

# **ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL**

**FACULTAD DE INGENIERÍA CIVIL Y AMBIENTAL**

**ESTUDIO NUMÉRICO COMPUTACIONAL DISCRETO DE LOS  
MECANISMOS DE FISURA DE UNA MATRIZ DE HORMIGÓN EN  
COMPRESIÓN UNIAXIAL**

**PROYECTO PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL  
MENCIÓN ESTRUCTURAS**

**MARIO ATAHUALPA DE LA TORRE RAMÍREZ  
zumack\_mc@yahoo.com**

**DIRECTOR: CARLOS FABIÁN ÁVILA VEGA Ph.D.  
cavila67@caltech.edu**

**Quito, mayo 2019**

## **DECLARACIÓN**

Yo, Mario Atahualpa De La Torre Ramírez, declaro bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

La Escuela Politécnica Nacional, puede hacer uso de los derechos correspondientes a este trabajo, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normativa institucional vigente.

---

**MARIO ATAHUALPA DE LA TORRE RAMÍREZ**

## **CERTIFICACIÓN**

Certifico que el presente trabajo fue realizado por Mario Atahualpa De La Torre Ramírez, bajo mi supervisión.

---

**PH.D. CARLOS FABIÁN ÁVILA VEGA**

DIRECTOR DEL PROYECTO

## AGRADECIMIENTOS

Al culminar este trabajo quiero agradecer a todas las personas que de una u otra manera han contribuido a la realización del presente proyecto.

Principalmente a mi director de tesis Ph.D. Carlos Ávila, quien con sus conocimientos y consejos colaboró en la ejecución de este proyecto. Por permitirme realizar este tema y encaminarme en el mundo de la investigación de materiales a través de la modelación computacional.

A Dios, por darme la vida y poder disfrutar de sus maravillas.

A mis padres; Elena y Mario, por su infinito amor, esfuerzo y dedicación en virtud de concederme la oportunidad de acercarme a la ciencia. Por inculcarme las virtudes del trabajo, la verdad y la excelencia.

A mi hermano; Ricky, por su compañía, apoyo y amor incondicional durante toda mi vida. Por su comprensión, su cariño y carisma; que le da mucha alegría a mi vida. Y por impulsarme a ser cada día la mejor versión de mí mismo.

A mi familia, especialmente a mis tíos; Digna, José, Delia y Alberto, por su incondicional apoyo en el transcurso de mi vida, este sueño no podría haber sido posible sin ellos.

A mis amigos cercanos; Wilmer Astudillo, Ángel Gómez, Daniel Sánchez por su amistad y compañía en la vida universitaria. Es una bendición haberlos conocido.

A la fundación Hanns Seidel, que con su programa de becas me brindó el apoyo necesario para culminar mi carrera universitaria.

Mario Atahualpa De La Torre Ramírez

## DEDICATORIA

A mi mamá; Rosa Elena.

Dios supo bendecirme con su infinito amor que es capaz de materializar los sueños más utópicos.

Todas las metas de mi vida no serían posibles sin su apoyo incondicional, solo ella sabe las palabras correctas para no dejarme decaer en los momentos de desidia. Su cariño sabe fortalecer y su entrega sabe conmover.

Su sacrificio y trabajo incansable por el bienestar de mi hermano y mío, nos motivan a ser cada día mejores personas, esforzarnos por alcanzar ideales y mantenernos en el camino de la excelencia.

Es mi inspiración y la persona a quien más admiro.

Mario Atahualpa De La Torre Ramírez

## CONTENIDO

DECLARACIÓN .....	II
CERTIFICACIÓN .....	III
AGRADECIMIENTOS .....	IV
DEDICATORIA.....	V
CONTENIDO.....	VI
LISTADO DE FIGURAS .....	XI
LISTADO DE TABLAS .....	XVII
RESUMEN .....	XIX
ABSTRACT .....	XXI
PRESENTACIÓN .....	XXIII
<b>INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO 1 .....</b>	<b>1</b>
1.1 GENERALIDADES.....	1
1.2 LIMITACIONES DEL ESTUDIO .....	4
1.3 OBJETIVOS.....	5
1.3.1 OBJETIVO GENERAL .....	5
1.3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	5
1.4 ALCANCE .....	6
1.5 JUSTIFICACIÓN .....	7
1.6 METODOLOGÍA .....	10
1.6.1 ACTIVIDAD 1: REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA .....	10
1.6.2 ACTIVIDAD 2: GENERACIÓN DE ENSAMBLES DE PARTÍCULAS .....	11
1.6.3 ACTIVIDAD 3: MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN .....	11
1.6.4 ACTIVIDAD 4: ANÁLISIS DE RESULTADOS .....	12
<b>CAPÍTULO 2 .....</b>	<b>13</b>
<b>MARCO TEÓRICO .....</b>	<b>13</b>

2.1 MATERIALES GRANULARES.....	13
2.1.1 DESCRIPCIÓN.....	13
2.1.2 COMPORTAMIENTO.....	14
2.2 MÉTODO DEL ELEMENTO DISCRETO.....	15
2.2.1 INTRODUCCIÓN.....	15
2.2.2 ANTECEDENTES Y DESCRIPCIÓN.....	15
2.2.3 ECUACIONES QUE GOBIERNAN EL DEM.....	16
2.2.4 PLANTEAMIENTO NUMÉRICO DEL DEM.....	17
2.2.5 INTEGRACIÓN DE VELOCIDAD DE VERLET.....	19
2.2.6 CONTACTO ENTRE PARTÍCULAS.....	20
2.2.6.1 Esferas duras.....	20
2.2.6.2 Esferas suaves.....	20
2.2.7 MODELO DE CONTACTO.....	21
2.2.7.1 Fuerza normal.....	22
2.2.7.2 Fuerza tangencial.....	23
2.2.8 MODELO DE ENLACE BPM.....	24
2.2.8.1 Planteamiento numérico del modelo BPM.....	26
2.2.8.2 Limitaciones del modelo BPM.....	29
2.2.9 MODELO DE ADHERENCIA JKR.....	31
2.2.9.1 Planteamiento numérico del modelo de adherencia JKR.....	32
2.2.9.2 Energía de adhesión JKR.....	36
2.2.10 INCREMENTO DE TIEMPO.....	39
2.2.10.1 Tiempo de Rayleigh.....	39
2.2.11 INTEGRACIÓN DEL MOVIMIENTO.....	40
2.3 CARACTERÍSTICAS DEL CONGLOMERADO GRANULAR.....	43
2.3.1 DILATANCIA.....	43
2.3.2 SEGREGACIÓN.....	44
2.3.3 DENSIDAD DEL CONGLOMERADO (BULK DENSITY).....	44
2.3.4 NUMERO DE COORDINACIÓN Y CADENAS DE FUERZAS.....	44
2.3.5 FUERZAS Y TENSIONES.....	45
2.3.6 ESFUERZOS EN UN SÓLIDO GRANULAR.....	45
2.3.7 CRITERIO DE FALLA DEL CONGLOMERADO COHESIVO DEL HORMIGÓN.....	47
2.4 COMPRESIÓN UNIAXIAL DEL HORMIGÓN.....	49

2.4.1 INTRODUCCIÓN .....	49
2.4.2 PROCEDIMIENTO EXPUESTO EN ASTM C39/C39M-18 .....	49
2.4.3 ENSAYO DE COMPRESIÓN CON PROBETAS CÚBICAS .....	50
2.4.4 FISURAS EN HORMIGÓN .....	51
<b>CAPÍTULO 3 .....</b>	<b>53</b>
<b>METODOLOGÍA .....</b>	<b>53</b>
3.1 INTRODUCCIÓN .....	53
3.2 SIMULACIÓN COMPUTACIONAL EN PARALELO .....	53
3.3 UNIDADES FÍSICAS .....	58
3.4 GEOMETRÍA DEL PISTÓN DE COMPRESIÓN .....	58
3.5 PROPIEDADES DE LOS MATERIALES .....	60
3.5.1 PROPIEDADES DEL PISTÓN DE COMPRESIÓN .....	60
3.5.2 PROPIEDADES DE GRAVA .....	61
3.5.3 PROPIEDADES DE ARENA .....	62
3.6 GRANULOMETRÍA .....	63
3.6.1 GRANULOMETRÍA DE GRAVA .....	63
3.6.1.1 GRANULOMETRÍA DE GRAVA 1 .....	64
3.6.1.2 GRANULOMETRÍA DE GRAVA 2 .....	65
3.6.1.3 GRANULOMETRÍA DE GRAVA 3 .....	66
3.6.2 GRANULOMETRÍA DE ARENA .....	67
3.7 DOSIFICACIÓN PARA EL HORMIGÓN .....	69
3.7.1 DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN A .....	72
3.7.2 DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN B .....	73
3.7.3 DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN C .....	73
3.7.4 INGRESO DE DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN EN LIGGGHTS .....	74
3.8 CREACIÓN DE INPUT DATA PARA EL HORMIGÓN .....	78
3.9 ENERGÍA DE ADHESIÓN JKR TEÓRICO PARA EL HORMIGÓN .....	80
3.10 DENSIDAD DE ENERGÍA DE COHESIÓN JKR EN LIGGGHTS .....	87
3.11 FACTOR DE CORRECCIÓN EN DENSIDAD DE ENERGÍA DE COHESIÓN JKR EN LIGGGHTS .....	94
3.12 CONDICIONES DE FRONTERA .....	97
3.12.1 PARED RÍGIDA .....	97



3.12.2 MOVIMIENTO DEL PISTÓN DE COMPRESIÓN .....	98
3.13 ESTABILIDAD E INCREMENTO DEL TIEMPO .....	100
3.13.1 TRANSFERENCIA DE ENERGÍA DE RAYLEIGH .....	100
3.13.2 TIME STEP .....	101
3.14 SCRIPT CARACTERÍSTICO .....	101
3.14.1 SCRIPT CARACTERÍSTICO PARA GENERACIÓN DE INPUT DATA .....	101
3.14.2 SCRIPT CARACTERÍSTICO DE COMPRESIÓN UNIAxIAL .....	104
3.14.3 SCRIPT CARACTERÍSTICO SLURM PARA CLUSTER .....	107
<b>CAPÍTULO 4 .....</b>	<b>108</b>
<b>ANÁLISIS DE RESULTADOS .....</b>	<b>108</b>
4.1 INTRODUCCIÓN .....	108
4.2 CURVA ESFUERZO - DEFORMACIÓN .....	108
4.2.1 HORMIGÓN A .....	109
4.2.2 HORMIGÓN B .....	112
4.2.3 HORMIGÓN C .....	115
4.2.4 COMPARACIÓN DE CAPACIDAD UNIAxIAL .....	118
4.3 DESPLAZAMIENTOS POR PARTÍCULA .....	121
4.3.1 HORMIGÓN A .....	121
4.3.2 HORMIGÓN B .....	131
4.3.3 HORMIGÓN C .....	140
4.4 CADENAS DE FUERZAS .....	149
4.4.1 HORMIGÓN A .....	149
4.4.2 HORMIGÓN B .....	156
4.4.3 HORMIGÓN C .....	163
4.5 ESFUERZOS INTERNOS .....	170
4.5.1 HORMIGÓN A .....	170
4.5.2 HORMIGÓN B .....	174
4.5.3 HORMIGÓN C .....	177
4.6 TENDENCIA DE FISURA .....	180
4.6.1 HORMIGÓN A .....	180
4.6.2 HORMIGÓN B .....	193
4.6.3 HORMIGÓN C .....	206

<b>CAPÍTULO 5</b> .....	<b>219</b>
<b>CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES</b> .....	<b>219</b>
5.1 CONCLUSIONES .....	219
5.2 RECOMENDACIONES .....	222
5.3 TRABAJO A FUTURO .....	223
<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>224</b>
<b>ANEXOS</b> .....	<b>232</b>
<b>ANEXO N° 1</b> .....	<b>233</b>
<b>CÓDIGO EN MATLAB PARA GENERAR INPUT DATA DE LIGGGHTS</b> .....	<b>233</b>
<b>ANEXO N° 2</b> .....	<b>236</b>
<b>CALCULOS DE DOSIFICACION DE HORMIGON</b> .....	<b>236</b>
<b>ANEXO N° 3</b> .....	<b>240</b>
<b>DETALLE DE SCRIPT CARACTERÍSTICO EN LIGGGHTS</b> .....	<b>240</b>

## LISTADO DE FIGURAS

<b>FIGURA 1.1.</b> Representación de la meso escala del hormigón. ....	3
<b>FIGURA 2.1</b> Tipos de partícula en DEM .....	21
<b>FIGURA 2.2</b> Traslape entre partículas en DEM. ....	22
<b>FIGURA 2.3</b> Modelo de contacto de partículas: masa, resorte, amortiguador. ....	22
<b>FIGURA 2.4</b> Comportamiento fuerza-desplazamiento del sistema granular BPM .....	25
<b>FIGURA 2.5</b> Proceso de generación del conglomerado granular BPM.....	30
<b>FIGURA 2.6</b> Resultado experimental y numérico del ensayo de flexión de tres puntos en viga: Curva Carga aplicada vs incremento de abertura de zona de falla (CMOD).....	31
<b>FIGURA 2.7</b> Zona de contacto entre dos partículas esféricas. ....	32
<b>FIGURA 2.8</b> Curva JKR fuerza-distancia enfocada en una esfera elástica al separarse de una superficie rígida. ....	36
<b>FIGURA 2.9</b> Máquina JKR desarrollada por Tirrel y otros en 1995.....	37
<b>FIGURA 2.10</b> Esquema de medición de fuerzas de adhesión. ....	38
<b>FIGURA 2.11</b> Esquema de la fuerza pullout (F).....	39
<b>FIGURA 2.12</b> Dos discos comprimidos entre paredes rígidas. ....	41
<b>FIGURA 2.13</b> Proceso de cálculo en DEM.....	43
<b>FIGURA 2.14</b> Dilatancia del material granular.- existe re ordenamiento de partículas y cambio de volumen de (a) a (b) .....	43
<b>FIGURA 2.15</b> Cadenas de fuerzas en un conglomerado granular con enlaces cohesivos. ....	44
<b>FIGURA 2.16</b> a) Fuerza aplicada F; b) Fuerza resultante, $F_s$ , $F_n$ y esfuerzos .....	45
<b>FIGURA 2.17</b> Esquema del sistema de celdas propuesto por Bagi (1996).....	46
<b>FIGURA 2.18</b> ITZ en el hormigón obtenida con barrido microscópico electrónico. Aumento de 200 a 1 con agregados de 3mm de diámetro .....	48
<b>FIGURA 2.19</b> Muestra de fisuras encontradas con ensayos experimentales en especímenes de geometría cilíndrica. ....	51
<b>FIGURA 2.20</b> Esquemas de patrones de fractura en ASTM C39/C39M-18.....	52

<b>FIGURA 3.1</b> Comando squeue. ....	56
<b>FIGURA 3.2</b> Comando tail -f.....	56
<b>FIGURA 3.3</b> Directorio remoto en el clúster.....	56
<b>FIGURA 3.4</b> Entorno Winscp .....	57
<b>FIGURA 3.5</b> Geometría del pistón de compresión.....	59
<b>FIGURA 3.6</b> Esquema del pistón de compresión en el modelo. ....	59
<b>FIGURA 3.7</b> Curva granulométrica de grava 1.....	65
<b>FIGURA 3.8</b> Curva granulométrica de grava 2.....	66
<b>FIGURA 3.9</b> Curva granulométrica de grava 3.....	67
<b>FIGURA 3.10</b> Curva granulométrica de arena .....	68
<b>FIGURA 3.11.</b> Proceso de inserción de partículas en el volumen de control. .....	79
<b>FIGURA 3.12</b> Estado final del conglomerado granular, vista en 3D y en corte. ....	80
<b>FIGURA 3.13</b> Geometría de un espécimen dogbone para ensayo de tensión directa.....	82
<b>FIGURA 3.14</b> Geometría de espécimen dogbone.....	83
<b>FIGURA 3.15</b> Patrón de fisura a tensión del hormigón no reforzado en especimen tipo DogBone. ....	83
<b>FIGURA 3.16</b> Esquema de partículas en la zona de rotura en el espécimen tipo dogbone en perfil (a) y en planta (b).....	84
<b>FIGURA 3.17</b> Diagrama de dist en LIGGGHTS .....	88
<b>FIGURA 3.18</b> Curva Fuerza JKR y Fuerza Hertz vs radio de área de contacto (a), para el caso con Densidad de energía de cohesión de $2,16E+09 \text{ J/m}^3$ .....	91
<b>FIGURA 3.19</b> Curva Fuerza JKR menos Fuerza Hertz vs radio de área de contacto (a), para el caso con Densidad de energía de cohesión de $2,16E+09 \text{ J/m}^3$ .....	91
<b>FIGURA 3.20</b> Vista en perfil del conglomerado con Densidad de energía de cohesión $2.16E+09 \text{ J/m}^3$ para el agregado grueso y $2.47E+09 \text{ J/m}^3$ para el agregado fino .....	95
<b>FIGURA 3.21</b> Vista 3D del conglomerado con Densidad de energía de cohesión $2.16E+09 \text{ J/m}^3$ para el agregado grueso y $2.47E+09 \text{ J/m}^3$ para el agregado fino .....	96

<b>FIGURA 3.22.</b> Curva esfuerzo (Pa) vs tiempo ( $5 \times 10^{-7}$ seg) para el hormigón representado con Densidad de energía de cohesión $2.16 \times 10^9$ J/m <sup>3</sup> para el agregado grueso y $2.47 \times 10^9$ J/m <sup>3</sup> para el agregado fino .....	96
<b>FIGURA 3.23</b> Esquema de condiciones de frontera del modelo DEM del hormigón .....	98
<b>FIGURA 3.24</b> Condición de frontera superior del modelo DEM del hormigón: Pistón de compresión .....	98
<b>FIGURA 3.25</b> Curva esfuerzo vs deformación unitaria típica para el hormigón en compresión uniaxial .....	99
<b>FIGURA 4.1</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria del modelo discreto del hormigón A.....	110
<b>FIGURA 4.2</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta del modelo discreto del hormigón A.....	110
<b>FIGURA 4.3</b> Diagrama Esfuerzo vs Tiempo del modelo discreto del hormigón A.....	111
<b>FIGURA 4.4</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria del modelo discreto del hormigón B.....	113
<b>FIGURA 4.5</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta del modelo discreto del hormigón B.....	113
<b>FIGURA 4.6</b> Diagrama Esfuerzo vs Tiempo del modelo discreto del hormigón B.....	114
<b>FIGURA 4.7</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria del modelo discreto del hormigón C. ....	116
<b>FIGURA 4.8</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta del modelo discreto del hormigón C. ....	116
<b>FIGURA 4.9</b> Diagrama Esfuerzo vs Tiempo del modelo discreto del hormigón C.....	117
<b>FIGURA 4.10</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria combinado de los modelos discretos de hormigón A, B y C.....	119
<b>FIGURA 4.11</b> Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta combinado de los modelos discretos de hormigón A, B y C.....	120
<b>FIGURA 4.12</b> Diagrama Esfuerzo vs Tiempo combinado de los modelos discretos de hormigón A, B y C.....	121
<b>FIGURA 4.13</b> Modelo hormigón A deformado en 3D .....	125
<b>FIGURA 4.14</b> Modelo hormigón A deformado en sección $x=5$ cm.....	126

<b>FIGURA 4.15</b> Modelo hormigón A deformado en sección $x=10\text{cm}$ .....	127
<b>FIGURA 4.16</b> Vistas en 3D de desplazamiento total por partícula del hormigón A. Antes y al final de la compresión uniaxial. ....	128
<b>FIGURA 4.17</b> Desplazamientos por partícula en sección $x=5\text{cm}$ del hormigón A .....	129
<b>FIGURA 4.18</b> Desplazamientos por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón A .....	130
<b>FIGURA 4.19</b> Modelo hormigón B deformado en 3D. ....	134
<b>FIGURA 4.20</b> Modelo hormigón B deformado en sección $x=5\text{cm}$ .....	135
<b>FIGURA 4.21</b> Modelo hormigón B deformado en sección $x=10\text{cm}$ .....	136
<b>FIGURA 4.22</b> Vistas en 3D de desplazamiento total por partícula del hormigón B. Antes y al final de la compresión uniaxial. ....	137
<b>FIGURA 4.23</b> Desplazamientos por partícula en sección $x=5\text{cm}$ en hormigón B .....	138
<b>FIGURA 4.24</b> Desplazamientos por partícula en sección $x=10\text{cm}$ en hormigón B .....	139
<b>FIGURA 4.25</b> Modelo hormigón C deformado en 3D. ....	143
<b>FIGURA 4.26</b> Modelo hormigón C deformado en sección $x=5\text{cm}$ .....	144
<b>FIGURA 4.27</b> Modelo hormigón C deformado en sección $x=10\text{cm}$ .....	145
<b>FIGURA 4.28</b> Vistas en 3D de desplazamiento total por partícula del hormigón C. Antes y al final de la compresión uniaxial. ....	146
<b>FIGURA 4.29</b> Desplazamientos por partícula en sección $x=5\text{cm}$ en hormigón C .....	147
<b>FIGURA 4.30</b> Desplazamientos por partícula en sección $x=10\text{cm}$ en hormigón C .....	148
<b>FIGURA 4.31</b> Vistas en 3D de cadenas de fuerza del hormigón A, en planta (a) y en elevación (b). Antes y al final de la compresión uniaxial. ....	151
<b>FIGURA 4.32</b> Cadenas de fuerzas en sección $x=5\text{ cm}$ del hormigón A .....	152
<b>FIGURA 4.33</b> Cadenas de fuerzas en sección $x=10\text{ cm}$ del hormigón A .....	153
<b>FIGURA 4.34</b> Cadenas de fuerzas en sección $z=14\text{ cm}$ del hormigón A .....	154
<b>FIGURA 4.35</b> Cadenas de fuerzas en sección $z=10\text{ cm}$ del hormigón A .....	155
<b>FIGURA 4.36</b> Vistas en 3D de cadenas de fuerza del hormigón B, en planta (a) y en elevación (b). Antes y al final de la compresión uniaxial. ....	158

<b>FIGURA 4.37</b> Cadenas de fuerzas en sección $x=5$ cm del hormigón B .....	159
<b>FIGURA 4.38</b> Cadenas de fuerzas en sección $x=10$ cm del hormigón B .....	160
<b>FIGURA 4.39</b> Cadenas de fuerzas en sección $z=14$ cm del hormigón B .....	161
<b>FIGURA 4.40</b> Cadenas de fuerzas en sección $z=10$ cm del hormigón B .....	162
<b>FIGURA 4.41</b> Vistas en 3D de cadenas de fuerza del hormigón C, en planta (a) y en elevación (b). Antes y al final de la compresión uniaxial. ....	165
<b>FIGURA 4.42</b> Cadenas de fuerzas en sección $x=5$ cm del hormigón C .....	166
<b>FIGURA 4.43</b> Cadenas de fuerzas en sección $x=10$ cm del hormigón C .....	167
<b>FIGURA 4.44</b> Cadenas de fuerzas en sección $z=14$ cm del hormigón C .....	168
<b>FIGURA 4.45</b> Cadenas de fuerzas en sección $z=10$ cm del hormigón C .....	169
<b>FIGURA 4.46</b> Distribución de Esfuerzos Axiales internos del hormigón A .....	172
<b>FIGURA 4.47</b> Distribución de Esfuerzos Cortantes internos del hormigón A .....	173
<b>FIGURA 4.48</b> Distribución de Esfuerzos Axiales internos del hormigón B .....	175
<b>FIGURA 4.49</b> Distribución de Esfuerzos Cortantes internos del hormigón B .....	176
<b>FIGURA 4.50</b> Distribución de Esfuerzos Axiales internos del hormigón C .....	178
<b>FIGURA 4.51</b> Distribución de Esfuerzos Cortantes internos del hormigón C .....	179
<b>FIGURA 4.52</b> Diagrama número de contactos vs tiempo del conglomerado granular del modelo discreto del hormigón A. ....	184
<b>FIGURA 4.53</b> Distribución de número de contactos por partícula del hormigón A .....	185
<b>FIGURA 4.54</b> Distribución de energía cinética en hormigón A, vista en 3D .....	186
<b>FIGURA 4.55</b> Fuerza neta por partícula en sección $x=5$ cm del hormigón A .....	187
<b>FIGURA 4.56</b> Fuerza neta por partícula en sección $x=10$ cm del hormigón A .....	188
<b>FIGURA 4.57</b> Velocidad angular por partícula en sección $x=5$ cm del hormigón A .....	189
<b>FIGURA 4.58</b> Velocidad angular por partícula en sección $x=10$ cm del hormigón A .....	190
<b>FIGURA 4.59</b> Velocidad lineal por partícula en sección $x=5$ cm del hormigón A .....	191

