Universidad de los Andes
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental

Estudio numérico y experimental de la fractura de materiales granulares

Realizado por

David Alexander Cantor García

Asesor

Prof. Nicolás Estrada Ph.D.

Junio de 2013

Indudablemente para R. e I.,
con cariño para D.

Agradecimientos

Este trabajo de tesis contó con el apoyo de varias personas sin las cuales no hubiera salido adelante. En primer lugar, quiero agradecerle a Nicolás Estrada, mi asesor, quien me dio la oportunidad de ser su asistente y quién me guió a través de todo el proceso entorno a este estudio. Sin lugar a dudas, durante los casi 3 años que he podido trabajar con Nicolás, él ha sido una parte muy importante en mi formación profesional y humana. !Muchas gracias!

Quiero agradecer también a las personas que intervinieron directamente en el desarrollo de este estudio, como lo fueron Émilien Azema, Alfredo Taboada y Farhang Radjaï. Doy un especial agradecimiento a Farhang y a Nicolás que, a través del proyecto ECOS-Nord No. C12PU01, me permitieron realizar una pasantía en la Universidad de Montpellier II.

Le quiero agradecer a las personas pertenecientes al grupo de investigación en geotecnia y pavimentos por sus comentarios y discusiones, las cuales, indudablemente ayudaron a darle forma al contenido y estilo de este documento.

Finalmente, le quiero dar un enorme agradecimiento a mis papás. Viviré siempre sorprendido y en deuda por su paciencia y apoyo infinitos.

Contenidos

Agradecimientos I

Introducción 1

1. Modelos de fractura precedentes 3
1.1. Técnica de pegado . . . 3
1.2. Técnica de reemplazo . . . 5
1.3. Técnicas alternativas . . . 6

2. Modelo de fractura de granos 9
2.1. Cálculo de esfuerzos . . . 9
2.1.1. Esfuerzos de tensión . . . 12
2.1.2. Esfuerzos de compresión . . . 16
2.2. Criterio de fractura . . . 17
2.3. Modo de fractura . . . 17

3. Fragmentación bajo compresión 19
3.1. Procedimientos experimentales y numéricos . . . 19
3.1.1. Montajes experimentales . . . 19
3.1.2. Método de simulación . . . 21
3.2. Resultados y discusión . . . 23

4. Conclusiones y perspectivas 29

Lista de Figuras

1.1. Simulación en 3D con pegado de partículas. Sistema cargado entre dos placas. (Bolton, 2000) . . . 4
1.2. Simulación de una partícula compuesta de pequeñas esferas sometida a carga entre dos placas. (McDowell & Harireche, 2002) . . . 4
1.3. Simulación con partículas esféricas pegadas. (Lim & McDowell, 2005) . . . 4
1.4. Simulación en 3D con pegado de partículas. Sistema cargado entre dos muros. (Abe, 2005) . . . 5
1.5. Reemplazo de partícula inicial con 10 partículas de menor tamaño. (Tsoungui et al., 1999) . . . 6
1.6. Reemplazo de partícula inicial con 2 partículas inicialmente interpenetradas. (Abe, 2005) . . . 6
1.7. Fractura de material granular representado con triángulos apilados. (McDowell et al., 1996) . . . 7

2.1. Fractura de un grano cargado entre placas . . . 10
2.2. Esfuerzos principales en un disco . . . 11
2.3. Par de fuerzas aplicados en las direcciones principales que generan el mismo tensor de esfuerzos . . . 12
2.4. Distribuciones de esfuerzos de tensión en polígonos regulares . . . 13
2.5. Distribución de esfuerzos de tensión en polígonos irregulares . . . 14
2.6. Parámetros para el factor $\bar{l}/w$ . . . 15
2.7. Valores de esfuerzo de tensión para diferentes polígonos . . . 15
2.8. Valores de esfuerzo de compresión para diferentes polígonos . . . 16
2.9. Simplificaciones de la grieta en un partícula. . . . 18

3.1. Sistemas de partículas para ensayos de compresión . . . 20
3.2. Ensayo de compresión sobre un disco . . . 21
3.3. Juego de discos de yeso ensayados . . . 21
3.4. Sistemas de partículas para ensayos de compresión - Simulación . . . 23

3.5. Evolución de las fracturas en el experimento 24
3.6. Comparación para la muestra 1 25
3.7. Comparación para la muestra 2 25
3.8. Comparación para la muestra 3 25
3.9. Comparación para la muestra 4 26
3.10. Comparación de fuerzas aplicadas en el experimento y la simulación para la muestra 3 26

Introducción

El estudio de los materiales granulares es de gran interés en diferentes campos de la ingeniería y la industria. En la ingeniería civil, por ejemplo, su estudio es importante para el análisis de la capacidad portante y asentamientos en estructuras apoyadas sobre suelos con contenidos importante de arenas, gravas o coluviones. Así mismo, en industrias como la encargada de la producción de agregados, existe una creciente preocupación acerca del comportamiento de estos materiales con propósitos como la reducción de la producción de finos y la disminución del consumo de energía durante procesos como la trituración de rocas (Guimaraes et al., 2007).

Uno de los fenómenos que ocurren en los materiales granulares al ser sometidos a cargas o deformaciones es la fractura, entendida como la rotura de partículas en fragmentos más pequeños. En Geotecnia, este fenómeno tiene efectos importantes como la degradación de la granulometría, aumentos de las deformaciones plásticas, reducción de conductividad hidráulica, degradación del módulo de elasticidad y de la resistencia al corte (Lobo-guerrero, 2006). Su estudio se remonta a los trabajos llevados a cabo por Griffith (1921), cuyo objetivo era analizar la influencia de las grietas sobre la resistencia de materiales frágiles. Análisis más recientes hacen uso de técnicas tanto experimentales como numéricas para observar los efectos de la fractura sobre la granulometría y su dimensión fractal (McDowell et al. (1996); Aström & Herrmann (1998); Lobo-Guerrero (2006)), sobre la dilatancia (Feda, 2002), sobre procesos constructivos como la hinca de pilotes (Lobo-Guerrero & Vallejo, 2007), entre otros. Sin embargo, pese a los adelantos en torno a este tema, aún no es clara la forma en que la fractura de materiales granulares debe ser implementada en simulaciones numéricas y sus efectos a nivel microestructural (i.e., textura, cadenas de fuerzas, coordinación) y macroestructural (i.e., compacidad, granulometría, resistencia al corte, superficie de fluencia).

Por otra parte, una serie de métodos numéricos que han sido desarrollados desde la década de 1970, conocidos como Métodos de Elementos Discretos (i.e., DEM, por sus siglas en inglés), se han convertido en una herramienta privilegiada para el estudio de los materiales granulares tanto a nivel de unas cuantas partículas como también en sistemas compuestos por cientos de ellas.

Este trabajo de grado tuvo como principal objetivo proponer un modelo de fractura de materiales granulares para su implementación en un programa con DEM, usando partículas poligonales y que fuera capaz de reproducir varias características de las rupturas observadas experimentalmente. Para esto, se buscaron las diferentes aproximaciones realizadas hasta el momento entorno a este problema. Esta búsqueda permitió precisar los tipos de esfuerzos que conllevan a la fractura y las formas que adquieren los fragmentos. Posteriormente, se realizaron ensayos en un programa de elementos finitos (ABAQUS), con el fin de observar las distribuciones de los esfuerzos de interés en partículas de diferentes formas cargadas uniaxialmente. Estos ensayos en ABAQUS permitieron definir las ecuaciones del modelo de fractura el cual luego se comparó con ensayos realizados en laboratorio.

Como resultado, se lograron reproducir satisfactoriamente las fracturas observadas en ensayos de compresión vertical, en sistemas compuestos por partículas poligonales de yeso y bajo niveles de carga similares.

Capítulo 1

Modelos de fractura precedentes

El estudio numérico de la fractura de materiales granulares empezó a realizarse desde la década de 1990 gracias al desarrollo de los métodos de elementos discretos (DEM). Trabajos más recientes incluyen la fractura de materiales granulares en modelos constitutivos (Cecconi et al., 2002), sin embargo, los DEM resultan ser una herramienta privilegiada ya que permiten observar y entender los eventos que ocurren a la escala de una sola partícula como también sus efectos a nivel macroscópico.

Ahora bien, los eventos que ocurren al momento de romperse un grano son complejos (i.e., evolución del estados de esfuerzos y deformaciones y la formación de la grieta), por lo que estudios anteriores han requerido de diferentes técnicas que simplifican la forma inicial de las partículas, la zonas por donde es permitido que pase la fractura y las formas que adquieren los fragmentos. Estas técnicas pueden agruparse en las categorías de *pegado* y *remplazo* de partículas.

1.1. Técnica de pegado

Esta técnica se ha utilizado en simulaciones 2D y 3D, y consiste en la formación de clusters a partir del pegado de círculos o esferas pequeñas mediante una cohesión definida en un comienzo. Estos clusters simulan el material granular en su estado inicial y las partículas pequeñas son los fragmentos potenciales en los que éste puede dividirse. Trabajos realizados en el marco de esta técnica han sido desarrollados por Bolton (2000) (Figura 1.1), Jensen & Plesha (2001), McDowell & Harireche (2002) (Figura 1.2), Lim & McDowell (2005) (Figura 1.3), Abe (2005) (Figura 1.4), Guo & Morgan (2006), entre otros.

