S)/bT) dS}{\int \exp(-F(S)/bT) dS} \quad (4.35)$$

Desafortunadamente, para muchas funciones solución la Ecuación 4.35 no puede ser evaluada analíticamente. Metropolis et al. (1953) resolvió este problema discretizando el espacio de solución de tal forma que las integrales de las Ecuaciones 4.34 y 4.35 se reemplazan por sumatorias sobre un conjunto de soluciones discretas $\omega' \in \Omega$, y mediante la construcción de una cadena de Markov irreducible y no periodica con probabilidades de transición $P(\omega, \omega')$ tal que

$$\pi(\omega') = \sum_{\omega \in \Omega} \pi(\omega) P(\omega, \omega') \quad \text{para todo } \omega' \in \Omega \quad (4.36)$$

$$\pi(\omega') = \frac{\exp(-F(\omega')/bT)}{\sum_{\omega \in \Omega} \exp(-F(\omega)/bT)} \quad \text{para todo } \omega' \in \Omega \quad (4.37)$$

Para el cálculo de la distribución de equilibrio π , el denominador de la Ecuación 4.35 (una constante de normalización) no necesita ser calculado. En cambio, las relaciones $\pi(\omega')/\pi(\omega)$ deben calcularse y la matriz de transición P que satisfaga la Ecuación 4.36. Hammersley y Handscomb (1964) mostraron que Metropolis et al. (1953) lleva a cabo definiendo P como el producto de las probabilidades de generación de la solución simétrica $g(\omega, \omega')$, y las relaciones de equilibrio $\pi(\omega')/\pi(\omega)$,

$$P(\omega, \omega') = \begin{cases} g(\omega, \omega')\pi(\omega')/p_i(\omega) & \text{si } \pi(\omega')/\pi(\omega) < 1, \omega' \neq \omega \\ g(\omega, \omega') & \text{si } \pi(\omega')/\pi(\omega) \geq 1, \omega' \neq \omega \\ g(\omega, \omega') + \sum_{\substack{\omega'' \in \Omega \\ \pi(\omega'') < \pi(\omega)}} g(\omega, \omega'')(1 - (\pi(\omega'')/\pi(\omega))) & \text{si } \omega' = \omega \end{cases} \quad (4.38)$$

Donde

$$g(\omega, \omega') \geq 0 \quad \sum_{\omega' \in \Omega} g(\omega, \omega') = 1 \quad \text{y} \quad g(\omega, \omega') = g(\omega', \omega) \quad \text{para todo } \omega, \omega' \in \Omega \quad (4.39)$$

El uso de coeficientes de probabilidad estacionaria para definir las probabilidades de solución de aceptación, combinado con las probabilidades de generación de la solución simétrica, permiten Metropolis et al. (1953) usar la condición de la reversibilidad en la Ecuaciones 4.31 para demostrar que las Ecuaciones 4.38 y 4.39 satisfacen 4.36.

La existencia de una única distribución fija para cada ciclo exterior de la iteración k es fácilmente demostrable especificando que cada matriz de transición P_k es irreducible y no periódica. Por otro lado, es muy difícil derivar una expresión explícita para cada distribución estacionaria π_k

Capítulo 5

Dinámica de Contactos

El método de la dinámica del contacto es un método de elementos discretos para la simulación de materiales granulares. La diferencia entre este método y métodos tradicionales de cómo el método de los elementos discretos o la dinámica molecular es el tratamiento de las escalas de tiempo y longitudes involucradas en la dinámica de medios granulares Radjai and Richefeu (2008).

En la dinámica molecular las partículas son tratadas como cuerpos rígidos mientras que los contactos entre partículas presentan un comportamiento viscoelástico en el cual las variables locales de deformaciones son relativas a la posición de las partículas y a sus desplazamientos. Los pasos de tiempo usados para la integración numérica de las ecuaciones del movimiento implican una fina división de las escalas de tiempo y longitudes involucradas en la interacción de los contactos.

En el método de la dinámica de los contactos, estas pequeñas escalas son despreciadas y sus efectos absorbidos en las leyes de contacto con una formulación de dinámica de partículas descrita a una mayor escala que la pequeña elástica respuesta de los tiempos y los desplazamientos.

La diferencia entre los dos métodos radica principalmente en las escalas de descripción y la presencia de parámetros elásticos en la dinámico molecular. Es decir, que cuando solamente interesa el flujo granular plástico, la deformación elástica del contacto puede ser irrelevante. Numericamente esto significa que pueden usarse grandes pasos de tiempo y simular materiales con partículas muy rígidas.

La dinámica de contactos calcula las fuerzas como las resultantes de dos restricciones que se deben cumplir en todo contacto. En primer lugar, los granos son rígidos e indeformables, no hay ningún bobrelapamiento. La segunda restricción es el criterio de Coulomb: en un contacto no hay deslizamiento a menos que la fuerza tangencial sea mayor que un cierto límite, dado por el coeficiente de fricción estático multiplicado por la fuerza normal. Una vez conocidas las fuerzas, las nuevas posiciones y velocidades se determinan integrando la ecuación de movimiento de Newton.

El método de la dinámica del contacto se basa en un modelo de partículas a escala de dinámica granular con dos grandes componentes. Primero, la interacción entre las partículas son descritas por leyes de contacto en lugar de leyes de fuerzas; es decir, un contacto es un elemento dinámico y unilateral con un comportamiento de grano grueso sobre un intervalo de tiempo

considerado. Segundo, las ecuaciones de la dinámica son adaptadas para tener en cuenta consistentemente ambos movimientos Suave y No Suave en un esquema de pasos de tiempo.

Consideremos el movimiento de dos partículas. Ellos avanzan según las fuerzas que tengan aplicadas (como la gravitatoria o las que resulten de una colisión anterior) hasta que la distancia que separa sus superficies se hace nula o negativa. En ese momento, el tiempo deja de avanzar y se procede a calcular las fuerzas de manera que la distancia entre sus superficies y la velocidad relativa entre ellas sean ambas nulas. Las configuraciones de fuerzas que verifican estas condiciones pueden ser múltiples, en cuyo caso se tomarán las fuerzas mínimas.

Ahora se comprobará si todas las fuerzas verifican el criterio de Coulomb. De no ser así, el contacto es deslizante y habrá que recalcular las fuerzas tangenciales eliminando la restricción de que la velocidad relativa entre las superficies de contacto sea nula. En una situación normal no se tendrán dos partículas, sino muchas y por lo tanto múltiples contactos. Los tres pasos anteriores no se aplican una sola vez en cada paso de integración, sino varias veces de forma iterativa hasta que todos los contactos verifican las restricciones en las fuerzas. Una vez logrado esto, la integración avanza al siguiente instante de tiempo haciendo uso de las fuerzas recién obtenidas para calcular la aceleración y de ella las nuevas velocidades y posiciones. En el nuevo paso de integración, las fuerzas no se obtienen de las anteriores, en cambio son todas puestas a cero y vueltas a calcular iterativamente sobre las imposiciones de la rigidez de los granos y el criterio de Coulomb. Este proceso iterativo es global, implica a las fuerzas sobre cada contacto a la vez, lo que supone una diferencia importante con los métodos anteriores en los que el contacto se resuelve localmente.

La dinámica que surge de este método de integración no es suave, a diferencia de lo que ocurre en la dinámicas molecular, sino que debido a la forma como se calculan las fuerzas, la velocidad puede evolucionar a pequeños saltos. Debido a esta característica, no se usan esquemas de integración de orden grande y se suele optar por un simple método de Euler con bajos costos computacionales Turnes (2007).

5.1 Leyes No Suaves

5.1.1 Condición Dinámica del Contacto

Un punto de contacto entre dos partículas tiene el siguiente contenido dinámico. Mientras la distancia n entre dos partículas sea positiva, es decir hay separación de éstas, no existe ninguna fuerza y la fuerza normal f_n es cero. Cuando n es cero una fuerza normal positiva (repulsiva) f_n es movilizada en el punto de contacto, ésta puede tomar indefinidamente grandes valores dependiendo de las fuerzas actuantes en las dos partículas. Estas condiciones definen una relación complementariedad entre n y f_n llamada condición de Signorini Radjai and Richefeu (2008).

$$\begin{cases} \delta_n > 0 \Rightarrow f_n = 0 \\ \delta_n = 0 \Rightarrow f_n \geq 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Solamente una de las dos alternativas es cierta. Esta disyunción entre los dos estados señala que ninguna de las dos variables puede ser reducida a una mono-valorada función de la otra. En otras palabras, la condición de Signorini define una ley de interacción. Ésto puede representarse como se indica en la Figura 5.1.

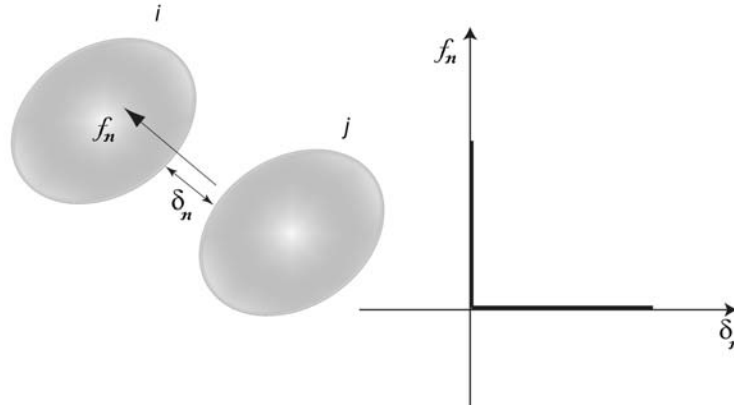


Fig. 5.1: Contacto potencial entre dos partículas

Esta relación puede representarse simbólicamente como:

$$\delta_n \overset{S}{\longleftrightarrow} f_n \tag{5.2}$$

Un contacto es persistente si ambos $\delta_n = 0$ y $u_n = \dot{\delta}_n = 0$. La fuerza normal desaparece cuando el contacto se rompe, por ejemplo cuando $\delta_n = 0$ y $u_n > 0$. De aquí que la relación de complementariedad de signorinis pueda expresarse como:

$$\begin{cases} \delta_n > 0 \Rightarrow f_n = 0 \\ \delta_n = 0 \wedge \begin{cases} u_n > 0 \Rightarrow f_n = 0 \\ u_n = 0 \Rightarrow f_n \geq 0 \end{cases} \end{cases} \tag{5.3}$$

De esta forma, la condición de Signorini contiene una restricción cinemática. Para un contacto donde $\delta_n = 0$, se tiene:

$$u_n \overset{S}{\longleftrightarrow} f_n \tag{5.4}$$

La dinámica contenida en la condición de Signorini aparece para la segunda derivada $\ddot{\delta}_n = \dot{u}_n$ respecto al tiempo donde la aceleración relativa $\ddot{\delta}_n$ y f_n obedecerán la la relación de complementariedad de Signorini. Sin embargo, en un nonsmooth formulación donde la velocidad salta como se esperaba, tenemos que estar en el nivel de velocidades y la relación (5.4)

Las tres alternativas de la Ecuación 5.3 llevan a una ley de contacto formulada por Moreau (1994) como:

$$\begin{cases} \delta_n > 0 \Rightarrow f_n = 0 \\ \delta_n \leq 0 \Rightarrow u_n \geq 0 \\ u_n > \Rightarrow f_n = 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

Donde $\delta_n \leq 0$ corresponde a la condición de un contacto geométrico.

En el contexto del movimiento no suave, la derivada del tiempo $\dot{\delta}_n(t)$ no es única. Suponiendo una variación del contorno, puede distinguirse un límite izquierdo de velocidad u_n^- y un límite derecho de velocidad u_n^+ las cuales en una formulación de pasos de tiempo debe considerarse como velocidades de contacto en los tiempos t y $t + \delta_t$ respectivamente. Con una resolución de tiempo finita δ_t la velocidad actual es irrelevante dado que las velocidades izquierda y derecha intervienen en la dinámica.

Moreau reconoció que la aproximación de la fuerza de contacto f_n durante el δ_t es un problema de medida en el sentido matemático (Moreau [1994, 2004]). Una fuerza estática regular f^s es la densidad de la medida $f^s dt$ respecto a dt . En contraste, un impulso p generado por la colisión no tiene la densidad con respecto a dt . Es decir, las fuerzas en el origen del impulso no se resuelven en la escala de dt . Sin embargo, no se puede diferenciar entre estas contribuciones por lo cual, las dos contribuciones deben sumarse hasta una sola medida df'_n . Por lo tanto, la fuerza de contacto se define como un promedio de esta medida sobre d_t :

$$f_n = \frac{1}{\delta_t} \int_t^{t+\delta_t} df'_n \quad (5.6)$$

Con estas definiciones, las ecuaciones de la dinámica pueden ser formuladas como ecuaciones de medida diferencial. A excepción del equilibrio estático donde las fuerzas son de origen estático, f_n generalmente depende de la resolución del tiempo. Para largos pasos, la dinámica rápida es parcialmente filtrada y los efectos remanentes aparecen como una fuerza promedio p/δ_t , en adición a la parte estática f_n^s . Para pasos de tiempo suficientemente bajos, la dinámica rápida prevalece y la correspondiente contribución p/δ_t se incrementa.