<b>FIGURA 4.60</b> Velocidad lineal por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón A.....	192
<b>FIGURA 4.61</b> Diagrama número de contactos vs tiempo del conglomerado granular del modelo discreto del hormigón B. ....	197
<b>FIGURA 4.62</b> Distribución de número de contactos por partícula del hormigón B.....	198
<b>FIGURA 4.63</b> Distribución de energía cinética en hormigón B, vista en 3D.....	199
<b>FIGURA 4.64</b> Fuerza neta por partícula en sección $x=5\text{cm}$ del hormigón B.....	200
<b>FIGURA 4.65</b> Fuerza neta por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón B.....	201
<b>FIGURA 4.66</b> Velocidad angular por partícula en sección $x=5\text{cm}$ del hormigón B.....	202
<b>FIGURA 4.67</b> Velocidad angular por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón B.....	203
<b>FIGURA 4.68</b> Velocidad lineal por partícula en sección $x=5\text{cm}$ del hormigón B.....	204
<b>FIGURA 4.69</b> Velocidad lineal por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón B.....	205
<b>FIGURA 4.70</b> Diagrama número de contactos vs tiempo del conglomerado granular del modelo discreto del hormigón C. ....	210
<b>FIGURA 4.71</b> Distribución de número de contactos por partícula del hormigón C.....	211
<b>FIGURA 4.72</b> Distribución de energía cinética en hormigón C, vista en 3D.....	212
<b>FIGURA 4.73</b> Fuerza neta por partícula en sección $x=5\text{cm}$ del hormigón C.....	213
<b>FIGURA 4.74</b> Fuerza neta por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón C.....	214
<b>FIGURA 4.75</b> Velocidad angular por partícula en sección $x=5\text{cm}$ del hormigón C.....	215
<b>FIGURA 4.76</b> Velocidad angular por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón C.....	216
<b>FIGURA 4.77</b> Velocidad lineal por partícula en sección $x=5\text{cm}$ del hormigón C.....	217
<b>FIGURA 4.78</b> Velocidad lineal por partícula en sección $x=10\text{cm}$ del hormigón C.....	218



## LISTADO DE TABLAS

<b>TABLA 2.1</b> Relación de la resistencia del cilindro a la del cubo. ....	51
<b>TABLA 3.1</b> Unidades básicas en sistema internacional .....	58
<b>TABLA 3.2</b> Propiedades micro mecánicas del acero del pistón de compresión.....	61
<b>TABLA 3.3</b> Propiedades de la grava como información para dosificación. ....	61
<b>TABLA 3.4</b> Propiedades mecánicas de grava. ....	62
<b>TABLA 3.5.</b> Propiedades de la arena como información para dosificación. ....	62
<b>TABLA 3.6</b> Propiedades mecánicas de arena .....	63
<b>TABLA 3.7</b> Granulometría de grava 1. ....	64
<b>TABLA 3.8</b> Granulometría de grava 2. ....	65
<b>TABLA 3.9</b> Granulometría de grava 3. ....	66
<b>TABLA 3.10</b> Granulometría de arena .....	68
<b>TABLA 3.11</b> Valores de cantidad de agua para el concreto. ....	69
<b>TABLA 3.12</b> Relación agua cemento.....	70
<b>TABLA 3.13</b> Volumen de agregado grueso por unidad de volumen de concreto.....	71
<b>TABLA 3.14</b> Pesos de los hormigones de acuerdo a tamaño nominal de agregado grueso. ....	72
<b>TABLA 3.15</b> Dosificación para hormigón A.....	73
<b>TABLA 3.16</b> Dosificación para hormigón B.....	73
<b>TABLA 3.17</b> Dosificación para hormigón C .....	73
<b>TABLA 3.18</b> Tamaños nominales de agregados, versus propuesta para ingresar en LIGGGHTS.....	74
<b>TABLA 3.19</b> Proporciones de agregados para modelo de hormigón A .....	75
<b>TABLA 3.20</b> Proporciones de agregados para modelo de hormigón B .....	75
<b>TABLA 3.21</b> Proporciones de agregados para modelo de hormigón C .....	75
<b>TABLA 3.22</b> Proporciones de agregados para modelación de hormigón A, de acuerdo a su tamaño.....	76
<b>TABLA 3.23</b> Proporciones de agregados para modelación de hormigón B, de acuerdo a su tamaño.....	76
<b>TABLA 3.24</b> Proporciones de agregados para modelación de hormigón C, de acuerdo a su tamaño.....	76

<b>TABLA 3.25</b> Porcentajes absolutos en peso de agregados que se ingresan en LIGGGHTS, para hormigón A .....	77
<b>TABLA 3.26</b> Porcentajes absolutos en peso de agregados que se ingresan en LIGGGHTS, para hormigón B .....	77
<b>TABLA 3.27</b> Porcentajes absolutos en peso de agregados que se ingresan en LIGGGHTS, para hormigón C .....	78
<b>TABLA 3.28</b> Cálculo de ft en kg/cm <sup>2</sup> .....	82
<b>TABLA 3.29</b> Cálculo de radio promedio y parámetro R de cada tipo de agregado .....	85
<b>TABLA 3.30.</b> Cálculo de fuerza pullout teórico JKR. ....	85
<b>TABLA 3.31</b> Cálculo de número de partículas en área de rotura. ....	86
<b>TABLA 3.32</b> Calculo de fuerza pullout por par de partículas y cálculo de energía de adhesión JKR teórico en J/m <sup>2</sup> . ....	87
<b>TABLA 3.33</b> Parámetros de calibración de densidad de energía de cohesión JKR en LIGGGHTS.....	90
<b>TABLA 3.34</b> Cálculos iterativos para encontrar la energía de cohesión, para el caso con Densidad de energía de cohesión de 2,16E9 J/m <sup>3</sup> . ....	92
<b>TABLA 3.35</b> Densidad de energía de cohesión JKR para ingresar en LIGGGHTS.....	93
<b>TABLA 3.36</b> Densidad de energía de cohesión LIGGGHTS corregida .....	97

## RESUMEN

Los mecanismos de transmisión de esfuerzos y deformaciones entre los componentes del hormigón son de interés común en la comunidad científica, ya que se pueden interpretar las posibles causas de fractura y mejorar la capacidad predictiva de las ecuaciones constitutivas del material. Estos procesos de desgaste, generalmente, se han estudiado con la mecánica del medio continuo, presentándose limitaciones en cuando a nivel de detalle y escalas de representación que pueden ser descritas; fenómenos como la traslación y fuerzas de contacto por agregado no es posible visualizarlos.

En este estudio se aplica el método de los elementos discretos para el propósito de representar la meso escala del hormigón, aproximándolo como un conglomerado poli disperso de partículas que interactúan entre ellas; que de acuerdo al tamaño corresponden a grava o arena, y la función enlazante del cemento es representado implícitamente por el modelo de adhesión Johnson-Kendall-Roberts. Para estudiar los mecanismos de fisura del material se realizó experimentos numéricos computacionales del ensayo de compresión uniaxial descrito en la norma ASTM C39/C39M-18.

El proyecto parte de la revisión del estado del arte en cuanto a modelación numérica del hormigón con DEM, así como también la revisión de software Open Source LIGGGHTS y la ejecución del mismo en el cluster de la EPN.

Posterior a ello, se realizó la caracterización del conglomerado granular representativo del material, mediante la identificación de granulometría y propiedades mecánicas de los agregados conformantes. Luego, se aplicó artificios teóricos para calibrar la energía de adhesión Johnson-Kendall-Roberts como medio enlazante. Estas propiedades se ingresaron en un script característico que es ejecutado por el software LIGGGHTS.

Finalmente, con los archivos generados se realizó un post procesamiento de datos en Paraview y Matlab para identificar gráficamente las tendencias y mecanismos de fisura progresivos conforme se aplica carga de compresión uniaxial en las representaciones discretas de hormigón generadas. Se concluye que el tamaño

nominal del agregado grueso es influyente en la resistencia del material a compresión uniaxial y que los principales mecanismos de fisura están estrechamente ligados a las traslaciones y rotaciones del agregado fino.

## ABSTRACT

The mechanisms of transmission of stresses and deformations between the concrete components are the interests of the scientific community, which can interpret the possibilities of fracture and improve the predictive capacity of the constituent equations of the material. These processes of wear, generally, have been studied with the mechanics of the continuous medium, presenting limitations in a level of detail and scales of representation that can be described; phenomena such as translation and contact forces by aggregate can not be visualized.

In this study the Discrete Element Method is applied for representing the mesoscale of concrete, for approximating it as a poly dispersed conglomerate of particles that interact between them; that according to size correspond to gravel or sand, and the bonding function of the cement is represented implicitly by the Johnson-Kendall-Roberts adhesion model. To study the cracking mechanisms of the material, computational numerical experiments of the uniaxial compression test described in ASTM C39 / C39M-18 were carried out.

The project is based on a review of the state of the art in terms of numerical modeling of concrete with DEM, as well as the review of Open Source software LIGGGHTS and its execution in the EPN cluster.

After that, the characterization of the representative granular conglomerate of the material was carried out, through the identification of granulometry and mechanical properties of the conforming aggregates. Then, theoretical devices were applied to calibrate the Johnson-Kendall-Roberts adhesion energy as a binding medium. These properties were entered into a characteristic script that is executed by the LIGGGHTS software.

Finally, with the generated files, a post-processing of data was carried out in Paraview and Matlab to graphically identify the progressive fissure trends and mechanisms as uniaxial compression load is applied in the discrete concrete representations generated. It is concluded that the nominal size of the coarse aggregate is influential in the uniaxial compression resistance of the material, and

that the main crack mechanisms are closely linked to the translations and rotations of the fine aggregate.

## PRESENTACIÓN

A continuación, se describe la distribución del documento de investigación:

En el capítulo 1 se detalla el problema a resolver y el estado del arte sobre el cual se sustenta este trabajo de investigación, así como las limitaciones propias del método de los elementos discretos; en cuanto a algoritmos y herramientas computacionales que resuelven los cálculos numéricos.

En el capítulo 2 se describe el marco teórico del DEM, el modelo de enlace BPM y adhesión JKR, así como las características del conglomerado granular que permiten interpretar los resultados del capítulo 4. Se describe además el procedimiento experimental de la norma ASTM C39/C39M-18 y los ensayos de compresión uniaxial en especímenes cúbicos; que permiten generar el script característico de simulación computacional en el capítulo 3.

En el capítulo 3 se detalla la modelación computacional de compresión uniaxial del hormigón en el software Open Source LIGGGHTS a través del uso del clúster de la EPN; se describen las propiedades mecánicas y granulometría de los agregados conformantes, información que es relevante en la generación de tres representaciones del material, basado en el diseño de hormigón de acuerdo a la norma ACI 211.1-91. En esta parte del texto también se realiza un procedimiento de calibración de la energía de adhesión JKR enlazante. Se finaliza el capítulo con los scripts característicos en LIGGGHTS y en SLURM para ejecutar la simulación en el clúster.

Los archivos generados en LIGGGHTS son objeto de post procesamiento realizado en los software Paraview y Matlab. En el capítulo 4 se muestran los resultados gráficos de tendencias de comportamiento progresivo del agregado conforme incrementa la carga de compresión aplicada. El análisis de resultados realizado en esta parte del texto comprende además la diferenciación entre los mecanismos de fisura de los tres modelos discretos de hormigón generados en el capítulo 3.

En el capítulo 5 se especifican las conclusiones y recomendaciones del proyecto, de las que se puede destacar que el tamaño nominal del agregado grueso del hormigón influye en la resistencia a compresión uniaxial; conforme el tamaño nominal de agregado grueso es mayor se tiende a tener menor capacidad a compresión uniaxial. Se ha demostrado además que es el agregado fino el principal potencial de fisura, debido a que tiende a rotar y trasladarse fácilmente. Se evidencia que las mayores fuerzas de contacto se presentan en el agregado grueso, y que es en el mismo en el cual se concentran las zonas con mayores esfuerzos. En esta parte del texto también se recomienda tener en cuenta las limitaciones y estado del arte actual del DEM para realizar simulaciones computacionales del hormigón.



# CAPÍTULO 1

## INTRODUCCIÓN

### 1.1 GENERALIDADES

Este proyecto desarrolla un modelo numérico computacional discreto para estudiar el fenómeno de fisura del hormigón, en el cual se representa al hormigón como un cubo de conglomerado poli disperso conformado de partículas que interactúan entre ellas mediante potenciales de contacto y de adhesión; dentro del contexto del método de los elementos discretos (Cundall & Strack, 1979). El modelo permite la simulación computacional del procedimiento de compresión uniaxial, basado en lo expuesto en la norma experimental ASTM C39/C39M-18 (Nitka & Tejchman, 2015; Potyondy & Cundall, 2004; Gyurkó, Bagi, & Borosnyói, 2014).

Los modelos matemáticos continuos de representación del hormigón a nivel macro escalar tienden a tomar simplificaciones de homogenización, que no describen acertadamente las interacciones que ocurren con los componentes internos del material, a nivel meso escalar éstos tienen gran relevancia debido a que son quienes ocasionan las respuestas estructurales visibles a nivel macro escalar. El estudio de la resistencia del hormigón a compresión uniaxial abordado bajo el marco conceptual de los modelos continuos, tanto para estudios teóricos como experimentales, tiene sus limitaciones en cuanto no se puede registrar detalladamente el desgaste progresivo del material, y las fisuras en sus estados iniciales (Beckmann, Schicktanz, Reischl, & Curbach, 2012).

Debido a su naturaleza heterogénea, el comportamiento mecánico del hormigón tiende a ser no lineal, aún ante bajos niveles de carga, y se ha comprobado experimentalmente que la principal causa de falla es que el cemento tienda presentar microfisuras en todo el volumen de compresión; similar comportamiento al de un material granular, por ende; se puede hacer uso del método de los elementos discretos, como herramienta de estudio para el propósito de identificar progresivamente fisuras a nivel meso escalar (Aráoz & Luccioni, 2011; Nitka & Tejchman, 2015).

El método de los elementos discretos es una herramienta que ha sido usada por numerosas investigaciones en la representación de materiales no isotrópicos, como lo son las rocas y el hormigón, para este propósito se han desarrollado modelos de enlace entre partículas características; uno de estos modelos es el desarrollado por Potyondy & Cundall (2004) denominado Bounded-Particle Model (BPM) y que ha sido el principal modelo usado hasta el momento. El fundamento de este modelo es que las partículas se enlazan mediante una viga en su punto de contacto, y los potenciales de desenlace son correspondientes a la falla de la viga. Las fisuras a nivel macroscópico se interpretan entonces como el quiebre de vigas enlazantes (Potyondy & Cundall, 2004).

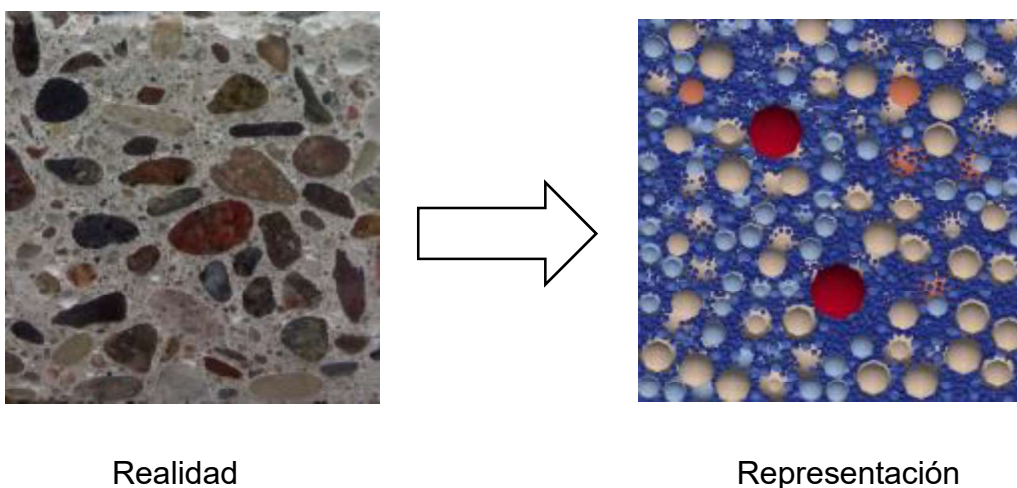
Otro de los modelos de enlace desarrollados corresponde a la adhesión cohesiva entre partículas realizada por Johnson, Kendall & Roberts (1971) como la ampliación al modelo de contacto de Hertz, exponiendo el parámetro de energía de adhesión para el fin de caracterizar un enlace en el punto de contacto entre partículas, este parámetro es característico del material y es dependiente de la geometría y tamaño de las partículas. La energía de adhesión se relaciona con la fuerza necesaria para separar una partícula, es decir; cuando la fuerza de extracción externa aplicada es mayor que la fuerza adhesiva resistente las partículas se separarán, y este desenlace se puede interpretar como una fisura a nivel macroscópico (Johnson, Kendall, & Roberts, 1971).

Hasta el momento las investigaciones relacionadas a la modelación computacional discreta del hormigón han generado representaciones basadas principalmente en los fundamentos del modelo de enlace BPM entre partículas. Y se expresa que en el trabajo a futuro será necesario ensayar otros modelos de enlace; que permitan describir fenómenos adicionales. Por ello en este proyecto de titulación, a diferencia de la aplicación común del modelo de enlace BPM, se aplica el modelo de adhesión Johnson-Kendall-Roberts como medio de enlace entre partículas, y mediante la simulación computacional de compresión uniaxial se comprueba la capacidad de este modelo de representar adecuadamente al hormigón. Se evalúa la resistencia de enlace máxima que se puede alcanzar antes de que se pueda interpretar una posible fisura y junto con ello se demuestra que el enlace adhesivo ha fallado, esto

sirve de comprobación numérica del límite de carga uniaxial al que se puede llegar antes de que los componentes del material presenten desenlaces permanentes.

En esta investigación se aborda el problema desde la meso escala del hormigón; para este propósito, el modelo considera una aproximación del agregado grueso como partículas esféricas de diámetro variable entre 1cm y 2,5cm embebido entre partículas de diámetro entre 2,5mm a 5mm que representan al agregado fino como se muestra en la FIGURA 1.1. La matriz cementante es representada implícitamente por la adhesión Johnson-Kendall-Roberts existente entre las partículas antes mencionadas, enlace que será relevante únicamente por el contacto existente entre componentes, es decir; que las fisuras se interpretarán como el desenlace de la adhesión entre agregados. Esta iniciativa tiene la principal limitación de que los agregados no se pueden romper, y que la respuesta macro estructural es dependiente de la granulometría de agregados. Sin embargo, este enfoque presenta una adecuada aproximación de la realidad, ya que el principal potencial de falla es la micro fisuración del cemento.

**FIGURA 1.1.** Representación de la meso escala del hormigón.



FUENTE: Propia

La representación de meso escala alcanza buen nivel de detalle, considerando que las proporciones de agregados son congruentes con la dosificación requerida; calculada usando la norma ACI 211.1 -91. Para lo cual se ha tomado en cuenta la granulometría de agregados, así como la caracterización de sus propiedades

mecánicas, en base a informes experimentales. La energía de adhesión enlazante pasa por un proceso de calibración; basado en el marco teórico de adhesión Johnson-Kendall-Roberts y la resistencia a tensión experimental del hormigón (Keppler & Csatar, 2011).

## **1.2 LIMITACIONES DEL ESTUDIO**

En el método de los elementos discretos los modelos de enlace en paralelo son considerados adecuados para representar el material como un continuo, y el modelo de enlace Johnson-Kendall-Roberts cumple con esta función, limitándose únicamente a conservar un criterio de falla a tracción. Esta es una limitación en cuanto el modelo no puede alcanzar a predecir ciertas funciones que realiza el cemento en la realidad, sin embargo, no es la excepción en comparación con otros modelos de enlace propuestos por anteriores investigaciones; ya que el principal propósito del método de los elementos discretos a este nivel de estado del arte no es el de reemplazar al modelamiento continuo en cuanto a capacidad predictiva ni a los experimentos físicos como medio de comprensión fundamental. Mas bien se ha establecido como una herramienta clave para el desarrollo de futuros métodos analíticos en el hormigón.

Cabe recalcar que las predicciones cuantitativas en DEM permanecen en un futuro distante, pero en el corto e intermedio plazo la aplicación del DEM en ingeniería está en la exploración cualitativa. Por lo que el presente estudio solamente puede hacer un acercamiento de tendencias en el comportamiento meso mecánico del material, y no se debe tomar los valores numéricos presentados como estrictamente relevantes.

Desde la perspectiva de la ciencia física y la ingeniería, un modelo exitoso es una simplificación de la realidad, que capta las principales características del sistema de interés mientras permite un análisis más detallado. En tal virtud, hay que tomar en cuenta que las representaciones del hormigón en DEM no corresponden a la realidad; tales aproximaciones pueden considerar a los agregados como de forma esférica, conformando un ensamble granular enlazado que pretende simular el material continuo. La limitante en el proceso de calibración de la densidad de

energía de cohesión Johnson-Kendall-Roberts enlazante es que se recurre a un artificio teórico ideal para establecer una relación entre información experimental de tensión del hormigón y su modelo representativo discreto en DEM.

Así, se está despreciando la porosidad, contenido de aire, fisuras por contracción, entre otros fenómenos que sí se aprecian en la realidad. Entonces, no se puede esperar a que el modelo discreto pueda alcanzar elevados niveles de predicción de respuestas macro escalares. Actualmente, estas simplificaciones están basadas en las limitaciones teóricas del DEM, y buscan reducir los costos de procesamiento computacional.

Por eso es que las resistencias a compresión uniaxial resultado de este estudio tienen la finalidad únicamente de poder diferenciar las representaciones de hormigón generadas. Esto indica que el modelo no puede alcanzar numéricamente el valor de resistencia  $f_c$  experimental durante la simulación computacional, sin embargo, sí permite identificar las fases de resistencia y desgaste en la curva esfuerzo-deformación, así como los mecanismos de fisura característicos del material; objetivos logrados, que representan una contribución al estado del arte del hormigón en DEM.

## **1.3 OBJETIVOS**

### **1.3.1 OBJETIVO GENERAL**

Estudiar desde una perspectiva meso-mecánica los mecanismos de fisura de una matriz de hormigón sometida a compresión uniaxial, mediante experimentos numérico computacionales dentro del marco de trabajo del método de los elementos discretos, para generar un mayor entendimiento de la física que gobierna a este material.

### **1.3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

1. Generar un modelo discreto que permita representar al hormigón a nivel meso escalar en base a tecnología del método de los elementos discretos.
2. Calibrar las propiedades meso mecánicas del modelo computacional discreto del hormigón, mediante la caracterización de las propiedades

mecánicas a nivel macro escalar; mismas que están estrechamente relacionadas con la resistencia a compresión uniaxial.

3. Modelar y simular el ensayo de compresión uniaxial de cubos de hormigón, tomando como base el procedimiento descrito en la norma ASTM C39/C39M-18.
4. Evaluar tendencias de las respuestas meso mecánicas de las simulaciones; esfuerzos, deformación volumétrica, y fuerzas de contacto entre partículas durante el proceso de compresión uniaxial, para describir el comportamiento mecánico del hormigón.

#### **1.4 ALCANCE**

1. El presente trabajo es a nivel meso mecánico. El modelamiento y simulación se realizará en software libre basado en el método de los elementos discretos.
2. El estudio se lo realiza en un computador con capacidad de procesamiento en paralelo.
3. Para la etapa de modelación se limita al uso de ensamblajes poli dispersos con enlaces adhesivos de tipo Johnson-Kendall-Roberts para representar al hormigón.
4. El estudio se enfoca en la identificación progresiva de las tendencias de las respuestas meso mecánicas durante el proceso de compresión uniaxial. Y se las relaciona con el desenlace de fuerzas adhesivas: causa del desgaste visible a nivel macroscópico.
5. El estudio no hace mención estrictamente a la resistencia cilíndrica a compresión experimental  $f_c$ . Las resistencias a compresión uniaxial alcanzadas corresponden a una característica que permite diferenciar las representaciones numéricas del hormigón generadas; cuyas propiedades meso mecánicas son calibradas conforme a tecnología DEM y al marco teórico de enlace adhesivo de tipo Johnson-Kendall-Roberts.