Sin embargo, esta técnica presenta ciertas desventajas como lo es la restricción de la forma y tamaño de los fragmentos, el camino que puede tomar la fractura (puesto que solo pueden ocurrir entre las zonas de contacto de partículas pequeñas), y la definición del valor de cohesión que mantiene unidos a los fragmentos no es clara. Adicionalmente, el

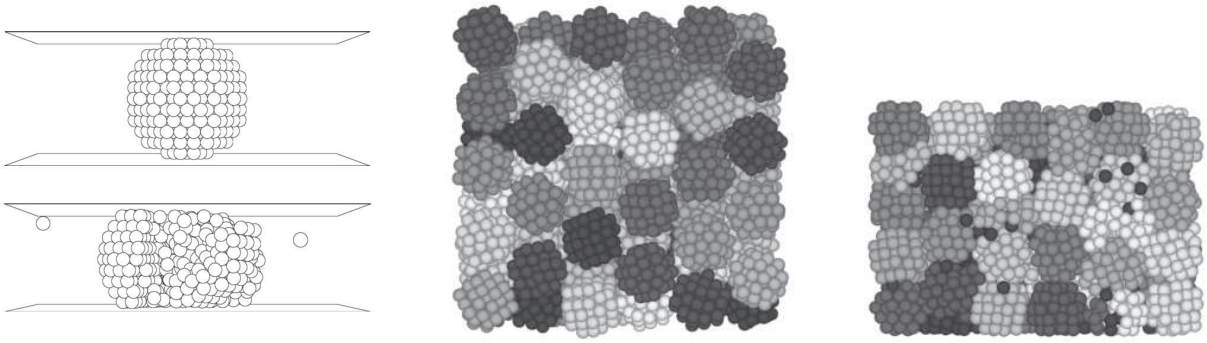


Figura 1.1: Simulación en 3D con pegado de partículas. Sistema cargado entre dos placas. (Bolton, 2000)

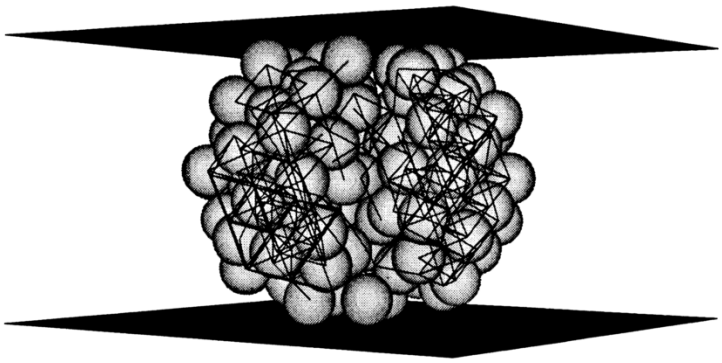


Figura 1.2: Simulación de una partícula compuesta de pequeñas esferas sometida a carga entre dos placas. (McDowell & Harireche, 2002)

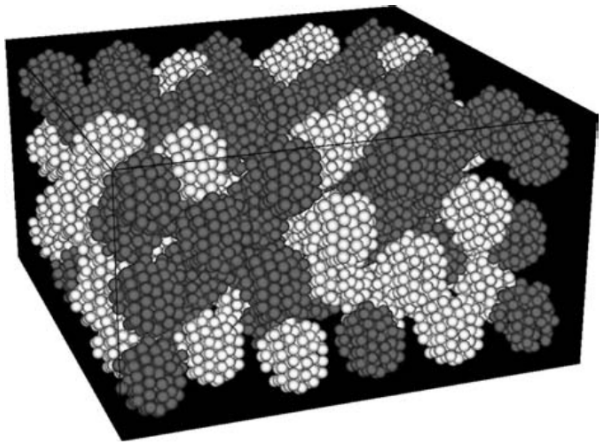


Figura 1.3: Simulación con partículas esféricas pegadas. (Lim & McDowell, 2005)

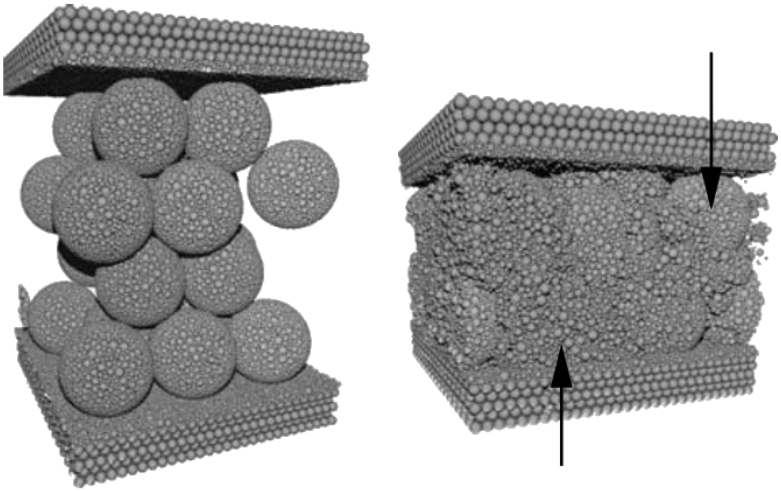


Figura 1.4: Simulación en 3D con pegado de partículas. Sistema cargado entre dos muros. (Abe, 2005)

tamaño de los fragmentos empieza a jugar un papel importante, dado que ayuda a definir la rugosidad de los clusters y por consiguiente la resistencia al corte macroscópica.

1.2. Técnica de reemplazo

Esta técnica ha sido utilizada en estudios llevados a cabo por Aström & Herrmann (1998), Tsoungui et al. (1999), Buchholtz et al. (2000), entre otros, y consiste en reemplazar una partícula por una serie de fragmentos más pequeños una vez sea alcanzado cierto límite de resistencia. En estos estudios la forma de las partículas en su estado inicial es circular y los fragmentos por lo que se reemplazan también son círculos.

En el marco de esta técnica existe dos diferentes metodologías para el reemplazo. En la primera, el área circunscrita por la partícula inicial se llena con partículas de diferentes tamaños (Figura 1.5). Sin embargo, como puede observarse en la figura, el área cubierta por los fragmentos es menor que el área de la partícula original, lo que en otros términos quiere decir que la masa de granos no se conserva. Adicionalmente, el número de fragmentos por los que se reemplaza una partícula no tiene ninguna explicación mecánica ni numérica.

La segunda metodología consiste en reemplazar la partícula original con fragmentos que, en suma, tengan la misma área. Sin embargo, al realizar este proceso se generan desde el comienzo interpenetraciones entre los fragmentos, las cuales crean presiones locales artificiales que tienen que ser disipadas por el sistema mediante la reacomodación de las partículas vecinas (Figura 1.6). Este proceso no corresponde a lo que ocurre en un evento

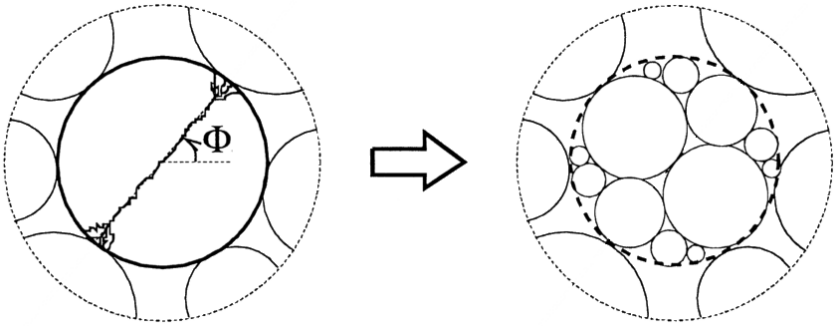


Figura 1.5: Reemplazo de partícula inicial con 10 partículas de menor tamaño. (Tsoungui et al., 1999)

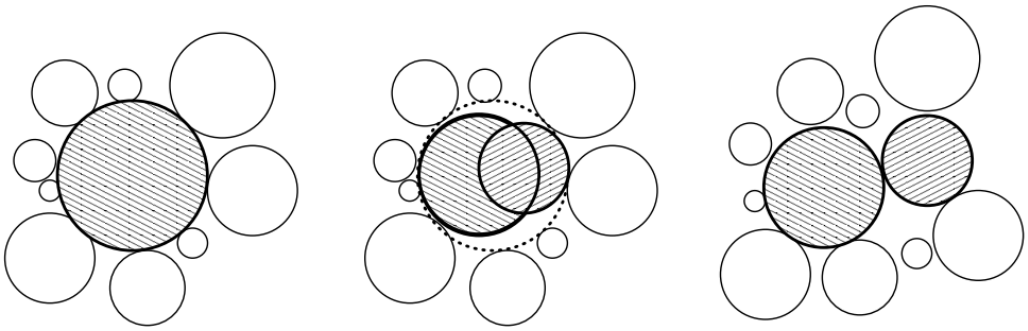


Figura 1.6: Reemplazo de partícula inicial con 2 partículas inicialmente interpenetradas. (Abe, 2005)

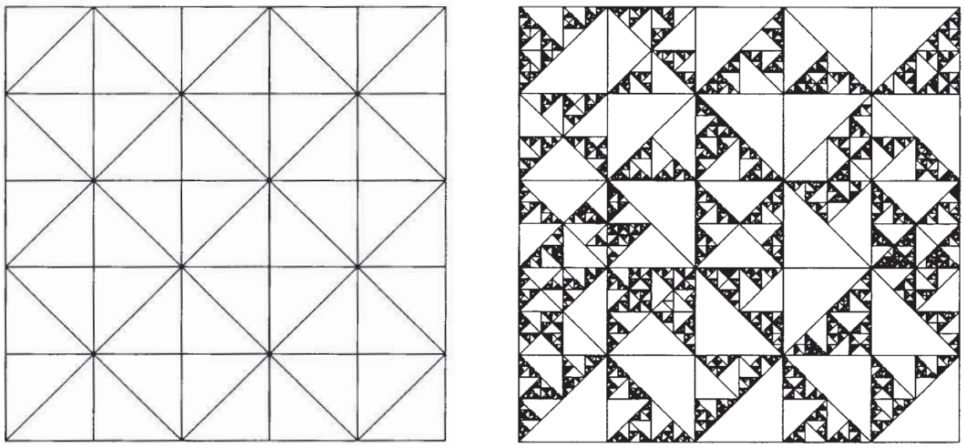
de fractura real en el que, por el contrario, hay una disipación de esfuerzos y reducción de espacios vacíos.

1.3. Técnicas alternativas

Otros intentos por simular la fractura de materiales granulares han sido llevados a cabo mediante técnicas como los elementos finitos (Bagherzadeh Kh. et al., 2011). Este método tiene ventajas importantes como lo son el cálculo explícito de las fuerzas y desplazamientos en los nodos al interior de cada partícula, los cuales permiten posteriormente un cálculo más exacto de esfuerzos y deformaciones. Sin embargo, al momento de ser necesaria la simulación de decenas o cientos de granos, esta técnica se vuelve computacionalmente costosa.

También se han realizado simulaciones mediante abstracciones de la naturaleza discreta de estos materiales. Por ejemplo, en 1996 McDowell et al., elaboraron un modelo simplificado de un material granular al que se le aplicaba una carga vertical de compresión. El sistema analizado consistía de partículas triangulares apiladas sin dejar vacíos entre ellas (Figura 1.7). A pesar de la simplificación de la forma de las partículas y de

la exclusión de los efectos de los vacíos en el sistema, lograron reproducir importantes aspectos de la evolución de las tallas de las partículas hacia una distribución fractal. Sin embargo, en el marco de esta técnica no es posible el estudio de otras cantidades interesantes como lo son la compacidad, la dilatancia o los desplazamiento y las rotaciones de las partículas.



Sistema original Sistema fracturado

Figura 1.7: Fractura de material granular representado con triángulos apilados. (McDowell et al., 1996)

Capítulo 2

Modelo de fractura de granos

Un modelo teórico es un conjunto de simplificaciones de eventos reales que tiene por objetivo la reproducción aproximada de fenómenos que ocurren en sistemas naturales o creados por el hombre. Como se observó en el capítulo anterior, los procesos entorno a la fractura de materiales granulares han requerido de un gran número simplificaciones. Sin embargo, algunas de esas restricciones pueden ser superadas hoy en día como resultado de los desarrollos en los métodos de simulación. En particular, en este trabajo se quiso evitar la restricción recurrente en los modelos anteriores en cuanto a la forma de las partículas a círculos o esferas.