Como la velocidad u_n involucra la condición de Signorini, esta puede asumirse como el promedio ponderado entre la velocidad izquierda u_n^- y la velocidad derecha u_n^+ como:

$$u_n = \eta u_n^- + (1 - \eta) u_n^+ \quad (5.7)$$

donde η es una característica del contacto. Para $\eta \neq 0$ un choque binario implica $u_n^+/u_n^- = -\eta/(1 + \eta)$, por lo cual la velocidad u_n puede expresarse en términos del coeficiente de restitución e_n como:

$$u_n = \frac{u_n^+ + e_n \cdot u_n^-}{1 + e_n} \quad (5.8)$$

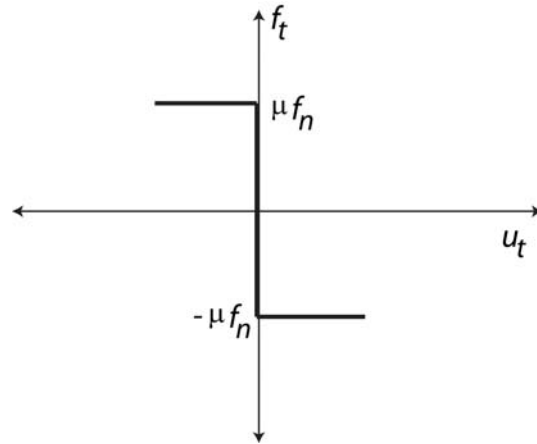


Fig. 5.2: Ley de fricción de Coulomb

5.1.2 Ley de Fricción de Coulomb

La ley de fricción de Coulomb definida como una relación complementaria entre la fuerza de fricción f_t y la velocidad deslizante u_t en un punto de contacto entre dos partículas es de la forma:

$$\begin{cases} u_t > 0 & f_t = -\mu f_n \\ u_t = 0 & -\mu f_n \leq f_t \leq \mu f_n \\ u_t < 0 & f_t = \mu f_n \end{cases} \quad (5.9)$$

donde μ es el coeficiente de fricción.

De forma análoga a la velocidad normal, puede derivarse una expresión para la velocidad tangencial como:

$$u_t = \frac{u_t^+ e_t u_t^-}{1 + e_t} \quad (5.10)$$

donde $e_t \in [-1, 1]$ es el coeficiente de restitución tangencial.

5.2 Dinámica No Suave

5.2.1 Ecuaciones Dinámicas

El movimiento de partículas rígidas en un arreglo granular se encuentra gobernado por la ecuaciones de Newton. En un marco de referencia bidimensional cada partícula se encuentra caracterizada por su masa m , momento de inercia I , centroide de masa y velocidades. Para un movimiento suave, las ecuaciones del movimiento pueden expresarse como:

$$m\dot{\vec{U}} = \vec{F} + \vec{F}_{ext} \quad (5.11)$$

$$I\dot{\omega} = M + M_{ext} \quad (5.12)$$

donde $\vec{F} = \sum_{\alpha} \vec{f}^{\alpha}$ y $M = \hat{z} \cdot \sum_{\alpha} \vec{c}^{\alpha} \times \vec{f}^{\alpha}$ donde \vec{c}^{α} es el vector que une los centros de masas de las partículas involucradas y M_{ext} representa el momento de las fuerzas externas.

Para un movimiento no suave con resolución de tiempo δ_t las ecuaciones anteriores deben expresarse en su forma integrada como:

$$m d\vec{U} = d\vec{F}' + \vec{F}_{ext} dt \quad (5.13)$$

$$I d\omega = dM' + M_{ext} dt \quad (5.14)$$

Integrando entre t y $t + \delta_t$ se obtiene:

$$m(\vec{U}^+ - \vec{U}^-) = \delta_t \vec{F} + \delta_t \vec{F}_{ext} \quad (5.15)$$

$$I(\omega^+ - \omega^-) = \delta_t M + \delta_t M_{ext} \quad (5.16)$$

En forma matricial se tiene:

$$M(U^+ - U^-) = \delta_t(F + F_{ext}) \quad (5.17)$$

5.2.2 Ecuaciones de Transferencia

A diferencia de la dinámica molecular, las fuerzas de contacto nos son funciones explícitas del estado, por lo cual deben determinarse al mismo tiempo expresando las ecuaciones de la dinámica en las mismas que las leyes de contacto.

Para pasar del sistema F y U al sistema f y u se emplea una aplicación afín a cada una como:

$$u = GU \quad (5.18)$$

$$F = Hf \quad (5.19)$$

donde G es una matriz de $2N_c \times 3N_p$ que contiene la información básica de la geometría de la red de contactos, y H es la transpuesta de G .

La matriz $H^{i\alpha}$ puede descomponerse en dos matrices $H_n^{i\alpha}$ y $H_t^{i\alpha}$ tal que:

$$u_n^\alpha = \sum_i H_n^{T,\alpha i} U^i \quad (5.20)$$

$$u_t^\alpha = \sum_i H_t^{T,\alpha i} U^i \quad (5.21)$$

$$F^i = \sum_\alpha (H_n^{i\alpha} f_n^\alpha + H_t^{i\alpha} f_t^\alpha) \quad (5.22)$$

Mediante estas relaciones, la Ecuación 5.18 puede transformarse en dos ecuaciones para cada contacto α

$$u_n^{\alpha+} - u_n^{\alpha-} = \delta_t \sum_{i,j} H_n^{T,\alpha i} M^{-1,ij} \left\{ \sum_\beta (H_n^{j\beta} f_n^\beta + H_t^{j\beta} f_t^\beta) + F_{ext}^j \right\} \quad (5.23)$$

$$u_t^{\alpha+} - u_t^{\alpha-} = \delta_t \sum_{i,j} H_t^{T,\alpha i} M^{-1,ij} \left\{ \sum_\beta (H_n^{j\beta} f_n^\beta + H_t^{j\beta} f_t^\beta) + F_{ext}^j \right\} \quad (5.24)$$

de forma explícita se tiene:

$$W_{k_1 k_2}^{\alpha\beta} = \sum_{i,j} H_{k_1}^{T,\alpha i} M^{-1,ij} H_{k_2}^{j\beta} \quad (5.25)$$

donde k_1 y k_2 denotan n o t . Con esta notación la Ecuación 5.21 puede reescribirse como:

$$\frac{1 + e_n}{\delta_t} (u_n^\alpha - u_n^{\alpha-}) = W_{nn}^{\alpha\alpha} f_n^\alpha + W_{nt}^{\alpha\alpha} f_t^\alpha + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \left\{ W_{nn}^{\alpha\beta} f_n^\beta + W_{nt}^{\alpha\beta} f_t^\beta \right\} + \sum_{i,j} H_n^{T,\alpha i} M^{-1,ij} F_{ext}^j \quad (5.26)$$

$$\frac{1 + e_t}{\delta_t} (u_t^\alpha - u_t^{\alpha-}) = W_{tn}^{\alpha\alpha} f_n^\alpha + W_{tt}^{\alpha\alpha} f_t^\alpha + \sum_{\beta(\neq\alpha)} \left\{ W_{tn}^{\alpha\beta} f_n^\beta + W_{tt}^{\alpha\beta} f_t^\beta \right\} + \sum_{i,j} H_t^{T,\alpha i} M^{-1,ij} F_{ext}^j \quad (5.27)$$

los coeficientes $W_{k_1 k_2}^{\alpha\alpha}$ para cada contacto α puede calcularse como una función de la geometría del contacto y los parámetros de inercia de las dos componentes 1_α y 2_α del contacto α . Denotando por \vec{c}_i^α al vector que une el centro de masa de la partícula i con el contacto α , puede establecerse:

$$W_{nn}^{\alpha\alpha} = \frac{1}{m_{1_\alpha}} \frac{1}{m_{2_\alpha}} + \frac{(c_{1n}^\alpha)^2}{I_{1_\alpha}} + \frac{(c_{2n}^\alpha)^2}{I_{2_\alpha}}, \quad (5.28)$$

$$W_{tt}^{\alpha\alpha} = \frac{1}{m_{1_\alpha}} \frac{1}{m_{2_\alpha}} + \frac{(c_{1t}^\alpha)^2}{I_{1_\alpha}} + \frac{(c_{2t}^\alpha)^2}{I_{2_\alpha}}, \quad (5.29)$$

$$W_{nt}^{\alpha\alpha} = W_{tn}^{\alpha\alpha} = \frac{c_{1n}^\alpha c_{1t}^\alpha}{I_{1_\alpha}} + \frac{c_{2n}^\alpha c_{2t}^\alpha}{I_{2_\alpha}} \quad (5.30)$$

donde $c_{i_n}^\alpha = \vec{c}_i^\alpha \cdot \vec{n}^\alpha$ y $c_{i_t}^\alpha = \vec{c}_i^\alpha \cdot \vec{t}^\alpha$ son las componentes de los vectores de contacto en el marco de referencia del contacto.

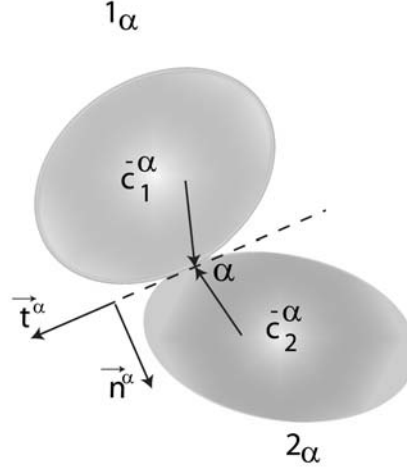


Fig. 5.3: Geometría de un contacto α

Alternativamente, las Ecuaciones 5.26 y 5.27 pueden expresarse como:

$$W_{nn}^{\alpha\alpha} f_n^\alpha + W_{nt}^{\alpha\alpha} f_t^\alpha = (1 + e_n) \frac{1}{\delta_t} u_n^\alpha + a_n^\alpha \quad (5.31)$$

$$W_{tt}^{\alpha\alpha} f_t^\alpha + W_{tn}^{\alpha\alpha} f_n^\alpha = (1 + e_t) \frac{1}{\delta_t} u_t^\alpha + a_t^\alpha \quad (5.32)$$

Donde:

$$a_n^\alpha = b_n^\alpha - (1 + e_n) \frac{1}{\delta_t} u_n^{\alpha-} + \left(\frac{F_{ext}^{\vec{2}\alpha}}{m_{2\alpha}} - \frac{F_{ext}^{\vec{1}\alpha}}{m_{1\alpha}} \right) \cdot \vec{n}^\alpha \quad (5.33)$$

$$a_t^\alpha = b_t^\alpha - (1 + e_t) \frac{1}{\delta_t} u_t^{\alpha-} + \left(\frac{F_{ext}^{\vec{2}\alpha}}{m_{2\alpha}} - \frac{F_{ext}^{\vec{1}\alpha}}{m_{1\alpha}} \right) \cdot \vec{t}^\alpha \quad (5.34)$$

El efecto de la velocidad de aproximación ($u_n^{\alpha-}, u_t^{\alpha-}$) aparece como un impulso dependiendo de la masa reducida y el coeficiente de restitución. el efecto de las fuerzas de contacto f_i^β actuando en las dos partículas en contacto está representado por b_n^α y b_t^α :

$$b_n^\alpha = \frac{1}{m_{2\alpha}} \sum_{\beta(\neq\alpha)} \vec{f}_{2\alpha}^\beta \cdot \vec{n}^\alpha - \frac{1}{m_{1\alpha}} \sum_{\beta(\neq\alpha)} \vec{f}_{1\alpha}^\beta \cdot \vec{n}^\alpha \quad (5.35)$$

$$b_t^\alpha = \frac{1}{m_{2\alpha}} \sum_{\beta(\neq\alpha)} \vec{f}_{2\alpha}^\beta \cdot \vec{t}^\alpha - \frac{1}{m_{1\alpha}} \sum_{\beta(\neq\alpha)} \vec{f}_{1\alpha}^\beta \cdot \vec{t}^\alpha \quad (5.36)$$

Las ecuaciones de transferencia 5.31 y 5.32 definen un sistema lineal de dos ecuaciones entre las variables del contacto de cada contacto. La solución, cuando los valores de a_n y a_t son asumidos, también debe comprobar las relaciones de complementariedad.

Capítulo 6

Simulaciones

6.1 Modelos Constitutivos

Los suelos cementados desde el punto de vista de su comportamiento mecánico se encuentran zona intermedia entre las rocas blandas y los suelos siendo difícil de explicar su comportamiento desde el punto de vista de la mecánica de suelos clásica. Leroueil & Vaughan (1990) han realizado contribuciones importantes resaltando el hecho de que este tipo de suelos presentan un comportamiento similar al de materiales elastoplásticos, los cuales ellos presentan un bien definido punto de fluencia más allá del cual se presentan grandes deformaciones, mientras que en la zona localizada antes de dicho punto son relativamente pequeñas y la mayor parte de ellas son recuperables. Existe una transición desde el comportamiento frágil a dúctil en corte con un incremento en el esfuerzo de confinamiento. Otra observación importante es que la trayectoria de esfuerzos de los suelos cementados converge hacia la trayectoria de esfuerzos del correspondiente estado en un suelo no cementado.

De acuerdo con dichas observaciones, Vatsala (1989), Natgraj et al. (1991), Gens and Nova (1993) y Adachi & Oka (1995), entre otros, llegaron a la conclusión que la modelación del comportamiento de suelos cementados se debe realizar considerando el equivalente de un estado reconstituido.

Gens & Nova (1993) presentaron un trabajo conceptual para la modelación elastoplástica de suelos cementados, en el cual la superficie de fluencia presentaba la misma forma que la de un suelo no cementado pero alargada a fin de considerar la resistencia adicional de los contactos. El parámetro de endurecimiento se consideró mediante dos componentes: el endurecimiento del suelo no cementado y el ablandamiento debido a la degradación de los contactos cementados por deformaciones plásticas. En esta formulación, una ley de fluencia es aplicada al estado de esfuerzos combinados, es decir la resistencia de los contactos y la resistencia del esqueleto mineral.

Lagioia y Nova (1993, 1995) desarrollaron un modelo basado en estos parámetros, el cual se validó con resultados experimentales de un suelo granular grueso.

Oka y Adachi (1985, 1995) desarrollaron un modelo que describe la respuesta de la deformación de ablandamiento de rocas blandas mediante la introducción de del tensor de historia de esfuerzos considerando que la resistencia del material se compone de una parte friccionante y otra cementante o cohesiva. En este modelo, la componente friccionante es considerada como una fracción del esfuerzo total. Las leyes de flujo son consideradas para los esfuerzos combi-

nados.