## 1.5 JUSTIFICACIÓN

A nivel macroscópico el hormigón ha sido representado como un material homogéneo, isotrópico y continuo, para el fin de facilitar el diseño de elementos estructurales. Sin embargo, este enfoque presenta limitaciones en cuanto al entendimiento de su comportamiento mecánico en condiciones de alta compresión, estado plástico del material y mecanismos de falla (Aráoz & Luccioni, 2011).

Es necesario entender que el hormigón es un material multi escalar: a nivel macro escalar es un conglomerado continuo, a nivel meso escalar es el conjunto de agregados (ej.: Grava) interactuando dentro de una matriz cementante, y a nivel micro escalar se debe tomar en cuenta también partículas cementantes no hidratadas y poros con aire. Cada nivel presenta características que permiten analizar el hormigón, de manera que posibilitan el mayor entendimiento de su respuesta estructural (Nguyen, Stroeven, & Johannes Sluys, 2011).

La modelación numérica computacional discreta basada en la teoría del método de los elementos discretos, es una herramienta que permite describir características meso escalares del material y su respuesta estructural. Al calibrar los modelos se generan avances en el entendimiento de los fenómenos relacionados a materiales no isotrópicos, no homogéneos y de comportamiento no lineal; como lo son el hormigón, rocas y suelos (Gyurkó, Bagi, & Borosnyói, 2014; Nitka & Tejchman, 2015; Potyondy & Cundall, 2004).

Las calibraciones del modelo numérico computacional DEM para hormigón realizadas hasta el momento en su mayoría han sido en entornos 2D, debido a la alta demanda computacional en realizar modelaciones en 3D. Sin embargo, cabe recalcar que las simulaciones computacionales en 3D permiten explorar la respuesta interna del material con mayor detalle. Por eso este proyecto de titulación realiza el modelamiento y simulación de una matriz de hormigón en 3D específicamente, como aporte a los esfuerzos de anteriores investigaciones.

A la fecha, escasos son los estudios que tratan de describir progresivamente los mecanismos de fisura del hormigón durante compresión uniaxial. La degradación

es un fenómeno progresivo, y tratarlo desde ese enfoque es un aporte al entendimiento de la mecánica del material.

El aporte de este trabajo de investigación, es también comprobar la capacidad del modelo de adhesión JKR para representar el enlace entre partículas de hormigón. A diferencia de anteriores investigaciones; que aplican el modelo de enlace BPM específicamente, y en las que se expresa que en el trabajo a futuro es necesario evaluar el comportamiento del material al aplicar otros modelos de enlace; que conlleven a describir fenómenos adicionales.

Este proyecto de investigación tiene un gran impacto metodológico, porque hasta el momento en la Facultad de ingeniería civil y ambiental de la EPN, el procedimiento a seguir para estudiar la respuesta estructural del hormigón a compresión uniaxial es mediante la construcción del espécimen y posterior ensayo destructivo en laboratorio, dentro del marco teórico de medios continuos. En contra parte, este trabajo de titulación hace uso de la metodología enfocada en la simulación numérica computacional, basándose en el marco teórico de la tecnología del método de los elementos discretos. De esta manera se genera un modelo numérico discreto representativo del hormigón, que permite describir con mayor exactitud los procesos de degradación desde una perspectiva meso escalar, para evaluar la interacción entre componentes internos y su evolución progresiva temporal.

Al contar con los recursos computacionales actuales como una herramienta que permite desarrollar modelos numéricos que describen de forma más realista al material; es prudente evaluar las relaciones constitutivas a través de diferentes simulaciones computacionales; con distintas características meso mecánicas para identificar las relaciones entre las propiedades del hormigón y su comportamiento mecánico en compresión uniaxial (Nitka & Tejchman, 2015).

El mayor conocimiento de los mecanismos de fisura del hormigón tiene el potencial de clarificar el análisis de estructuras en el rango plástico, permitiendo mejorar y optimizar las normas vigentes en el país, y de esta manera mejorar las prácticas ingenieriles en cuanto a diseño y manipulación del hormigón.



El conocimiento de la respuesta mecánica del hormigón en altos niveles de compresión tiene el potencial de evaluar los modos de falla de los elementos estructurales, y mediante análisis estructurales más aproximados a la realidad, se puede disminuir el riesgo de catástrofes relacionados al colapso de estructuras.

La industria de la construcción se vería beneficiada de este estudio, porque los mecanismos de fisura en este modelo numérico computacional se basan en modelos de enlace adhesivos de partículas, y al establecer las fuerzas de enlace se obtienen distintos comportamientos de fisura del hormigón; por lo que se pueden modificar estas características de enlace hasta encontrar la relación más óptima de resistencia. Estas fuerzas de enlace tienen el potencial de relacionarse con una económica dosificación de material conglomerante: cemento. Y con ello se abren expectativas hacia la disminución de los costos en la construcción.

El estudio realizado está encaminado a los esfuerzos de la Facultad de Ingeniería Civil de establecer y fortalecer líneas de investigación en el área de materiales, contribuyendo en gran medida al proceso de formación académica de los estudiantes, mediante la representación del hormigón como un conglomerado de elementos discretos para facilitar el entendimiento del comportamiento mecánico del material. Porque en la Facultad de Ingeniería Civil y Ambiental de la EPN, al estudiante se lo fortalece en conocimiento en cuanto a diseño y estudio del hormigón a nivel de microescala sin tomar en cuenta la meso-escala o microescala, con la cual se podría comprender de una manera más exacta el fenómeno de fisura, por esta razón es prudente tomar en cuenta asignaturas que reflejen el estado del arte como lo hace este estudio y más aún si se tiene la tecnología a la mano.

La comunidad científica está trabajando arduamente por encontrar las relaciones constitutivas de los materiales, que permitan entender todos sus mecanismos y respuestas estructurales, y se espera en un futuro no muy lejano poder caracterizar materiales únicamente mediante medios computacionales; dejando de lado la realización de comprobaciones de calidad mediante ensayos destructivos. Actualmente los estudios físicos experimentales del hormigón presentan limitaciones en presupuesto y tiempo; porque es necesario esperar a construir el espécimen, a que fragüe y finalmente someterlos a cargas. En contra parte, los

modelos numérico computacionales permitirán realizar infinidad de ensayos, con la ventaja de poder estudiar los fenómenos a nivel multi escalar. De esta manera, la velocidad de los descubrimientos será mayor y el estudio de nuevos materiales tendrá un ritmo acelerado. Y el presente proyecto de titulación contribuye a que ese futuro sea una realidad cada vez más posible y más cercana.

## **1.6 METODOLOGÍA**

### **1.6.1 ACTIVIDAD 1: REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA**

Para realizar este proyecto de titulación se parte de la revisión bibliográfica de los fundamentos del elemento discreto, citando documentos de investigación; tales como artículos de revistas científicas enfocadas en la aplicación del DEM en la representación del hormigón, entre los que se puede destacar: “A discrete numerical model to granular assemblies” Escrito por Cundall y Strack (1979) que es una de las primeras descripciones de los fundamentos del método de los elementos discretos. Así también tiene gran relevancia el artículo de Nitka y Tejchman (2015) “Modelling of concrete behavior in uniaxial compresión and tensión with DEM” que demuestra una de las primeras calibraciones del DEM como aplicación a la representación del hormigón, el artículo de Barthel (2014) “Adhesive Elastic contacts: JKR and more” y el libro de Johnson (1985) “Contact Mechanics” que describen los modelos de contacto y adhesión en materiales granulares, y el artículo de Potyondy y Cundall (2004) “A bonded-particle model for rock” que describe los fundamentos del modelo de enlace BPM para materiales granulares; modelo con el cual han sido desarrollados los trabajos con DEM para el hormigón hasta la actualidad.

Citando libros de gran relevancia para el desarrollo de este trabajo, se tiene el de O’Sullivan (2010) “Particulate discrete element modelling” que se enfoca en las consideraciones tomadas en cuenta por el DEM para la modelación numérica. Se tiene también el libro de Jebahi et al. (2015) “Discrete Element Method in 3D Continuos Materials” en el que se describen modelos de enlace en DEM para generar modelos representativos de medios continuos y sus principales métodos de calibración.

También se realizó la revisión de trabajos previos realizados con DEM y materiales granulares en la EPN, tales como el de Rivera y Vergara (2013) “Modelamiento y simulación del flujo de descarga de silos mediante el método del elemento discreto” y el de Guamushig (2016) “Modelamiento y simulación multifísica de materiales granulares” en los cuales se describe el proceso metodológico de este tipo de trabajos investigativos.

### **1.6.2 ACTIVIDAD 2: GENERACIÓN DE ENSAMBLES DE PARTÍCULAS**

Para generar el modelo representativo del hormigón es necesario tomar en cuenta parámetros de discretización que lo puedan modelar como un conglomerado de partículas enlazadas entre sí mediante el modelo de adhesión. Se considera a dichas partículas de geometría esférica debido a las limitaciones computacionales en cuanto a simular geometrías más realistas (Jebahi, André, Terreros, & Iordanoff, 2015).

La generación de partículas se basa en las consideraciones resultado del artículo de Nitka y Tejchman (2015) “Modelling of concrete behavior in uniaxial compresión and tensión with DEM”. De lo cual se hacen limitaciones con respecto a los diámetros del conglomerado, y cómo ellos pueden representar arena y grava manteniendo la estabilidad numérica del DEM.

El ensamble realizado es poli disperso, y es aproximado a la dosificación recomendada de cantidades de agregado fino y agregado grueso que se aplica en la elaboración del hormigón. El cemento es representado implícitamente por la adhesión Johnson-Kendall-Roberts, y es sujeto de calibración con valores experimentales de ensayos de tensión del hormigón (Barthel, 2014; Israelachvili, 2011).

### **1.6.3 ACTIVIDAD 3: MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN**

La simulación se realiza por DEM, usando para ello la herramienta computacional LIGGGHTS.

El modelamiento corresponde a una representación aproximada del fenómeno, por lo que es necesario recopilar información referente al sistema real. En tal virtud; es

necesario incorporar en un script de entrada las principales características mecánicas del hormigón, objeto de estudio, basado en información de reportes tanto experimentales como normativos.

En la etapa de modelación también se incluye la calibración de la energía de adhesión Johnson-Kendall-Roberts, garantizando la estabilidad numérica del DEM.

Una vez definido el modelo discreto representativo del hormigón se procede a simular computacionalmente la compresión uniaxial en base al procedimiento recomendado en la norma experimental ASTM C39/C39M-18.

#### **1.6.4 ACTIVIDAD 4: ANÁLISIS DE RESULTADOS**

El análisis de resultados corresponde a la observación y descripción numérica de las respuestas meso mecánicas de las representaciones de hormigón generadas.

Para este fin es necesario realizar gráficos de la variación de las posiciones de las partículas, y la evaluación progresiva de las cadenas de fuerzas. A partir de estos parámetros se obtienen tendencias en el tiempo, que se pueden vincular con la pérdida de enlace adhesivo JKR, y que permiten clarificar la relación entre los fenómenos meso mecánicos y las posibles causas de fisuras visibles a nivel macroscópico.

## CAPÍTULO 2

### MARCO TEÓRICO

#### 2.1 MATERIALES GRANULARES

##### 2.1.1 DESCRIPCIÓN

Los materiales granulares corresponden a los ensambles de partículas, mismas que pueden formar conglomerados, o actuar en forma de flujo granular. Estas partículas interactúan entre sí de acuerdo a los contactos que se provocan y son gobernadas por las leyes de mecánica clásica. Como medio colectivo presentan ciertas propiedades propias de su naturaleza, como la dilatancia, propiedades que son distintas a las que tienen las partículas como medio individual (Luding, 2005).

En la naturaleza las principales representaciones de los materiales granulares serían los suelos, granos, semillas, rocas, etc. En la industria los materiales granulares corresponden a pastillas, polvos cosméticos, polímeros, hidrogeles, virutas etc. Por lo que su estudio tiene gran relevancia a nivel de ingeniería de optimización por la capacidad de mejorar los procesos de manipulación de este tipo de materiales.

Los procesos de discretización consideran a materiales no homogéneos como el conjunto de componentes que interactúan entre ellos, de esta manera, al evaluarlos a distintas escalas, se puede comprender la física que los gobierna. En contraparte a los modelos continuos, los métodos de discretización evalúan el comportamiento de los materiales como un conglomerado granular, aplicando de esta manera la teoría del elemento discreto para describir las interacciones entre componentes internos, y sus desplazamientos relativos. Mismos que son causantes del comportamiento mecánico visible a nivel macroscópico (Beckmann, Schick Tanz, Reischl, & Curbach, 2012).

La aplicación de la teoría de los medios granulares ha generado grandes avances en el entendimiento de las relaciones constitutivas fundamentales de materiales altamente complejos; como lo son las rocas, suelos y el hormigón. En tal virtud, las

ventajas presentadas por el método del elemento discreto, exigen que para el fin de comprender fenómenos multi escalares es necesario considerar al material como un conglomerado granular, cuyo enlace depende de modelos de contacto, y las potenciales fallas están ligadas al quiebre de modelos de enlace; refiriéndose a éstos como ecuaciones constitutivas del material. Sin embargo, la principal desventaja es el difícil proceso de calibración de propiedades meso mecánicas; que en su gran mayoría no se pueden determinar experimentalmente de manera directa, es por ello que el método no consigue ser predictivo, sino solamente descriptivo. Siendo los resultados apreciables; las respuestas meso estructurales; en forma de tendencias o zonificación (Jebahi, André, Terreros, & Iordanoff, 2015).

### **2.1.2 COMPORTAMIENTO**

El comportamiento de los materiales granulares está gobernado por las leyes de la mecánica clásica, y son producto de las interacciones entre partículas individuales del conglomerado (O'Sullivan, 2010).

Los materiales granulares pueden comportarse como sólido, líquido o gas de acuerdo a sus condiciones de enlace, o eventos a los que son sometidos. En tal virtud, la aplicación de fuerzas externas, la granulometría del material, así como el tamaño de partícula o sus propiedades meso mecánicas son parámetros altamente influyentes (Jebahi, André, Terreros, & Iordanoff, 2015).

Para el propósito de representar materiales sólidos como rocas y hormigón, se han desarrollado modelos de enlace entre partículas, que permiten generar enlaces adhesivos o frágiles, dependiendo del requerimiento de material. En el caso del hormigón se han realizado aproximaciones usando el modelo de enlace BPM, cuyos límites resistentes han sido calibrados con experimentos físico destructivos (Barthel, 2014; Potyondy & Cundall, 2004).

El comportamiento de un medio granular con enlaces entre partículas es complejo; su adhesión o resistencia a eventos es altamente dependiente de la fuerza de enlace. Individualmente de las propiedades mecánicas de las partículas, las propiedades características de los enlaces son determinantes para representar y definir el comportamiento del material.

Calibrar las propiedades características de los enlaces es una tarea bastante compleja, ya que es necesario realizar una abstracción de la teoría del modelo numérico de enlace; ya sea BPM o JKR, y en base a artificios ideales se puede tener una idea de los valores meso escalares de los enlaces en DEM; que tengan contraste con resultados experimentales (Keppler & Csatar, 2011).

## **2.2 MÉTODO DEL ELEMENTO DISCRETO**

### **2.2.1 INTRODUCCIÓN**

El método de los elementos discretos es el estado del arte en cuanto a modelación de medios granulares. Ya que se puede considerar al material como un ensamble de partículas; las cuales interactúan entre ellas mediante potenciales de contacto. La libertad de desplazamiento que se le otorga a las partículas individuales hace que el método haya tenido gran acogida por la comunidad científica; ya que su principal aplicación es la descripción de los fenómenos internos que suceden en el material a niveles micro y meso escalares, éstas interacciones internas permiten identificar mecanismos propios de eventos a los que es sometido el material (Lommen, Schott, & Lodewijks, 2014; Cundall & Strack, 1979).

Al considerar materiales no homogéneos, no isotrópicos y compuestos, la modelación continua se ha visto limitada en la identificación detallada de relaciones constitutivas fundamentales, aplicación para la que actualmente el método de los elementos discretos es adecuado (Nguyen, Stroeven, & Johannes Sluys, 2011).

### **2.2.2 ANTECEDENTES Y DESCRIPCIÓN**

El método de los elementos discretos fue concebido inicialmente por Cundall & Strack en 1979 como una herramienta numérica para describir el comportamiento del suelo. En ese entonces la capacidad de procesamiento computacional de los ordenadores limitaban de sobremanera el desarrollo de esta propuesta, sin embargo, conforme se ha avanzado en la otorgación de capacidad de las computadoras personales; así como de la facilidad adquisitiva para los investigadores, el número de publicaciones científicas bajo este concepto han ido en aumento (Cundall & Strack, 1979; O'Sullivan, 2010).

La aplicación del método de los elementos discretos para representar materiales continuos viene de la mano del desarrollo de modelos de enlace entre partículas y sus potenciales de falla, entonces se habla de discontinuidades, y de la capacidad del DEM de alcanzar las escalas meso y micro mecánicas. Clara ventaja en contra parte de los modelos continuos. Al tener claro que los fenómenos meso mecánicos y micro mecánicos tienen influencia en el comportamiento estructural macro mecánico de un material; se han hecho avances en la modelación discreta de rocas y cristales con el método BPM, entre otros modelos de enlace (Jebahi, André, Terreros, & Iordanoff, 2015).

Las primeras propuestas en DEM para la descripción del hormigón fueron en ensamblajes prismáticos en 2D, los cuales todavía tienen sus limitaciones en cuanto no se puede ingresar detalladamente la granulometría de agregados. Luego, se han realizado estudios paramétricos para verificar la capacidad del DEM como herramienta de estudio del hormigón como material compuesto, concluyendo que efectivamente es adecuado (Nitka & Tejchman, 2015; Wang Zhuolin & Gu, 2008).

En ese sentido, los modelos de enlace de partículas deben ser calibrados para poder representar hormigón, y es por ello que surge la necesidad de encontrar parámetros macro escalares como resultado de las simulaciones DEM, tales como: deformaciones y esfuerzos que se puedan relacionar con resultados experimentales. El principal interés en este tipo de estudios numéricos es indagar dentro del material los procesos de desgaste, discontinuidad y mecanismos de falla, aspectos que no son alcanzables mediante el marco metodológico experimental o la teoría del medio continuo.

### 2.2.3 ECUACIONES QUE GOBIERNAN EL DEM

El movimiento traslacional de la partícula en DEM está determinado por la interacción con sus partículas vecinas, y es gobernado por la ecuación ( 2.1 ) (O'Sullivan, 2010).

$$m_p \ddot{\mathbf{u}}_p = \sum_{c=1}^{N_{c,p}} \mathbf{F}_{pc}^{\text{con}} + \sum_{j=1}^{N_{nc,p}} \mathbf{F}_{pj}^{\text{non-con}} + \mathbf{F}_p^f + \mathbf{F}_p^g + \mathbf{F}_p^{\text{app}} \quad (2.1)$$



Dónde:

- $\ddot{\mathbf{u}}_p$  : es el vector de aceleración para la partícula p.
- $\mathbf{F}_{pc}^{con}$  : son fuerzas de contacto entre la partícula p y otras partículas vecinas o bordes definidos, de cantidad  $N_{c,p}$ .
- $\mathbf{F}_{pj}^{non-con}$  : son las fuerzas de no contacto entre partículas (ej: capilaridad) entre la partícula p y otras partículas o bordes definidos, de cantidad  $N_{nc,p}$ .
- $\mathbf{F}_p^f$  : son las fuerzas de interacción de la partícula p con fluido.
- $\mathbf{F}_p^g$  : es la fuerza gravitacional de la partícula p.
- $\mathbf{F}_p^{app}$  : Fuerzas externas aplicadas en la partícula p.

El movimiento rotacional de la partícula en DEM está gobernado por la ecuación ( 2.2 ).

$$\mathbf{I}_p \frac{d\boldsymbol{\omega}_p}{dt} = \sum_{j=1}^{N_{nom}} \mathbf{M}_{pj} \quad ( 2.2 )$$

Dónde:

- $\boldsymbol{\omega}_p$  : es la velocidad angular de la partícula p.
- $\mathbf{M}_{pj}$  : es el momento que actúa en la partícula p, debido al contacto con otras partículas j. De cantidad  $N_{nom}$ .

El disipamiento de energía en DEM se calcula a través de consideraciones implícitas adicionales, en donde está involucrado el amortiguamiento viscoso.

La solución de estas ecuaciones se hace mediante integración numérica, en la cual se hace consideraciones adicionales a las ecuaciones de equilibrio de Newton.

#### 2.2.4 PLANTEAMIENTO NUMÉRICO DEL DEM

La realidad de la interacción entre gránulos individuales es altamente compleja, partiendo desde la concepción de deformaciones potenciales de fuerzas de contacto, así como transmisión de esfuerzos a través del material. El DEM considera simplificaciones que permiten generar aproximaciones numéricas, y

permite resolver las ecuaciones de movimiento con buen grado de asertividad y óptimo costo computacional (O'Sullivan, 2010). A continuación, se describen las consideraciones:

1. Las partículas son rígidas, tienen su propia masa e inercia finita, y se las puede describir analíticamente.
2. Las partículas pueden trasladarse y rotar independientemente una de otra.
3. El programa puede automáticamente detectar nuevos contactos entre partículas
4. El contacto se da entre un par de partículas únicamente y a través de un área de contacto infinitesimal.
5. Se permite a las partículas traslaparse ligeramente en el punto de contacto, y este traslape se interpreta como la deformación real entre partículas. La magnitud de la deformación entre partículas en el punto de contacto se asume que es pequeña.
6. Las fuerzas de contacto se calculan a través de la magnitud del traslape en el punto de contacto
7. En el punto de contacto, las partículas pueden transmitir fuerzas normales de compresión o tracción; y fuerzas tangenciales en un eje ortogonal al eje normal de fuerzas de contacto.
8. Las fuerzas de contacto se calculan siempre y cuando las partículas estén a una cierta distancia una de otra; en la cual se pueda considerar que están en contacto. Si esta distancia es mayor entonces se considera que las partículas no están en contacto y se anula el contacto, o ya no se considera para el posterior cálculo.
9. El incremento del tiempo debe ser lo suficientemente pequeño para que la traslación de una partícula no influya en más que sus partículas vecinas inmediatas.
10. Un conglomerado de partículas puede representar un medio continuo, y los movimientos relativos entre partículas tienen influencia en las deformaciones a nivel macro escalar.

### 2.2.5 INTEGRACIÓN DE VELOCIDAD DE VERLET

La integración de Verlet es el método numérico con el cual se pueden resolver las ecuaciones de movimiento que gobiernan el DEM. Considerando que se conocen las condiciones iniciales del sistema granular (Verlet, 1967).

Dado un sistema de coordenadas la velocidad, aceleración y posición de una partícula se definen con las ecuaciones ( 2.3 ), ( 2.4 ) y ( 2.5 ).

$$\text{Posición} = \vec{x}(t) \quad (2.3)$$

$$\text{Velocidad} = \frac{d\vec{x}(t)}{dt} \quad (2.4)$$

$$\text{aceleración} = \frac{d^2\vec{x}(t)}{dt^2} \quad (2.5)$$

De acuerdo al método de Stormer al considerar que  $dt$  puede aproximarse a  $\Delta t$ , entonces se puede escribir la aceleración como la ecuación ( 2.6 ).

$$\vec{A}(\vec{x}_n) = \frac{\Delta^2 \vec{x}_n}{\Delta t^2} = \frac{\frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n}{\Delta t} - \frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\Delta t}}{\Delta t} = \frac{\vec{x}_{n+1} - 2\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{\Delta t^2} = \vec{a}_n \quad (2.6)$$

Entonces se puede calcular la posición consecuente, conociendo las dos anteriores con la ecuación ( 2.7 ).

$$\vec{x}_{n+1} = 2\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1} + \vec{a}_n \Delta t^2, \quad \vec{a}_n = \vec{A}(\vec{x}_n) \quad (2.7)$$

Para calcular el error existente en este método se realiza la serie de Taylor para posición en el tiempo  $t \pm \Delta t$ , entonces se tienen las ecuaciones ( 2.8 ) y ( 2.9 ).