Paralelamente, mediante el análisis de los modelos de fractura realizados hasta el momento, se identificaron los elementos centrales que un modelo de este tipo involucra. Estos aspectos son: (a) el cálculo de alguna cantidad representativa que indique que tan cargada esta una partícula, (b) el criterio bajo el cual se decide si una partícula debe romperse y (c) la forma que deben adquirir los fragmentos.

Estos tres aspectos le dan forma al modelo de fractura y sus detalles se presentan a continuación.

2.1. Cálculo de esfuerzos

Los esfuerzos son cantidades adecuadas para determinar que tan solicitado se encuentra un material bajo múltiples cargas. Ahora bien, no todos los tipos de esfuerzos son de interés para el problema de fractura de granos. Para un grano cargado diametralmente, bajo la acción de una carga F, se generan esfuerzos de compresión en la dirección de la carga y esfuerzos de tensión en la dirección perpendicular a la carga. Adicionalmente, se sabe que la resistencia a la tensión de materiales frágiles es baja en comparación con su resistencia a la compresión, por lo tanto la fractura de este grano es causada finalmente por la tensión indirecta y tiene la forma que se muestra en la Figura 2.1.

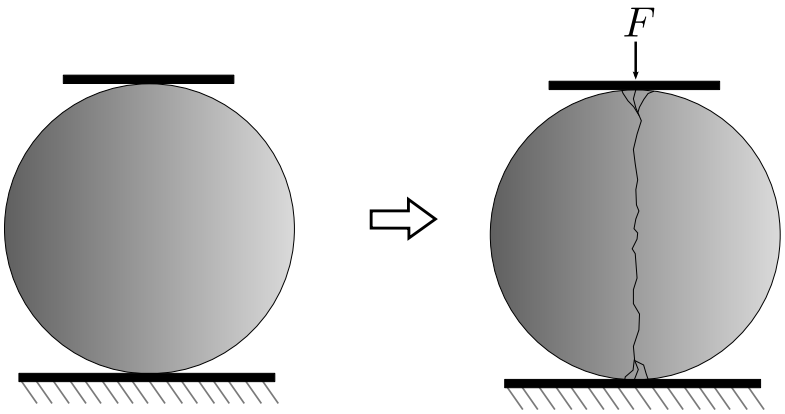


Figura 2.1: Fractura de un grano cargado entre placas

Si bien los granos pueden estar sometidos a un conjunto de cargas las cuales generen esfuerzos cortantes, estos no fueron considerados dado el carácter frágil de los materiales analizados y su tendencia a fallar por esfuerzos de tensión bajo cargas de confinamiento no muy altas. Cuando las cargas de confinamiento empiezan a ser altas, las fracturas se vuelven difíciles y el material granular se empieza a comportar más como un sólido (Tsoungui et al., 1999).

Ahora bien, una partícula sometida a un conjunto de cargas cualquiera presenta un estado de esfuerzos que puede ser representado mediante el tensor $\boldsymbol{\sigma}$. Este tensor en dos dimensiones puede escribirse según la Ecuación 2.1.

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

Y puede calcularse según la ecuación 2.2.

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{c=1}^{n_c} l_i^{(c)} n_i^{(c)} F_j^{(c)} \tag{2.2}$$

De donde V es el área de la partícula, n_c es la cantidad de contactos, l_i es la distancia del centro de masa a los contactos, n_i es un vector unitario que indica la componente normal y tangencial de la fuerza y F_j es un vector que contiene las fuerzas en los contactos.

Después de calcular el tensor de esfuerzos es posible calcular los esfuerzos principales con la Ecuación 2.3.

$$\sigma_{1,2} = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2}\right)^2 + \sigma_{xy}\sigma_{yx}} \tag{2.3}$$

Las direcciones de los esfuerzos principales se calculan con las ecuaciones 2.4 y 2.5. Esquemáticamente, estas cantidades se representan en la Figura 2.2.

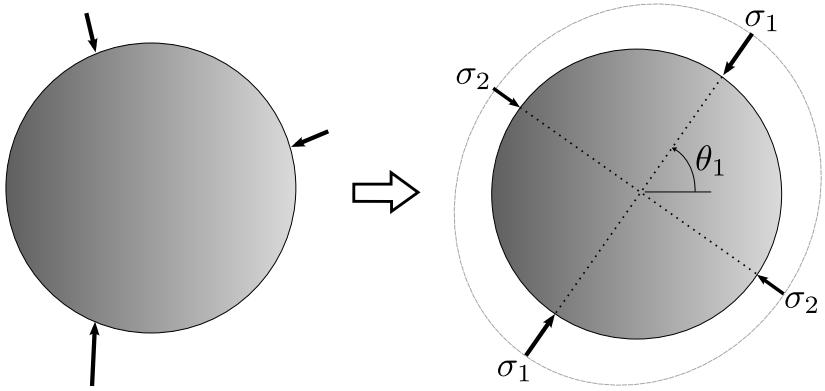


Figura 2.2: Esfuerzos principales en un disco

$$\theta_1 = \frac{1}{2}\arctan\left(\frac{2\sigma_{xy}}{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}\right) \tag{2.4}$$

$$\theta_2 = \theta_1 + \frac{\pi}{2} \tag{2.5}$$

Ahora, es posible calcular una pareja de fuerzas que aplicadas en las direcciones θ_1 y θ_2 generen el mismo tensor de esfuerzos $\boldsymbol{\sigma}$. Esto es posible realizarlo para una partícula circular haciendo uso de la teoría de la elasticidad con las Ecuaciones 2.6 y 2.7, siendo R el radio de las partículas. Esquemáticamente, las fuerzas F_1 y F_2 se muestran en la Figura 2.3.

$$F_1 = \frac{\sigma_1 \pi R}{2} \tag{2.6}$$

$$F_2 = \frac{\sigma_2 \pi R}{2} \tag{2.7}$$

Finalmente, con este par de fuerzas es posible calcular la tensión y compresión a la que está sometido un disco. Puesto que F_1 es mayor que F_2, la tensión más grande se genera por acción de F_1. Por otro lado, la fuerza F_2, genera una compresión en la misma orientación que la tensión generada por F_1, reduciendo el valor de tensión total. La tensión generada por F_1 y la compresión generada por F_2 se calculan con las Ecuaciones 2.8 y 2.9 respectivamente. Como resultado, la *tensión máxima neta* que se presenta en el disco esta dada por la Ecuación 2.10 [1].

[1] El superíndice (d) indica que los cálculos se realizan para partículas circulares o discos

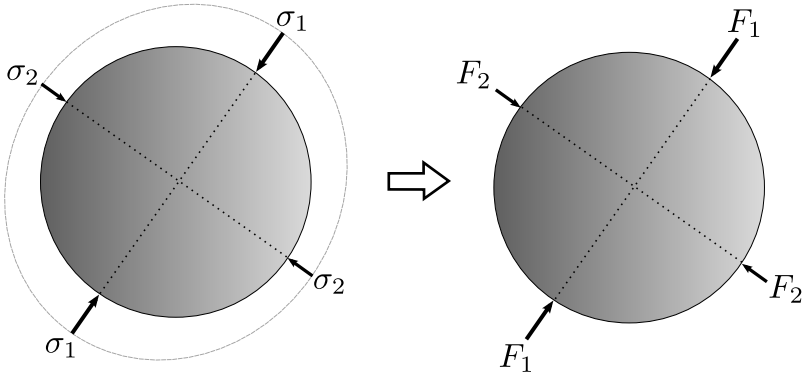


Figura 2.3: Par de fuerzas aplicados en las direcciones principales que generan el mismo tensor de esfuerzos

$$\sigma_t^{(d)} = \frac{F}{\pi R} \tag{2.8}$$

$$\sigma_c^{(d)} = \frac{3F}{\pi R} \tag{2.9}$$

$$\sigma_{t_{neta}}^{(d)} = \sigma_t^{(d)} - \sigma_c^{(d)} \tag{2.10}$$

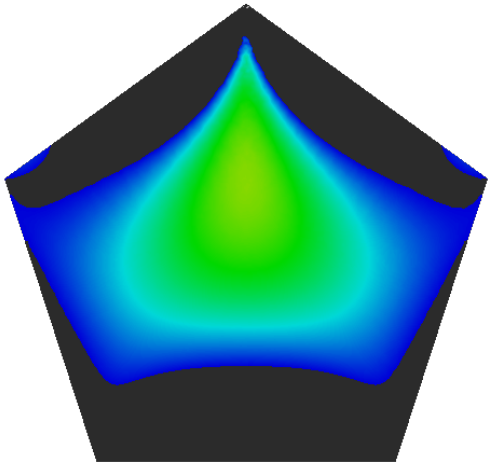
Este mismo procedimiento fue llevado a cabo por Tsoungui et al. (1999), utilizando posteriormente el método de remplazo con partículas circulares.

Ahora bien, en el caso en que las partículas no son círculos, el cálculo de las fuerzas F_1 y F_2 no puede realizarse de manera explícita a partir de la teoría de la elasticidad. Por lo tanto, mediante una serie de experimentos numéricos sobre polígonos en el programa de elementos finitos ABAQUS, se buscaron los valores de tensión máxima, su ubicación y el esfuerzo de compresión en el mismo lugar. Los experimentos consistieron en someter partículas de área unitaria y de formas regulares, irregulares y con diferentes relaciones de aspecto (η), a una carga unitaria al estilo de un disco cargado entre dos placas. A continuación se muestran los resultados de dichos experimentos.

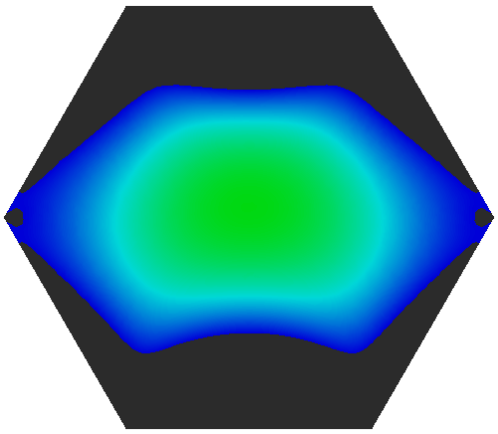
2.1.1. Esfuerzos de tensión

En primer lugar, se midieron los esfuerzos de tensión para partículas regulares con diferente número de lados. En la Figura 2.4 se muestra la distribución de estos esfuerzos para polígonos regulares de 5, 6, 7, 8, 16 y 33 lados.

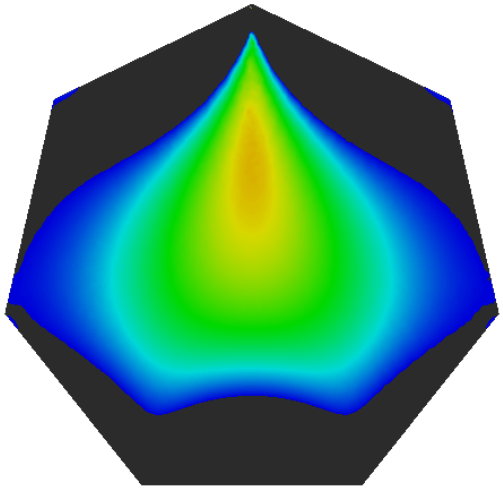
Posteriormente, se observó la distribución de esfuerzos de tensión en partículas irregulares y partículas que partiendo de formas regulares eran deformadas con determinada relación de aspecto (η) (Figura 2.5).