Vastala et al. (2001) presenta un modelo elastoplástico para suelos cementados considerando su respuesta como la suma de la resistencia del esqueleto mineral y la resistencia del contacto cementado, así como la modelación de los dos componentes por separado. Asimismo, se utiliza el modelo Cam-Clay modificado para la componente no cementada. Una regla de flujo asociada es empleada para ambos componentes.

6.1.1 Modelo Elastoplástico para Suelos Cementados Vastala et al. (2001)

Se ha encontrado que la microfabrica de suelos blandos cementados es muy similar a la de suelos reconstituidos con la misma relación de vacíos. Datos de la distribución del tamaño de los poros presentados por Delage y Lefebvre (1984) y Lapierre et al. (1989), ambos mediante intrusión de mercurio y técnicas de escaneo en microscopio de electrones mostraron curvas de distribución del tamaño de los poros y permeabilidades casi idénticas para suelos inalterados y muestras reconstituidas a la misma relación de vacíos.

Bajo las condiciones anteriores se puede considerar cierta similitud entre la microfabrica de muestras inalteradas y la de muestras reconstituidas, con lo cual se podría afirmar que el comportamiento de un suelo no cementado será similar al de un suelo reconstituido y comprimido a la misma relación de vacíos. De la misma forma, puede hacerse una validación de esto para suelos cementados densos de origen sedimentario, en cuyo caso el esqueleto mineral equivaldría a un estado sobreconsolidado con una adecuada historia de deformaciones. Sin embargo, es difícil hacer este tipo de afirmaciones para suelos residuales. Vaughan (1988) señaló que incluso los suelos residuales, después de la meteorización de la roca madre, tienden a un estado cercano al sobreconsolidado. De esta forma, se puede concluir que un suelo cementado es la suma de el esqueleto mineral a la misma relación de vacíos y microfabrica del suelo cementado y los enlaces cementados en los contactos entre partículas.

Considerando que un suelo cementado bajo incremento de deformación $d\varepsilon$ se somete a ciertos incrementos de esfuerzos tomados por el esqueleto mineral $d\sigma'_R$ en la misma forma que un suelo no cementado, se tiene que la misma relación esfuerzo-deformación de un suelo no cementado debe ser válida para el esqueleto mineral, es decir excluyendo los esfuerzos tomados por los contactos cementados. De esta forma, el comportamiento de un suelo cementado puede obtenerse mediante la adición de esfuerzos del esqueleto mineral de un suelo no cementado y los esfuerzos tomados por los contactos cementados para cada nivel de deformación.

La Figura 6.1 muestra la curva de compresión de una arcilla de Louisville junto con su estado remoldeado y reconstituido (Lapierre et al. 1989), en la cual para cualquier relación de vacíos el máximo esfuerzo que puede soportar el esqueleto mineral es σ_R . El esfuerzo de equilibrio σ en suelos cementados es el exceso de σ_R , σ_B el cual es la contribución de los contactos cementados.

De esta forma se tiene:

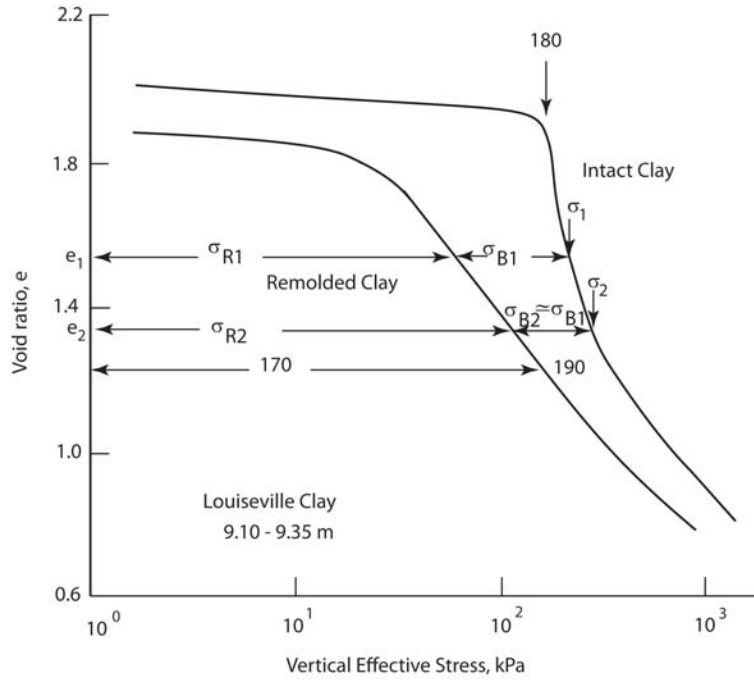


Fig. 6.1: Trayectoria típica de compresión de un suelo cementado balndo (Louisville Clay, Lapierre et al. 1989)

- La resistencia de un suelo cementado puede considerarse la resistencia del esqueleto mineral σ_R ; y la resistencia de los contactos cementados σ_B .
- La respuesta esfuerzo-deformación de la componente no cementada se puede asumir cercana a la misma de un suelo reconstituido a la misma relación de vacíos, los contactos cementados ofrecen una resistencia adicional a cualquier nivel de deformación.

$$\sigma_{ij} = \sigma_{Rij} + \sigma_{Bij} \quad (6.1)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{Rij} = (C_R)_{ijkl} \times \dot{\sigma}_{Rkl} \quad (6.2)$$

La movilización del esfuerzo de enlace σ_{Bij} con la deformación ha sido caracterizada a partir de resultados experimentales, en los cuales se ha observado que los contactos cementados se degradan con una deformación continua. Como los enlaces se rompen, los esfuerzos tomados por estos deben ser transferidos al esqueleto mineral o a la presión de poros, dependiendo las condiciones de drenaje. Cuando los enlaces han sido completamente rotos, el suelo alcanza el mismo estado crítico que para un estado equivalente no cementado.

La Figura 6.2 y la Figura 6.3 muestran esquemáticamente las trayectorias drenadas y no drenadas de suelos cementados junto con con las correspondientes trayectorias para suelos no cementados en los espacios q vs p y e vs $\log p$.

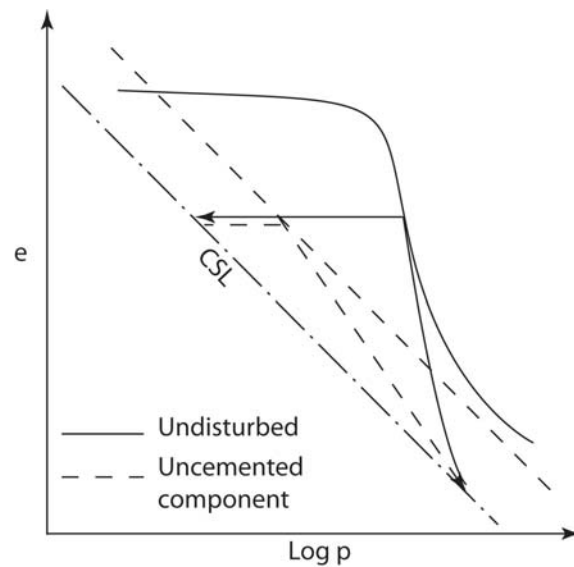


Fig. 6.2: Trayectoria de esfuerzos drenada y no drenada de un suelo cementado y trayectoria de esfuerzos de la componente no cementada en el espacio e vs $\log p$ Vastala et al. (2001)

De acuerdo con lo anterior, el comportamiento de un suelo cementado se resume en modelar separadamente la respuesta de un suelo no cementado y la respuesta de los enlaces, para posteriormente adicionarlos y obtener la respuesta completa. El proceso puede visualizarse como dos rigideces actuando paralelamente (Figura 6.4).

La componente no cementada se consideró mediante el modelo Cam Clay modificado con endurecimiento isotrópico y una ley de flujo asociada al comportamiento elástico dentro del campo de fluencia. El modelamiento de los enlaces se describe a continuación.

En el modelo de Vastala et al. (2001) comportamiento de los contactos cementados se obtuvo del análisis de múltiples resultados de ensayos en suelos cementados. La variación de los esfuerzos de los enlaces p_B con la relación de vacíos e se obtuvo de ensayos de compresión isotrópica. Ensayos de corte no drenado en suelos altamente sensibles (índices de liquidez mayores a 1) a presiones de confinamiento menores a las del esfuerzo de fluencia reflejan de forma directa la resistencia de los contactos cementados en corte, dado que a relaciones de vacíos tan altas la resistencia al corte de la componente no cementada es despreciable.

En la Figura 6.5 y Figura 6.6 se presentan los resultados de ensayos de compresión y corte no drenado respectivamente para arcilla de Osaka. De los datos de compresión puede determinarse el esfuerzo de enlace p_B para cada relación de vacíos e . En la Figura 6.5 se observa como esfuerzo de enlace no decrece con el incremento de esfuerzos, sino que por el contrario se incrementa ligeramente como se observa en la mayoría de los ensayos de suelos reconstituidos. Los ensayos de corte no drenado indican que la resistencia movilizada por el enlace es un valor pico a una deformación baja y gradualmente decrece con el incremento de la deformación (Figura 6.6).

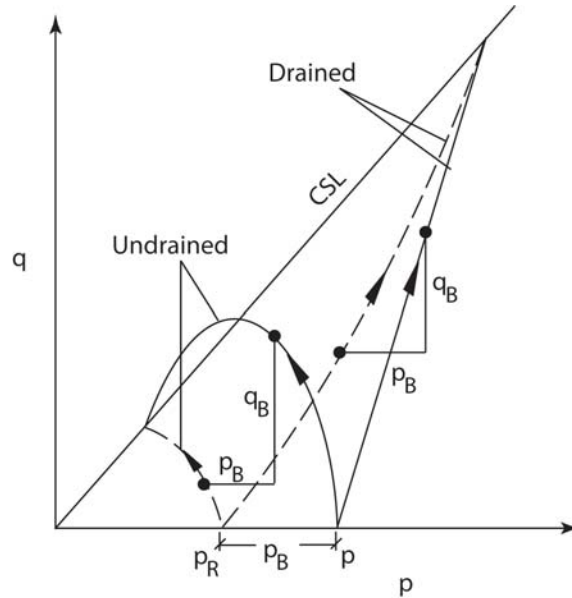


Fig. 6.3: Trayectoria de esfuerzos drenada y no drenada de un suelo cementado y trayectoria de esfuerzos de la componente no cementada en el espacio q vs p Vastala et al. (2001)

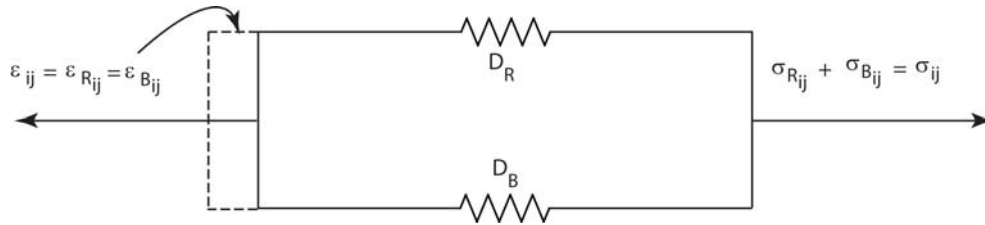


Fig. 6.4: Representación de la acción compuesta de las fuerzas friccionales y de contacto en suelos cementados Vastala et al. (2001)

Los resultados anteriores permiten establecer un comportamiento inelástico de los enlaces (contactos cementados) bajo compresión y corte, por lo cual Vastala et al. (2001) adopta un modelo elastoplástico. Este modelo consiste en una parte inicial simple caracterizada por un comportamiento lineal elástico definido mediante el módulo bulk K_B y el módulo cortante G_B , el cual se adopta hasta el esfuerzo de fluencia, y un modelo elastoplástico para esfuerzos superiores. La curva de fluencia de los enlaces se ajusta a una forma casi rectangular en el plano p - q para obtener una fuerza cortante casi constante para todas las presiones de confinamiento menos la del esfuerzo de fluencia (Figura 6.7), la expresión que la describe se presenta a continuación (6.3):

$$f_B(\sigma_{ij}, h) = (p_B/Ap)^m + (q_B/Ap)^m - N = 0 \tag{6.3}$$

Donde, Ap y Aq son constantes que definen la resistencia inicial a la fluencia de los enlaces en compresión y corte respectivamente. N es el parámetro de endurecimiento según el grado de cementación, el valor de N se toma como 1, correspondiente a la curva de fluencia inicial. El exponente m es una constante matemática (entre más grande sea m , más cercana será la curva