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} + \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + \theta(\Delta t^4) \quad (2.8)$$

$$\vec{x}(t - \Delta t) = \vec{x}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\vec{a}(t)\Delta t^2}{2} - \frac{\vec{b}(t)\Delta t^3}{6} + \theta(\Delta t^4) \quad (2.9)$$

Sumando se obtiene la ecuación ( 2.10 ). La cual no incluye la velocidad. En donde  $\theta(\Delta t^4)$  es el error global de cálculo numérico de desplazamiento.

$$\vec{x}(t + \Delta t) = 2\vec{x}(t) - \vec{x}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + \theta(\Delta t^4) \quad ( 2.10 )$$

A partir del conocimiento de las posiciones en el tiempo  $t \pm \Delta t$  se puede obtener mediante integración numérica el valor de la velocidad con la ecuación ( 2.11 ).

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{x}(t + \Delta t) - \vec{x}(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad ( 2.11 )$$

## 2.2.6 CONTACTO ENTRE PARTÍCULAS

El modelo de contacto entre partículas en DEM es altamente dependiente del módulo de elasticidad del material, y en base a ello se diferencian entre “partículas duras” (hard particle) y “partículas suaves” (soft particle) (CFDEM Project, 2018).

### 2.2.6.1 Esferas duras

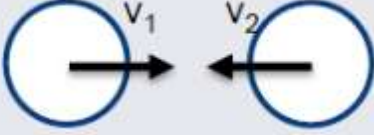
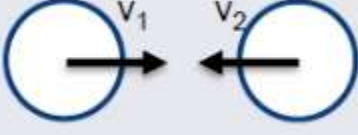
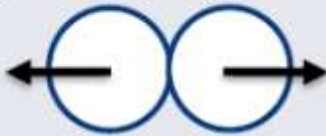
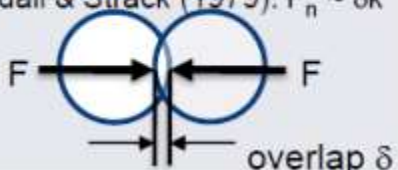


El modelo de esfera dura considera el contacto como la colisión perfectamente elástica, así como se ilustra en la FIGURA 2.1. Por tanto, no se presentan deformaciones o superposición entre partículas explícitamente, y la variación en el momento lineal es consecuencia de la disipación de energía en base de calor y deformaciones plásticas (O'Sullivan, 2010).

### 2.2.6.2 Esferas suaves

El modelo de esfera suave las partículas son rígidas, pero considera que cuando las partículas chocan presentan traslape entre esferas, así como se ilustra en la FIGURA 2.1 .

Este trabajo investigativo está realizado considerando la teoría de contacto de esferas suaves, en la cual se calculan las fuerzas y momentos a través de los traslapes elásticos entre partículas, siguiendo el modelo simplificado de contacto de Hertz. La dinámica y traslación de las partículas es determinado a través de las leyes de Newton para cada paso del tiempo (Cundall & Strack, 1979).

**FIGURA 2.1** Tipos de partícula en DEM

Ejemplo: Fuerza Normal	Enfoque Esfera Dura	Enfoque Esfera suave (DEM Clásico)
Antes del impacto		
Durante el impacto	$v_1^* = -e v_1 \quad v_2^* = -e v_2$  <p><math>e = \text{coeficiente de restitución}</math></p>	<p>Hertz: <math>F_n \sim \delta^{3/2}k</math> Cundall &amp; Strack (1979): <math>F_n \sim \delta k</math></p>  <p>overlap <math>\delta</math></p>
Después del impacto	$v_1^* < v_1 \quad v_2^* < v_2$ 	$v_1^* < v_1 \quad v_2^* < v_2$ 

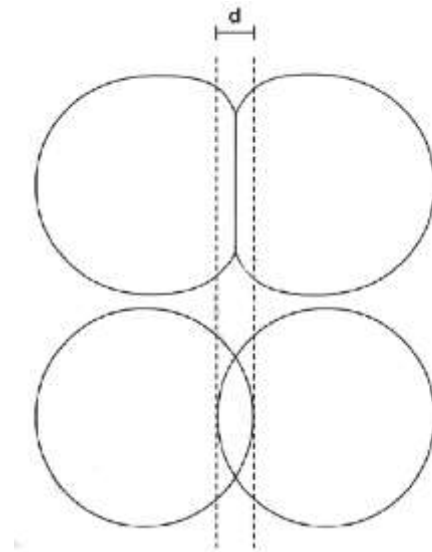
FUENTE: (Kloss & Queteschiner, 2010)

### 2.2.7 MODELO DE CONTACTO

El modelo DEM representa la deformación entre partículas, en su punto de contacto, como el traslape entre dos esferas rígidas, así como se ilustra en la FIGURA 2.2. En donde  $d$  corresponde a la deformación en el punto de contacto y la longitud de traslape.

El modelo constitutivo de contacto es el grupo de ecuaciones que definen la relación fuerza-deformación del punto de contacto. Las fuerzas y momentos que accionan en un par de partículas se calculan a través del traslape que se produce por su interacción de contacto. Considerando un sistema de coordenadas ortogonales en dirección normal y tangencial al contacto. En los cuales se proponen dos modelos reológicos; conformados por un sistema de masa, resorte, y amortiguador, los cuales puede permitirse ser lineales o no lineales. Así como se muestra en la FIGURA 2.3. (O'Sullivan, 2010).

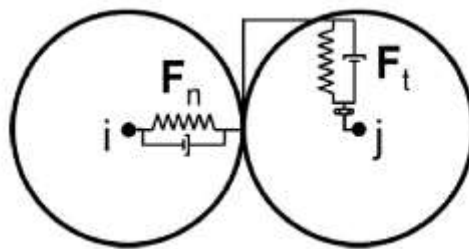
**FIGURA 2.2** Traslape entre partículas en DEM.



FUENTE: (Guamushig, 2016)

En el caso de que una partícula tenga contacto con algunas otras, se idealiza a cada par de partículas como un sistema reológico independiente; uno en cada punto de contacto.

**FIGURA 2.3** Modelo de contacto de partículas: masa, resorte, amortiguador.



FUENTE: (Kloss, Goniva, Hager, Amberger, & Pirker, 2012)

### 2.2.7.1 Fuerza normal

Considerando el traslape entre dos partículas  $d$  (ver FIGURA 2.2) como  $\delta_n$ . Y considerando que existe velocidad relativa entre ellas.

La fuerza normal  $F_n$  (ver FIGURA 2.3) se calcula con la ecuación ( 2.12 ). (Kloss, Goniva, Hager, Amberger, & Pirker, 2012)

$$F_n = -k_n \delta_n + c_n \Delta u_n \quad (2.12)$$

Dónde:

- $F_n$  : es la fuerza normal debido al contacto entre partículas
- $c_n$  : es el coeficiente de amortiguamiento normal
- $\Delta u_n$  : es la velocidad relativa normal en el punto de contacto
- $k_n$  : es la rigidez normal

La rigidez normal de Hertz-Midlin se calcula con la ecuación( 2.13 ). Considerando dos partículas de distintos materiales y radios (Lommen, Schott, & Lodewijks, 2014).

$$k_n = \frac{4}{3} E_{eff} \sqrt{R_{eff}} \quad (2.13)$$

Donde  $R_{eff}$  y  $E_{eff}$  son el radio efectivo y módulo de Young efectivo del par de partículas en contacto respectivamente, y se calculan con las ecuaciones( 2.14 ) y ( 2.15 ).

$$\frac{1}{R_{eff}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (2.14)$$

$$\frac{1}{E_{eff}} = \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j} \quad (2.15)$$

El enfoque de fuerza normal de Hertz-Midlin es aplicable bajo el estado elástico de las partículas, por tanto el límite de traslape se relaciona al  $0,3R_{eff} = a$  en donde  $a$  es el radio de área de contacto entre partículas, ya que luego de este valor geométrico las partículas entrarían en el rango plástico (Johnson K. , 1985).

### 2.2.7.2 Fuerza tangencial

La fuerza tangencial  $F_t$  (ver FIGURA 2.3) se calcula a partir del modelo de fricción de Coulomb con la ecuación ( 2.16 ) (Kloss, Goniva, Hager, Amberger, & Pirker, 2012).

$$F_t = \min \left\{ \left| k_t \int_{t_{c,0}}^t \Delta u_t dt + c_t \Delta u_t \right|, \mu F_n \right\} \quad (2.16)$$

Dónde:

- $F_t$  : es la fuerza tangencial
- $k_t$  : es la rigidez tangencial
- $\Delta u_t$  : es la velocidad relativa tangencial entre partículas en contacto
- $c_t$  : es el coeficiente de amortiguamiento tangencial
- $\mu$  : es el coeficiente de fricción de la partícula
- $t_{c,0}$  : es el paso del tiempo en el cual las partículas entraron en contacto inicialmente

El término integral se refiere a que a partir de que las partículas entran en contacto ( $t = t_{c,0}$ ) se genera una fuerza tangencial que se va guardando y aumenta progresivamente con cada paso de tiempo  $dt$ . La misma se debe sumar al incremento de fuerza tangencial actual.

Esto se cumple siempre y cuando  $F_t < \mu F_n$

Caso contrario se considera que la partícula se desliza y la fuerza tangencial es igual a lo indicado en la ecuación ( 2.17 ).

$$F_t = \mu F_n \quad (2.17)$$

## 2.2.8 MODELO DE ENLACE BPM

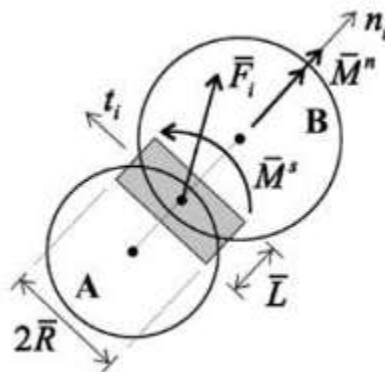
El modelo de enlace Bonded-Particle Model (BPM por sus siglas en inglés), pretende imitar el comportamiento de un ensamble de partículas enlazadas con cemento. Cada par de partículas y el cemento enlazante es representado como un sistema que actúa en paralelo, así como se muestra en la FIGURA 2.4 (Potyondy & Cundall, 2004).

Para el propósito de definir este enlace se considera lo siguiente:



- Las partículas son cuerpos rígidos circulares o esféricos. con una masa finita.
- Las partículas se mueven independientemente unas de otras y pueden trasladarse o rotar.
- Las partículas interactúan solo en los contactos; al ser éstas circulares o esféricas, un contacto es compuesto por exactamente dos partículas.
- Las partículas pueden solaparse unas con otras, y todas las superposiciones son pequeñas en relación con el tamaño de partícula de modo que los contactos se producen en una pequeña región (es decir, en un punto).
- Pueden existir enlaces con rigidez finita en los contactos, y estos enlaces resisten carga y pueden romperse. Las partículas en contacto con enlace no se superponen.
- Las leyes generalizadas de fuerza-desplazamiento en cada contacto relacionan el movimiento relativo de partículas con la fuerza y el momento en el contacto.

**FIGURA 2.4** Comportamiento fuerza-desplazamiento del sistema granular BPM



FUENTE: (Potyondy & Cundall, 2004).

Un ensamble de partículas enlazadas con este modelo, puede representar el material en su estado continuo, y las respuestas mecánicas del conglomerado tales como: deformaciones y tensiones son dependientes de los enlaces entre cada par de partículas; es decir; que en cuanto los enlaces se rompen las partículas solamente pueden comportarse como material granular. Los enlaces se pueden

romper progresivamente, simulando un proceso de desgaste del material conforme se aumenta la carga externa (Sinaie, 2016).

### 2.2.8.1 Planteamiento numérico del modelo BPM

Las leyes de fuerza-desplazamiento de las partículas en este modelo tienen dos porciones contribuyentes que actúan en paralelo: una que corresponde a las fuerzas de contacto abordadas en la sección 2.2.7; que corresponde al comportamiento granular del conglomerado. Y otra porción que corresponde al enlace BPM (Potyondy & Cundall, 2004).

El enlace se puede visualizar como un conjunto de resortes distribuidos uniformemente en una sección transversal circular sobre el plano de contacto y centrado con el punto de contacto. Estos resortes se comportan como una viga de longitud  $\bar{L}$  (ver FIGURA 2.4).

Los parámetros de cálculo de la porción BPM del comportamiento fuerza-desplazamiento en cada punto de contacto son:

- $\bar{E}_c$  : Módulo de Young del enlace
- $\bar{k}^n$  : rigidez axial por unidad de área, calculada con la ecuación ( 2.18 ).
- $\bar{k}^n / \bar{k}^s$ : relación de rigidez axial entre rigidez tangencial del enlace.
- $\bar{\sigma}_c$  : esfuerzo axial admisible del enlace.
- $\bar{\tau}_c$  : esfuerzo cortante admisible del enlace.
- $\bar{\lambda}$  : factor geométrico entre enlace y radio de partícula
- $\bar{R}$  : radio del enlace en paralelo, el cual se define con la ecuación ( 2.20 ).

$$\bar{k}^n = \frac{\bar{E}_c}{R^{(A)} + R^{(B)}} \quad ( 2.18 )$$

$$\bar{k}^s = \frac{\bar{k}^n}{\left( \frac{\bar{k}^n}{\bar{k}^s} \right)} \quad ( 2.19 )$$

$$\bar{R} = \bar{\lambda} \min ( R^{(A)}, R^{(B)} ) \quad ( 2.20 )$$

Dónde:

- $R^{(A)}$  : es el radio de la partícula A (ver FIGURA 2.4)
- $R^{(B)}$  : es el radio de la partícula B (ver FIGURA 2.4)

El modelo BPM considera que el aporte de fuerza y momento actuante en el contacto entre partículas, a causa del enlace, es comprendido por  $\bar{F}_i$  y  $\bar{M}_i$  respectivamente (ver FIGURA 2.4), y es correspondiente al traslape entre partículas. Tomando en cuenta el sistema de coordenadas  $n_i$  ,  $t_i$  como normal y tangencial, se pueden entonces obtener las componentes normal y tangencial de las fuerzas como la ecuación ( 2.21 ) y la ecuación ( 2.22 ) .

$$\bar{F}_i = \bar{F}^n n_i + \bar{F}^s t_i \quad ( 2.21 )$$

$$\bar{M}_i = \bar{M}^n n_i + \bar{M}^s t_i \quad ( 2.22 )$$

Dónde:

- $\bar{F}^n$  y  $\bar{M}^n$  : Son las componentes de la fuerza y momento en el eje normal
- $\bar{F}^s$  y  $\bar{M}^s$  : Son las componentes de la fuerza y momento en el eje tangencial
- $n_i$  y  $t_i$  : Son los vectores unitarios que definen el plano de contacto

Los incrementos de fuerza y momento; normal y tangencial conforme se produzcan incrementos en los desplazamientos y rotaciones en su respectivo eje de coordenadas ( $n_i$  ,  $t_i$ ), se calculan con las ecuaciones ( 2.23 ), ( 2.24 ), ( 2.25 ) y ( 2.26 ).

$$\Delta \bar{F}^n = \bar{k}^n A \Delta U^n \quad ( 2.23 )$$

$$\Delta \bar{F}^s = -\bar{k}^s A \Delta U^s \quad ( 2.24 )$$

$$\Delta \bar{M}^n = -\bar{k}^s J \Delta \theta^n \quad ( 2.25 )$$

$$\Delta \bar{M}^s = -\bar{k}^n I \Delta \theta^s \quad ( 2.26 )$$

Dónde:

- $\Delta U^n$  : incremento en desplazamiento en el eje normal.
- $\Delta U^s$  : incremento en desplazamiento en el eje tangencial.
- $\Delta \theta^n$  : incremento de desplazamiento rotacional con respecto al eje normal.
- $\Delta \theta^s$  : incremento de desplazamiento rotacional con respecto al eje tangencial.
- $A$  : Es el área de la sección transversal del enlace.
- $I$  : Es el momento de inercia de la sección transversal del enlace.
- $J$  : Es el momento polar de inercia de la sección transversal del enlace.

Los parámetros  $A$ ,  $I$  y  $J$  para esferas se calculan con las ecuaciones ( 2.27 ), ( 2.28 ) y ( 2.29 ). Donde  $\bar{R}$  viene de la ecuación ( 2.20 ).

$$A = \pi \bar{R}^2 \quad ( 2.27 )$$

$$I = \frac{1}{4} \pi \bar{R}^4 \quad ( 2.28 )$$

$$J = \frac{1}{2} \pi \bar{R}^4 \quad ( 2.29 )$$

Los máximos esfuerzos de tensión y de corte actuando en la periferia del enlace son calculados con la teoría de vigas con las ecuaciones ( 2.30 ) y ( 2.31 ).

$$\bar{\sigma}^{\max} = -\frac{\bar{F}^n}{A} + \frac{|\bar{M}^s| \bar{R}}{I} \quad ( 2.30 )$$

$$\bar{\tau}^{\max} = -\frac{|\bar{F}^s|}{A} + \frac{|\bar{M}^n| \bar{R}}{J} \quad ( 2.31 )$$

Los enlaces BPM se rompen cuando se cumplen las condiciones ( 2.32 ) o ( 2.33 ), en cuyo caso son removidos permanentemente del sistema; junto con su fuerza y momento.

$$\bar{\sigma}^{\max} \geq \bar{\sigma}_c \quad ( 2.32 )$$

$$\bar{\tau}^{\max} \geq \bar{\tau}_c \quad ( 2.33 )$$

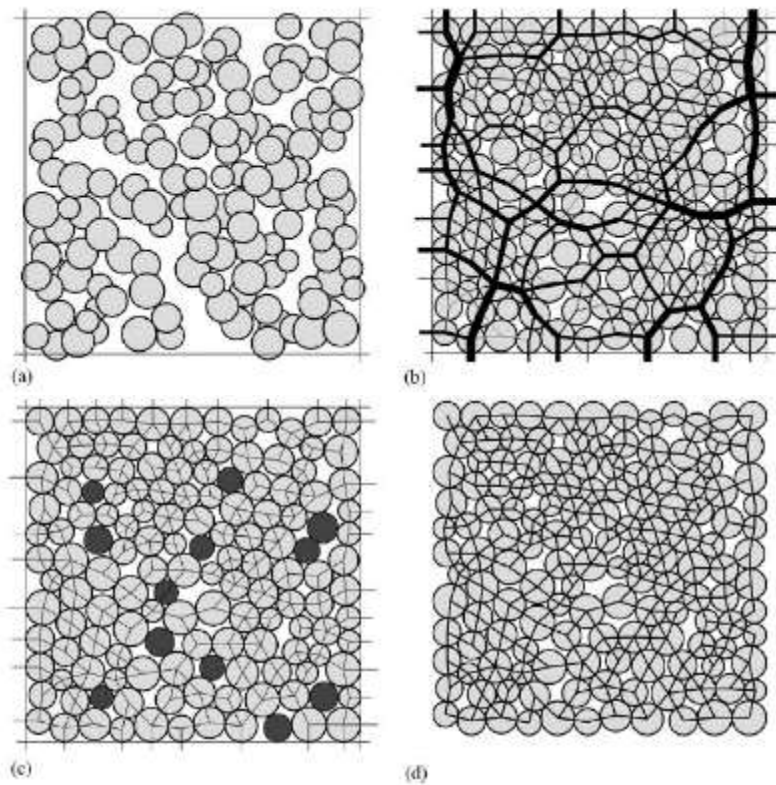
### 2.2.8.2 Limitaciones del modelo BPM

El modelo BPM presenta sus limitaciones en cuanto no puede generar un amplio proceso de desgaste luego de alcanzar la máxima resistencia en un modelo de falla, así como se puede ver en la FIGURA 2.6. Esto se debe principalmente a que el enlace entre partículas es frágil (Wang Zhuolin & Gu, 2008; Nitka & Tejchman, 2015).

El proceso de calibración del modelo BPM implica un verdadero trabajo iterativo, ya que la cantidad de parámetros del enlace es considerable. En los medios continuos los parámetros de modelación se obtienen directamente de los resultados experimentales, sin embargo, en DEM la respuesta estructural depende de la interacción de componentes, y los parámetros de simulación numérica no se pueden encontrar de manera directa. Esto implica elevados recursos computacionales y una gran cantidad de tiempo de procesamiento computacional, mismo que limita la reproducción de este tipo de estudios numéricos bajo el marco teórico del BPM para el común denominador estudiantil.

Considerando que el proceso de acoplado de partículas en el BPM es la inserción de partículas en un recipiente, para luego comprimir el volumen, tal que todas las partículas involucradas estén en contacto; por tanto enlazadas (ver FIGURA 2.5), se entiende que no se puede extender la diferencia entre diámetros de partículas del conglomerado, limitando la representación de la realidad de un conglomerado extremadamente poli disperso.

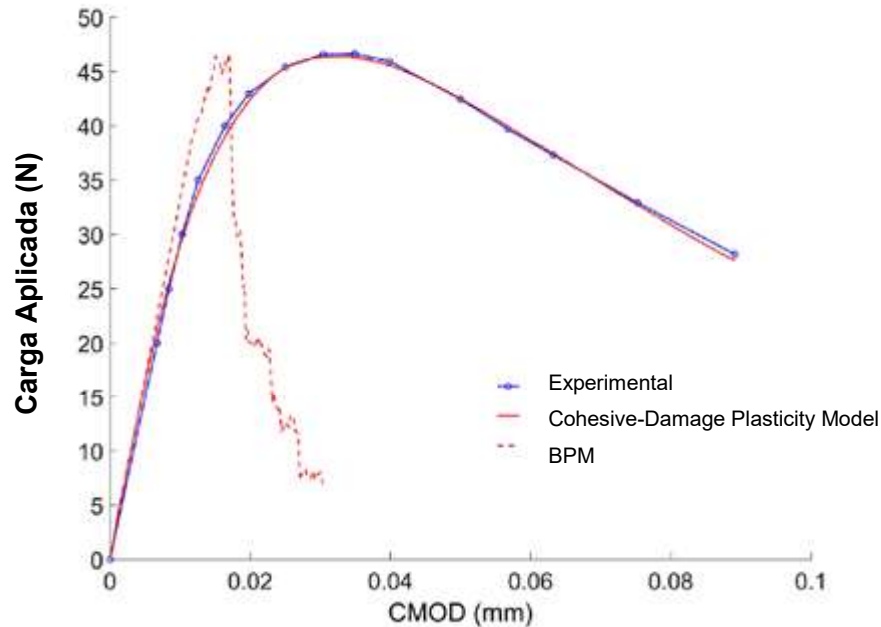
**FIGURA 2.5** Proceso de generación del conglomerado granular BPM



- (a) Llenado de partículas
- (b) Compresión del conglomerado
- (c) Colocación de enlaces BPM
- (d) Retiro de paredes del recipiente contenedor

FUENTE: (Potyondy & Cundall, 2004)

**FIGURA 2.6** Resultado experimental y numérico del ensayo de flexión de tres puntos en viga: Curva Carga aplicada vs incremento de abertura de zona de falla (CMOD)



Descripción: Se considera modelos de enlace BPM y Cohesive-Damage Plasticity Model.

FUENTE: (Nguyen, Bui, Nguyen, & Kodikara, 2017)

Por las razones expuestas anteriormente, es que se han propuesto modelos de enlace adicionales como el modelo “Cohesive-Damage Plasticity Model”, o el modelo “Cohesive Beam Model”, entre otros, en los cuales se pueda representar el aporte de la cohesión, o se permita establecer un proceso de degradación para las vigas del modelo BPM y el desenlace entre partículas sea progresivo (André, Iordanoff, Charles, & Néauport, 2012; Nguyen, Bui, Nguyen, & Kodikara, 2017).

### 2.2.9 MODELO DE ADHERENCIA JKR

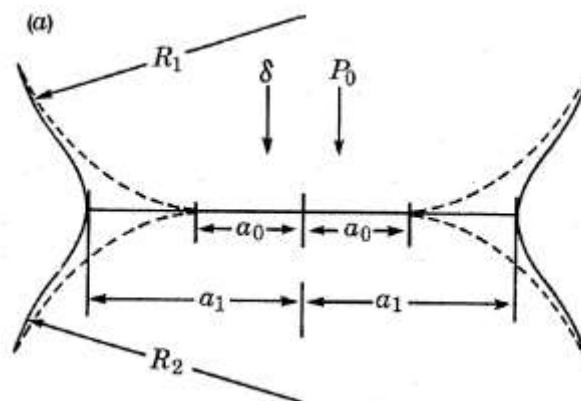
El enlace entre los componentes de los materiales a nivel molecular o nano escalar ha sido de interés de la comunidad científica, por sus posibles aplicaciones a nivel ingenieril, en ramas tales como la biotecnología, biofísica, ciencia de materiales. Por este interés se han desarrollado modelos de enlace a través de la física de la materia condensada, en tal virtud, los primeros acercamientos a los modelos de enlace cohesivos se derivan principalmente de los fundamentos de los enlaces químicos; partiendo de las fuerzas de Van Der Waals, considerando como principal

causante de enlace a las relaciones electromagnéticas entre componentes. De la fuerza de estos enlaces depende el estado de la materia: sólido (si la fuerza es grande), líquido (si las fuerzas son medianas) o gas (si las fuerzas son pequeñas). Tratar de explicar los procesos de desgaste de la materia, o el cambio de estado a través de la inducción de eventos termodinámicos o eléctricos viene de la mano de estos modelos enlazantes (Derjaguin, Muller, & Toporov, November 1975; Bradley, 1932).