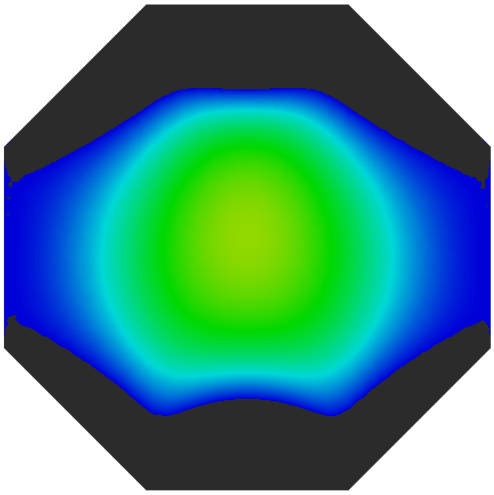
(a) Polígono de 5 lados



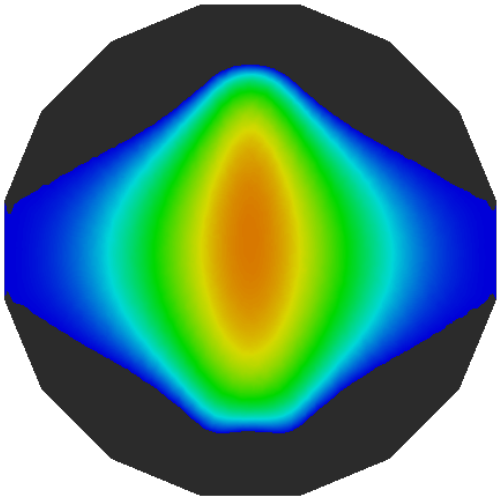
(b) Polígono de 6 lados



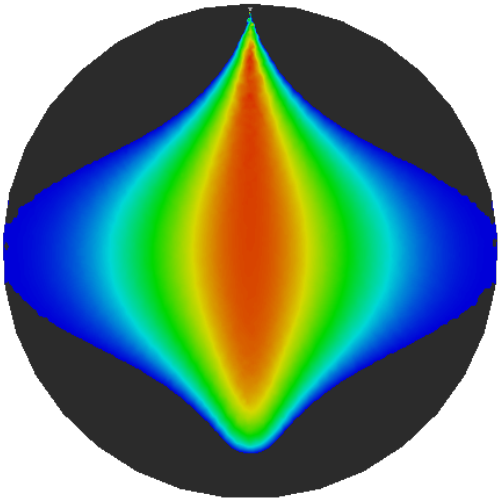
(c) Polígono de 7 lados



(d) Polígono de 8 lados

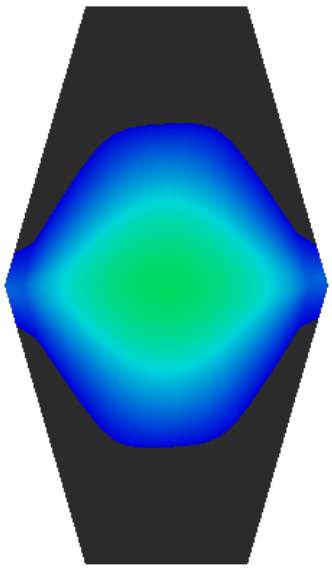


(e) Polígono de 16 lados

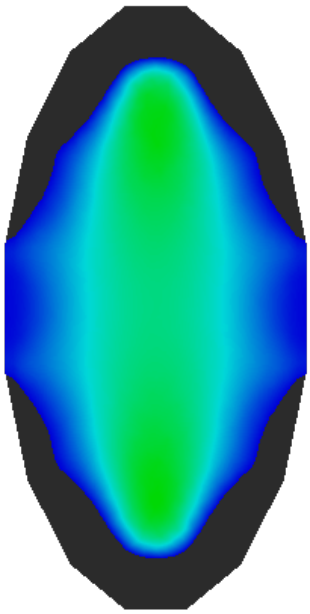


(f) Polígono de 33 lados

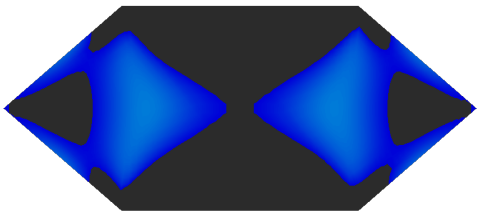
Figura 2.4: Distribuciones de esfuerzos de tensión en polígonos regulares



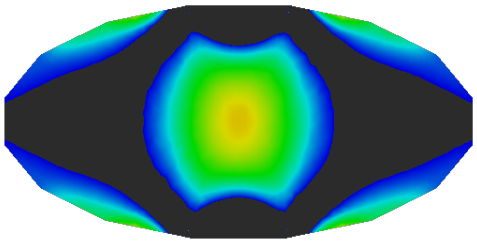
(a) Polígono de 6 lados con $\eta = 2$



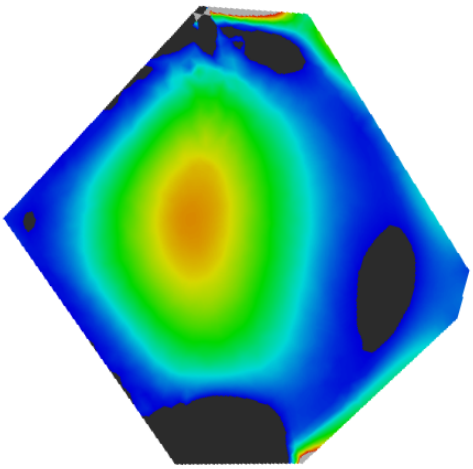
(b) Polígono de 16 lados con $\eta = 2$



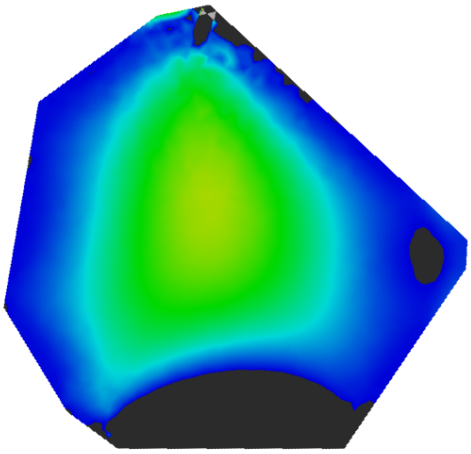
(c) Polígono de 6 lados con $\eta = 0{,}5$



(d) Polígono de 16 lados con $\eta = 0{,}5$



(e) Polígono de 6 lados



(f) Polígono de 9 lados

Figura 2.5: Distribución de esfuerzos de tensión en polígonos irregulares

A partir de las distribuciones de esfuerzos obtenidas en ABAQUS fue posible encontrar el valor máximo de esfuerzo a tensión para cada polígono. Paralelamente, se definió el parámetro adimensional $\bar{l}/w$, en donde $\bar{l}$ es el promedio de la longitud de los lados que están en la dirección principal de esfuerzos (θ_1) y w es la longitud de la línea que pasa por el centro de masa e interseca los lados del polígono en la dirección θ_2(Figura 2.6).

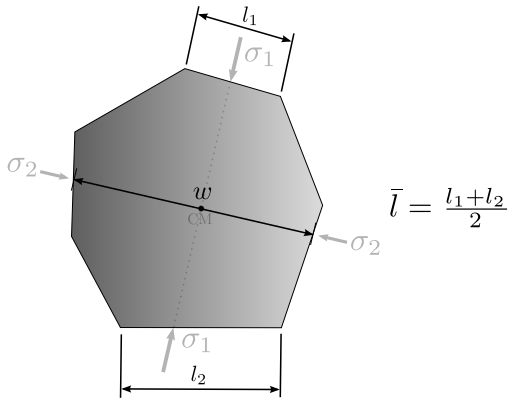


Figura 2.6: Parámetros para el factor $\bar{l}/w$

Bajo este parámetro adimensional, los valores de tensión fueron trazados en la Figura 2.7, y se encontró que éstos obedecían una tendencia que podía ajustarse mediante una línea recta. Esta línea se definió en coordenadas ($\bar{l}/w$, σ_t), dado que fácilmente pueden saberse los valores tensión cuando $\bar{l}/w = 0$ y $\bar{l}/w = 1$.

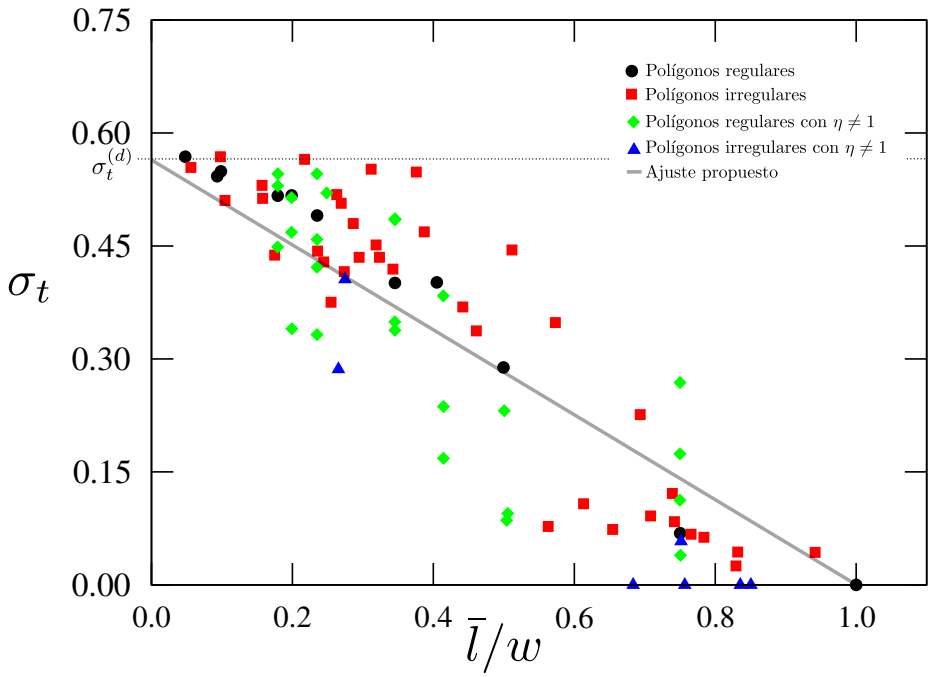


Figura 2.7: Valores de esfuerzo de tensión para diferentes polígonos

En el caso en el que $\bar{l}/w$ se aproxima a cero, se tiene un polígono que cada vez tiene más lados de longitud más pequeña. En el límite se encuentra un polígono cuyo número de lados es infinito (i.e., un círculo en el caso de formas regulares), el cual produce el valor $\bar{l}/w = 0$. Por otra parte, cuando $\bar{l}/w$ se aproxima a 1, se tiene un polígono cuyos lados cargados son aproximadamente de la misma longitud que su w correspondiente, lo cual pasa con formas rectangulares.