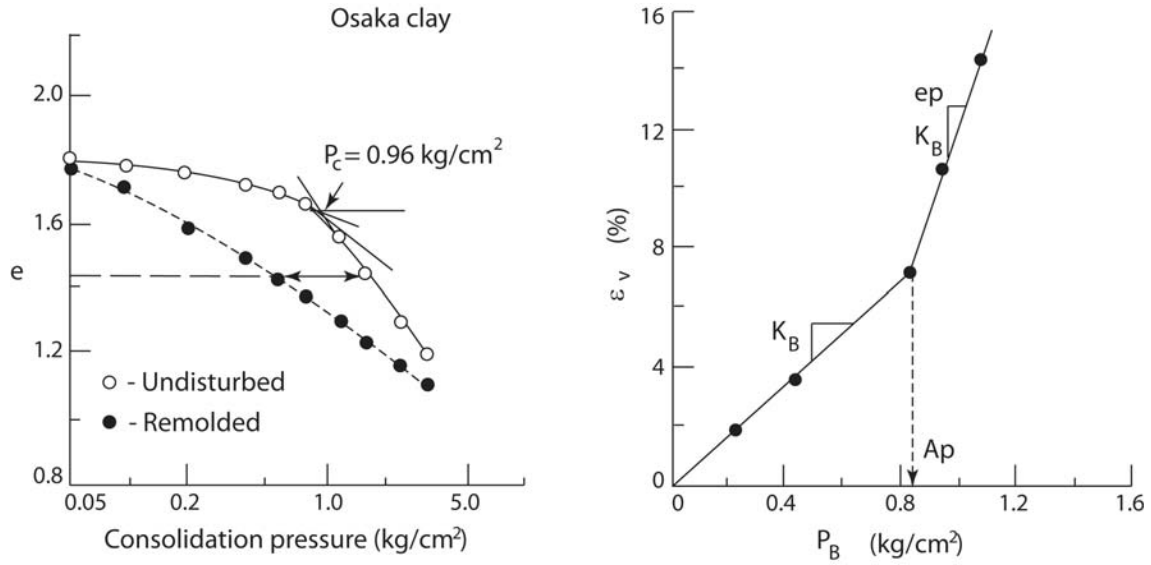


Fig. 6.5: Variación de la resistencia del cementante p_B con la relación de vacíos (Datos de la Arcilla de Osaka, Adachi et al. 1991) Vastala et al. (2001)

a un rectángulo). La expresión empleada para el endurecimiento/ablandamiento se obtiene como:

$$dN = \frac{\partial N}{\partial p_B} \frac{\partial p_B}{\partial \varepsilon_v^p} d\varepsilon_v^p + \frac{\partial N}{\partial q_B} \frac{\partial q_B}{\partial \varepsilon_s^p} d\varepsilon_s^p \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial p_B}{\partial \varepsilon_v^p} = K_B^p; \quad \frac{\partial q_B}{\partial \varepsilon_s^p} = -\alpha q_B \quad (6.5)$$

$$dN = \frac{\partial N}{\partial p_B} K_B^p d\varepsilon_v^p - \alpha \frac{\partial N}{\partial q_B} q_B d\varepsilon_s^p \quad (6.6)$$

El parámetro de ablandamiento α se obtiene por ajuste de resultados para cada suelo. La tasa de deformación plástica se determina por métodos convencionales utilizados en el endurecimiento plástico. La regla de flujo asociada se presenta a continuación:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \Lambda \frac{\partial g_B}{\partial \sigma_{ij}} = \Lambda \frac{\partial f_B}{\partial \sigma_{ij}} \quad (6.7)$$

El valor de Λ puede derivarse usando la condición de consistencia que será:

$$\Lambda = \frac{1}{H} \frac{\partial f_B}{\partial \sigma_{ij}} \dot{\sigma}_{ij} \quad (6.8)$$

Donde:

$$H = \frac{\partial f_B}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial \varepsilon_{ij}^p} \frac{\partial g_B}{\partial \sigma_{kl}} \quad (6.9)$$

La tasa de deformación elástica está dada por:

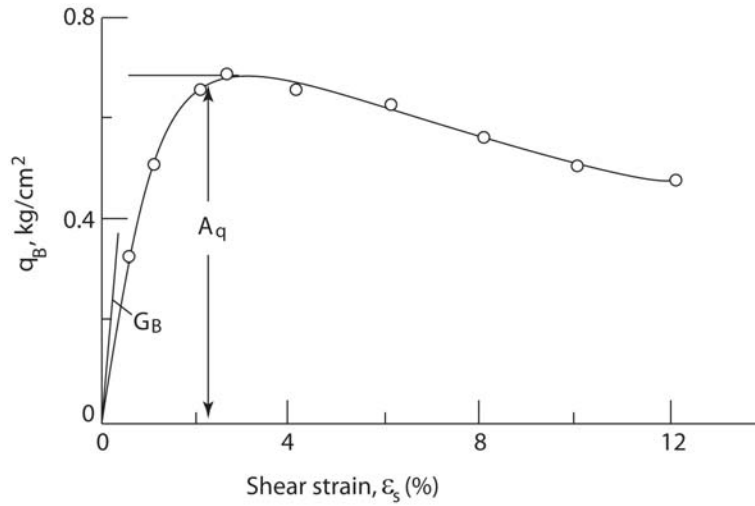


Fig. 6.6: Resistencia del cementante q_B en corte con deformación por corte (Ensayo no drenado en arcilla de Osaka a presión de confinamiento de 0.20 kg/cm^2) Vastala et al. (2001)

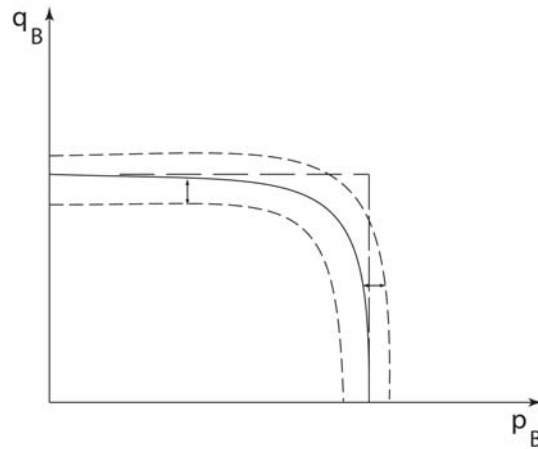


Fig. 6.7: Curva de fluencia para la componente cementada Vastala et al. (2001)

$$\dot{\epsilon}_v^p = \frac{\dot{p}_B}{K_B}$$

;

$$\dot{\epsilon}_{ij}^e = \frac{\dot{S}_{Bij}}{2G_B} \tag{6.10}$$

e_{ij} y S_{Bij} son las componentes de deformación y esfuerzos desviadores respectivamente. Para la componente no cementada, las relaciones de esfuerzo deformación son descritas por el modelo Cam Clay modificado con una regla de flujo asociada a endurecimiento isotrópico.

A partir de las definiciones anteriores pueden obtenerse las matrices de conformidad (C_B) y (C_R) o las matrices de rigidez (D_B) y (D_R) para las dos componentes. Por lo tanto, la matriz completa de rigidez (D) para el suelo puede obtenerse sumando la rigidez de las dos

componentes:

$$(D) = (D_R) + (D_B) \quad (6.11)$$

Las relaciones de esfuerzo deformación para el suelo pueden calcularse incrementalmente, actualizando los esfuerzos, deformaciones y endurecimiento separadamente para las dos componentes en cada paso. El modelo desarrollado es simple y los parámetros de entrada requeridos son mínimos y bien definidos. Los parámetros para la componente no cementada del suelo son los parámetros usuales del Cam Clay (i.e. λ , κ , M , G_R , y la relación de vacíos). Si el suelo in situ se encuentra en estado sobreconsolidado, la presión de preconsolidación p_{CR} correspondiente a la componente no cementada además será conocida. Los parámetros adicionales para la componente cementada son A_p , A_q , K_B , G_B y K_B^p , como se definió anteriormente, los cuales pueden ser fácilmente determinados por un ensayo de compresión isotrópica y un ensayo de corte no drenado en estado inalterado y remoldeado.

El valor de K_B es la pendiente de la parte rígida inicial de la gráfica p_B vs deformación volumétrica, en la región elástica, y A_p es el límite elástico del esfuerzo de contacto. La siguiente recta de la gráfica de la Figura 6.5 muestra el endurecimiento plástico del esfuerzo de enlace. La pendiente de esta gráfica da el valor del módulo elastoplástico, K_B^{ep} . El módulo plástico K_B^p puede obtenerse como:

$$\frac{1}{K_B^{ep}} = \frac{1}{K_B^p} - \frac{1}{K_B^e} \quad (6.12)$$

6.2 Modelación Numérica

Este trabajo presenta una metodología para la fabricación de muestras granulares para la modelación de suelos cementados mediante la dinámica molecular. En estas muestras las partículas son idealizadas mediante polígonos irregulares generados de forma aleatoria e independiente, con la facultad de preestablecer el número de vértices de cada partícula así como la forma de la misma. Dichos polígonos mediante un proceso de escalamiento son ajustados a una curva granulométrica característica de la muestra a modelar y posteriormente son distribuidos en un espacio muestral de forma aleatoria para después ser redistribuidos a fin de alcanzar la condición de porosidad deseada, es decir la construcción de muestras con relaciones de vacíos iniciales predeterminadas. Este espacio muestral es determinado a partir de la relación de vacíos inicial de la muestra y el área de total de las partículas involucradas.

La distribución de las partículas en la muestra se logra mediante el método de enfriamiento o recocido simulado (simulated annealing) el cual es un algoritmo de optimización de búsqueda meta-heurística empleado en problemas clásicos de optimización. Este método consiste en alcanzar una solución adecuada de una función objetivo, la cual se estableció como una suma ponderada de las áreas de solapamiento de las partículas y el número de coordinación promedio.

Puentes de material que conectan las partículas simulan la cementación entre partículas.

Asimismo, la metodología propuesta permite establecer de forma independiente o global la resistencia del cementante entre partículas, en el primer caso dicha resistencia es considerada proporcional al área de solapamiento involucrada en el contacto de las partículas en su configuración inicial.

Suelos provenientes de la descomposición de cenizas volcánicas presentan un comportamiento muy especial, como resultado de las características de su formación y mineralogía. La cementación entre las partículas es la característica más importante de este tipo de suelos, la cual controla su comportamiento mecánico. Estos suelos constituyen la mayor parte del territorio colombiano.

La cementación entre las partículas, ocasionada por procesos físicos y químicos como la descomposición de minerales puede llegar a darle al suelo estructuras bastante especiales como por ejemplo la presencia de macro poros.

Este trabajo presenta una metodología para la fabricación de muestras granulares cementadas para ser empleadas en la modelación micromecánica. La metodología propuesta permite obtener una muestra de tamaño deseado, siguiendo una distribución granulométrica dada, así como una determinada relación de vacíos inicial de la muestra.

La metodología propuesta considera las partículas mediante polígonos de formas irregulares, esto permite tener una mejor aproximación al comportamiento real de materiales granulares. Trabajos como los presentados por Holubec (1973), o más recientes como Peña (2007) entre otros, han proporcionado evidencia experimental y teórica acerca del efecto de la forma de las partículas en el comportamiento de materiales granulares. Holubec (1973) presenta resultados experimentales donde se demuestra que arenas angulares bajo compresión estática presentan una mayor recuperación elástica ante la liberación de la carga que la obtenida con partículas arena equidimensionales. Ensayos realizados en bases granulares para pavimentos asfálticos revelaron que partículas angulares tienen mayores deformaciones elásticas y permanentes bajo condiciones de cargas repetitivas que partículas redondeadas bajo las mismas condiciones. Koerner (1968) sugiere que el ángulo de fricción interna de suelos granulares no cohesivos varía inversamente con la esfericidad y directamente con la angulosidad de las partículas, inversamente con el tamaño efectivo del espécimen de suelo y no muestra cambios apreciables con la uniformidad de la gradación de la muestra.

Asimismo, ensayos realizados en arenas medias a finas, variando la forma de las partículas indican que suelos granulares a la misma densidad relativa pueden tener diferencias drásticas en sus propiedades geomecánicas.

6.2.1 Generación de Partículas

Considerando que la forma de las partículas tiene gran importancia en la respuesta de suelos granulares en este trabajo se propone una metodología alternativa a la teselación de voronoi para la fabricación de muestras granulares mediante polígonos irregulares. Este método permite un mayor control de las características de las partículas durante el proceso de generación. La modelación de las partículas se realiza por medio de polígonos irregulares los cuales se gen-

eran de forma aleatoria con un número de vértices determinado. La metodología propuesta permite obtener partículas de diferentes formas desde alargadas hasta subredondeadas mediante el control de la función aleatoria generadora de los vértices del polígono. El procedimiento em-pleado se resume a continuación:

- Definir el número de vértices
- Definir una función aleatoria rnd
- Calcular la localización de los vértices

$$x_i = \cos(rnd \cdot 2\pi) \quad (6.13)$$

$$y_i = \sin(rnd \cdot 2\pi) \quad (6.14)$$

Donde rnd es un número aleatorio entre 0 y 1, y x_i , y_i son las coordenadas x y y del vértice respectivamente

- Organizar los vértices de acuerdo con la coordenada x de menor a mayor.
- Calcular el ángulo entre vértices respecto al menor valor de x

$$\beta_{i+1} = \tan^{-1} \left(\frac{x_i - x_1}{y_i - y_1} \right) \quad (6.15)$$

- Reorganizar los vértices desde $i + 1$ de acuerdo con el menor valor de β_{i+1}

Los vértices del polígono modelado se generan en un sistema polar de radio unitario y ángulos de aleatorios entre 0 y 2π . Esto permite obtener puntos en el espacio cartesiano, los cuales co-nectados de forma adecuada conforman un polígono irregular. Se consideraron diferentes números de vértices y mediante en-sayos de prueba y error se determinó que partículas con números de vértices iguales o superiores a 5 se presenten una mayor heterogeneidad de las partículas, además de reducir la presencia de formas puntiagudas, hecho que es bastante marcado en polí-gonos de 3 y 4 vértices.

Las muestras generadas mediante esta metodología presentan partículas de diversas formas desde alar-gadas hasta semi-circulares.

6.2.2 Propiedades Geométricas

A fin de poder emplear las partículas ya generadas en la mode-lación micromecánica, es necesario conocer algunas propiedades geométricas de los polígonos; éstas son su área, centro de gravedad, coordenadas extremas (máximos y mínimos) y su inercia. El área de los polígonos se determinó mediante el producto en cruz de las coordenadas de sus vértices, el cual corresponde al determinante de sus vértices expandido por una constante igual a 0.5. En forma

simplicada el área del polígono puede expresarse como se muestra a continuación:

$$A_j = \frac{1}{2} \left| \left\{ \sum_{i=1}^{i=n-1} x_i \cdot y_{i+1} - y_i \cdot x_{i+1} \right\} + x_n \cdot y_1 - y_n \cdot x_1 \right| \quad (6.16)$$

$$\bar{x}_j = \frac{1}{6 \cdot A_j} \sum_{i=1}^{i=n-1} (y_i - y_{i+1}) (x_i^2 + x_i \cdot x_{i+1} + x_{i+1}^2) \quad (6.17)$$

$$\bar{y}_j = \frac{1}{6 \cdot A_j} \sum_{i=1}^{i=n-1} (y_{i+1} - y_i) (y_i^2 + y_i \cdot y_{i+1} + y_{i+1}^2) \quad (6.18)$$

Donde A_j es el área del polígono, y \bar{x}_j, \bar{y}_j definen el centro de gravedad del polígono j .