### 2.2.9.1 Planteamiento numérico del modelo de adherencia JKR

El modelo de enlace Johnson-Kendall-Roberts entre partículas considera asignar a las partículas una propiedad adherente mediante la modificación de la teoría de contacto de Hertz; en la que únicamente se trata las partículas secas y sin adherencia. Para el propósito de presentar los fundamentos de la teoría de contacto adhesivo de Johnson-Kendall-Roberts se tiene en la FIGURA 2.7 la geometría del contacto entre dos partículas esféricas.

**FIGURA 2.7** Zona de contacto entre dos partículas esféricas.



FUENTE: (Johnson, Kendall, & Roberts, 1971)

En la teoría de contacto de Hertz se tiene la siguiente ecuación ( 2.34 ) que relaciona la fuerza repulsiva con la zona de contacto de la partícula (en este caso de geometría esférica):

$$P_0 = \frac{4E^*a_0^3}{3R} \quad ( 2.34 )$$



Dónde:

$$R = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \quad ( 2.35 )$$

$$E^* = \frac{E}{1 - \nu^2} \quad ( 2.36 )$$

Dónde:

- $P_0$  : es la fuerza aplicada al sistema.
- $R$  : es el radio de giro de la zona de contacto.
- $E$  : es el módulo de elasticidad de las partículas en contacto.
- $\nu$  : es el módulo de Poisson de las partículas en contacto

Siendo que Hertz únicamente consideraba el área formada por el radio de contacto  $a_0$  como la fuente de fuerza repulsiva. En este modelo no hay fuerza de adherencia (Barthel, 2014).

La primera aproximación de adherencia es que; partiendo de este mismo concepto, y considerando la inserción del parámetro de energía de superficie de adhesión para el propósito de incluir la adherencia en el modelo de contacto de Hertz, queda entonces la energía total del sistema como la suma entre la energía elástica de Hertz (repulsión) más la energía de adhesión (atracción). Quedando expresada de forma de la ecuación ( 2.37 ) (Barthel, 2014; Derjaguin B. , 1934).

$$\varepsilon(\delta) = \varepsilon_H(\delta) - \omega(\pi a^2) \quad ( 2.37 )$$

Donde:

- $\varepsilon(\delta)$  : Es la energía total del sistema
- $\varepsilon_H(\delta)$  : Es la energía elástica de Hertz
- $\omega(\pi a^2)$  : Es la energía de adhesión
- $\omega$  : Es la energía superficial de adhesión

Luego, Johnson, Kendall y Roberts, mediante experimentos físicos, identifican que la adherencia entre esferas de caucho se manifiestan de tal manera que se forma una película alrededor del área de contacto, haciendo que ésta sea mayor, y generando un cuello como se puede apreciar en la FIGURA 2.7. Por lo que el radio del área de contacto adherente ahora debe identificarse como  $a_1$ , así como se define en la ecuación ( 2.38 ) (Johnson, Kendall, & Roberts, 1971).

$$a_1^3 = RP/K \quad ( 2.38 )$$

Dónde:

$$K = \frac{4}{3\pi(k_1 + k_2)} \quad ( 2.39 )$$

$$k_1 = \frac{1 - \nu_1^2}{\pi E_1} \quad ( 2.40 )$$

$$k_2 = \frac{1 - \nu_2^2}{\pi E_2} \quad ( 2.41 )$$

Dónde:

- $a_1$  : es el radio del área de contacto aumentado por el cuello formado por adhesión.
- $P$  : Es la fuerza aplicada al sistema.
- $K$  : Es la rigidez efectiva modificada para el modelo JKR.
- $E_1$  : es el módulo de elasticidad de la partícula 1 (superior).
- $E_2$  : es el módulo de elasticidad de la partícula 2 (inferior).
- $\nu_1$  : es el módulo de Poisson de la partícula 1 (superior).
- $\nu_2$  : es el módulo de Poisson de la partícula 2 (inferior).

En tal virtud, en el modelo JKR se modifica entonces la energía superficial de adhesión hasta entonces conocida (referirse a la ecuación ( 2.37 )) con la ecuación ( 2.42 ) (Johnson, Kendall, & Roberts, 1971).

$$U_s = -\gamma\pi a_1^2 \quad (2.42)$$

Dónde:

- $\gamma$  : es la energía superficial de adherencia entre los materiales en contacto.

Entonces la ecuación de Hertz (referirse a la ecuación ( 2.34 )) queda modificada como se indica en la ecuación ( 2.43 ) (Johnson, Kendall, & Roberts, 1971).

$$a^3 = \frac{R}{K} (P + 3\gamma\pi R + \sqrt{6\gamma\pi R P + (3\gamma\pi R)^2}) \quad (2.43)$$

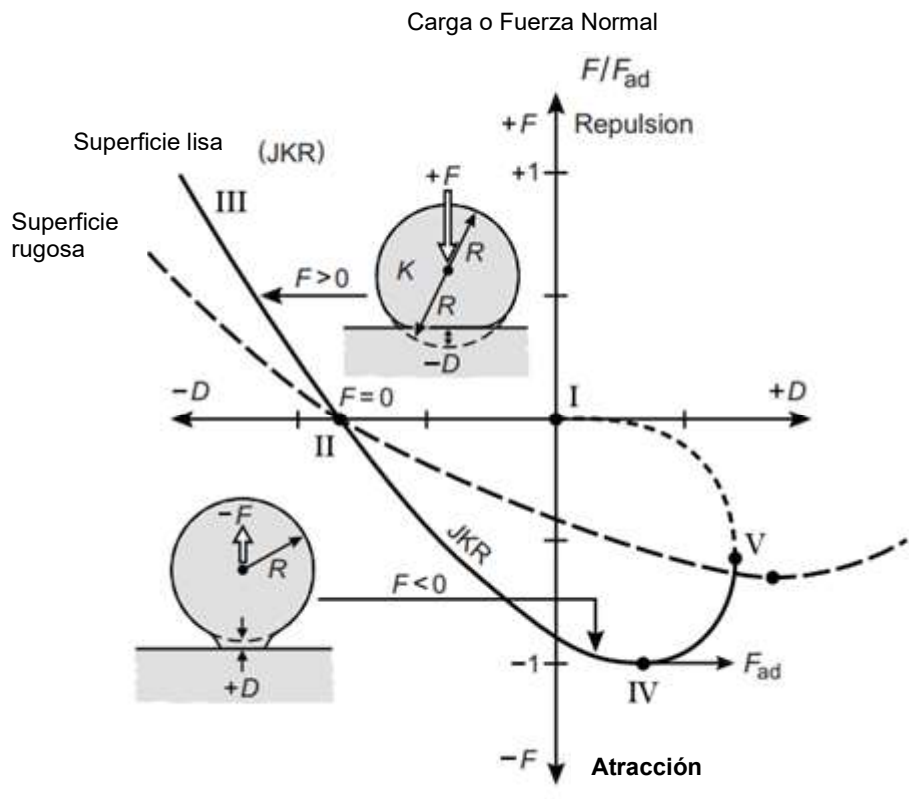
Por tanto, la fuerza de desenlace adherente de acuerdo al modelo JKR queda definido con la ecuación ( 2.44 ) (Johnson, Kendall, & Roberts, 1971).

$$F_{\text{pullout}} = -\frac{3}{2} \pi \gamma R \quad (2.44)$$

Este modelo no relaciona la energía superficial de adherencia con el módulo de elasticidad directamente, sin embargo, se ha demostrado experimentalmente que a menor módulo de Young es mayor la energía de adherencia (Israelachvili, 2011).

El modelo JKR define el comportamiento de la adherencia como lo muestra la FIGURA 2.8. En donde se muestra que el equilibrio presenta contacto, siendo D el traslape  $\delta$  (ver ecuación ( 2.12), en el cual actúan la fuerza de repulsión y adherencia simultáneamente en el estado II, en el estado IV la esfera se separaría de la superficie rígida a causa de la fuerza de desenlace adherente  $F_{ad}$ . En el estado III se muestra a la esfera siendo comprimida, aumentando entonces la fuerza de repulsión. De igual manera se muestra con líneas entre cortadas el comportamiento que se presentaría si las superficies fuesen rugosas.

**FIGURA 2.8** Curva JKR fuerza-distancia enfocada en una esfera elástica al separarse de una superficie rígida.



FUENTE: (Israelachvili, 2011).

### 2.2.9.2 Energía de adhesión JKR

La energía de adhesión del modelo Johnson-Kendall-Roberts está relacionada con la fuerza necesaria para separar partículas de un conglomerado granular. Y es de interés en la caracterización de un material en específico, ya que es determinante en su comportamiento mecánico (Barthel, 2014).

La energía superficial  $\gamma$  se define como el cambio de energía libre cuando el área de superficie de un medio se incrementa por unidad de área. Este parámetro es dependiente del trabajo de adhesión; que se define como el trabajo realizado para separar unidades de área de dos superficies o medios de contacto en el vacío (Israelachvili, 2011).

Al considerar partículas en contacto del mismo material se tiene la ecuación ( 2.45 ) para la determinación de la energía superficial de adhesión.

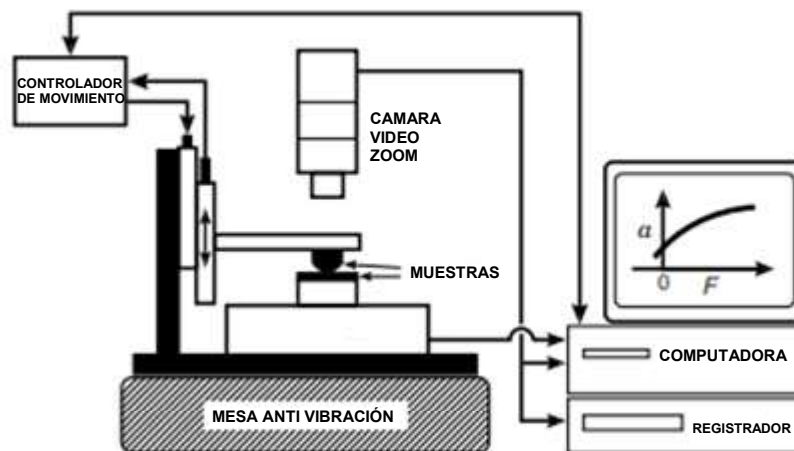
$$\gamma = \frac{1}{2}W \quad (2.45)$$

Dónde:

- $W$  : es el trabajo de adhesión.
- $\gamma$  : es la energía superficial de adhesión JKR.

Los experimentos enfocados en la obtención de la energía de adherencia, se realizan mediante la medición de la fuerza causante de desenlace, y la geometría de las partículas, así como el área de contacto de las partículas, entendiéndose estos experimentos a nivel nano y micro escalar, realizados con máquinas altamente precisas y de gran alcance óptico así como se muestra en la FIGURA 2.9. Ya que los potenciales que se desean evaluar son intermoleculares; como las fuerzas de Van Der Waals por ejemplo. Las mediciones realizadas hasta el momento han tratado de caracterizar líquidos y gases, para relacionar la energía  $\gamma$  con propiedades termodinámicas como el punto de ebullición, por ejemplo, y clarificar los procesos de cambios de estado de la materia. Cabe recalcar que bajo este aspecto existen modelos de adherencia y cohesión que permiten obtener la energía  $\gamma$  a partir de parámetros altamente controlados, como los mencionados anteriormente (Israelachvili, 2011).

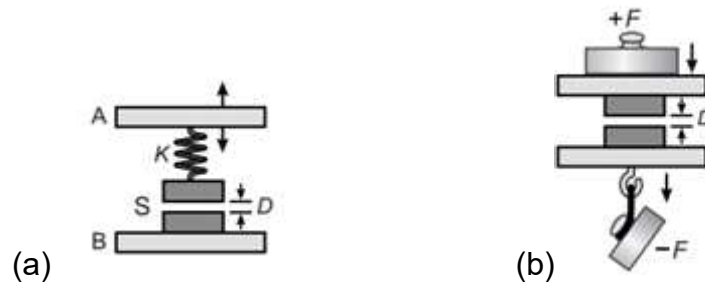
**FIGURA 2.9** Máquina JKR desarrollada por Tirrel y otros en 1995.



FUENTE: (Israelachvili, 2011)

Para la medición de las fuerzas y desplazamientos se usan bastidores móviles así como se muestra en la FIGURA 2.10. Conformados de resortes (a) o con capacidad de cargar fuerza progresivamente (b). Entre éstos se coloca la muestra de material a evaluar.

**FIGURA 2.10** Esquema de medición de fuerzas de adhesión.



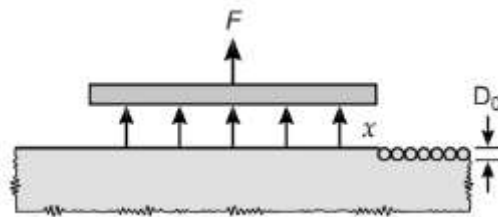
FUENTE: (Israelachvili, 2011).

Generalmente la energía superficial de adherencia se obtiene de manera indirecta, mediante la evaluación de la fuerza de desenlace y el desplazamiento  $D$  medidos (Referidos a la FIGURA 2.10). Calculándose el trabajo de adhesión, y posterior a ello la aplicación de la ecuación ( 2.45 ).

El modelo JKR permite calcular la energía superficial de adherencia entre dos partículas esféricas mediante la ecuación ( 2.44 ), que al despejarse queda como la ecuación ( 2.46 ). Conociéndose la fuerza de desenlace, y la geometría de las partículas en contacto.

$$\gamma = \frac{2(F_{\text{pullout}})}{3\pi R} \quad ( 2.46 )$$

La fuerza  $F_{\text{pullout}}$  se puede interpretar como la tensión necesaria para desenlazar una superficie en contacto, así como se muestra en la FIGURA 2.11

**FIGURA 2.11** Esquema de la fuerza pullout (F)

FUENTE: (Israelachvili, 2011)

### 2.2.10 INCREMENTO DE TIEMPO

La estabilidad del modelo numérico DEM requiere que los incrementos en los desplazamientos de las partículas sean lo suficientemente pequeños, tal que el rango de influencia de sus cambios sea sensible únicamente a las partículas vecinas inmediatas. Consecuentemente, el incremento de tiempo debe ser proporcionalmente pequeño; tal que la perturbación individual de una partícula no se propague en más que sus partículas vecinas inmediatas (O'Sullivan, 2010).

#### 2.2.10.1 Tiempo de Rayleigh

La propagación de carga de una partícula a otra está definida mediante la propagación de ondas elásticas en un medio sólido. En tal virtud, se distinguen tres tipos de onda; de presión (ondas P), onda de corte (ondas S), y onda superficial de Rayleigh. Cuyos aportes a la transferencia de energía corresponden al 7%, 26% y 67% respectivamente. Por lo que se puede asumir que toda la energía es transferida mediante ondas Rayleigh (Thornton & Randall, 1988).

Para el cálculo del tiempo de transferencia de energía de Rayleigh se tiene la ecuación ( 2.47 ).

$$T_R = \pi R \frac{\sqrt{\rho/G}}{(0,1632\nu + 0,8766)} \quad ( 2.47 )$$

Dónde:

- R : es el mínimo radio de las partículas

- $\rho$  : es la densidad de la partícula
- $\nu$  : es el módulo de Poisson
- $G$  : es el módulo de corte, y se calcula con la ecuación ( 2.48 ).

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad ( 2.48 )$$

El valor  $\Delta t$  a usarse en el modelamiento computacional discreto debe estar en el rango que se indica en la ecuación ( 2.49 ).

$$\Delta t < (0,1T_R - 0,3T_R) \quad ( 2.49 )$$

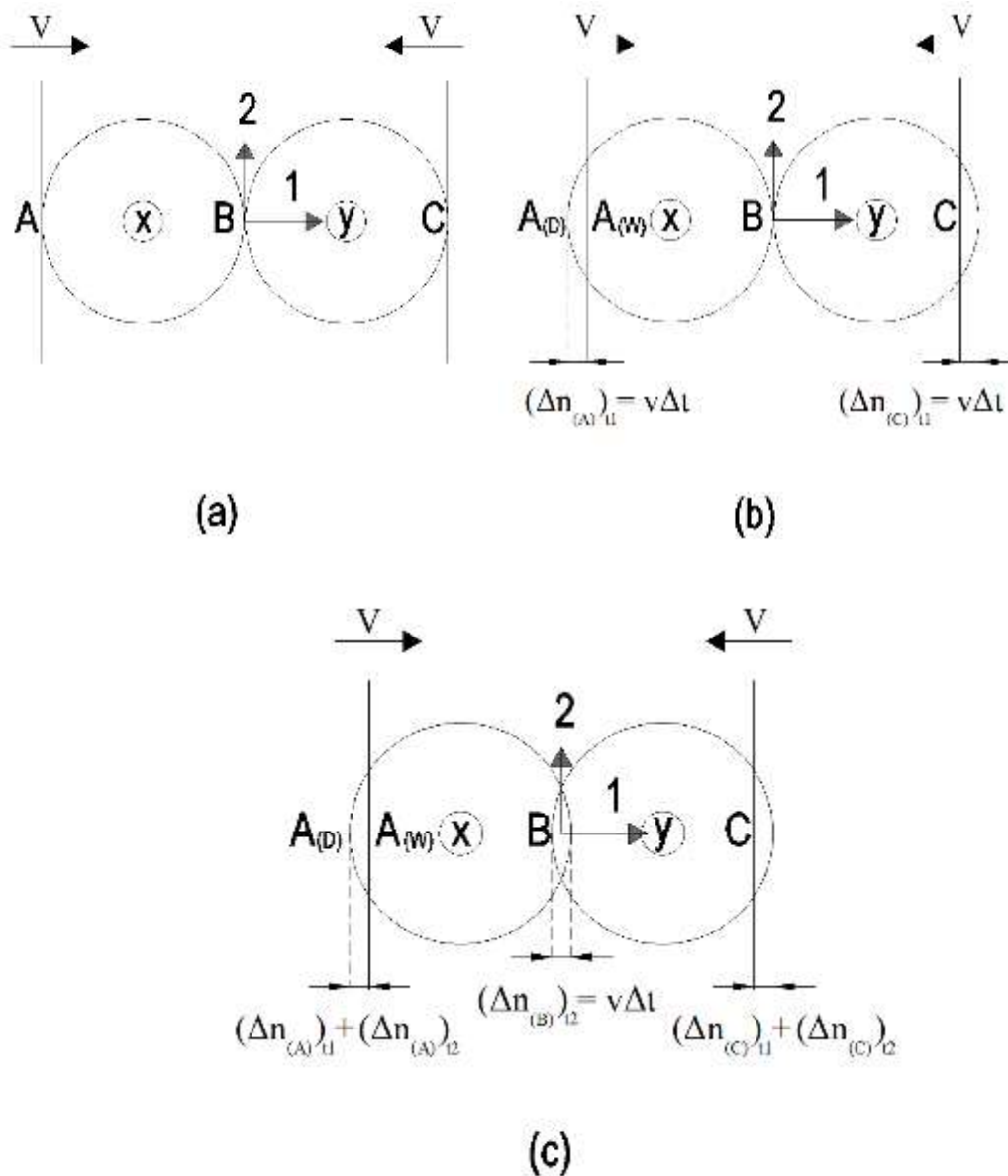
### 2.2.11 INTEGRACIÓN DEL MOVIMIENTO

El DEM describe un proceso transitorio y dinámico de las partículas que conforman el conglomerado. Para el propósito de actualizar las posiciones, velocidades y aceleraciones de cada partícula se resuelve numéricamente las ecuaciones de movimiento mediante la integración de Verlet. De donde se obtienen las nuevas aceleraciones para el tiempo  $t = t + \Delta t$ .

Para indicar cómo es el proceso de integración de movimiento se referirá a la FIGURA 2.12 En la cual se tienen tres estados del movimiento relativo entre dos partículas: (a) En el tiempo  $t = 0$  las partículas no están en contacto, pero las paredes se mueven a una velocidad constante  $v$ , en (b) las paredes entran en contacto con cada una de las partículas generando entonces un traslape  $(\Delta n_A)_{t1}$  y  $(\Delta n_C)_{t1}$  en los puntos A y C respectivamente en el tiempo  $t = t1 = 0 + \Delta t$ . en (c) es el tiempo  $t = t2 = t1 + \Delta t$ , las partículas se mueven en direcciones opuestas y se genera entre ellas el traslape  $(\Delta n_B)_{t2}$  en el punto B, mientras que en los puntos A y C se generan nuevos incrementos en los traslapes  $(\Delta n_A)_{t2}$  y  $(\Delta n_C)_{t2}$  respectivamente.



**FIGURA 2.12** Dos discos comprimidos entre paredes rígidas.



FUENTE: (Cundall & Strack, 1979)

Durante el intervalo  $\Delta t$  la velocidad  $v$  es constante y considerando la ecuación ( 2.12 ) (Referido a los modelos de contacto en DEM). En el tiempo  $t = t_1 = 0 + \Delta t$  (ver FIGURA 2.12 (a)) la fuerza actuante en el punto A de la esfera x es:

$$F_{(x)t_1} = kn ((\Delta n_A)_{t_1}) = kn v \Delta t \quad ( 2.50 )$$

Al aplicar la segunda ley de Newton (Referido a las ecuaciones de movimiento del DEM) se tiene la aceleración de la partícula x en el tiempo  $t = t_1$ .

$$\dot{x}_{t1} = \frac{F_{(x)t1}}{m_{(x)}} \quad (2.51)$$

Al aplicar integración numérica en la ecuación ( 2.51 ) se obtiene la velocidad, para el tiempo  $t = t2$ , como se indica en la ecuación ( 2.52 ).

$$[\dot{x}]_{t2} = \left[ \frac{F_{(x)t1}}{m_{(x)}} \right] \Delta t \quad (2.52)$$

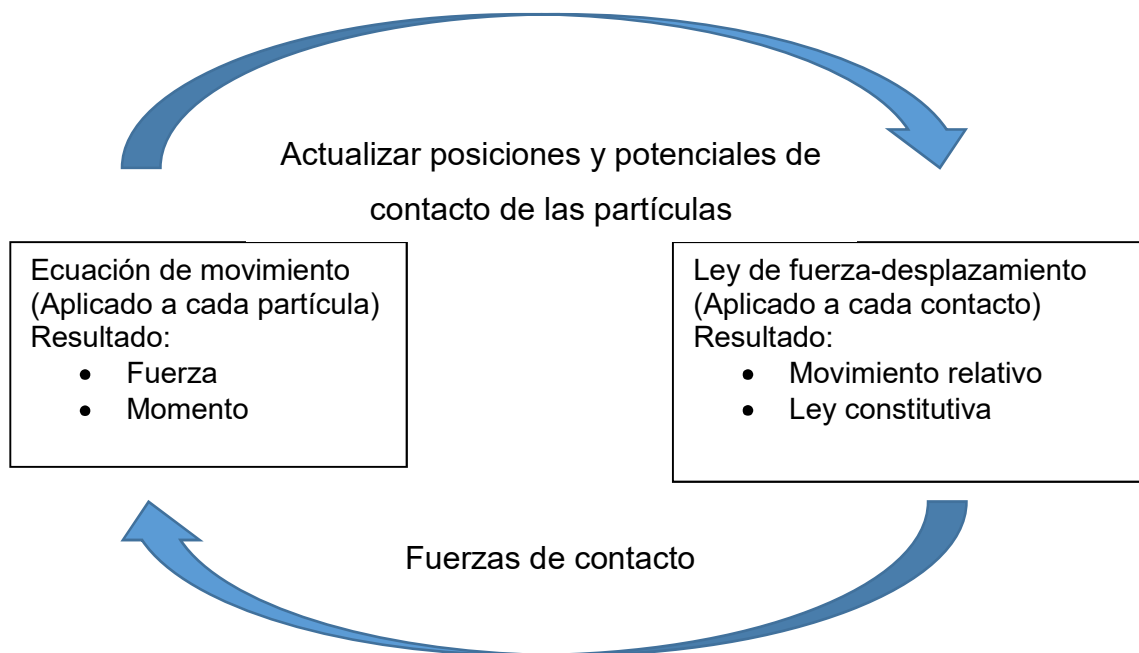
Para obtener las traslaciones en el tiempo  $t = t2$  es necesario considerar la velocidad calculada con la ecuación ( 2.52 ) y la velocidad existente lateral de las paredes  $v$ . Aplicando integración numérica se tiene entonces el incremento en el desplazamiento del punto A:

$$((\Delta n_A)_{t2} = \left( v - \left[ \frac{F_{(x)t1}}{m_{(x)}} \right] \Delta t \right) \Delta t \quad (2.53)$$

Una vez obtenida la posición para el tiempo  $t = t2$  se aplicará la ecuación ( 2.50 ) para calcular la fuerza en el tiempo  $t = t2$ , luego se aplicará la ecuación ( 2.52 ) para calcular la velocidad en el tiempo  $t = t3$  y a partir de ello la nueva posición del punto A en el tiempo  $t = t3$  con la ecuación ( 2.53 ). Este proceso de cálculo es sucesivo, para cada uno de los puntos de contacto. Para obtener la fuerza resultante actuante en una partícula se hace sumatoria de fuerzas, tanto normales y tangenciales de los puntos de contacto. Y se calcula la traslación, aceleración y velocidad para el centriode de la partícula.