Para una partícula con forma circular, puede calcularse el esfuerzo a tensión del modo en que se mostró en la sección anterior, y para un rectángulo cargado en sus caras, se sabe que la tensión indirecta generada es cero. Por lo tanto, la ecuación que describe el comportamiento a tensión de polígonos puede ser escrita del siguiente modo:

$$\sigma_t = \sigma_t^{(d)} \left(1 - \frac{\bar{l}}{w} \right) \tag{2.11}$$

2.1.2. Esfuerzos de compresión

En los mismos lugares en los que se encontraron los valores máximos de esfuerzo a tensión fue medido el esfuerzo a compresión en la dirección de la carga. Estos valores fueron trazados en la Figura 2.8, en función del parámetro adimensional $\bar{l}/w$.

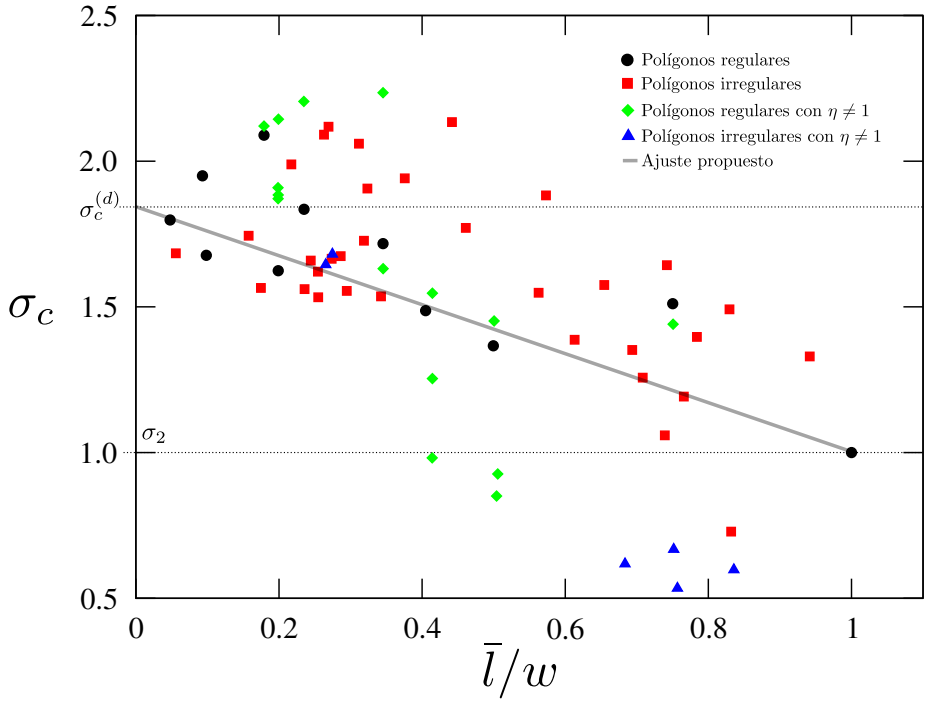


Figura 2.8: Valores de esfuerzo de compresión para diferentes polígonos

En este caso, los datos presentaron una dispersión importante. Sin embargo, realizando el proceso análogo al que se realizó con los esfuerzos de tensión, se ajustó el compor-

tamiento a una línea recta que une los valores conocidos de compresión para un disco y un rectángulo en función de $\bar{l}/w$. Para un disco, el esfuerzo a compresión puede ser calculado como se observó en la ecuación 2.9, y para un rectángulo el esfuerzo de compresión es igual a la presión aplicada σ_{apl}. Por lo tanto, la ecuación que define el comportamiento a compresión de polígonos puede ser escrita del siguiente modo:

$$\sigma_c = \sigma_c^{(d)} \left(1 - \frac{\bar{l}}{w} \right) + \sigma_{apl} \frac{\bar{l}}{w} \tag{2.12}$$

Para un partícula poligonal sometida a un conjunto de cargas el esfuerzo de compresión esta dado por el esfuerzo principal menor, es decir que $\sigma_{apl} = \sigma_2$.

Finalmente, el valor de tensión máxima neta para polígonos puede describirse mediante la Ecuación 2.13.

$$\sigma_{t_{neta}} = \sigma_t - \sigma_c \tag{2.13}$$

2.2. Criterio de fractura

El criterio de fractura escogido fue el valor máximo de tensión neta que puede resistir un polígono y se le llamó σ_{crit}. Al momento en el que una partícula es sometida a un conjunto de cargas y el valor calculado de tensión neta alcanza σ_{crit} se considera que la partícula debe romperse. La decisión de escoger el valor de tensión como criterio de fractura trae varias ventajas como lo son su fácil cálculo numérico y experimental.

Numéricamente se mostró en la sección anterior que el cálculo del esfuerzo de tensión neta depende del tensor de esfuerzos y de propiedades geométricas de las partículas (i.e., cantidades de rápido calculo computacional). Por otra parte, a través de ensayos sobre cilindros o granos individuales sometidos a compresión diametral es posible hallar en el laboratorio el valor de σ_{crit} para diferentes materiales o minerales.

2.3. Modo de fractura

La forma que adquieren los fragmentos en un caso de fractura real es complejo puesto que además de una grieta principal pueden generarse desprendimientos de material a lo largo de ésta y también en la vecindad de los contactos. Adicionalmente, las fracturas no ocurren en caminos rectos y dependiendo de la distribución de las cargas la grieta puede ser curva. Por lo tanto, fueron necesarias varias simplificaciones entorno a la forma que adquieren los fragmentos una vez se alcanza el valor crítico de esfuerzo de tensión.

En primer lugar, se determinó que la grieta debía recorrer un camino recto, no podía presentar *zig-zags* en su recorrido y no se simularía el material que se desprende cerca a la zonas de contacto. Esta simplificación puede verse representada esquemáticamente en la Figura 2.9.

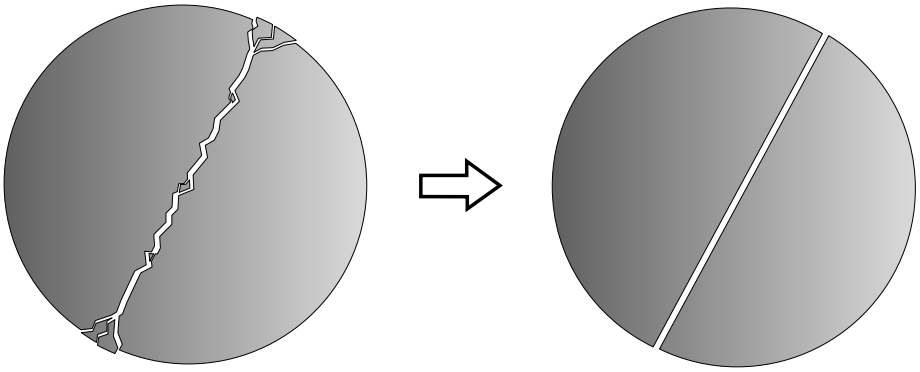


Figura 2.9: Simplificaciones de la grieta en un partícula.

En segundo lugar, a partir de las fracturas que ocurren experimentalmente en discos cargados diametralmente, se acordó que la dirección de la grieta debía tener la misma orientación que el esfuerzo principal mayor (i.e., θ_1). Además, se observó en los experimentos numéricos realizados en ABAQUS que el esfuerzo máximo a tensión se encuentra generalmente cerca al centro de masa de las partículas, a excepción de algunos casos de polígonos con relación de aspecto mayor a 2. En efecto, se fijó que las fracturas debían pasar por el centro de masa de las partículas.

Capítulo 3

Fragmentación bajo compresión

El modelo de fractura teórico se validó a través de la comparación con un ensayo de laboratorio. El ensayo elegido fue una compresión vertical sobre un sistema compuesto por 15 partículas pentagonales. Estas características fueron escogidas por las siguientes razones:

- Un ensayo de compresión vertical genera fracturas sobre un material granular frágil desde bajos niveles de deformación axial.
- El ensayo podía ser fácilmente controlado en velocidad o en fuerza.
- La relación $\bar{l}/w$ para un polígono de 5 lados se encuentra en medio del comportamiento típico para relaciones $\bar{l}/w = 0$ y $\bar{l}/w = 1$, lo que permite comprobar lo robusto del cálculo de los esfuerzo de tensión y compresión.

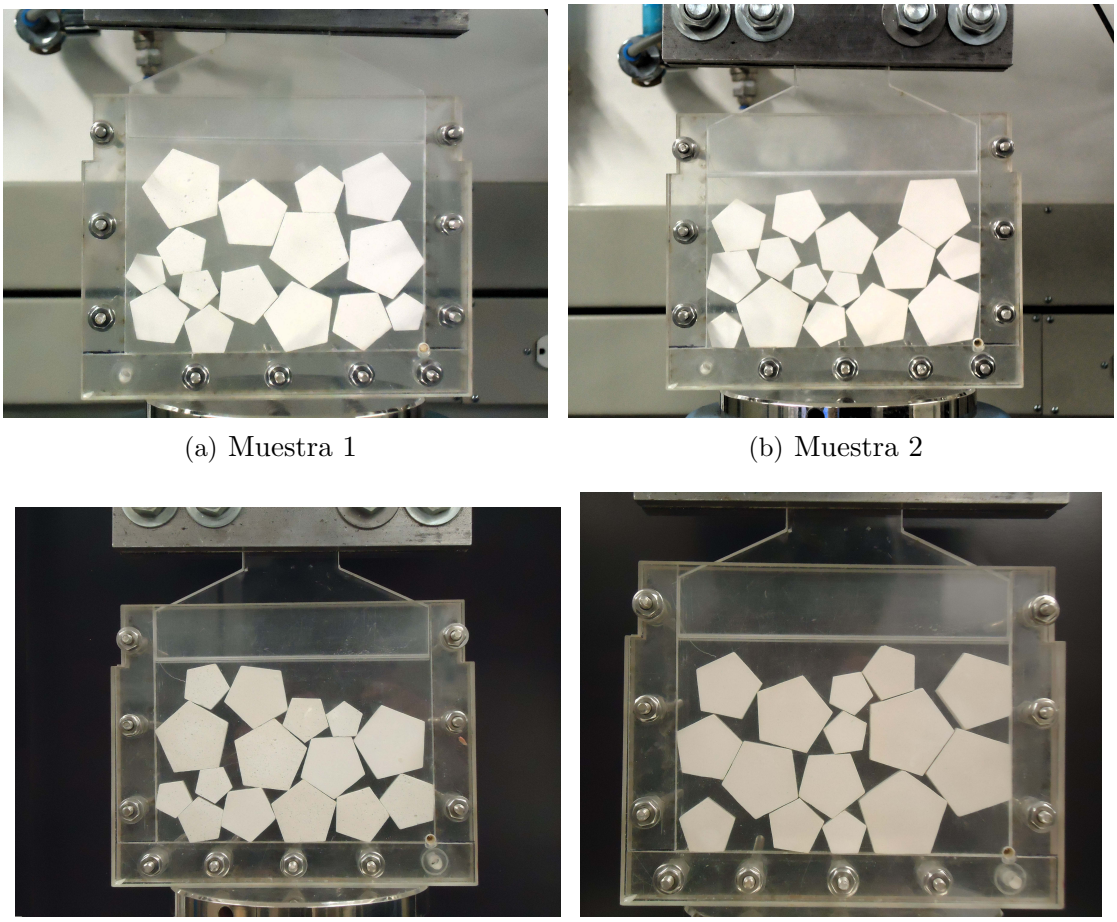
3.1. Procedimientos experimentales y numéricos

3.1.1. Montajes experimentales

En primer lugar, fue necesario escoger un material con el que se elaborarían las partículas pentagonales. El material tenía que cumplir los requisitos de comportarse de forma frágil, presentar fracturas fáciles de observar y poder moldearse rápidamente. Luego de realizar una serie de pruebas el material que mejor cumplió estas condiciones fue el yeso.