6.2.3 Caracterización de la Muestra

Una vez que se han generado las partículas y calculado sus propiedades geométricas, es necesario establecer las características que tendrán las muestras a modelar; estas características son: la distribución granulométrica, relación de vacíos inicial, tamaño de la muestra (SS) y espacio muestral (SM). Donde SS corresponde al número total de partículas que conforman la muestra y SM es el lugar geométrico donde se localizaran dichas partículas. La curva de distribución granulométrica de la muestra se determina a partir de seis tamaños característicos de partícula: tamaño máximo, mínimo y los correspondientes al 10 %, 30 %, 60 % and 90 % de partículas de menor tamaño, lo cual permite caracterizar dicha distribución granulométrica mediante los coeficientes de uniformidad Cu y curvatura Cc .

$$Cu = U =: \frac{d_{60}}{d_{10}} \quad (6.19)$$

$$Cc = \frac{d_{30}^2}{d_{60} \cdot d_{10}} \quad (6.20)$$

Donde d_{60} , d_{30} y d_{10} son los tamaños de las partículas que pasan el 60 %, 30 % y el 10 % respectivamente. La curva de distribución granulométrica de la muestra es generada usando el método de Monte Carlo partir de S_s y los diámetros característicos de la granulometría a reconstruir. El tamaño de particular puede obtenerse de por tres diferente metodologías. Por tratarse de polígonos irregulares el tamaño puede considerarse como el diámetro equivalente de la particular para un disco de igual área, o un tamaño correspondiente a un disco que circunscriba la partícula o un disco que se encuentre inscrito en la partícula (Figura 6.8).

En este trabajo se propone trabajar con un tamaño real de partícula el cual se establece teniendo en cuenta la mayor distancia desde cada lado del polígono hasta cada uno de los vértices del mismo; la menor de estas distancias corresponderá con el tamaño de partícula (6.9). Donde V_i denota el vértice i de la partícula j y S_k el lado k de la de la partícula j .

$$\delta_{ki} = \perp S_k V_i \quad (6.21)$$

$$\Delta_j = \min(\max \delta_{ki}) \quad (6.22)$$

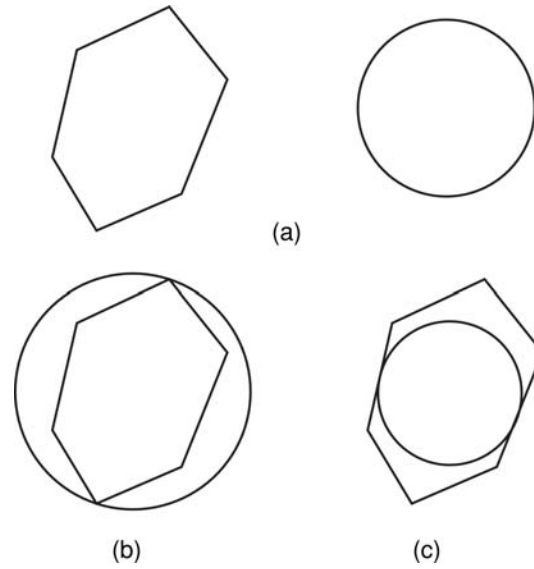


Fig. 6.8: Determinación del tamaño de la partícula. En (a) se observa una partícula de forma circular cuyo área es la misma del polígono, en (b) el tamaño de la partícula es determinado por el disco que la circunscribe y en (c) el tamaño es determinado por disco inscrito. Moreno and Pelaez (2009)

Tamaño	Masa Retenida	Masa Retenida Acumulada	Porcentaje Retenido Acumulado
Δ_1	M_1	$\sum M_j$	$M_t^{-1} \cdot \sum M_j$
Δ_2	M_1		
\vdots	\vdots		
Δ_n	M_n	M_t	100 % height

Tab. 6.1: Datos Ensayo Granulométrico

Donde δ_{ki} es la distancia perpendicular desde el lado k hasta el vértice i y Δ_j es el tamaño característico de la partícula j .

La asignación del número de partículas por rango de tamaño puede estimarse de forma análoga a un ensayo granulométrico como se indica en la Tabla 6.1

De forma análoga la masa retenida puede adoptarse equivalente al área total de partículas con tamaños comprendidos en cada intervalo de valores

$$M_i = \sum A_j \cdot Np_{A_i} \tag{6.23}$$

Donde Np_{A_i} es el número de partículas con área A_j .

La Figura 6.10 muestra una curva granulométrica obtenida mediante la metodología propuesta junto con los datos de laboratorio para $SS = 50$; resultados similares fueron obtenidos para valores de SS mayores.

Como segundo parámetro para la fabricación de las muestras se tiene la relación de vacíos

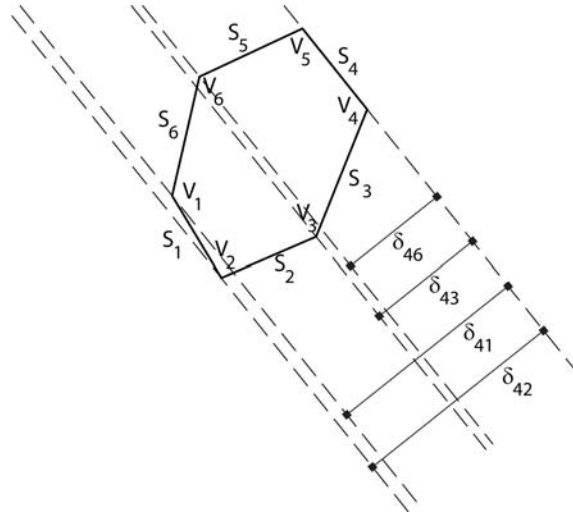


Fig. 6.9: Determinación del tamaño de la partícula. Metodología propuesta

inicial. Este parámetro se determina considerando la definición de relación de vacíos en un marco de referencia bidimensional

$$e_0 \equiv \frac{A_v}{A_s} \quad (6.24)$$

Donde e_0 es la relación de vacíos inicial de la muestra, A_v y A_s son las áreas de vacíos y sólidos respectivamente. Una vez definida la relación de la muestra a simular es posible determinar las dimensiones de la misma, mediante la introducción del parámetro re que representa la relación alto - ancho de la muestra:

$$A_v = A_T - A_s \quad (6.25)$$

$$A_T = b \cdot h \quad (6.26)$$

$$re = \frac{h}{b} \quad (6.27)$$

$$A_T = re \cdot b^2 \quad (6.28)$$

$$e_0 = \frac{A_T - A_s}{A_s} \quad (6.29)$$

$$A_s(e_0 + 1) = re \cdot b^2 \quad (6.30)$$

$$b = \sqrt{\frac{A_s(e_0 + 1)}{re}} \quad (6.31)$$

Donde b , h , A_T son el ancho, altura y área total de la muestra respectivamente.

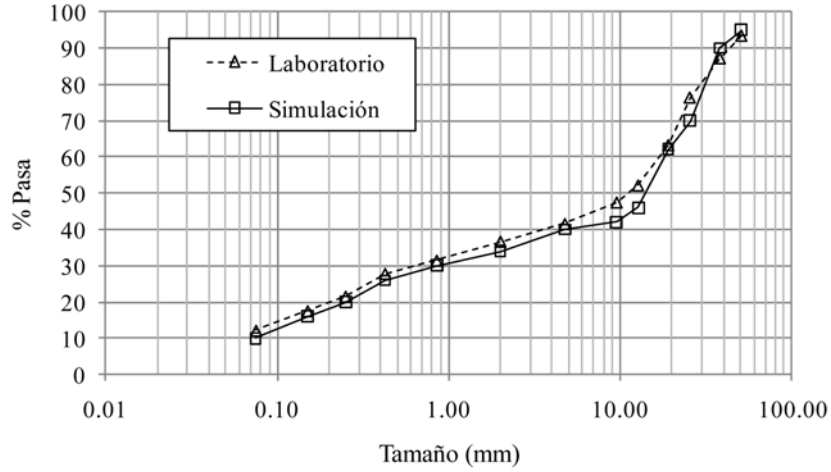


Fig. 6.10: Curva granulométrica generada

6.2.4 Fabricación de la Muestra

Después de generadas las partículas, establecidas las características granulométricas de la muestra y relación de vacíos de la misma, es necesario conectar estos dos procesos, para lo cual se realiza una asignación de partículas a la curva granulométrica y localización inicial de éstas en *SM*. La asignación de polígonos se realiza de acuerdo con la curva granulométrica de la muestra a modelar, para lo cual los polígonos generados aleatoriamente deberán escalarse a los tamaños dados por la Ecuación 6.22

$$S_{f_j} = \frac{\Delta_n}{\Delta_j} \quad (6.32)$$

$$x'_{ij} = S_{f_j} (x_{ij}^2 + y_{ij}^2)^{1/2} \cos \left(\arctan \left(\frac{y_{ij}}{x_{ij}} \right) \right) \quad (6.33)$$

$$y'_{ij} = S_{f_j} (x_{ij}^2 + y_{ij}^2)^{1/2} \sin \left(\arctan \left(\frac{x_{ij}}{y_{ij}} \right) \right) \quad (6.34)$$

Donde x_{ij} , y_{ij} son las coordenadas del vértice i de la partícula j antes de ser escalada; y x'_{ij} , y'_{ij} son las coordenadas después del escalamiento. S_{f_j} es el factor de escala para la partícula j .

La localización de la partículas se realiza mediante el método de enfriamiento o recocido simulado (simulated annealing, SA) descrito en detalle en el Capítulo 4, el cual emplea un modelo de búsqueda metaheurística para resolver problemas de optimización global de un función objetivo en un espacio de búsqueda grande. El método consiste en determinar para cada iteración las condiciones de vecindad, en este caso áreas de solapamiento y número de coordinación promedio, y probabilísticamente se decide entre cambiar al siguiente estado o permanecer en la forma actual. El método emplea la función de probabilidad de Boltzman, (Georgalli and Reuter (2008))

$$P(E) \approx \exp\left(\frac{-E}{k \cdot T}\right) \quad (6.35)$$

$$P = \exp\left[\frac{-(E_2 - E_1)}{k \cdot T}\right] \quad (6.36)$$

donde P es la probabilidad de Boltzman, E la energía de enfriamiento simulada, k la constante de Boltzman, T la temperatura de enfriamiento simulada E_1 la energía del sistema en sus estado anterior y E_2 la energía del sistema en sus estado actual.

La función objetivo se compone de dos funciones que describen la desviación del número de coordinación objetivo y la magnitud admisible de solapamiento de las partículas.

$$\Delta E = \beta \cdot \Delta E_{OV} + (1 - \beta)\Delta E_{CN} \quad (6.37)$$

ΔE es el cambio de energía de un estado a otro, β es un factor de ponderación y son los cambios en la función objetivo respecto al solapamiento y al número de coordinación promedio respectivamente. A partir de la configuración inicial de partículas empieza la relajación mediante movimientos determinados por una constante ς .

$$x_{ij}^r = \bar{x}_j^{r-1} + \varsigma \frac{\Delta_j}{2} (2 \cdot rnd - 1) \quad (6.38)$$

$$y_{ij}^r = \bar{y}_j^{r-1} + \varsigma \frac{\Delta_j}{2} (2 \cdot rnd - 1) \quad (6.39)$$

x_{ij}^r y y_{ij}^r son los desplazamientos en dirección x y y respectivamente del vértice i de la partícula j en la iteración r , \bar{x}_j^{r-1} y \bar{y}_j^{r-1} son las coordenadas del centroide de la partícula j en la iteración $r - 1$ y Δ_j es el tamaño de la partícula j .

6.2.5 Cementación entre las Partículas

La cementación entre las partículas se estableció de forma proporcional al área de solapamiento de las partículas y longitud de la superficie donde ocurre el contacto, para lo cual se consideraron leyes de resistencia en la dirección normal y tangencial (Figura 6.11)

$$F_N \propto A_{OV} \quad (6.40)$$

$$F_T \propto L_C \quad (6.41)$$

F_N , F_T son las fuerzas resistentes por el contacto en la dirección normal y tangencial respectivamente, A_{OV} es el área de solapamiento y L_C es la longitud del contacto.

En La Figura 6.12 a modo de ejemplo se ilustra un sistema cuatro partículas en contacto cuyas áreas de solapamiento y longitudes de contacto permiten establecer una ley de resistencia

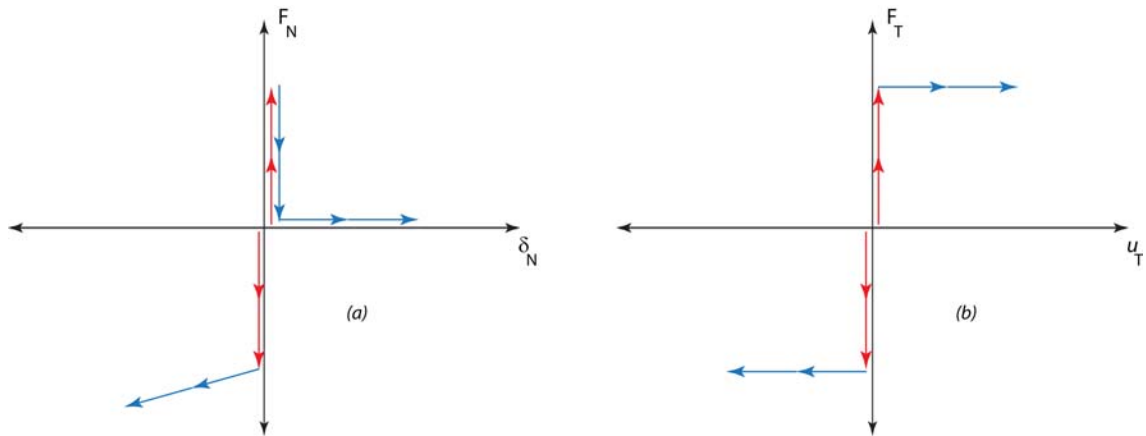


Fig. 6.11: Leyes de resistencia contactos cementados. (a) Resistencia en la dirección normal, (b) Resistencia en la dirección tangencial

independiente para cada contacto.