El ciclo de cálculo sigue la secuencia que se muestra en la FIGURA 2.13, y corresponde al algoritmo implementado en la mayoría de programas DEM existentes. LIGGGHTS no es la excepción.

**FIGURA 2.13** Proceso de cálculo en DEM.



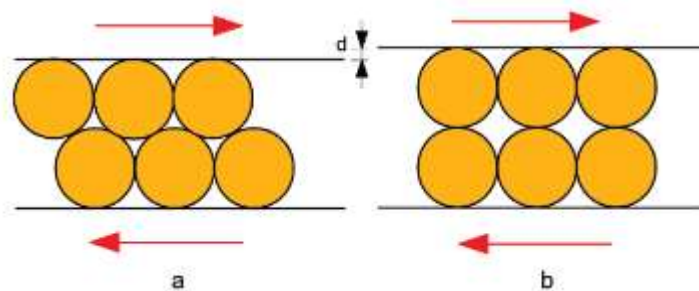
FUENTE: (Gupta, 2006)

## 2.3 CARACTERÍSTICAS DEL CONGLOMERADO GRANULAR

### 2.3.1 DILATANCIA

La dilatación de un material granular se define como la propiedad de incrementar su volumen, a causa del reordenamiento de sus partículas por efectos de corte. Este fenómeno se aprecia en la FIGURA 2.14.

**FIGURA 2.14** Dilatación del material granular.- existe reordenamiento de partículas y cambio de volumen de (a) a (b)



### 2.3.2 SEGREGACIÓN

En ensambles de partículas polidispersos distribuidos inicialmente de una forma arbitraria este fenómeno se presenta como la re distribución por tamaño, densidad y rigidez a causa de agentes externos como vibraciones o fuerzas aplicadas (Reis, 2004).

### 2.3.3 DENSIDAD DEL CONGLOMERADO (BULK DENSITY)

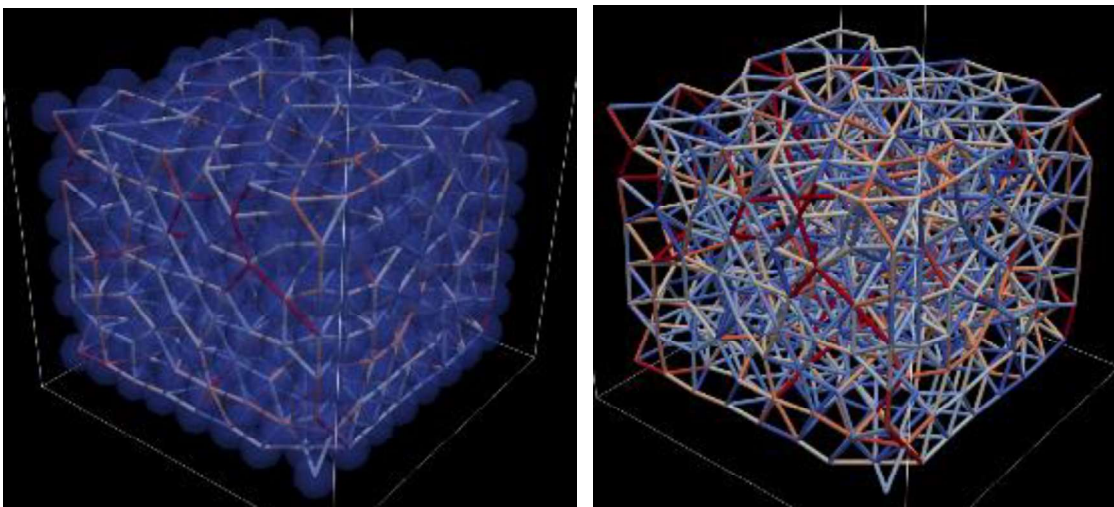
La densidad del conglomerado granular es la relación entre la masa del ensamble granular y el volumen ocupado (O'Sullivan, 2010).

### 2.3.4 NUMERO DE COORDINACIÓN Y CADENAS DE FUERZAS

El número de coordinación de una partícula está relacionado al número de contactos con sus vecinas inmediatas. Mientras mayor es el número de coordinación, mayor es la densidad de conglomerado (Bulk Density).

Las cadenas de fuerzas se producen siempre y cuando se presente contacto entre partículas colindantes, las mismas se representan como líneas de centro a centro de partículas en contacto formando redes que transmiten presiones, así como se puede apreciar en la FIGURA 2.15 (Ballaz, 2005).

**FIGURA 2.15** Cadenas de fuerzas en un conglomerado granular con enlaces cohesivos.

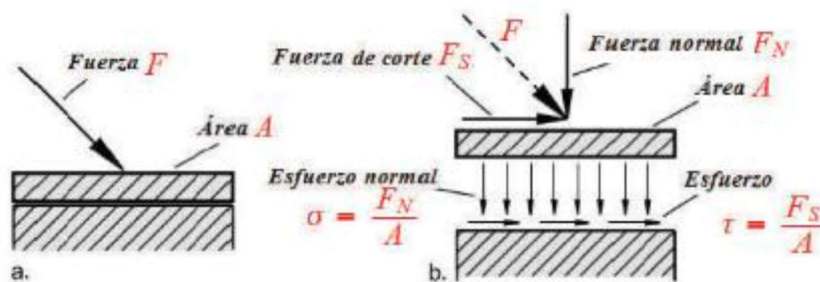


FUENTE: Propia

### 2.3.5 FUERZAS Y TENSIONES

Las fuerzas de un conglomerado cohesivo son producto de la sumatoria de fuerzas individuales de las partículas que se encuentran en zonas límite del volumen de control. Para describir un estado de carga es necesario recurrir a la mecánica de medios continuos, entonces se considera una fuerza actuando sobre un área  $A$ , como se puede apreciar en la FIGURA 2.16.

**FIGURA 2.16** a) Fuerza aplicada  $F$ ; b) Fuerza resultante,  $F_s$ ,  $F_n$  y esfuerzos



FUENTE: (Guamushig, 2016)

Entonces se puede describir dos tipos de fuerzas actuantes en el conglomerado granular:

1. La fuerza normal  $F_N$  que actúa en dirección ortogonal al área  $A$ .
2. La fuerza tangencial  $F_S$  que actúa en dirección paralela al área  $A$ .

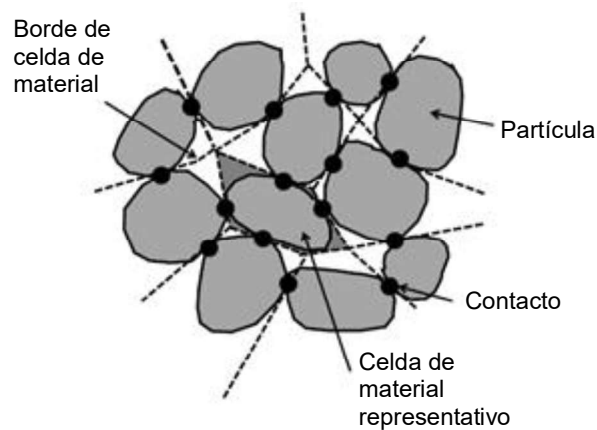
Las fuerzas normales se relacionan con el módulo de elasticidad y con las deformaciones axiales de las partículas. Mientras que las fuerzas tangenciales están estrechamente relacionadas al coeficiente de fricción de las partículas. Cabe recalcar que estas fuerzas manifestadas en los límites del volumen de control, son consecuencia de la interacción de todas las partículas conformantes, mas no únicamente de las partículas de borde.

### 2.3.6 ESFUERZOS EN UN SÓLIDO GRANULAR

El esfuerzo de un conglomerado granular se puede presentar de distintas maneras; generalmente es un tensor esfuerzo aplicado en un volumen de control, el cual puede ser una fracción del volumen del conglomerado granular. O puede ser el

volumen total del mismo. Para el propósito de encontrar este esfuerzo el enfoque presentado en este estudio es el de esfuerzos locales calculados a través de las fuerzas de contacto. El esquema del material granular para este propósito es el que se muestra en la FIGURA 2.17 en la que se puede notar que una partícula está en una celda de material (MC); la cual tiene su volumen de celda, y se presentan fuerzas de contacto en los bordes de la celda.

**FIGURA 2.17** Esquema del sistema de celdas propuesto por Bagi (1996).



FUENTE: (O'Sullivan, 2010)

Entonces el esfuerzo promedio de un volumen mayor de conglomerado granular es la suma de esfuerzos individuales manifestados en cada una de las celdas de material.

Los esfuerzos en las celdas individuales se pueden calcular directamente de las fuerzas de contacto con la ecuación ( 2.54 ) (O'Sullivan, 2010).

$$\bar{\sigma}_{ij}^{MC} = \frac{1}{V^{MC}} \sum_{c=1}^{N^{f,MC}} f_i^c x_j^c \quad (2.54)$$

Dónde:

- $\bar{\sigma}_{ij}^{MC}$  : es el tensor esfuerzo promedio del volumen de una celda.
- $V^{MC}$  : es el volumen de una celda individual.
- $f_i^c$  : son las fuerzas de contacto alrededor del borde de una celda c.

- $x_j^c$  : es el vector de posición de aplicación de cada una de las fuerzas.
- La sumatoria se hace desde el contacto  $c=1$  en la celda hasta  $N^{f,MC}$  que es el número de contactos total en la celda.

Una vez calculados los esfuerzos en cada una de las celdas de material, se puede tener el tensor esfuerzo en un volumen de control con la ecuación ( 2.55 ).

$$\bar{\sigma}_{ij}^{MR} = \frac{1}{V^{MR}} \sum_{MC=1}^{N^{MC,MR}} \bar{\sigma}_{ij}^{MC} V^{MC} \quad (2.55)$$

Dónde:

- $\bar{\sigma}_{ij}^{MR}$  : es el tensor esfuerzo promedio en el volumen de control
- $V^{MR}$  : es el volumen de control
- La sumatoria se hace desde la celda de materia  $MC=1$  hasta  $N^{MC,MR}$  que es el número de celdas de material que hay en volumen de control.

### 2.3.7 CRITERIO DE FALLA DEL CONGLOMERADO COHESIVO DEL HORMIGÓN

Uno de los grandes problemas de la modelación continua o discreta del hormigón ha sido poder representar el material de manera realística, considerando sus tres fases: matriz cementante, agregados y porosidad. Es conocido de manera experimental que existen zonas de menor resistencia en el material, los cuales son proclives a generar las primeras microfisuras y posterior falla macroscópica, entonces; son estas zonas las que son determinantes de la resistencia y comportamiento mecánico del hormigón. Entonces se identifica que es en ellas en donde se debe centrar el interés de los criterios de falla (Nguyen, Stroeven, & Johannes Sluys, 2011).

La zona de transición, ITZ, por sus siglas en inglés (Interfacial Transition Zone). Es la zona en la cual se producen las primeras apariciones de fisuras, y las cuales se expanden hasta convertirse en macro fisuras visibles. Físicamente estas zonas son las que mayor porosidad presentan; esto se debe a que, en el momento de la

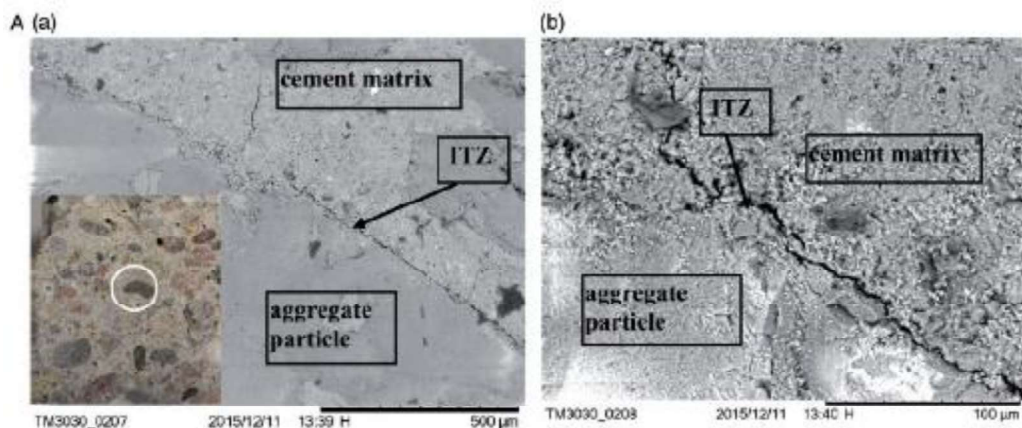
elaboración del hormigón la cantidad de aire incorporado en los bordes de los agregados es mayor debido a su propia naturaleza porosa e irregular. La zona de transición se puede apreciar físicamente en la FIGURA 2.18 (Zhang, Zhang, Liao, & Wang, 2018).

Los primeros estudios de fisuras consideraban directamente el criterio de falla descrito en los modelos de contacto y enlace. Es decir; que solamente se enfocaban en realizar un conglomerado aleatorio, sin prestar mayor detalle a la granulometría, forma o dosificaciones del hormigón. Ya que al ser el modelo BPM enfocado para representar roca, no se ha tomado en cuenta este aspecto fundamental del hormigón (Wang Zhuolin & Gu, 2008).

Actualmente los modelos DEM del hormigón, están enfocados en analizar los potenciales micro mecánicos del ITZ, por lo que el criterio de falla del conglomerado granular está estrechamente ligado a las condiciones paramétricas del ensamble de partículas; es decir: a su forma, granulometría, variables de enlace, etc. (Nitka & Tejchman, 2015; Suchorzewski, Tejchman, & Nitka, 2017).

Considerando lo expuesto anteriormente, es prudente comprender que el criterio de falla del conglomerado enlazado poli disperso debe ser función de la geometría y propiedades de los agregados, así como de los parámetros del enlace (Entiéndase como enlace BPM o adhesión JKR).

**FIGURA 2.18** ITZ en el hormigón obtenida con barrido microscópico electrónico. Aumento de 200 a 1 con agregados de 3mm de diámetro



FUENTE: (Suchorzewski, Tejchman, & Nitka, 2017)



Al emplear el modelo de adhesión JKR, como lo es el caso de este estudio, el criterio de falla de enlace debe estar ligado a los principios antes mencionados. Entonces, citando las ecuaciones ( 2.39 ), ( 2.40 ) y ( 2.41 ), claramente se puede evidenciar que el modelo considera las propiedades mecánicas del material, al ver en la ecuación ( 2.43 ) se puede comprobar que el modelo considera la geometría de los componentes del conglomerado granular como potencial fundamental de las fuerzas de enlace.

Es por ello que el criterio de falla ligado al hormigón se puede representar con el modelo de adherencia JKR, y sigue lo expuesto en la ecuación ( 2.44 ). Si bien el ensamble granular no puede ser altamente detallado a fin de representar el ITZ, por las limitaciones computacionales, sí es posible identificar tendencias de desenlace características del material.

## **2.4 COMPRESIÓN UNIAXIAL DEL HORMIGÓN**

### **2.4.1 INTRODUCCIÓN**

La compresión uniaxial del hormigón es el evento en el cual se somete a un espécimen del material, luego de los 28 días de su construcción a un ensayo de aplastamiento en el sentido de su eje longitudinal. Sin aplicación de medios confinantes en las caras laterales. El procedimiento a tomar en cuenta para la ejecución del ensayo físico destructivo debe seguir lo descrito en la norma ASTM C39/C39M-18.

### **2.4.2 PROCEDIMIENTO EXPUESTO EN ASTM C39/C39M-18**

La norma ASTM C39/C39M-18 es el procedimiento de ensayo experimental de compresión uniaxial para especímenes cúbicos o cilíndricos de hormigón. Por medio de esta técnica se debe encontrar el comportamiento a compresión del material; dando como resultados la curva esfuerzo deformación y el valor característico de resistencia a compresión  $f'_c$ .

En la sección 7.5.1 de la norma se especifica que la velocidad de carga debe ser de  $0,25 \pm 0,05$  MPa por segundo. Para garantizar un estado de carga cuasi estático, sin incurrir en cargas de altas velocidades que pueden interpretarse como

de impacto; y cuya consecuencia sería una disminución de la resistencia  $f'_c$  (ASTM C39/C39M, 2018).

Se debe dejar de aplicar carga si se presenta decremento en la resistencia ó si se llega a presentar claras fisuras en todo el volumen del hormigón. Si las fallas se presentan únicamente en las esquinas del espécimen, entonces se considera un ensayo no valido por tratarse de un error en el proceso de preparado de la muestra y la nivelación de sus bordes.

Para garantizar que la carga se transmita de manera progresiva y uniforme, sin presentar deformaciones externas, se solicita en la sección 5.2 de la norma que los bastidores de la máquina de compresión deben ser bloques de acero de dureza no menor a 55 HRC en la escala de dureza de Rockwell, y también se especifica que los bastidores deben ser adecuadamente nivelados y que sus dimensiones transversales deben ser por lo menos 3% mayor que el espécimen a evaluar (ASTM C39/C39M, 2018).

### **2.4.3 ENSAYO DE COMPRESIÓN CON PROBETAS CÚBICAS**

El ensayo experimental a compresión uniaxial generalmente se realiza con probetas cilíndricas de dimensiones normalizadas las cuales tienen una relación de diámetro a longitud 1:2; siendo las más comunes las de dimensiones 15 cm de diámetro y 30 cm de longitud. Sin embargo, se admite también el uso de probetas cúbicas (ONNCCE, 2014).

La principal razón por la cual se limita la práctica de llevar a cabo la caracterización del hormigón a compresión uniaxial con probetas de geometría cúbica es porque debido a su mayor aportación de área transversal; demanda de máquinas con mayor capacidad de carga, lo cual sugiere una mayor inversión en los laboratorios (Baltazar, 2015).

Existen claras ventajas en obra al tomar muestras de hormigón de geometría cúbica, ya que el proceso de vibrado, transporte, manipulación y curado se ven facilitados. Y por estas mismas razones se han realizado estudios con respecto a

evaluar el parámetro  $f'_c$  cilíndrica partir de la resistencia a compresión de un cubo de hormigón. En la TABLA 2.1 se puede ver la relación entre ellos:

**TABLA 2.1** Relación de la resistencia del cilindro a la del cubo.

$f'_c$ (kg/cm <sup>2</sup> )	70	155	200	245	270	345	370	415	450	515
$\frac{f'_c_{cilindro}}{f'_c_{cubo}}$	0,77	0,76	0,81	0,87	0,91	0,93	0,94	0,95	0,96	0,96

FUENTE: (Hassoun & Al-Manasser, 2015)

Las dimensiones normadas de una probeta cúbica de hormigón son de 10 cm, 15 cm o 20 cm de arista.

#### 2.4.4 FISURAS EN HORMIGÓN

Mediante ensayos experimentales de compresión uniaxial se obtienen resultados físicos de las fisuras producidas, como se muestra en la FIGURA 2.19 a continuación:

**FIGURA 2.19** Muestra de fisuras encontradas con ensayos experimentales en especímenes de geometría cilíndrica.

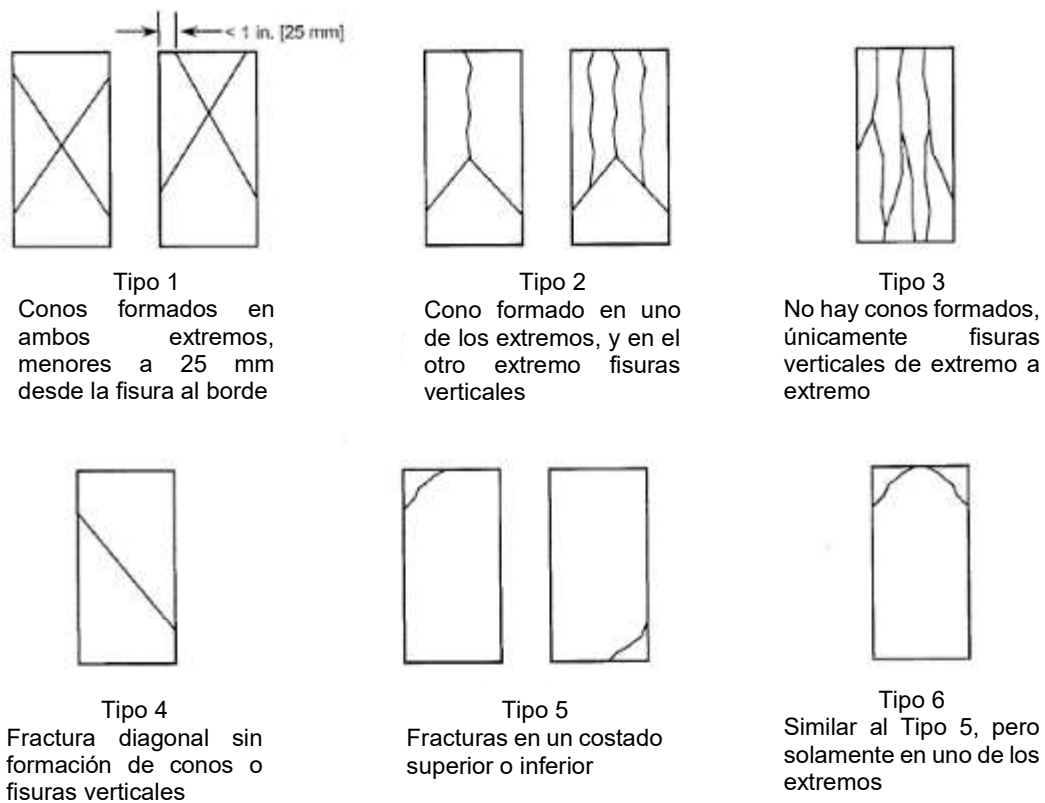


FUENTE: (Vanegas & Robles, 2008)

En tal virtud, se pueden identificar de manera visual las líneas de fisuras en su estado macroscópico. Esto permite describir e identificar las formas de falla de los especímenes.

En la norma ASTM C39/C39M-18 se presenta el criterio de las formas de falla que debe presentar un espécimen de hormigón, como se puede ver en la FIGURA 2.20. Del tipo 1 al tipo 4 corresponden a patrones de fractura adecuados; implican que la carga se ha distribuido por todo el espécimen. En el caso de los tipos 5 y 6 se presentan debido a concentración de esfuerzos y no son aceptados.

**FIGURA 2.20** Esquemas de patrones de fractura en ASTM C39/C39M-18



FUENTE: (ASTM C39/C39M, 2018)

## **CAPÍTULO 3**

### **METODOLOGÍA**

#### **3.1 INTRODUCCIÓN**

En este capítulo se detalla el marco de trabajo bajo el cual se han podido evaluar a compresión uniaxial tres representaciones numéricas discretas de hormigón; denominadas con notación A, B y C respectivamente. El potencial influyente es el tamaño del agregado grueso, ya que las propiedades adherentes características del cemento son siempre las mismas, y conforme a lo expuesto en el marco teórico de adhesión JKR; la energía de adhesión es propia de la naturaleza de un medio de enlace. Por ende, se ha modificado la granulometría del agregado grueso para generar representaciones de hormigones de mayor o menor capacidad. La metodología es numérica computacional, es decir; que se han realizado modelos numéricos representativos del hormigón, en base al método de los elementos discretos.