A continuación, se fijó la geometría de los pentágonos a una distribución de tamaños de 1cm a 2cm de radio circunscriptor y un espesor de 6mm. Se realizaron 4 distribuciones aleatorias de partículas en cajas de 14cm de ancho por 12cm de alto (Figura 3.1).

Los ensayos elaborados sobre las muestras 1, 2 y 3 fueron realizados tras imponer una velocidad de desplazamiento al muro superior y hasta alcanzar una deformación axial de



(a) Muestra 1 (b) Muestra 2

(c) Muestra 3 (d) Muestra 4

Figura 3.1: Sistemas de partículas para ensayos de compresión

aproximadamente el 18 %. El ensayo sobre la muestra 4 fue realizado con escalones de carga hasta los 100kg.

Posteriormente, se elaboró un montaje adicional con el objetivo de medir la resistencia a la tensión critica del yeso (i.e., σ_{crit}). Este ensayo consistió en someter partículas circulares de yeso a compresión diametral hasta la fractura. En total se llevaron a cabo 12 compresiones sobre partículas cuyos tamaños variaban entre 1cm y 2cm de radio y de espesor 6mm. Este procedimiento se elaboró en una prensa digital como se observa en la Figura 3.2, aplicando una tasa de desplazamiento constante y midiendo la carga en una celda ubicada en la parte superior de la máquina.

El estado inicial de las partículas y su estado fracturado se muestra en la Figura 3.3. En esta figura puede observarse que las grietas correspondieron a fallas por tensión indirecta como se describió en el *modo de fractura* presentado en el capítulo anterior.

Finalmente, este ensayo permitió encontrar que, en promedio, la resistencia a la tensión del yeso era de 800kPa.

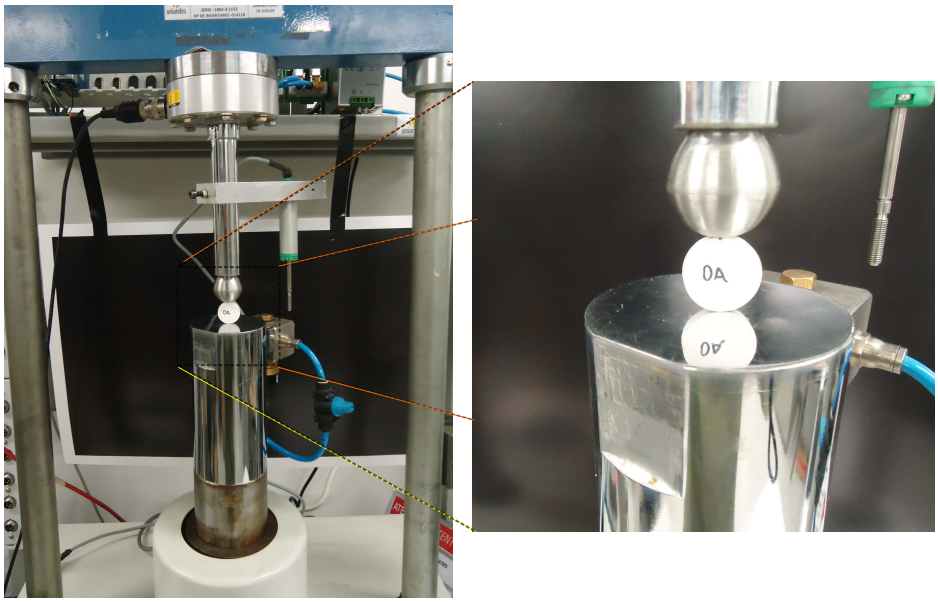


Figura 3.2: Ensayo de compresión sobre un disco

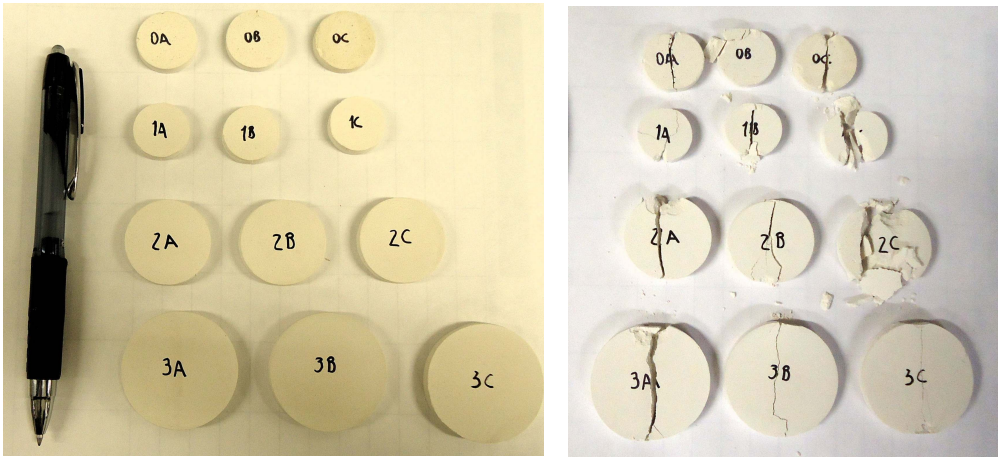


Figura 3.3: Juego de discos de yeso ensayados

3.1.2. Método de simulación

Las simulaciones numéricas se realizaron utilizado el método de elementos discretos denominado *Dinámica de contactos* (i.e., CD, por sus siglas en inglés), desarrollado por J. J. Moreau y M. Jean en los años 90 (Moreau, 1994; Jean, 1995, 1999; Radjaï & Richefeu, 2009; Radjaï & Dubois, 2011), e implementado en el programa de código abierto *LMGC90*, en el Laboratorio de Mecánica e Ingeniería Civil de la Universidad de Montpellier II. Este

método numérico puede ser entendido como la combinación de tres elementos, como se explica a continuación.

El primer elemento son las ecuaciones de movimiento (i.e., la segunda ley de Newton) integradas en un paso de tiempo. En esta forma, las ecuaciones de movimiento relacionan el impulso ejercido sobre cada partícula durante el paso de tiempo con el cambio en la cantidad de movimiento entre el inicio y el final del paso de tiempo.

El segundo elemento es un conjunto de leyes de contacto que determinan las posibles interacciones en los contactos entre partículas. Estas leyes están definidas como relaciones complementarias entre la impulsión ejercida en cada contacto y el cambio en la velocidad relativa entre las dos partículas en contacto entre el inicio y el final del paso de tiempo. La formulación de estas leyes es no-regular (i.e., nonsmooth en inglés), lo que implica que no requieren la introducción de coeficientes de regularización ni de amortiguamiento. Esta es una de las principales ventajas del método, ya que la formulación no-regular lleva a que puedan utilizarse pasos de tiempo más grandes y mayor número de partículas, en comparación con otros métodos de elementos discretos como la Dinámica Molecular (Azéma et al., 2012). La formulación no-regular de las leyes de contacto requiere la introducción de un coeficiente de restitución en los contactos, que determina la cantidad de energía disipada en las colisiones entre partículas. En las simulaciones realizadas el coeficiente de restitución fue nulo.

Específicamente, la ley de contacto que se utilizó en este trabajo establece que las partículas son infinitamente rígidas y la fricción entre ellas está dada por la relación de Coulomb, en la cual basta definir el coeficiente de resistencia al deslizamiento (i.e., μ_s). A través de mediciones en el laboratorio se encontró que este coeficiente, para partículas de yeso, era 0,78.

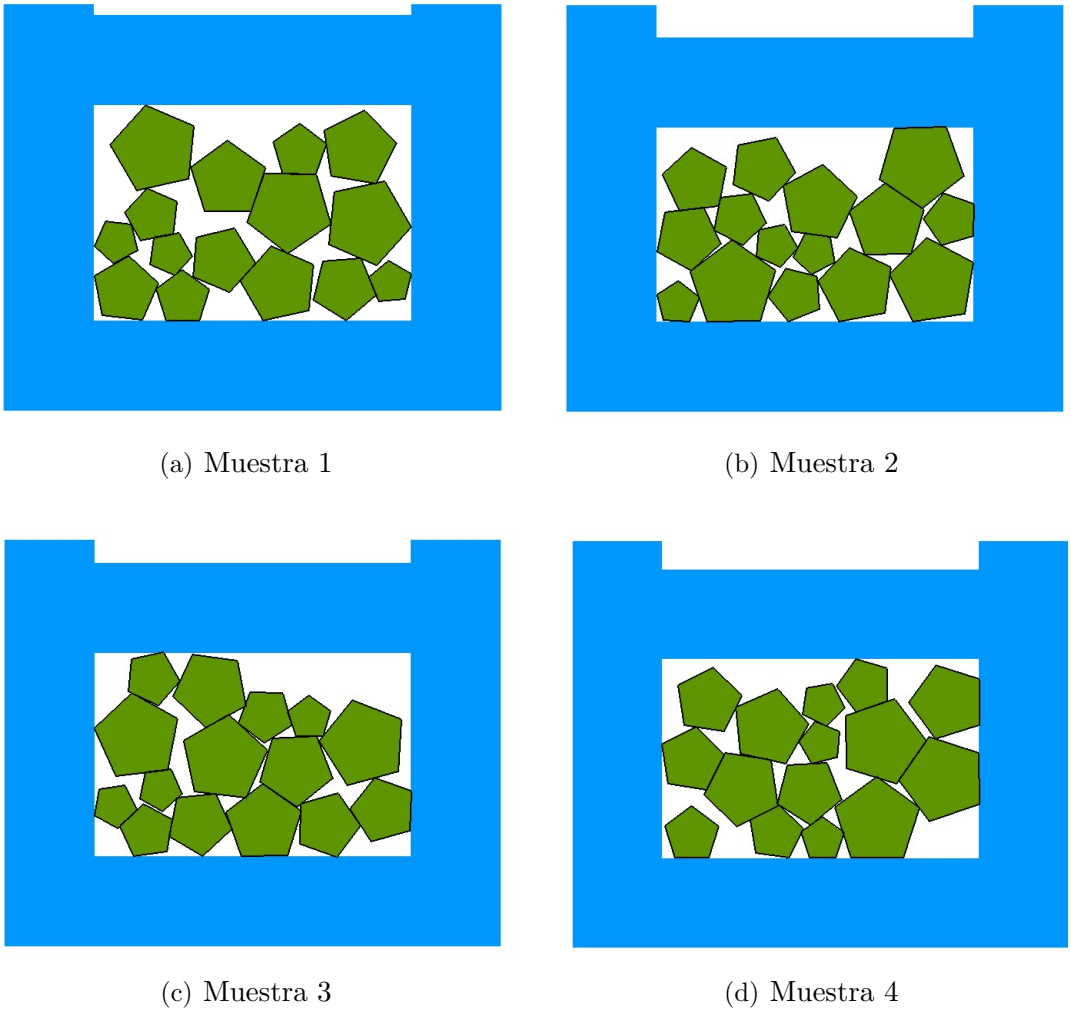
El tercer elemento es un algoritmo de solución que permite encontrar los impulsos y los cambios de cantidad de movimiento para cada partícula en el paso de tiempo. El sistema de ecuaciones a resolver es implícito, dado que la solución para cada partícula depende de la solución para todas las partículas que componen el sistema en el mismo paso de tiempo.