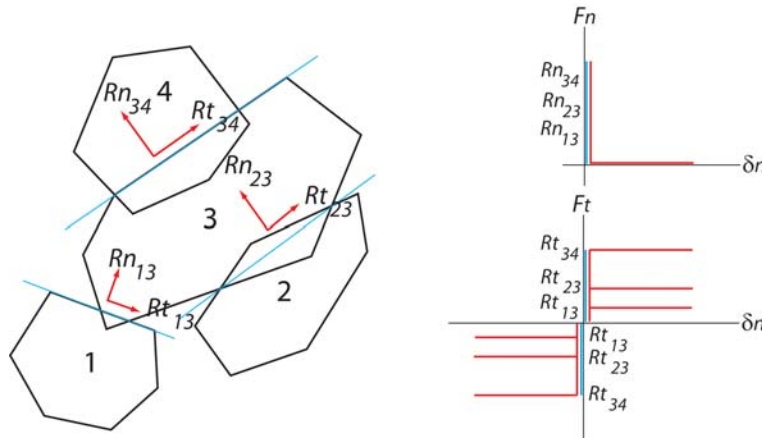


Fig. 6.12: Sistema de varias partículas, contactos con diferentes resistencias

6.2.6 Dinámica Molecular

Después de haber construido la muestra con las características deseadas, relación de vacíos inicial y gradación específica para un determinado número de partículas, se procede a determinar la interacción entre partículas y la respuesta de la muestra sometida ante diferentes sollicitaciones.

El método de la dinámica molecular (MD) se empleó para determinar dicha interacción. Este método consiste en integrar las ecuaciones del movimiento de Newton para un sistema de partículas que inician en una configuración inicial.

Las partículas representadas mediante polígonos irregulares no pueden romperse ni deformarse, pero pueden sobrelaparse cuando se empujan unas contra otras; este sobrelapamiento re-presenta la deformación local de las partículas.

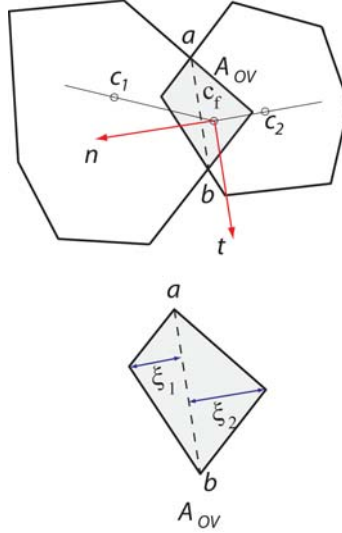


Fig. 6.13: Representación esquemática del contacto entre partículas

El punto de aplicación de las fuerzas se localiza en el centro de gravedad del área de sobrelapamiento, y la magnitud de dichas fuerzas es calculada mediante la teoría de Hertz como:

$$F_N = \bar{k}_n (\xi_1 + \xi_2)^{3/2} \hat{n} + \gamma_n (\dot{\xi}_2 - \dot{\xi}_1) \quad (6.42)$$

$$\bar{k}_n = \frac{4}{3} \sqrt{R_{eff}} \cdot E_{eff} \quad (6.43)$$

$$R_{eff} = \frac{R_1 \cdot R_2}{r_1 + R_2} \quad (6.44)$$

$$\frac{1}{E_{eff}} = \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \quad (6.45)$$

$$F_N = \bar{k}_n \cdot \xi^{3/2} \quad (6.46)$$

$$F_t = \mu |F_N| \frac{v_t}{|v_t|} \quad (6.47)$$

donde F_n es la fuerza normal, F_t es la fuerza tangencial, R_{eff} y E_{eff} son el radio y módulo efectivo respectivamente, es la interpenetración entre partículas, v_t es la velocidad tangencial entre las mismas y E_i , ν_i son el módulo de elasticidad y la relación de poisson de la partícula i . El cálculo de las variables traslacionales se realizó por el método de integración Leap-Frog, el cual se seleccionó considerando su precisión y su bajo costo computacional.

6.2.7 Identificación de Contactos

Para poder identificar las partículas que se encuentran en contacto y establecer las condiciones de vecindad de la muestra antes y durante las simulaciones se estudiaron varias metodologías, las cuales se describen a continuación:

- *Algoritmo de Jordan:* Esta metodología consiste en establecer el número de lados de un mismo polígono que son interceptados por una línea horizontal proyectada desde el vértice de análisis punto de análisis hacia su derecha o izquierda de acuerdo con su posición relativa al polígono de análisis.

$$\begin{cases} N_i^+ = 1, 3, 5, \dots & \text{punto interno} \\ N_i^- = 1, 3, 5, \dots & \text{punto interno} \\ N_i^+ = 2, 4, 6, \dots & \text{punto externo} \\ N_i^- = 2, 4, 6, \dots & \text{punto externo} \end{cases} \quad (6.48)$$

donde N_i^+ y N_i^- son el número de interceptos hacia la derecha y hacia la izquierda respectivamente. Si N_i^+ o N_i^- son pares el punto de proyección se encuentra por fuera del polígono analizado y por lo tanto no hay contacto entre las partículas. Si N_i^+ o N_i^- son impares el punto de proyección se encuentra dentro del polígono analizado y por lo tanto hay contacto entre las partículas.

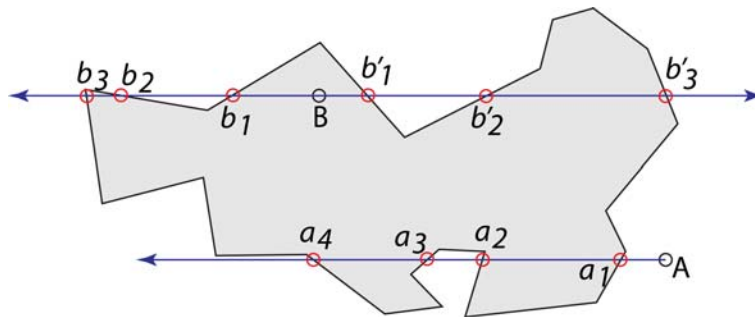


Fig. 6.14: Ejemplo del algoritmo de Jordan para detección de contactos

- *Algoritmo Radial:* Este método que responde al análisis de la expresión $\sum \Delta\sigma_i$, donde $\Delta\sigma_i$ equivale a la diferencia de ángulos entre dos radios consecutivos Figura 6.15

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \Delta\sigma_i = 360 & \text{punto interno} \\ \sum_{i=1}^n \Delta\sigma_i \neq 360 & \text{punto externo} \end{cases} \quad (6.49)$$

- *Algoritmo de Nezami:* El método de Nezami o método del plano común consiste en establecer un plano común (CP) a las dos partículas analizadas, el cual se encuentra

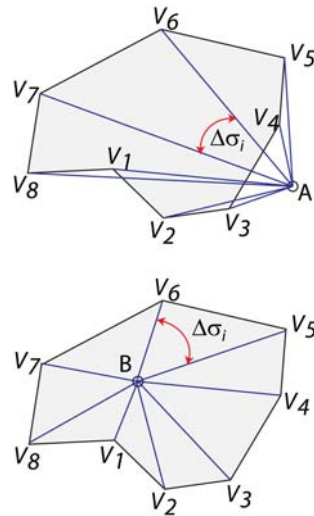


Fig. 6.15: Algoritmo radial

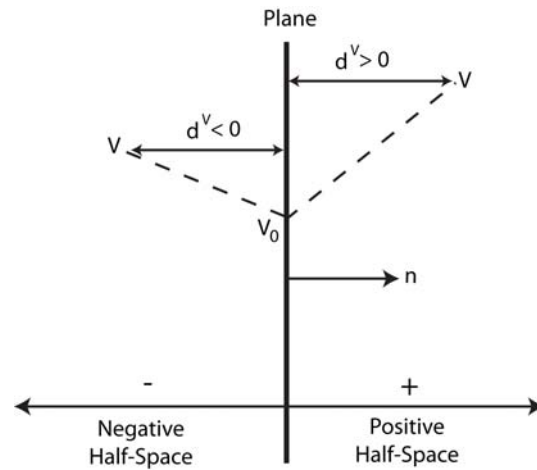


Fig. 6.16: definición de distancias y convención de signos de un punto a un plano. Nezami et al. (2004)

definido por un vector normal \hat{n} y un punto cualquiera V_0 , Figura 6.16. Para cualquier punto V en el espacio, la distancia d^V desde ese punto a un plano arbitrario se encuentra definida como:

$$d^V = \hat{n} \cdot (V_0 - V) \tag{6.50}$$

donde \hat{n} es el vector normal al plano y V_0 un punto localizado sobre dicho plano.

Para cualquier partícula A , la distancia d_A de la partícula a cualquier plano en el espacio está definido como:

$$d_A = \left\{ \begin{array}{ll} \text{máx} (d_A^V) & \text{si } d_A^C < 0 \\ \text{mín} (d_A^V) & \text{si } d_A^C > 0 \end{array} \right\} \tag{6.51}$$

donde d_A^V es la distancia del vértice V de la partícula al plano; máx y mín son los valores máximo y mínimo de todos los vértices de la partícula. d_A^C es la distancia del centroide de la partícula al plano. Si la cara de la partícula es paralela al plano entonces más de un vértice puede definir la distancia $d_A \cdot d_A^C = 0$, caso que no es de interés dado que CP nunca pasara por el centroide de la partícula.

Para dos partículas cualquiera A y B , CP es el plano que cumple con las siguientes condiciones:

Condición 1: Los centroides de las partículas A y B están localizados a lados opuestos de CP.

Condición 2: El espacio definido como $d_B - d_A$, es un máximo.

Condición 3: $d_A = -d_B$. d_A y d_B son las distancias de las partículas A y B .

La condición 1 garantiza que CP se encuentra entre las dos partículas, el espacio $d_B - d_A$ es una función de dirección de \hat{n} del CP y es independiente de la localización del plano en el espacio. Consecuentemente, la condición 2 identifica la dirección de \hat{n} maximizando el espacio. La condición 3 especifica la localización de CP. Para partículas separadas este espacio siempre será positivo ($d_A < 0$ y $d_B > 0$), mientras que para partículas en contacto el espacio es negativo ($d_A > 0$ y $d_B < 0$).

Para cualquier $d_B - d_A > TOL$, donde TOL es una pequeña tolerancia positiva, entonces las partículas son tratadas como no en contacto y no se desarrollara CP. Un contacto potencial es un contacto para el cual $0 < d_B - d_A < TOL$ y las partículas podrán desarrollar un contacto en los siguientes pasos.

Para el presente trabajo se optó por el algoritmo radial para la identificación de los contactos por su fácil programación e implementación.

6.3 Implementación del Modelo

Una vez establecidas cada una de las características del modelo a emplear y los algoritmos y métodos de cálculo para cada etapa de la simulación, se procedió a la elaboración del algoritmo de cálculo el cual se desarrolló en lenguaje Visual Basic y se presenta en el Apéndice 7. Este algoritmo se estructuró en tres etapas básicas:

- Generación de partículas formadas por polígonos irregulares que se ajusten a la curva granulométrica deseada. Se empleó el método de Monte Carlo.
- Definición del espacio muestral (SM) a partir de la relación de vacíos deseada e_0 y localización aleatoria de las partículas en dicho espacio condición T_0 .
- Relocalización de las partículas dentro de SM mediante el algoritmo de Simulated Annealing para alcanzar T_f correspondiente a la relación de vacíos deseada e_0 .

- Simulación de la interacción entre las partículas y suentorno mediante la metodología de la dinámica molecular de partículas blandas.

6.3.1 Validación del Modelo

En primer lugar, se realizó la validación de la metodología para la generación de partículas con granulometría dada; para tal fin se consideraron varias muestras de suelos granulares y mediante los valores d_{10} , d_{30} , d_{60} y d_{90} se generaron las muestras para tamaños de 100, 500, 1000 y 5000 partículas obteniéndose resultados similares.

A continuación se presentan los resultados obtenidos para cada una de las muestras simuladas:

Tamiz	Diámetro (mm)	Peso Retenido (gr)	%Retenido	% Pasa
2"	50.80	249.50	6.66	93.34
1 1/2"	38.10	232.60	6.21	87.13
1"	25.40	404.20	10.79	76.34
3/4"	19.05	490.40	13.09	63.25
1/2"	12.70	416.20	11.11	52.14
3/8"	9.53	175.70	4.69	47.45
4	4.75	221.40	5.91	41.54
10	2.00	183.20	4.89	36.65
20	0.85	195.60	5.22	31.43
40	0.43	135.20	3.61	27.82
60	0.25	236.00	6.30	21.52
100	0.15	149.80	4.00	17.52
200	0.08	201.50	5.38	12.14
Fondo	0.00	454.90	12.14	0.00

Tab. 6.2: Muestra 1. Clasificación USC: GC, Prof: 0.20-1.00 m, localización: Transversal 45 No. 40-11 Bogotá. Número de partículas 500. Fuente: Soitech S.A.

Adicionalmente se determinarn los coeficientes de uniformidad y curvatura para cada una de las muestras Tabla 6.5, teniendose que el método presenta buenos resultados pra un amplio rango de valores.