Se indica el caso del uso de LIGGGHTS en el clúster de la EPN para poder realizar simulaciones computacionales con procesamiento en paralelo. Luego se muestran las propiedades meso mecánicas del ensamble representativo de partículas de los distintos tipos de hormigón, objeto de este estudio. A partir de estas propiedades se muestra a continuación el proceso de calibración realizado para obtener la energía de cohesión representativa de los hormigones estudiados.

Finalmente se detallan los parámetros bajo los cuales se ha realizado la simulación computacional de compresión uniaxial, entendiéndose como estos parámetros a la velocidad de carga y propiedades del pistón de compresión. Todos estos detalles se resumen en un script característico que se presenta al final del capítulo.

#### **3.2 SIMULACIÓN COMPUTACIONAL EN PARALELO**

El alcance del presente estudio es realizar simulaciones con procedimientos computacionales en paralelo mediante el uso del clúster de la EPN. A continuación, se presenta el procedimiento para poder correr un script en LIGGGHTS.

LIGGGHTS es el software de modelación discreta, basada en el método de los elementos discretos. Este programa ha sido instalado en el clúster de la EPN mediante Singularity; a través de la creación de una imagen de Ubuntu 17.01 con MPI.

Singularity es un software que permite generar y ejecutar imágenes que simulan entornos de trabajo. Haciendo una analogía, una de estas imágenes se puede entender como una máquina virtual con su respectivo sistema operativo en el caso de virtual box.

En tal virtud, singularity es el medio por el cual se ha generado la imagen con MPI y Ubuntu 17.01. Dentro de este entorno de trabajo se ha instalado LIGGGHTS.

Por ello es que para ejecutar LIGGGHTS es necesario antes ejecutar la imagen Ubuntu 17.1 con MPI; y antes de esto es necesario ejecutar Singularity primero.

Slurm es el sistema operativo del clúster. Por ello, para ejecutar un trabajo en el clúster se debe elaborar un archivo de formato .slurm; en el cual se especifiquen los comandos a ser ejecutados por el clúster. Estos comandos corresponden a la ejecución de unos de los módulos instalados.

En el clúster están instalados algunos módulos; de los cuales es necesario ejecutar los siguientes módulos:

```
openmpi/2.1.1-intel
Singularity/2.4.5-intel
```

Luego desde singularity se carga la imagen de Ubuntu 7.10 con MPI:

```
Image=/scratch/images/Ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-
liggghts.img
```

Finalmente se ejecuta LIGGGHTS:

```
mpirun -np 64 singularity exec --writable --overlay
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-
liggghts_overlay.img
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts.img
./liggghts < in.hormigon2
```

Quedando el script .slurm de esta manera:

```
#!/bin/bash
```

```

#SBATCH -J liggghts_hormigon
#SBATCH -n 64
#SBATCH -p quinde-G8-4650
#SBATCH --qos=qos7
module purge
module load openmpi/2.1.1-intel
module load singularity/2.4.5-intel
#SBATCH --singularity
image=/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-
liggghts.img
####Directorio donde se encuentra el archivo a ser usado
####con liggghts

cd /home/mdelatorre/Hormigon_lento_3

mpirun -np 64 singularity exec --writable --overlay
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-
liggghts_overlay.img
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts.img
./liggghts < in.hormigon2

```

Es necesario tomar en cuenta que el script `.slurm` debe incluir el directorio en el cual se encuentra el script de LIGGGHTS a ser ejecutado.

El script `.slurm` debe subirse al clúster, como un trabajo. Para ello se ejecuta el comando `sbatch <nombre del archivo>.slurm`. Ejemplo:

```
sbatch singmpiligghths.slurm
```

Con el comando `squeue` se puede verificar que efectivamente el trabajo ha sido subido (Ver FIGURA 3.1). Y con el comando `tail -f <número del trabajo>.out` se puede observar la ejecución del trabajo en LIGGGHTS (Ver FIGURA 3.2). Este archivo `.out` se guarda en el directorio en el cual se ha ejecutado el archivo `.slurm`. Por eso lo recomendable es tener el script de LIGGGHTS y el script de slurm dentro del mismo directorio como se muestra en la FIGURA 3.3.

**FIGURA 3.1** Comando squeue.

```
[mdelatorre@login-1 ~]$ squeue
          JOBID PARTITION    NAME     USER  ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
          7935 quinde-G8 liggghts mdelator  R   12:34:31     2 quinde-2-[6-7]
          7940 quinde-G8 liggghts mdelator  R    2:39:30     2 quinde-2-[1,3]
          7840 quinde-G9 matlab_j jramirez  R 25-11:44:15     1 apollo-1
[mdelatorre@login-1 ~]$
```

FUENTE: propia

**FIGURA 3.2** Comando tail -f.

```
data      log.liggghts  post      post4      slurm-7940.out
in.hormigon2  meshes      post3     singmpiliggghts.slurm
[mdelatorre@login-1 Hormigon_lento_4]$ tail -f slurm-7940.out
123000    125000      0.10662765  3.4839021e-12  0.108
124000    125000      0.10840654  3.4824579e-12  0.108
125000    125000      0.11020176  3.4814984e-12  0.108
126000    125000      0.11201331  3.4813993e-12  0.108
127000    125000      0.11384118  3.4814023e-12  0.108
128000    125000      0.11568538  3.4814003e-12  0.108
129000    125000      0.1175459   3.4813993e-12  0.108
130000    125000      0.11942275  3.4813993e-12  0.108
```

FUENTE: propia

**FIGURA 3.3** Directorio remoto en el clúster

Nombre	Tamaño	Modificado
..		03/12/2018 0:46:11
data		20/11/2018 23:34:00
post		20/11/2018 23:34:00
in.llenado	3 KB	20/11/2018 23:36:29
ingmpiliggghts.slurm	1 KB	16/11/2018 23:48:26
slurm-7905.out	878 KB	20/11/2018 22:52:15

DESCRIPCIÓN: Script de LIGGGHTS (in.llenado), script de slurm (singmpiliggghts.slurm), archivo .out (slurm-7905.out) en el mismo directorio remoto del cluster (Hormigon\_llenado\_cilindro)

FUENTE: Propia

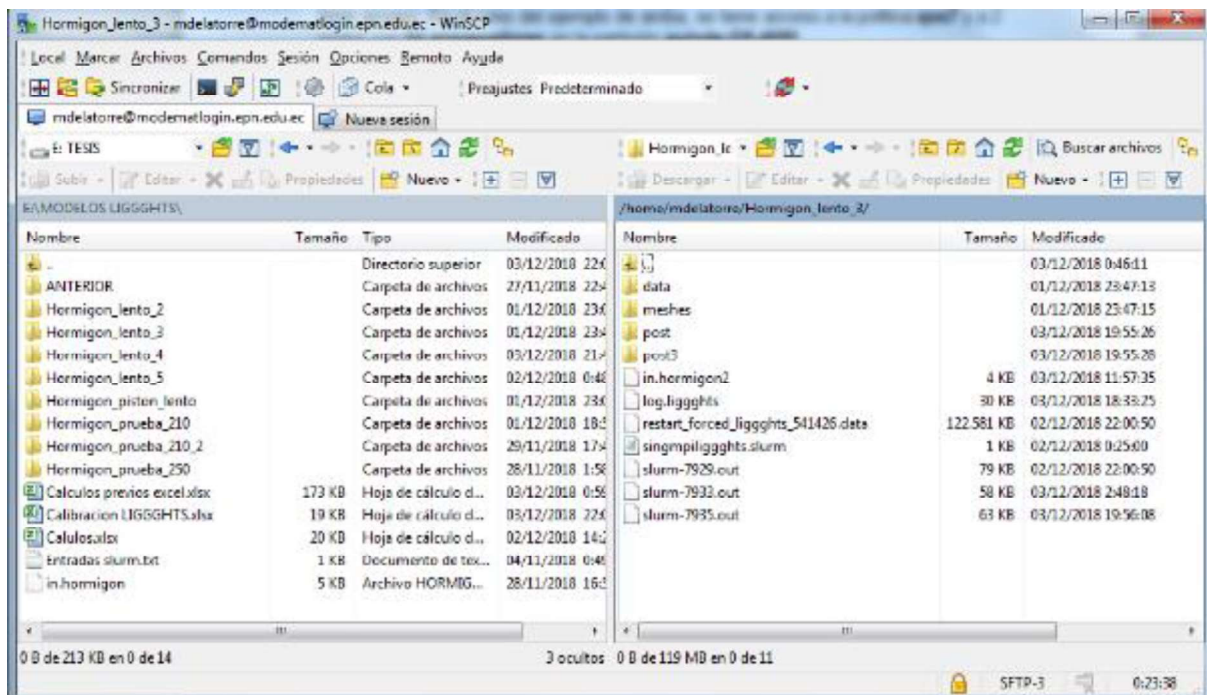
En el archivo .slurm también se especifican las políticas a las que el usuario tiene acceso en el clúster; éstas pueden ser qos8 o qos7. Y el número de procesadores



de acuerdo a los nodos que el usuario tiene asignados en su respectiva partición a la que tiene acceso. En el caso del ejemplo de arriba, se tiene acceso a la política qos7 y a 2 nodos con 64 procesadores en la partición quinde-G8-4650

Para poder manipular los archivos remotos que se encuentran en el clúster es necesario instalar el programa Winscp en el caso de Windows, o Filezilla en el caso de Ubuntu. Con esto se puede copiar archivos de y hacia el ordenador personal desde el clúster. Generándose un entorno de trabajo similar a la FIGURA 3.4.

**FIGURA 3.4** Entorno Winscp



FUENTE: propia

Para tener acceso al clúster de la EPN es necesario dirigir una solicitud de acceso al soporte MODEMAT con un correo a: [suporte.modemat@epn.edu.ec](mailto:suporte.modemat@epn.edu.ec). Para que se le genere un usuario, contraseña y se le envíe los manuales de uso. Para solicitar la ampliación de recursos computacionales y de políticas de uso es necesario proceder de acuerdo al manual de procesos. En caso de requerir de VPN para acceder desde una red que no sea la EPN LA 100 se puede solicitar de acuerdo al manual de procesos (ModeMat, 2018).

### 3.3 UNIDADES FÍSICAS

Las unidades físicas usadas en este modelo son las del sistema internacional.

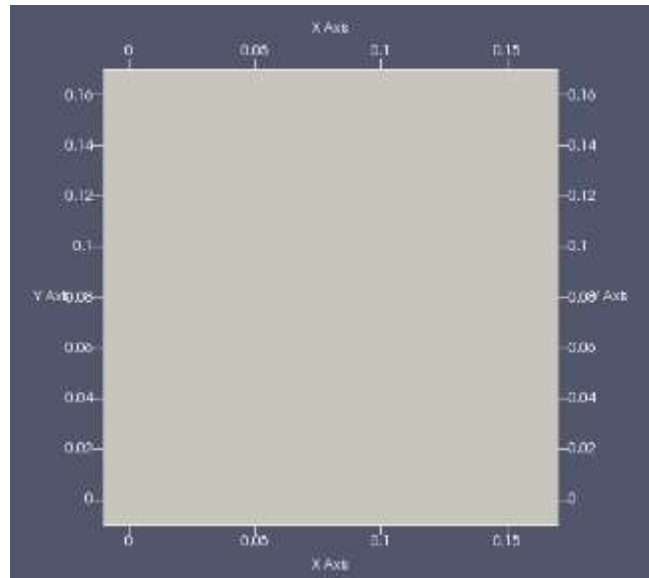
**TABLA 3.1** Unidades básicas en sistema internacional

<b>Magnitud física</b>	<b>Denominación</b>	<b>Símbolo</b>
Longitud	Metro	m
Masa	Kilogramo	kg
Tiempo	Segundo	s
Área	Metro cuadrado	m <sup>2</sup>
Volumen	Metro cúbico	m <sup>3</sup>
Velocidad	Metros por segundo	m/s
Presión	Pascal	Pa
Fuerza	Newton	N
Energía superficial de adhesión	Jules por metro cuadrado	J/m <sup>2</sup>
Densidad de energía de cohesión	Jules por metro cúbico	J/m <sup>3</sup>
Energía	Jules	J

### 3.4 GEOMETRÍA DEL PISTÓN DE COMPRESIÓN

La condición para generar la geometría del pistón de compresión es que sea más grande que las dimensiones del cubo de hormigón característico. Para este propósito se ha generado un archivo formato .stl cuadrado de dimensiones 17cmx17cm. Como se muestra en la FIGURA 3.5

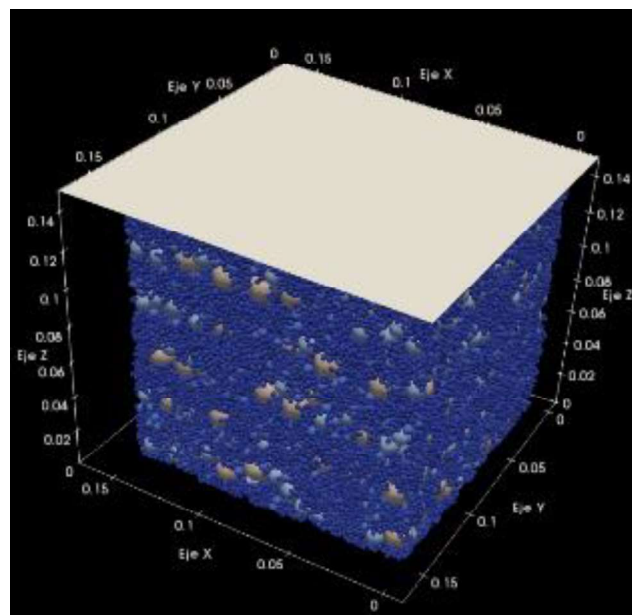
**FIGURA 3.5** Geometría del pistón de compresión.



FUENTE: Propia

El pistón de compresión es una plancha rígida de espesor despreciable. Que se coloca encima del bloque de hormigón, como se muestra en la FIGURA 3.6.

**FIGURA 3.6** Esquema del pistón de compresión en el modelo.



FUENTE: Propia

## **3.5 PROPIEDADES DE LOS MATERIALES**

### **3.5.1 PROPIEDADES DEL PISTÓN DE COMPRESIÓN**

De acuerdo a ASTM C39/C39M-14 el pistón de compresión debe ser de características mecánicas específicas, que permitan realizar una compresión sin deformaciones excesivas y de manera cuasi estática. Para lo cual se especifica que el acero debe ser de una dureza igual o mayor a 55 HRC en la escala de dureza Rockwell. Esto corresponde a un acero de alta resistencia.

La densidad y módulo de Young de este tipo de acero se obtienen del catálogo de acero de Aceros SISA, en el que se identifica el tipo de acero L6 como de grado de dureza mayor a 55 HRC. Mismo con el que se especifica son fabricados los bastidores de las máquinas AUTOMAX 50-C4652 a 50-C6652 por ejemplo (Heelt, 2018; Humbolt, 2018; SISA, 2018).

El coeficiente de fricción entre acero y hormigón debe estar entre 0,2 y 0,4. Y entre acero y acero debe estar entre 0,2 y 0,8. Para la simulación computacional se toma un valor arbitrario de 0,4 ya que los resultados de estudios enfocados en encontrar este parámetro de manera experimental tienden a 0,4, considerando además a la superficie de las partículas como lisas (Vanegas & Wahab, 2008; Wriggers, 2006; Coello, Miguel, Ferrer, Calatayud, & Martinez, 2008).

El coeficiente de restitución y la relación de Poisson se obtienen a partir del estudio de Marinack, et al. (2013) "Experimental Investigations on the Coefficient of restitution of single particles" en el que se detalla que aceros de alta resistencia (Pistón de compresión en este caso de estudio) presentan valores correspondientes a 0,7 y 0,3 para coeficiente de restitución y relación de Poisson respectivamente (Marinack, Musgrave, & Higgs, 2013).

El diámetro de partícula del pistón de compresión es despreciable, ya que en el software LIGGGHTS se realizará la transformación del archivo .stl en una malla rígida.

A continuación, se presenta el resumen de las propiedades a ser consideradas para el pistón de compresión en la simulación computacional en la TABLA 3.2.

**TABLA 3.2** Propiedades micro mecánicas del acero del pistón de compresión.

Descripción	Valor	Unidad
Módulo de Young	2,07E+11	Pa
Coefficiente de fricción	0,4	
Coefficiente de restitución	0,7	
Densidad	7860	kg/m <sup>3</sup>
Relación de Poisson	0,3	
Diámetro de partícula	0,00005	m
Energía de cohesión	0	J/m <sup>3</sup>

FUENTE: (Marinack, Musgrave, & Higgs, 2013; Wriggers, 2006; Coello, Miguel, Ferrer, Calatayud, & Martinez, 2008; Vanegas & Robles, 2008)

### 3.5.2 PROPIEDADES DE GRAVA

Para realizar el cálculo de las dosificaciones de los distintos hormigones, objeto de este estudio, se tienen las propiedades de grava expuestas en la TABLA 3.3.

**TABLA 3.3** Propiedades de la grava como información para dosificación.

Descripción	Valor	Unidad
Peso específico	2606	kg/m <sup>3</sup>
Absorción (%)	1,316	%
Densidad seca suelta	1572	kg/m <sup>3</sup>
Módulo de finura	6,71	
Desgaste	20,60	%

FUENTE: (Argel & Zúñiga, 2009)

Las propiedades mecánicas características de la grava a tomar en cuenta en el modelo DEM del hormigón se presentan en la TABLA 3.4.

**TABLA 3.4** Propiedades mecánicas de grava.

<b>Descripción</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidad</b>
Módulo de Young	7,00E+10	Pa
Coefficiente de fricción	0,839	
Coefficiente de restitución	0,77	
Relación de Poisson	0,2	

FUENTE: (Sinaie, Heidarpour, & Zhao, 2016) (Oñate & Rojek, 2004) (Durda, Movshovitz, Richardson, Asphaug, & Morgan, 2011)

### 3.5.3 PROPIEDADES DE ARENA

Para realizar el cálculo de las dosificaciones de los distintos hormigones, objeto de este estudio, se tienen las propiedades de arena expuestas en la TABLA 3.5.

**TABLA 3.5.** Propiedades de la arena como información para dosificación.

<b>Descripción</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidad</b>
Peso específico	2632	kg/m <sup>3</sup>
Absorción (%)	1,440	%
Densidad seca suelta	1723	kg/m <sup>3</sup>
Módulo de finura	3,53	
Desgaste	20,60	%

FUENTE: (Argel & Zúñiga, 2009)

Las propiedades mecánicas características de la arena a tomar en cuenta en el modelo DEM del hormigón se presentan en la TABLA 3.6.

**TABLA 3.6** Propiedades mecánicas de arena

Descripción	Valor	Unidad
Módulo de Young	7,00E+10	Pa
Coefficiente de fricción	0,7	
Coefficiente de restitución	0,7	
Relación de Poisson	0,3	

FUENTE: (Zhao & Shan, 2013)

## 3.6 GRANULOMETRÍA

### 3.6.1 GRANULOMETRÍA DE GRAVA

Para el propósito de representar hormigones que alcancen diferentes resistencias a compresión uniaxial; se ha optado por aplicar los resultados de estudios en los cuales se menciona que el tamaño de agregado grueso es un factor influyente en la capacidad del hormigón (Chindaprasirt, Hatanaka, Mishima, Yuasa, & Chareerat, 2009; Tasdemir & Tasdemir, 1996).

Si bien no se puede establecer una tendencia claramente marcada para determinar directamente el tamaño de agregado grueso que conllevaría a cierta resistencia, sí se puede establecer una aproximación de que el 50% de incremento en el diámetro del agregado grueso implica un decremento del 20% en la resistencia a compresión uniaxial. Supuesto que se va a considerar a continuación para generar los modelos representativos numéricos del hormigón. Cabe recalcar que los factores influyentes de resistencia del hormigón en la realidad son múltiples; curado, vibrado, cantidad de agua y cemento, propiedades mecánicas del agregado etc. Sin embargo; en este estudio dichos parámetros son omitidos y se considera que se mantienen constantes para todas las representaciones discretas.

En tal virtud, se consideran tres granulometrías para el agregado grueso: la primera (1) que corresponde al estudio de Argel y Zuñiga (2009) “Cálculo de la correlación entre el esfuerzo a la compresión y el módulo de rotura para concretos hidráulicos fabricados con materiales de la zona norte de Bolívar” del que se toma directamente la granulometría natural del agregado. La segunda (2) que es una modificación ideal de la anterior granulometría; tal que el tamaño de agregado grueso sea de mayor tamaño nominal. Y la tercera (3) que es una modificación ideal de la primera; tal que el tamaño nominal de agregado grueso sea menor.

### 3.6.1.1 GRANULOMETRÍA DE GRAVA 1

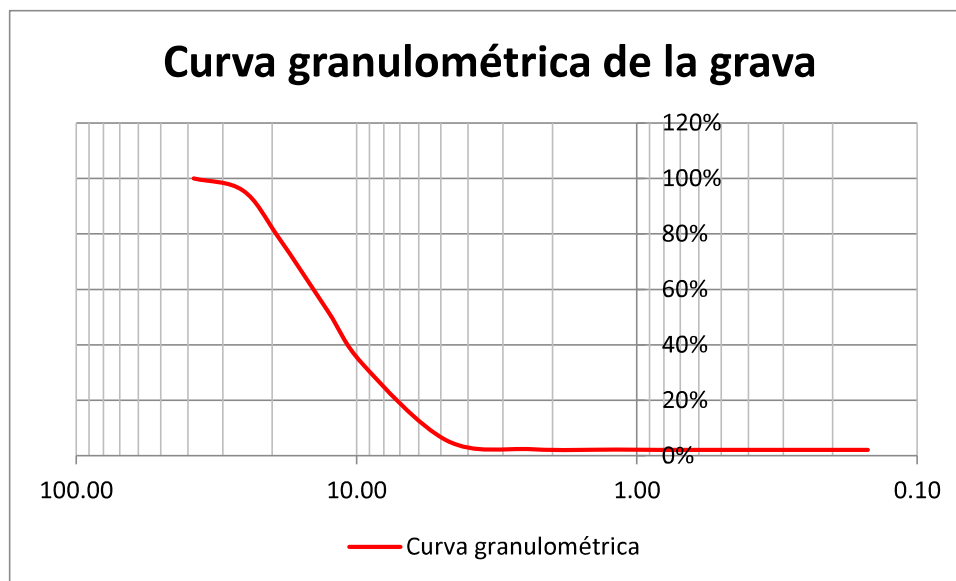
La granulometría de la grava característica utilizada en este estudio es tomado del estudio experimental de Argel y Zuñiga (2009) “Cálculo de la correlación entre el esfuerzo a la compresión y el módulo de rotura para concretos hidráulicos fabricados con materiales de la zona norte de Bolívar” y se presentan en la TABLA 3.7. También se presenta la curva granulométrica resultado en la FIGURA 3.7.