Para una descripción detallada del método de la Dinámica de Contactos, se recomienda referirse a Taboada et al. (2005); Radjaï & Richefeu (2009); Azéma et al. (2012), y para la explicación del mecanismo de detección de contactos para partículas poligonales se recomienda remitirse a Azéma et al. (2012).

Por otra parte, las razones por las cuales se decidió utilizar el programa *LMGC90* son que permite simular partículas con formas poligonales convexas tanto regulares como irregulares y su manipulación y modificación son relativamente sencillas. En efecto, el modelo de fractura propuesto pudo implementarse satisfactoriamente de tal modo que se

calcularan los esfuerzos de tensión y compresión para cada partícula, y se les permitiera dividirse en fragmentos una vez se alcanzaba el valor de tensión crítica.

Con el fin de reproducir los ensayos en el laboratorio, se reconstruyó numéricamente las organización inicial de partículas para cada muestra (Figura 3.4). Luego, se aplicaron las condiciones de velocidad o carga impuestas en el experimento físico y se guardó un registro de imágenes y evolución de diferentes parámetros durante las simulaciones.



(a) Muestra 1 (b) Muestra 2

(c) Muestra 3 (d) Muestra 4

Figura 3.4: Sistemas de partículas para ensayos de compresión - Simulación

3.2. Resultados y discusión

En primer lugar, fueron llevados a cabo los ensayos experimentales sobre las muestras construidas. Estos experimentos presentaron una cantidad importante de fracturas y permitieron observar la evolución del estado de las partículas tras eventos de fractura reales. Al comienzo del los ensayos se pudo observar una reacomodación de las partículas, suce-

dido por la aparición de las primeras grietas cuyos tamaños aumentaban progresivamente a medida que se aumentaban los desplazamientos y las cargas. A continuación, se comenzaban a presentar nuevas fracturas en partículas que ya habían sufrido fragmentación, y al mismo tiempo, se empezaban a degradar el yeso hasta formar polvo en algunos casos. La evolución del ensayo experimental se puede observar en la Figura 3.5.

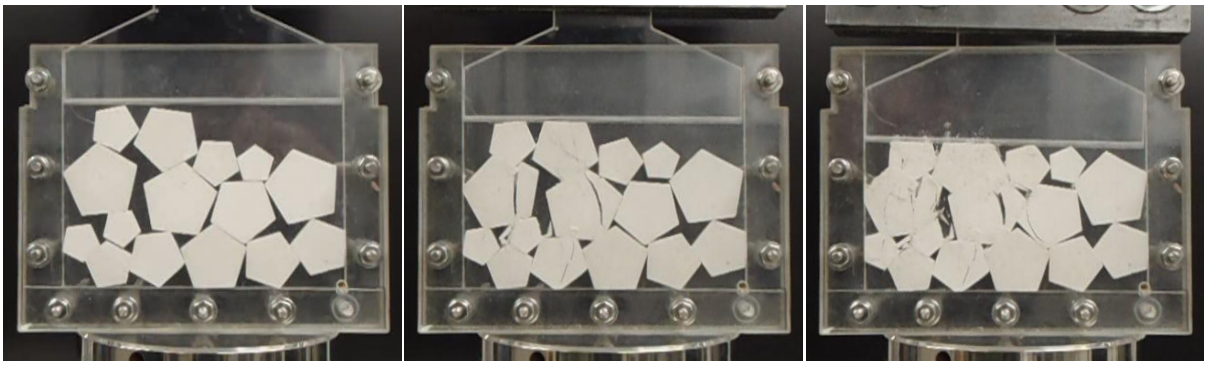


Figura 3.5: Evolución de las fracturas en el experimento

Luego de terminar los experimentos, se ejecutaron las simulaciones y se procedió a hacer diferentes comparaciones.

Inicialmente, se realizaron comparaciones cualitativas a través de la inspección visual de los registros fotográficos en el experimento e imágenes extraídas durante las simulaciones. En las Figuras 3.6, 3.7, 3.8 y 3.9, se pueden observar estados intermedios del ensayo de compresión en el laboratorio y su reproducción utilizando el modelo numérico para cada una de las muestras. Este paralelo permitió identificar el conjunto de partículas que fueron fracturadas en el ensayo físico y comprobar que tan aproximada era la reproducción de tales eventos por parte de los ensayos numéricos. En efecto, se pudo evidenciar que aunque no la totalidad de las partículas fracturadas coincidieron con las simulaciones, el grado de compatibilidad fue alto, teniendo en cuenta las partículas que sufrían fragmentación, la sucesión de las fracturas y sus orientaciones.

También se observó que bajo deformaciones verticales altas (i.e., mayores al 10 %), las partículas en el ensayo experimental empezaron a presentar perdidas importante de material en forma de partículas muy pequeñas y polvo tras sucesivas fracturas. Este material desprendido llenaba espacios vacíos y modificaban el desplazamiento de las partículas. Dado que las simulaciones no tenían en cuenta la perdida de material en los contactos y a lo largo de las grietas la comparación visual se limitó a un menor rango de deformación axial.