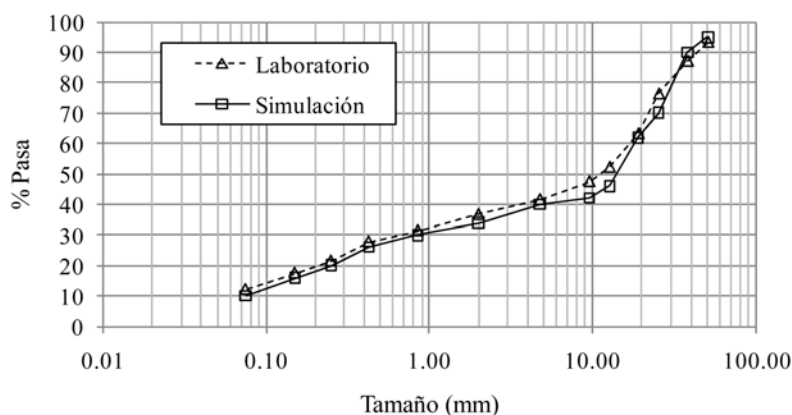


Fig. 6.17: Curva granulométrica muestra 1. Con línea discontinua se presentan los datos de obtenidos en el laboratorio, la línea continua corresponde a los resultados de las lodelaciones.

Tamiz	Diámetro (mm)	Peso Retenido (gr)	%Retenido	% Pasa
3/4"	19.05	138.00	7.76	92.24
1/2"	12.70	108.20	6.09	86.15
3/8"	9.53	100.00	5.63	80.52
4	4.75	92.20	5.19	75.34
10	2.00	89.20	5.02	70.32
20	0.85	134.00	7.54	62.78
40	0.43	115.00	6.47	56.31
60	0.25	221.00	12.43	43.88
100	0.15	63.00	3.54	40.33
200	0.08	58.50	3.29	37.04
Fondo	0.00	658.40	37.04	0.00

Tab. 6.3: Muestra 2. Clasificación USC: SC, Prof: 0.20-0.60 m, localización: Transversal 45 No. 40-11 Bogotá. Número de partículas 1000. Fuente: Soitech S.A.

Tamiz	Diámetro (mm)	Peso Retenido (gr)	%Retenido	% Pasa
3/8"	9.53	14.20	4.37	95.63
4	4.75	26.20	8.06	87.58
10	2.00	29.20	8.98	78.60
20	0.85	38.20	11.75	66.85
40	0.43	40.20	12.36	54.49
60	0.25	19.20	5.90	48.59
100	0.15	11.20	3.44	45.14
200	0.08	19.20	5.90	39.24
Fondo	0.00	127.60	39.24	0.00

Tab. 6.4: Muestra 3. Clasificación USC: SC, Prof: 1.20-2.00 m, localización: Isla de Providencia. Número de partículas 5000. Fuente: Soitech S.A.

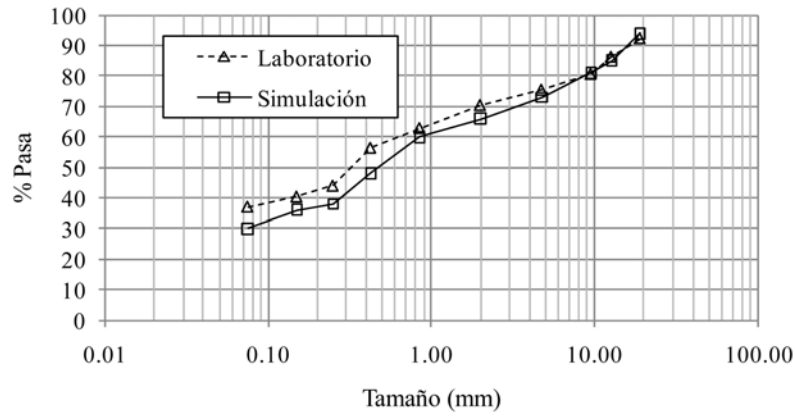


Fig. 6.18: Curva granulométrica muestra 2. Con línea discontinua se presentan los datos de obtenidos en el laboratorio, la línea continua corresponde a los resultados de las lodelaciones.

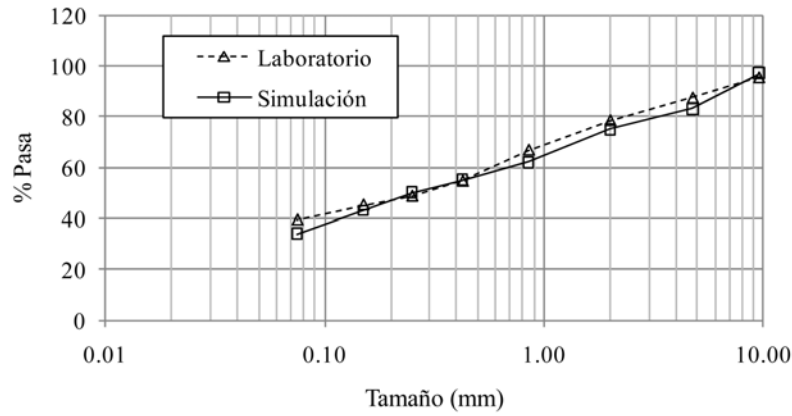


Fig. 6.19: Curva granulométrica muestra 3. Con línea discontinua se presentan los datos de obtenidos en el laboratorio, la línea continua corresponde a los resultados de las lodelaciones.

Muestra	Cu	Cc
1	278.35	0.44
2	32.96	0.27
3	32.15	0.28

Tab. 6.5: Coeficientes de uniformidad y curvatura de las muestras simuladas

Capítulo 7

Conclusiones

- La generación de muestras de granulares mediante polígonos irregulares considerando la distribución granulométrica y relación de vacíos inicial permite simular computacionalmente muestras más cercanas a la realidad.
- Mediante el empleo del modelo propuesto y el algoritmo SA se logra llegar a una muestra con características determinadas en tiempos de modelación relativamente cortos.
- Los parámetros y constantes empleados en la formulación del método deben seleccionarse de forma adecuada para evitar problemas de desbordamiento.
- La metodología propuesta permite simular partículas de forma irregular sin los problemas que acarrea otros métodos como la teselación de Voronoi, además que permite tener un mayor control sobre las características de las partículas a simular.
- La formulación de contactos cementados mediante leyes de resistencia de cementante permite simular muestras con zonas de débiles preestablecidas.

APÉNDICE

```

'*****
'Función que escala un polígono de acuerdo con un factor de escala fs
'*****
Function escalar2(pol1() As Double, sf As Double) As Double()

Dim r1(6, 1) As Double
Dim alfa1(6, 1) As Double
Dim centre() As Double
Dim sx As Double
Dim sy As Double

Dim i As Integer

centre = centroide(pol1)

For i = 1 To 6
  'sx = pol1(i, 1) / Abs(pol1(i, 1))
  'sy = pol1(i, 2) / Abs(pol1(i, 2))
  pol1(i, 1) = pol1(i, 1) + 99
  pol1(i, 2) = pol1(i, 2) + 99
  r1(i, 1) = (pol1(i, 1) ^ 2 + pol1(i, 2) ^ 2) ^ 0.5
  alfa1(i, 1) = Atn(pol1(i, 2) / pol1(i, 1))
  pol1(i, 1) = sf * r1(i, 1) * Cos(alfa1(i, 1)) ' * sx
  pol1(i, 2) = sf * r1(i, 1) * Sin(alfa1(i, 1)) ' * sy
Next
pol1(7, 1) = pol1(1, 1)
pol1(7, 2) = pol1(1, 2)

escalar2 = pol1

End Function

'*****
'Función que genera una matriz de np filas por ncel columnas localizando
'cada partícula en su respectiva casilla ncel
'*****
Public Function celdas(nx, ny, np, a() As Double, b() As Double, _
c() As Double, d() As Double) As Double()
Dim i, j, k, nc, cont, counter As Integer
Dim grupo() As Double
nc = nx * ny
counter = 0
inicio:
cont = 1
counter = counter + 1
ReDim grupo(np, nc)
For i = 1 To nx

```

```

For j = 1 To ny
For k = 1 To np
If a(k, 1) = i Then
If a(k, 2) = j Then
grupo(k, cont) = k
End If
End If
Next
cont = cont + 1
Next
Next
If counter = 1 Then
a = b
GoTo inicio
End If
If counter = 2 Then
a = c
GoTo inicio
End If
If counter = 3 Then
a = d
GoTo inicio
End If
celdas = grupo
End Function

'*****
'se determina a que subcelda pertenece el poligono considerando un punto
'extremo
'*****
Public Function belong(px, py, ax() As Double, ay() As Double, nx, ny) _
As Double()
'px, py: coordenadas del punto de análisis.
'ax(): limites celdas en x, ay(): limites celdas en y
'nx, ny: número de celdas en x ^ y
Dim i, col, fila As Integer
Dim pert() As Double
ReDim pert(1, 2)
For i = 1 To nx
If px <= ax(i + 1, 1) Then GoTo xok
Next
xok:
col = i
For i = 1 To ny
If py <= ay(i + 1, 1) Then GoTo yok
Next
yok:

```

```

fila = i
pert(1, 1) = col
pert(1, 2) = fila
belong = pert
End Function

'*****
'función que determina el tamaño máximo de una partícula que puede pasar
' por un tamiz
'*****
Public Function size(a() As Double) As Double

Dim i, j, n As Integer
Dim b() As Double
Dim d1, d2 As Double

n = UBound(a)

ReDim b(n - 1, 2)

For i = 1 To n - 1
    b(i, 1) = (a(i + 1, 2) - a(i, 2)) / (a(i + 1, 1) - a(i, 1))
    b(i, 2) = a(i, 2) - b(i, 1) * a(i, 1)
Next

d2 = 0

For i = 1 To n - 1
    For j = 1 To n - 1
        If i = j Then
            d1 = 0
        Else
            d1 = Abs(b(i, 1) * a(j, 1) - a(j, 2) + b(i, 2)) / ((b(i, 1) ^ 2 + 1) ^ 0.5)
        End If
        If d1 > d2 Then
            d2 = d1
        End If
    Next
Next

size = d2

End Function

'*****
'Función que crea un polígono con un número de vértices dado
'*****

```

```

Function polygon(n As Double) As Double()

Dim pol() As Double

Const pii = 3.14159265358979

ReDim pol(n + 1, 3)

For i = 1 To n
    Randomize
    alfa = 2 * pii * Rnd
    pol(i, 1) = Cos(alfa)
    pol(i, 2) = Sin(alfa)
Next

pol = Ordenar(pol, 1, 1)

For i = 2 To n
    pol(i, 3) = Atn((pol(i, 2) - pol(1, 2)) / (pol(i, 1) - pol(1, 1)))
Next

pol = Ordenar(pol, 3, 2)
pol(n + 1, 1) = pol(1, 1)
pol(n + 1, 2) = pol(1, 2)

polygon = pol

End Function

'*****
'Función para establecer las combinaciones de partículas posibles por celda
'La función recibe un vector a() que contiene el número de las partículas a
'analizar y determina el número de combinaciones probables entre ellas
'*****
Public Function combinar(a() As Double) As Double()
Dim c, d, cont As Integer
Dim b() As Double
c = UBound(a)
d = (c - 1) * c / 2
ReDim b(d, 2)
For i = 1 To c - 1
For j = i + 1 To c
cont = cont + 1
b(cont, 1) = a(i, 1)
b(cont, 2) = a(j, 1)
Next
Next

```

```

combinar = b
End Function

'*****
'Función para calcular el ArcCoseno de un ángulo en radianes
'*****
Public Function ArcoCos(angulo) As Double
Dim i As Integer
Dim a1, a2, b1, b2, sum, sum1, er As Double
Const pii = 3.14159265358979
a2 = 1
sum = 0
sum1 = 1
'er = 100
'While er > 0.001
For i = 2 To 1000
a1 = (2 * i - 3) / (2 * i - 2)
b1 = (angulo ^ (2 * i - 1)) / (2 * i - 1)
b2 = a1 * b1 * a2
a2 = a2 * a1
sum = sum + b2
er = Abs(1 - (sum1 / sum)) * 100
sum1 = sum
Next
'Wend
ArcoCos = (pii / 2) - angulo - sum
End Function

'*****
'determina los vertices internos de un poligono en otro, mediante
'el empleo del producto punto, y calculando el ángulo entre cada
'uno de los vertices de los dos poligonos. Si la suma de los
'ángulos es de 360, entonces el punto es interno.
'*****
Public Function vertex(a() As Double, b() As Double) As Double()
Dim ab, ac, bc, m, alfa, axb, sum, x1, x2, y1, y2 As Double
Dim i, j, k, count As Integer
Dim c1() As Double
Dim inside() As Double
Dim inside2() As Double
Const pii = 3.14159265358979
sum = 0
count = 0
k = 1
ReDim inside(6, 2)
ReDim inside2(6, 2)
GoTo inicia

```

```

a_over_b:
count = 1
k = 2
ReDim c(7, 2)
'cambio el orden de las matrices para verificar el contacto de b sobre a
c1 = a
a = b
b = c1
inicia:
For j = 1 To 6
sum = 0
  For i = 1 To 6
    x1 = b(i, 1) - a(j, 1)
    y1 = b(i, 2) - a(j, 2)
    x2 = b(i + 1, 1) - a(j, 1)
    y2 = b(i + 1, 2) - a(j, 2)
    ab = ((x1 ^ 2) + (y1 ^ 2)) ^ 0.5 ' magnitud del primer vector
    ac = ((x2 ^ 2) + (y2 ^ 2)) ^ 0.5 ' magnitud del segundo vector
    bc = (x1 * x2) + (y1 * y2) ' producto punto
    m = bc / (ab * ac)
    alfa = ArcoCos(m) ' ángulo entre los dos vectores
    alfa = alfa * 180 / pii ' ángulo en grados
    axb = x1 * y2 - y1 * x2 ' producto cruz
    If axb < 0 Then
      alfa = -alfa
    End If
    ActiveCell = alfa
    ActiveCell.Offset(1, 0).Select
    sum = sum + Abs(alfa) ' ángulo acumulado
  Next
  ActiveCell.Offset(-6, 3).Select
  If sum > (0.995 * 360) And sum < (1.005 * 360) Then
    inside(j, k) = j
    inside2(j, k) = 1
  End If
  sum = 0
Next
sum = 0
If count = 1 Then GoTo fin
If count = 0 Then GoTo a_over_b:
fin:
For i = 1 To 6
If Not inside(i, 1) = 0 Then
sum = sum + 1
End If
If Not inside(i, 2) = 0 Then
sum = sum + 1

```

```

End If
Next
vertex = inside
End Function

'*****
'función que devuelve la arcotangente de un número en grados
'*****
Public Function arctan(a) As Double
Dim i As Integer
Const pii = 3.14159265358979
arctan = 0
For i = 0 To 10
arctan = arctan + ((-1) ^ i) * (a ^ (2 * i + 1)) / (2 * i + 1)
Next
arctan = arctan * 180 / pii
End Function

'*****
'Función para calcular el área de un polígono
'*****
Public Function AreaPol(a() As Double) As Double
Dim i, n As Integer
Dim area, sum As Double
area = 0
sum = 0
n = UBound(a)
For i = 1 To n - 1
sum = (a(i, 1) * a(i + 1, 2)) - (a(i, 2) * a(i + 1, 1))
area = sum + area
Next
area = 0.5 * Abs(area)
AreaPol = area
End Function

'*****
'Función que ordena de menor a mayor una matriz de tres columnas
'*****
Public Function Ordenar(a() As Double, n As Integer, m As Integer) _
As Double()
'n columna por la cual se quiere ordenar
'm fila a partir de la cual se va a ordenar
Dim b() As Double
Dim i, j As Integer

j = UBound(a)

```



```

ReDim b(j, 3)

b = a
inicio:

For i = m To 6 - 1
    If a(i, n) > a(i + 1, n) Then
        a(i, 1) = a(i + 1, 1)
        a(i + 1, 1) = b(i, 1)
        a(i, 2) = a(i + 1, 2)
        a(i + 1, 2) = b(i, 2)
        a(i, 3) = a(i + 1, 3)
        a(i + 1, 3) = b(i, 3)
        b = a
        GoTo inicio:
    End If
Next

For i = 1 To 3
    a(j, i) = a(1, i)
Next

Ordenar = a

End Function

'*****
'Función que determina el valor máximo de un vector de datos
'*****
Public Function maxs(a() As Double, c As Double) As Double
'c columna de la cual quiero determinar el máximo
Dim b As Double
b = UBound(a, 1) 'me devuelve el número de filas de una matriz
Dim max As Double
max = a(1, c)
For i = 2 To b
    If a(i, c) > max Then
        max = a(i, c)
    End If
Next
maxs = max
End Function

'*****
'Función que determina el valor mínimo de un vector de datos
'*****
Public Function mins(a() As Double, c As Double) As Double

```

```

Dim b As Double
b = UBound(a, 1)
Dim min As Double
min = a(1, c)
For i = 2 To b
If a(i, c) < min Then
min = a(i, c)
End If
Next
mins = min
End Function

'*****
'Función que permite escalar un polígono dado un factor de escala "c"
'*****
Public Function escalar(a() As Double, c As Double) As Double()
Dim b() As Double
Dim m As Integer
m = UBound(a)
ReDim b(m, 2)
For j = 1 To 2
For i = 1 To m
b(i, j) = a(i, j) * c
Next
Next
escalar = b
End Function

'*****
'Función que determina el centroide de un polígono irregular
'*****
Public Function centroide(a() As Double) As Double()
Dim b, sumx, sumy, x, y As Double
Dim c(), e() As Double
Dim d1() As Double
Dim n As Integer
n = UBound(a)
sumx = 0
sumy = 0
ReDim c(n - 1, 2)
ReDim e(n, 2)
For i = 1 To n
e(i, 1) = a(n + 1 - i, 1) + 1000
e(i, 2) = a(n + 1 - i, 2) + 1000
Next
b = AreaPol(a)
For i = 1 To n - 1

```

```

c(i, 1) = (e(i, 2) - e(i + 1, 2)) * ((e(i, 1) ^ 2) + e(i, 1) * e(i + 1, 1) _
+ (e(i + 1, 1) ^ 2))
c(i, 2) = (e(i, 1) - e(i + 1, 1)) * ((e(i, 2) ^ 2) + e(i, 2) * e(i + 1, 2) _
+ (e(i + 1, 2) ^ 2))
sumx = sumx + c(i, 1)
sumy = sumy + c(i, 2)
Next
x = (Abs(sumx) / (6 * b))
y = (Abs(sumy) / (6 * b))
ReDim d1(1, 2)
d1(1, 1) = x - 1000
d1(1, 2) = y - 1000
centroide = d1
End Function

'*****
'Programa Principal, crea poligonos y determina contactos
'*****
Sub mis_poligonos()

Dim np, ncelx, ncely, ncel, i, j, k, l, m, n As Integer
Dim dmax, dmin, d10, d30, d60, d90, r1, R2, R3, R4 As Double
Dim Amin, Amax, A10, A60, A90 As Double
Dim Del1, Del2, Del3, Del4 As Double
Dim var1, var2, var3 As Double
Dim e As Double
Dim Asol As Double
Dim b As Double
Dim sizex, sizey As Double
Dim xcell() As Double
Dim ycell() As Double
Dim px, py, perte As Integer
Dim position1() As Double
Dim counter As Integer
Dim maxmin() As Double
Dim grupo() As Double
Dim cont As Integer
Dim index() As Double
Dim u, v, z As Double
Dim numcel() As Double
Dim temp() As Double
Dim center() As Double
Dim cal() As Double
Dim sumx, sumy As Double
Dim distmax() As Double
Dim counter2 As Integer
Dim polycel() As Double

```

```
Dim length1() As Double
Dim length2() As Double
Dim distancia1 As Double
Dim ang As Double
Dim ppa(), diam(), a As Double
Dim alfa As Double
Dim polygon2() As Double
Dim areas() As Double
Dim fscale() As Double
Dim locations(), locationx, locationy As Double
Dim poly() As Double
Dim e0 As Integer

Const pii = 3.14159265358979

np = InputBox("Número de Partículas", "Tamaño de la Muestra")

dmax = InputBox("Diametro Mayor", "Tamaño de la Muestra")
dmin = InputBox("Diametro Menor", "Tamaño de la Muestra")
d10 = InputBox("diametro que pasa el 10%", "Tamaño de la Muestra")
d30 = InputBox("diametro que pasa el 30%", "Tamaño de la Muestra")
d60 = InputBox("diametro que pasa el 60%", "Tamaño de la Muestra")
d90 = InputBox("diametro que pasa el 90%", "Tamaño de la Muestra")

e0 = InputBox("Ingrese la relación de vacios", "Tamaño de la Muestra")

ReDim ppa(4, 3)

ppa(1, 1) = 0.1 'corresponde con el d90
ppa(2, 1) = 0.4 'corresponde con el d60
ppa(3, 1) = 0.7 'corresponde con el d30
ppa(4, 1) = 0.9 'corresponde con el d10

For i = 1 To 4
    ppa(i, 2) = Application.Round(np * ppa(i, 1), 0)
    If i = 1 Then
        ppa(i, 3) = ppa(i, 2)
    End If
    ppa(i, 3) = ppa(i, 2) - ppa(i - 1, 2)
Next

Randomize
ReDim diam(np, 2)

For i = 1 To ppa(1, 2)
    diam(i, 1) = (dmax - d90) * Rnd + d90
Next
```

```
For i = 1 + ppa(1, 2) To ppa(2, 2)
    diam(i, 1) = (d90 - d60) * Rnd + d60
Next

For i = 1 + ppa(2, 2) To ppa(3, 2)
    diam(i, 1) = (d60 - d30) * Rnd + d30
Next

For i = 1 + ppa(3, 2) To ppa(4, 2)
    diam(i, 1) = (d30 - d10) * Rnd + d10
Next

For i = 1 + ppa(4, 2) To np
    diam(i, 1) = (d10 - dmin) * Rnd + dmin
Next

For i = 1 To np
    diam(i, 2) = pii * (diam(i, 1) ^ 2) / 4
Next

Asol = 0

Dim nexp1 As Double
Dim nexp2 As Integer

nexp1 = Log(np / 10) / Log(2)
nexp2 = Int(nexp1)

If np < 20 Then
    ncelx = 1
    ncely = 1
Else
    ncelx = 2 ^ (nexp2 - 1)
    ncely = 2 ^ nexp2
    ncel = ncelx * ncely
End If

sizex = b / ncelx
sizey = 2 * b / ncely

ReDim xcell(ncelx + 1, 1)
ReDim ycell(ncely + 1, 1)

For i = 0 To ncelx
    xcell(i + 1, 1) = (-b / 2) + sizex * i
```

```
Next

For i = 0 To ncely
    ycell(i + 1, 1) = (-b) + sizey * i
Next

ReDim locations(np, 2)
Randomize

For i = 1 To np
    locations(i, 1) = (b * Rnd - (b / 2))
    locations(i, 2) = (2 * b * Rnd - b)
Next

Dim centers() As Double
Dim centre() As Double

ReDim poly(np * 6, 2)
ReDim maxmin(np, 4)
ReDim numcel(np, 1)
ReDim center(np, 2)
ReDim cal(6, 2)
ReDim areas(np, 1)
ReDim fscale(np, 1)
ReDim centers(np, 2)
ReDim centre(1, 2)

n = 0
dist = 0

Dim position2() As Double
Dim position3() As Double
Dim position4() As Double

ReDim position1(np, 2)
ReDim position2(np, 2)
ReDim position3(np, 2)
ReDim position4(np, 2)

Dim fila1, fila2, fila3, fila4, col1, col2, col3, col4 As Integer
Dim fsc0 As Double
Dim temp1 As Double
Dim temp5() As Double
Dim temp6() As Double

ReDim temp5(np, 1)
ReDim temp6(np, 1)
```

```
Dim pertenencia1() As Double
Dim pertenencia2() As Double
Dim pertenencia3() As Double
Dim pertenencia4() As Double

ReDim pertenencia1(1, 2)
ReDim pertenencia2(1, 2)
ReDim pertenencia3(1, 2)
ReDim pertenencia4(1, 2)

Dim sieve() As Double
Dim scf As Double

ReDim sieve(np, 1)

Sheets("Hoja1").Select
Range("a1").Select

While n < np
    ReDim polygon2(7, 3)
    polygon2 = polygon(6) 'se crean los polígonos
    sieve(n + 1, 1) = size(polygon2)
    scf = diam(n + 1, 1) / sieve(n + 1, 1)

    polygon2 = escalar2(polygon2, scf)
    areas(n + 1, 1) = AreaPol(polygon2) 'se calcula el área
    'de cada polígono

    For i = ((n + 1) * 6) - 5 To (n + 1) * 6 'Se almacenan las coordenadas
        'de los poligonos
            poly(i, 1) = polygon2(i - (6 * n), 1)
            poly(i, 2) = polygon2(i - (6 * n), 2)
        Next

        ActiveCell = "p1"
        ActiveCell.Offset(1, 0).Select
        For i = 1 To 6
            ActiveCell = polygon2(i, 1)
            ActiveCell.Offset(0, 1).Select
            ActiveCell = polygon2(i, 2)
            ActiveCell.Offset(1, -1).Select
        Next

        ActiveCell = "c"
        ActiveCell.Offset(1, 0).Select
        n = n + 1
```

Wend

Range("g1").Select

For i = 1 To np

 ActiveCell = diam(i, 1)

 ActiveCell.Offset(0, 2).Select

 ActiveCell = areas(i, 1)

 ActiveCell.Offset(1, -2).Select

Next

End Sub

Bibliografía

- María Cristina Herrera Ardila. *Suelos Derivados de Cenizas Volcánicas en Colombia: Estudio Fundamental e Implicaciones Ingeniería*. PhD thesis, Universidad de Los Andes, Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental, 2006.
- G. A. Georgalli and M. A. Reuter. A particle packing algorithm for packed beds with size distribution. *Granular Matter*, 10:257–262, March 2008.
- Nicolás Jose Giraldo and Juan Diego Morales. Cementación y colapso en cenizas volcánicas. Master's thesis, Universidad de Los Andes, Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental, 2004.
- Darrall Henderson, Sheldon H. Jacobson, and Alan W. Johnson. *The Theory and Practice of Simulated Annealing*, volume 57 of *International Series in Operations Research and Management Science*, chapter 10, pages 287–319. Springer, 2006.
- Edwin Sibel Moreno and Arcesio Lizcano Pelaez. Fabricación de muestras polidispersas para la modelación micromecánica de suelos granulares cementados. *Jornadas Geotécnicas de la Ingeniería Colombiana*, Octubre 2009.
- Erfan G. Nezami, Youseff M.A. Hashash, Dawei Zhao, and Jamshid Ghaboussi. A fast contact detection algorithm for 3-d discrete element method. *Computers and Geotechnics*, 31:575–587, 2004.
- Farhang Radjai and Vincent Richefeu. Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method. Preprint submitted to *Mechanics of Material*, April 2008.
- Fernando Schnaid, Pedro D. M. Prietto, and Nilo C. Consoli. Characterization of cemented sand in triaxial compression. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 2001.
- V. Topin, J.-Y. Delenne, F. Radjaï, L. Brendel, and F. Mabilbe. Strength and failure of cemented granular matter. *The European Physical Journal E*, E 23:413–429, August 2007.
- Roberto Arévalo Turnes. Dinámica molecular de medios granulares. Master's thesis, Universidad de Navarra, Departamento de Física y Matemática Aplicada, Mayo 2007.
- A. Vastala, R. Nova, and B. R. Srinivasa Murthy. Elastoplastic model for cemented soils. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 2001.
- Anwar Ernest Zaki. *Effective Stress-Strength Behavior of Cemented Soils*. PhD thesis, Massachusetts Institute Of Technology, 1965.