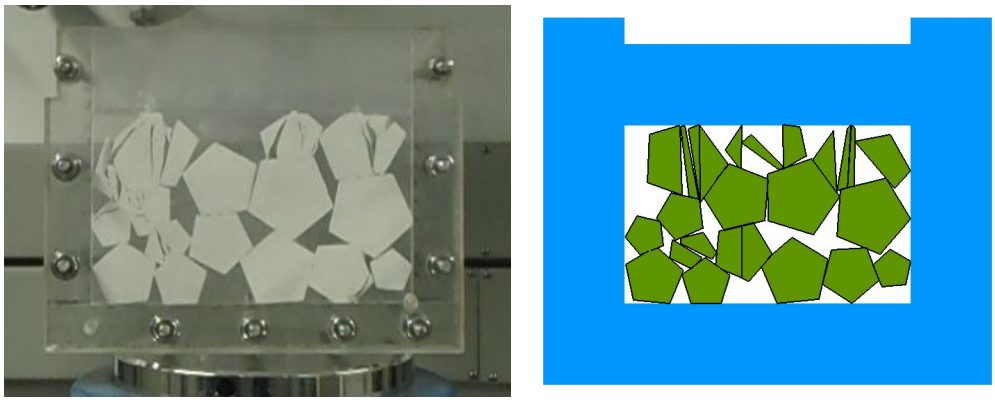


Figura 3.6: Comparación para la muestra 1

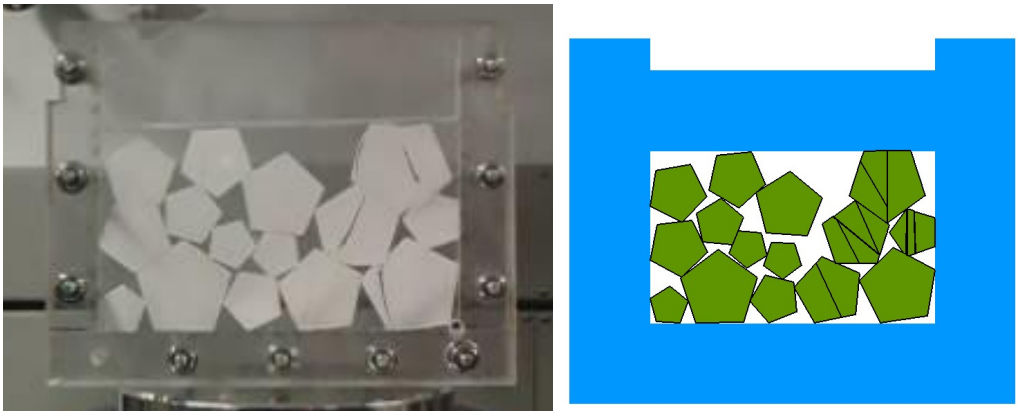


Figura 3.7: Comparación para la muestra 2

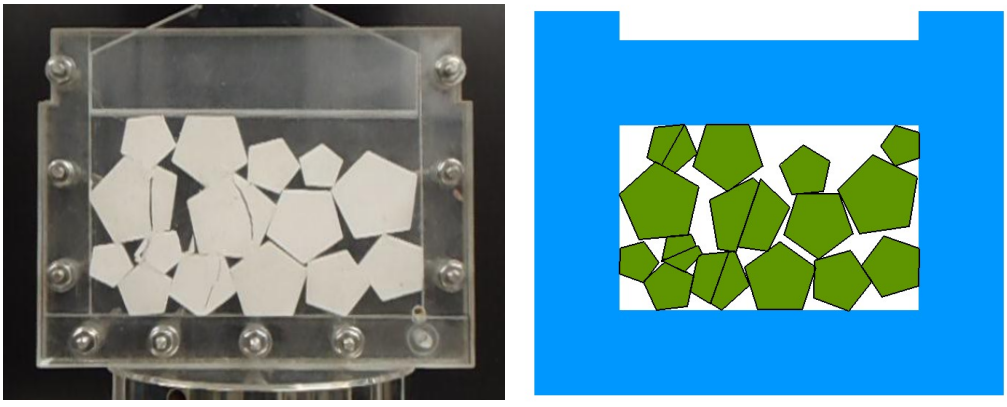


Figura 3.8: Comparación para la muestra 3

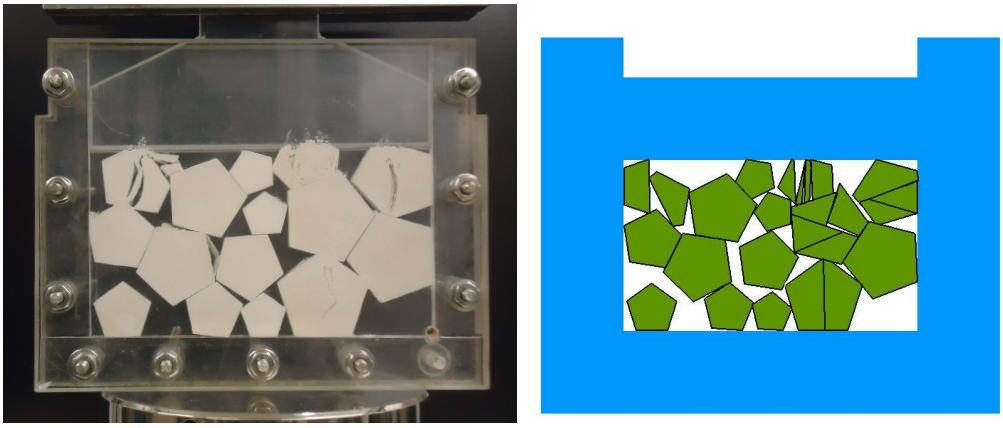


Figura 3.9: Comparación para la muestra 4

Por otra parte, fue posible realizar una comparación cuantitativa la cual permitió demostrar que los niveles de fuerzas en los ensayos de laboratorio y en las simulaciones eran similares. Específicamente, en el ensayo realizado sobre la muestra 3, se contó con una celda de carga que midió la fuerza aplicada sobre las partículas a medida que se realizaba la compresión controlando el desplazamiento del muro superior. En la simulación numérica el dato de fuerzas en los muros también fue registrado. Como resultado, se pudo trazar la Figura 3.10, en donde se muestra la fuerza vertical en el experimento y en la simulación a lo largo del ensayo. Para la línea correspondiente al experimento, se observa un aumento progresivo de la fuerza vertical, mientras que los datos de la simulación presentan repetidos saltos, no obstante el nivel de fuerzas es similar y están dentro de los mismos ordenes de magnitud.

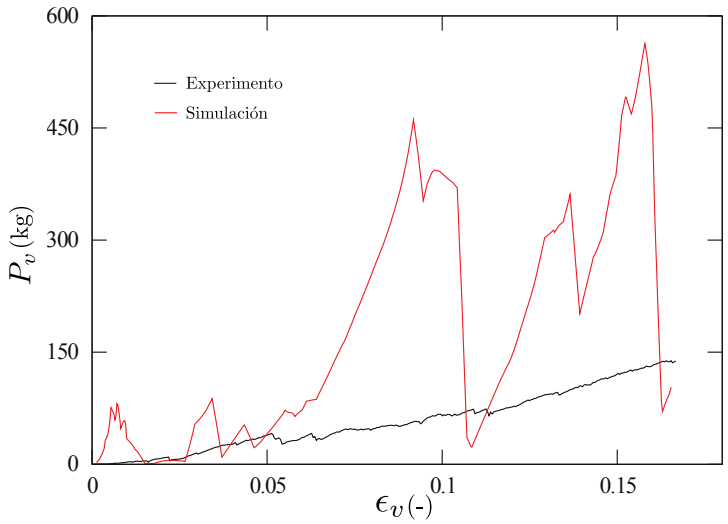


Figura 3.10: Comparación de fuerzas aplicadas en el experimento y la simulación para la muestra 3

Las razones por las que se presentaron diferencias cualitativas y cuantitativas entre el ensayo experimental y las simulaciones son por una parte, causadas por las características propias del método numérico utilizado (i.e., la dinámica de contactos). La naturaleza de este método establece que la rigidez de las partículas es infinita, lo cual tiene efectos como la aparición de fracturas y cambios rápidos en las fuerzas en el sistema bajo pequeños desplazamientos de los muros. Por otra parte, el sistema compuesto por 15 partículas se considera una representación pequeña de un material granular en la que ligeras variaciones en la organización inicial de las partículas o en sus desplazamientos a lo largo del ensayo tienen efectos importantes en la evolución de las fracturas.

Existen otras razones de tipo experimental que pudieron causar parte de las diferencias observadas. Entre estas se encuentran las imperfecciones, micro grietas o heterogeneidades en el yeso, la pérdida de material en las partículas por efecto del contacto con las paredes y ligeras excentricidades en la aplicación de la deformación o la carga.

Capítulo 4

Conclusiones y perspectivas

Se observó que la fractura de materiales granulares es un proceso complejo que involucra, para su simulación, varias simplificaciones en torno a la forma de las partículas, a los esfuerzos que ocasionan las grietas y las formas de los fragmentos. Estas simplificaciones fueron consolidadas en un modelo teórico para la fractura de granos con formas poligonales.

El análisis aquí presentado, identificó las principales características que el modelo de fractura debe contener, como lo son el cálculo de esfuerzos, el criterio de falla y el modo de falla. Específicamente se comprobó, a través de las coincidencias entre los ensayos de laboratorio y las simulaciones, que los esfuerzos de tensión y compresión son cantidades adecuadas para describir las cargas sobre una partícula, se mostró que el criterio de falla puede estar fácilmente relacionado con el valor de tensión máxima neta y que la forma de las fracturas coinciden satisfactoriamente si estas siguen la dirección del esfuerzo principal mayor.

Así mismo, se observó que el cálculo de los esfuerzos es una parte fundamental en el problema de fragmentación de partículas, y a pesar que su tratamiento para partículas poligonales no se puede realizar de manera explícita, sus valores resultaron obedecer relaciones sencillas que describen satisfactoriamente su comportamiento a compresión y a tensión.

Las comparaciones realizadas entre ensayos experimentales y las simulaciones mostraron que, si bien hubo diferencias, el nivel de coincidencia fue alto considerando el conjunto de partículas que sufrieron fracturas, la sucesión de tales eventos, las direcciones de las grietas y lo relativamente pequeño del sistema analizado.

Estudios posteriores se pueden encargar, en una primera etapa, de complementar la comprobación del modelo teórico a través de comparaciones con ensayos de compresión sobre sistemas con mayor número de partículas, o por medio de otros tipos de ensayos como biaxiales o cortes directos. Es importante que se elaboren comparaciones de tipo

cuantitativo, tales como la evolución de la compacidad y de la distribución granulométrica, y se haga un análisis de la frecuencia de las fracturas en función de las cargas o deformaciones aplicadas.

En etapas siguientes, este modelo y la implementación realizada en el programa *LMGC90*, pueden utilizarse como herramienta para el análisis de problemas a la escala de unas cuantas partículas, como la evolución de la textura, las cadenas de fuerzas y la coordinación; y para problemas macroscópicos, como la variación de la resistencia al corte, cambios en la superficie de fluencia y la degradación de la granulometría ante cargas cíclicas.

Bibliografía

Abe, S. (2005). Grain fracture in 3D numerical simulations of granular shear. *Geophysical Research Letters*, *32*(5), L05305.

Aström, J., & Herrmann, H. (1998). Fragmentation of grains in a two-dimensional packing. *The European Physical Journal B*, *5*(3), 551–554.

Azéma, E., Estrada, N., & Radjaï, F. (2012). Nonlinear effects of particle shape angularity in sheared granular media. *Physical Review E*, *86*(4), 041301.

Bagherzadeh Kh., A., Mirghasemi, A., & Mohammadi, S. (2011). Numerical simulation of particle breakage of angular particles using combined DEM and FEM. *Powder Technology*, *205*(1-3), 15–29.

Bolton, M. (2000). The role of micro-mechanics in soil mechanics. *Proc. Soil Behavior and Geo-Micromechanics*.

Buchholtz, V., Freund, J., & Pöschel, T. (2000). Molecular dynamics of comminution in ball mills. *The European Physical Journal B*, *16*(1), 169–182.

Cecconi, M., DeSimone, A., Tamagnini, C., & M.B. Viggiani, G. (2002). A constitutive model for granular materials with grain crushing and its application to a pyroclastic soil. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, *26*(15), 1531–1560.

Feda, J. (2002). Notes on the effect of grain crushing on the granular soil behaviour. *Engineering Geology*, *63*(1-2), 93–98.

Griffith, A. (1921). The phenomena of rupture and flow in solids. *Philosophical transactions of the royal society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character.*, *221*.

Guimaraes, M., Valdes, J., a.M. Palomino, & Santamarina, J. (2007). Aggregate production: Fines generation during rock crushing. *International Journal of Mineral Processing*, *81*(4), 237–247.

Guo, Y., & Morgan, J. K. (2006). The frictional and micromechanical effects of grain comminution in fault gouge from distinct element simulations. *Journal of Geophysical Research*, *111*(B12), B12406.

Jean, M. (1995). *Mechanics of Geometrical Interfaces*, (pp. 463–486). Elsevier, New York.

Jean, M. (1999). The non smooth contact dynamics method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, *117*, 235 – 257.

Jensen, R., & Plesha, M. (2001). DEM simulation of particle damage in granular media-structure interfaces. *International Journal of Geomechanics*, *1*(1), 21–39.

Lim, W. L., & McDowell, G. R. (2005). Discrete element modelling of railway ballast. *Granular Matter*, *7*(1), 19–29.

Lobo-guerrero, S. (2006). *Evaluation of crushing in glanular materials using the discrete element mehot and fractal theory*. Ph.D. thesis, University of Pittsburgh.

Lobo-Guerrero, S. (2006). Visualization of crushing evolution in granular materials under compression using DEM. *International Journal of Geomechanics*, (June), 195–200.

Lobo-Guerrero, S., & Vallejo, L. E. (2007). Influence of pile shape and pile interaction on the crushable behavior of granular materials around driven piles: DEM analyses. *Granular Matter*, *9*(3-4), 241–250.

McDowell, G., Bolton, M., & Robertson, D. (1996). The fractal crushing of granular materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*.

McDowell, G., & Harireche, O. (2002). Discrete element modelling of soil particle fracture. *Géotechnique*, (2), 2–6.

Moreau, J. J. (1994). Some numerical methods in multibody dynamics: Application to granular materials. *European Journal of Mechanics, A/Solids*, *13 (Suppl.)*(4), 93–114.

Radjaï, F., & Dubois, F. (2011). *Discrete Numerical Modeling of Granular Materials*. Wiley.

Radjaï, F., & Richefeu, V. (2009). Contact dynamics as a nonsmooth discrete element method. *Mechanics of Materials*, *41*(6), 715–728.

Taboada, A., Chang, K.-J., Radjaï, F., & Bouchette, F. (2005). Rheology, force transmission, and shear instabilities in frictional granular media from biaxial numerical tests using the contact dynamics method. *J. Geophys. Res.*, *110*(9), B09202.

Tsoungui, O., Vallet, D., & Charmet, J. (1999). Numerical model of crushing of grains inside two-dimensional granular materials. *Powder technology*, (pp. 190–198).