**TABLA 3.7** Granulometría de grava 1.

<b>Peso total: 2828 gr</b>					
<b>Tamiz</b>	<b>Tamiz</b>	<b>Peso suelo retenido</b>	<b>% Retenido</b>	<b>%Retenido acumulado</b>	<b>% Que pasa</b>
<b>US Standard</b>	<b>mm</b>	<b>gramo</b>			
1 1/2	38,10	0,00	0,00%	0,00%	100%
1	25,40	124,00	4,38%	4,38%	96%
3/4	19,05	472,00	16,69%	21,07%	79%
1/2	12,70	752,00	26,59%	47,67%	52%
3/8	9,53	542,00	19,17%	66,83%	33%
4	4,76	782,00	27,65%	94,48%	6%
8	2,36	90,00	3,18%	97,67%	2%
16	1,18	4,00	0,14%	97,81%	2%
30	0,60	1,00	0,04%	97,84%	2%
50	0,30	0,00	0,00%	97,84%	2%
100	0,15	0,00	0,00%	97,84%	2%
200					
<b>Fondo</b>		61,00			

FUENTE: (Argel & Zúñiga, 2009)



**FIGURA 3.7** Curva granulométrica de grava 1

FUENTE: (Argel &amp; Zúñiga, 2009)

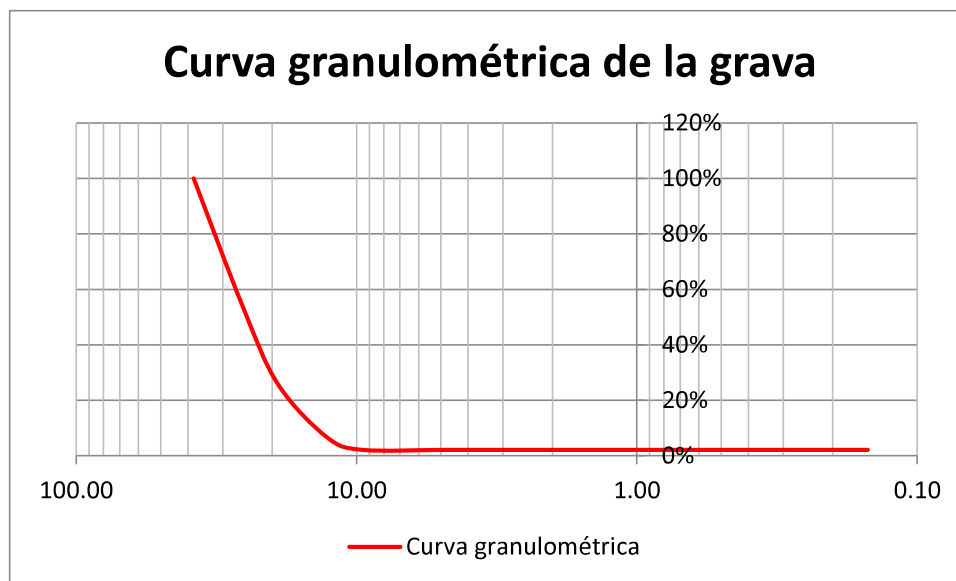
**3.6.1.2 GRANULOMETRÍA DE GRAVA 2**

La granulometría de grava con agregados de tamaño grande es una modificación de la granulometría 1, mostrada en la sección 3.6.1.1, y se presentan a continuación en la TABLA 3.8. También se presenta la curva granulométrica resultado en la FIGURA 3.8.

**TABLA 3.8** Granulometría de grava 2.

Peso total: 2828 gr					
Tamiz	Tamiz	Peso suelo retenido	% Retenido	%Retenido acumulado	% Que pasa
US Standard	mm	gramo			
1 1/2	38,10	0,00	0,00%	0,00%	100%
1	25,40	1314,00	46,46%	46,46%	54%
3/4	19,05	787,00	27,83%	74,29%	26%
1/2	12,70	542,00	19,17%	93,46%	7%
3/8	9,53	124,00	4,38%	97,84%	2%
4	4,76	0,00	0,00%	97,84%	2%
<b>Fondo</b>		61,00			

FUENTE: Propia

**FIGURA 3.8** Curva granulométrica de grava 2.

FUENTE: Propia

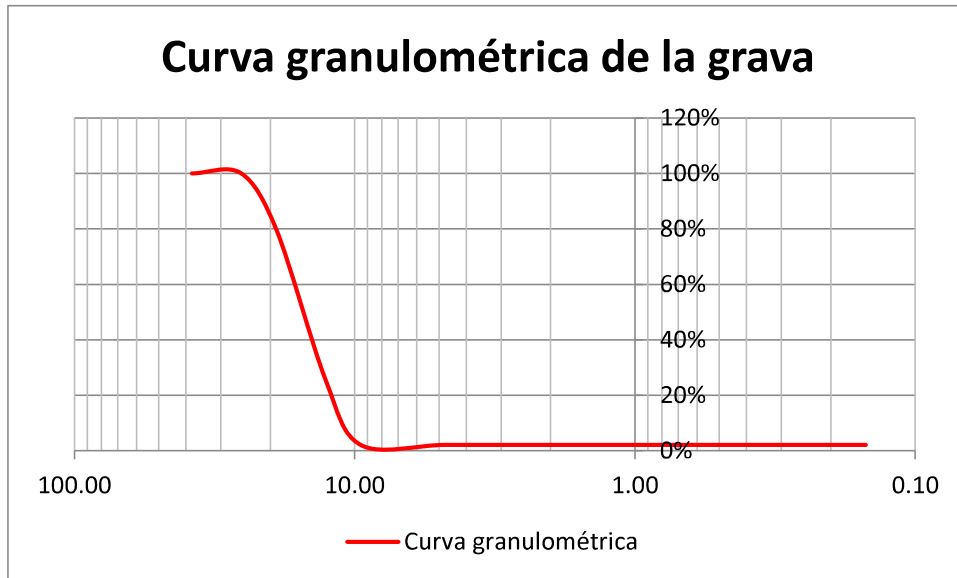
### 3.6.1.3 GRANULOMETRÍA DE GRAVA 3

La granulometría de grava con agregados de tamaño pequeño es una modificación de la granulometría 1, mostrada en la sección 3.6.1.1, y se presentan a continuación en la TABLA 3.9. También se presenta la curva granulométrica resultado en la FIGURA 3.9.

**TABLA 3.9** Granulometría de grava 3.

<b>Peso total:</b> 2828 gr					
<b>Tamiz</b>	<b>Tamiz</b>	<b>Peso suelo retenido</b>	<b>% Retenido</b>	<b>%Retenido acumulado</b>	<b>% Que pasa</b>
<b>US Standard</b>	<b>mm</b>	<b>gramo</b>			
1 1/2	38,10	0,00	0,00%	0,00%	100%
1	25,40	0,00	0,00%	0,00%	100%
3/4	19,05	567,00	20,05%	20,05%	80%
1/2	12,70	1534,00	54,24%	74,29%	26%
3/8	9,53	666,00	23,55%	97,84%	2%
4	4,76	0,00	0,00%	97,84%	2%
<b>Fondo</b>		61,00			

FUENTE: Propia

**FIGURA 3.9** Curva granulométrica de grava 3.

FUENTE: Propia

### 3.6.2 GRANULOMETRÍA DE ARENA

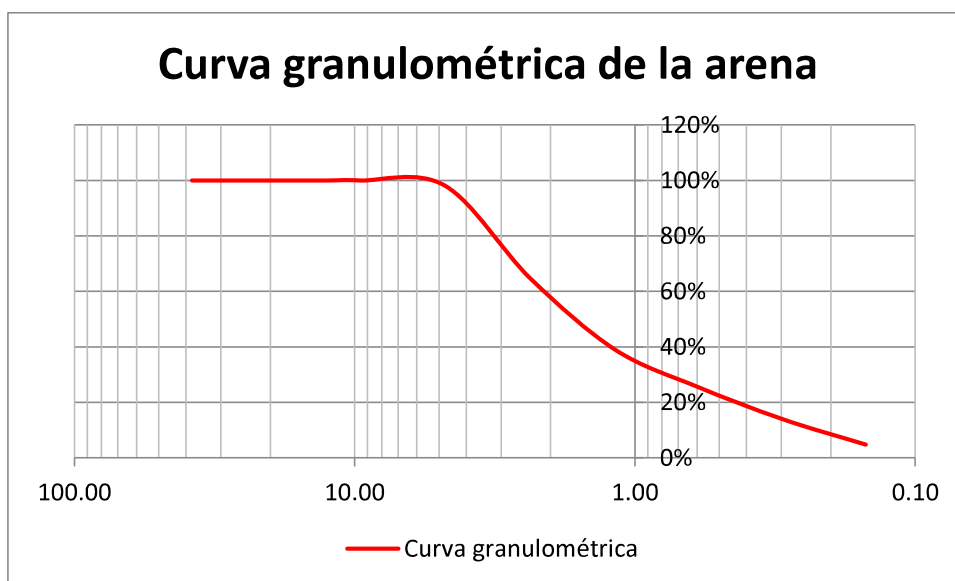
La granulometría de la arena característica utilizada en este estudio es tomado del estudio experimental de Argel y Zuñiga (2009) “Cálculo de la correlación entre el esfuerzo a la compresión y el módulo de rotura para concretos hidráulicos fabricados con materiales de la zona norte de Bolívar” y se presentan en la TABLA 3.10. También se presenta la curva granulométrica resultado en la FIGURA 3.10.

TABLA 3.10 Granulometría de arena

Peso total:		1720 gr				
Tamiz	Tamiz	Peso suelo retenido	% Retenido	%Retenido acumulado	% Que pasa	
US Standard	mm	gramo				
1 1/2	38,10	0,00	0,00%	0,00%	100%	
1	25,40	0,00	0,00%	0,00%	100%	
3/4	19,05	0,00	0,00%	0,00%	100%	
1/2	12,70	0,00	0,00%	0,00%	100%	
3/8	9,53	0,00	0,00%	0,00%	100%	
4	4,76	32,00	1,86%	1,86%	98%	
8	2,36	576,00	33,49%	35,35%	65%	
16	1,18	440,00	25,58%	60,93%	39%	
30	0,60	230,00	13,37%	74,30%	26%	
50	0,30	200,00	11,63%	85,93%	14%	
100	0,15	160,00	9,30%	95,23%	5%	
200		42,00	0,244186			
<b>Fondo</b>		40,00				

FUENTE: (Argel &amp; Zúñiga, 2009)

FIGURA 3.10 Curva granulométrica de arena



FUENTE: (Argel &amp; Zúñiga, 2009)

### 3.7 DOSIFICACIÓN PARA EL HORMIGÓN

El procedimiento de dosificación corresponde a lo expuesto en la norma ACI 211.1-91. En donde se consideran las características de los agregados expuestos en 3.5. El diseño comprende a hormigones sin contenido de aire incorporado y se asume un asentamiento de 7 cm, que corresponde al concreto de peso normal y adecuada trabajabilidad (ACI211.1-91, 2002).

La cantidad de agua se ha considerado a partir de la tabla 6.3.3 de la norma ACI 211.1-91, mostrada en la TABLA 3.11 a continuación.

**TABLA 3.11** Valores de cantidad de agua para el concreto.

<b>Tabla 6.3.3 ACI 211.1-91 Valores aproximados de contenido de agua y aire de acuerdo al asentamiento nominal</b>								
<b>Contenido de Agua (kg/m<sup>3</sup>) para el tamaño máximo nominal de agregado indicado (litros/m<sup>3</sup>)</b>								
Asentamiento (cm)	3/8 in	1/2 in	3/4 in	1 in	1 1/2 in	2 in	3 in	6 in
<b>Hormigón sin contenido de aire</b>								
2,5 a 5	207,6	198,7	186,9	178,0	163,2	154,3	130,5	112,7
5 a 10	228,4	216,5	201,7	192,8	178,0	169,1	145,4	124,6
15 a 17,5	243,2	228,4	213,6	201,7	186,9	178,0	160,2	0,0
Porcentaje de aire atrapado	3	2,5	2	1,5	1	0,5	0,3	0,2
<b>Hormigón con contenido de aire</b>								
2,5 a 5	180,9	175,0	166,1	160,2	148,3	142,4	121,6	106,8
5 a 10	201,7	192,8	180,9	175,0	163,2	157,2	133,5	118,7
15 a 17,5	216,5	204,7	192,8	183,9	172,1	166,1	154,3	0,0
Porcentaje de aire atrapado (moderado)	6	5,5	5	4,5	4,5	4	3,5	3

FUENTE: (ACI211.1-91, 2002)

Para la obtención de la cantidad de cemento en la mezcla, se considera la tabla 6.3.4(a) de la norma ACI 211.1-91, mostrada en la TABLA 3.12. De donde se tomará como referencia para el diseño de hormigón la relación agua cemento correspondiente a 210 kg/cm<sup>2</sup> en todos los casos; manteniendo de esta manera similar la función adherente del cemento en las representaciones numéricas de hormigón.

**TABLA 3.12** Relación agua cemento

<b>Tabla 6.3.4(a)- Relación agua cemento y resistencia a los 28 días</b>		
<b>Esfuerzo a los 28 días</b>	<b>Relación agua cemento</b>	
<b>kg/cm<sup>2</sup></b>	<b>Hormigón sin contenido de aire</b>	<b>Hormigón con contenido de aire</b>
421,842	0,41	0
351,535	0,48	0,4
281,228	0,57	0,48
210,921	0,68	0,59
140,614	0,82	0,74

FUENTE: (ACI211.1-91, 2002)

El volumen de agregado grueso se obtiene a partir de la tabla 6.3.6 de la norma ACI 211.1-91, mostrada en la TABLA 3.13.

**TABLA 3.13** Volumen de agregado grueso por unidad de volumen de concreto.

<b>Tabla 6.3.6 - Volumen de agregado grueso por unidad de volumen de concreto</b>				
<b>Tamaño nominal de agregado</b>	<b>Volumen de agregado grueso en seco por unidad de volumen de concreto de acuerdo al módulo de finura del agregado fino</b>			
	<b>2,4</b>	<b>2,6</b>	<b>2,8</b>	<b>3</b>
<b>in</b>				
3/4	0,5	0,48	0,46	0,44
1/2	0,59	0,57	0,55	0,53
3/4	0,66	0,64	0,62	0,6
1	0,71	0,69	0,67	0,65
1 1/2	0,75	0,73	0,71	0,69
2	0,78	0,76	0,74	0,72
3	0,82	0,8	0,78	0,76
6	0,87	0,85	0,83	0,81

FUENTE: (ACI211.1-91, 2002)

El peso del hormigón se considera a partir de la tabla 6.3.7.1 de la norma ACI 211.1-91, mostrada a continuación en la TABLA 3.14.

**TABLA 3.14** Pesos de los hormigones de acuerdo a tamaño nominal de agregado grueso.

<b>Tabla 6.3.7.1 - Primera estimación de peso de concreto fresco</b>		
<b>Tamaño nominal del agregado</b>	<b>Peso del concreto en kg/m<sup>3</sup></b>	
<b>in</b>	<b>Hormigón sin aire</b>	<b>Hormigón con aire</b>
3/4	2278,2	2201,1
1/2	2307,8	2230,7
3/4	2349,4	2278,2
1	2379,0	2284,1
1 1/2	2414,6	2319,7
2	2444,3	2343,4
3	2491,8	2396,8
6	2527,4	2438,4

FUENTE: (ACI211.1-91, 2002)

La dosificación de agregado fino (arena) se calcula de acuerdo a resta volumétrica, considerando un 1,5% de aire atrapado.

### **3.7.1 DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN A**

La dosificación para el hormigón A se hace de acuerdo al procedimiento del ACI 211.1-91, considerando la granulometría de agregado grueso 2 mostrado en la sección 3.6.1.1, y los resultados se presentan a continuación en la TABLA 3.15. Los cálculos se pueden apreciar en el Anexo 2.



**TABLA 3.15** Dosificación para hormigón A

PORCENTAJE DE DOSIFICACIÓN					
	CEMENTO	GRAVA	ARENA	AGUA	AIRE
PESO	11,00%	47,25%	34,27%	7,48%	0,00%
VOLUMEN	8,31%	43,13%	29,26%	17,80%	1,50%

FUENTE: Propia

**3.7.2 DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN B**

La dosificación para el hormigón B se hace de acuerdo al procedimiento del ACI 211.1-91, considerando la granulometría de agregado grueso 1 mostrado en la sección 3.6.1.1, y los resultados se presentan a continuación en la TABLA 3.16. Los cálculos se pueden apreciar en el Anexo 2.

**TABLA 3.16** Dosificación para hormigón B

PORCENTAJE DE DOSIFICACIÓN					
	CEMENTO	GRAVA	ARENA	AGUA	AIRE
PESO	11,92%	47,25%	32,73%	8,10%	0,00%
VOLUMEN	9,00%	43,13%	27,09%	19,28%	1,50%

FUENTE: Propia

**3.7.3 DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN C**

La dosificación para el hormigón C se hace de acuerdo al procedimiento del ACI 211.1-91, considerando la granulometría de agregado grueso 3 mostrado en la sección 3.6.1.1, y los resultados se presentan a continuación en la TABLA 3.17. Los cálculos se pueden apreciar en el Anexo 2.

**TABLA 3.17** Dosificación para hormigón C

PORCENTAJE DE DOSIFICACIÓN					
	CEMENTO	GRAVA	ARENA	AGUA	AIRE
PESO	12,63%	47,84%	30,95%	8,59%	0,00%
VOLUMEN	9,42%	43,13%	25,78%	20,17%	1,50%

FUENTE: Propia

### 3.7.4 INGRESO DE DOSIFICACIÓN PARA HORMIGÓN EN LIGGGHTS

La granulometría de los agregados abordado en 3.6 no se puede ingresar en el programa de manera estricta, ya que implica un enorme número de partículas (Aproximadamente  $1.0e8$ ), y la enorme diferencia de diámetros hace que la estabilidad numérica sea incapaz de procesarse. Cabe mencionar que LIGGGHTS utiliza el algoritmo de binning para la localización de contactos entre partículas; la misma presenta limitaciones en cuanto a diferencias de tamaños de partículas que pueden ser procesadas bajo este método.

Con el objetivo de disminuir los tiempos de simulación, y generar una adecuada aproximación de la granulometría, se hace la simplificación de diámetros de partículas reales; mostrados en las TABLA 3.7 y TABLA 3.10, hacia una aproximación computacionalmente estable como se muestra en la TABLA 3.18.

**TABLA 3.18** Tamaños nominales de agregados, versus propuesta para ingresar en LIGGGHTS.

Tamiz	Diámetro de agregados	Radio Propuesta LIGGGHTS	Diámetro propuesto en LIGGGHTS
<b>US Standard</b>	<b>mm</b>	<b>m</b>	<b>mm</b>
1 1/2	38,10	0,0191	38,10
1	25,40	0,0125	25,00
3/4	19,05	0,0100	20,00
1/2	12,70	0,0075	15,00
3/8	9,53	0,0050	10,00
4	4,76	0,0025	5,00
8	2,36	0,0013	2,50
16	1,18	0,0015	3,00

FUENTE: Propia

En la TABLA 3.18. Se puede notar que se ha realizado una simplificación de los diámetros de menor tamaño, y sus porcentajes en peso pasarán a formar parte de los diámetros 2,5mm y 3mm propuestos para ingresar en LIGGGHTS.

Para ingresar las correspondientes dosificaciones con las respectivas granulometrías características de los agregados, se ha hecho a criterio personal considerar que los vacíos en LIGGGHTS corresponderán al aire y al agua. Mientras que la cantidad de cemento se suma a la cantidad de arena. Quedando entonces para los casos de este estudio las proporciones de agregados en volumen y peso mostradas en la TABLA 3.19, TABLA 3.20 y TABLA 3.21 respectivamente.

**TABLA 3.19** Proporciones de agregados para modelo de hormigón A

	<b>Grava</b>	<b>Arena</b>	<b>Vacíos (Aire y agua)</b>
PESO	<b>47%</b>	<b>45%</b>	<b>7,48%</b>
VOLUMEN	<b>43%</b>	<b>38%</b>	<b>19,30%</b>

FUENTE: Propia

**TABLA 3.20** Proporciones de agregados para modelo de hormigón B

	<b>Grava</b>	<b>Arena</b>	<b>Vacíos (Aire y agua)</b>
PESO	<b>47%</b>	<b>45%</b>	<b>8,10%</b>
VOLUMEN	<b>43%</b>	<b>36%</b>	<b>20,78%</b>

FUENTE: Propia

**TABLA 3.21** Proporciones de agregados para modelo de hormigón C

	<b>Grava</b>	<b>Arena</b>	<b>Vacíos (Aire y agua)</b>
PESO	<b>48%</b>	<b>44%</b>	<b>8,59%</b>
VOLUMEN	<b>43%</b>	<b>35%</b>	<b>21,67%</b>

FUENTE: Propia

En tal virtud, en LIGGGHTS se introducen únicamente las proporciones de partículas representativas correspondientes al agregado grueso (grava) y agregado fino (arena), siendo éstas las únicas conformantes del ensamble granular, por lo que las proporciones en las que se encuentran cada una de ellas para cada representación de hormigón se muestran en la TABLA 3.22, TABLA 3.23 y TABLA 3.24.

**TABLA 3.22** Proporciones de agregados para modelación de hormigón A, de acuerdo a su tamaño.

	<b>Agregado grueso</b>	<b>Agregado fino</b>
PESO	<b>51%</b>	<b>49%</b>
VOLUMEN	<b>53%</b>	<b>47%</b>

FUENTE: Propia

**TABLA 3.23** Proporciones de agregados para modelación de hormigón B, de acuerdo a su tamaño.

	<b>Agregado grueso</b>	<b>Agregado fino</b>
PESO	<b>51%</b>	<b>49%</b>
VOLUMEN	<b>54%</b>	<b>46%</b>

FUENTE: Propia

**TABLA 3.24** Proporciones de agregados para modelación de hormigón C, de acuerdo a su tamaño.

	<b>Agregado grueso</b>	<b>Agregado fino</b>
PESO	<b>52%</b>	<b>48%</b>
VOLUMEN	<b>55%</b>	<b>45%</b>

FUENTE: Propia

De acuerdo a esta propuesta de simplificación, se tienen entonces en la TABLA 3.25, TABLA 3.26 y TABLA 3.27, Los respectivos porcentajes de agregados en peso para el hormigón A, B y C. Relacionados a la dosificación antes propuesta en la TABLA 3.22, TABLA 3.23 y TABLA 3.24.

**TABLA 3.25** Porcentajes absolutos en peso de agregados que se ingresan en LIGGGHTS, para hormigón A

Tamiz	Diámetro de agregados	Diámetro propuesto en LIGGGHTS	%Absoluto en la mezcla
US Standard	mm	mm	
1 1/2	38,10	38,10	0,00%
1	25,40	25,00	23,70%
3/4	19,05	20,00	14,19%
1/2	12,70	15,00	9,77%
3/8	9,53	10,00	2,24%
4	4,76	5,00	4,35%
8	2,36	2,50	16,41%
16	1,18	3,00	29,34%

FUENTE: Propia

**TABLA 3.26** Porcentajes absolutos en peso de agregados que se ingresan en LIGGGHTS, para hormigón B

Tamiz	Diámetro de agregados	Diámetro propuesto en LIGGGHTS	%Absoluto en la mezcla
US Standard	mm	mm	
1 1/2	38,10	38,10	0,00%
1	25,40	25,00	2,24%
3/4	19,05	20,00	8,51%
1/2	12,70	15,00	13,56%

**TABLA 3.26 CONTINUACIÓN**

3/8	9,53	10,00	9,77%
4	4,76	5,00	20,16%
8	2,36	2,50	16,41%
16	1,18	3,00	29,34%

FUENTE: Propia

**TABLA 3.27** Porcentajes absolutos en peso de agregados que se ingresan en LIGGGHTS, para hormigón C

Tamiz	Diámetro de agregados	Diámetro propuesto en LIGGGHTS	%Absoluto en la mezcla
US Standard	mm	mm	
1 1/2	38,10	38,10	0,00%
1	25,40	25,00	0,00%
3/4	19,05	20,00	10,43%
1/2	12,70	15,00	28,21%
3/8	9,53	10,00	12,25%
4	4,76	5,00	4,33%
8	2,36	2,50	16,07%
16	1,18	3,00	28,74%

FUENTE: Propia

### 3.8 CREACIÓN DE INPUT DATA PARA EL HORMIGÓN

El input data es un archivo de texto que puede ser leído por LIGGGHTS y que contiene información de las posiciones y velocidades de las partículas iniciales. Así como sus principales características geométricas físicas.

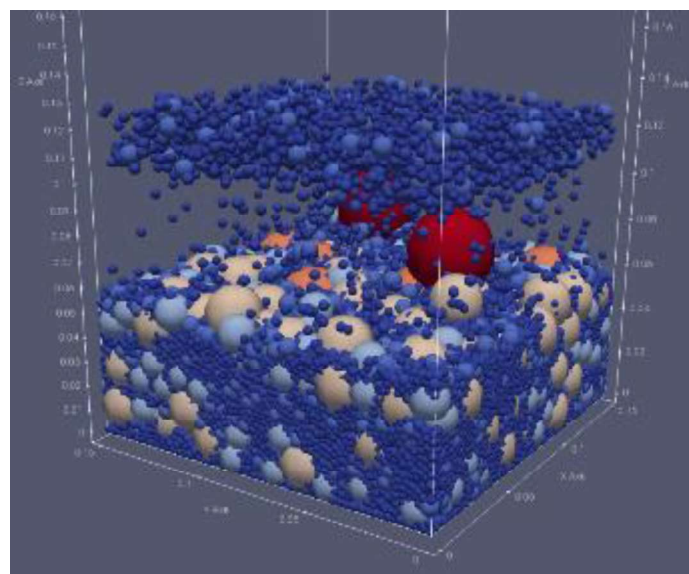
En una modelación de un elevado número de partículas que pretenden representar un sólido como un conglomerado granular, es necesario definir de entrada las posiciones de las partículas para ganar tiempo de ejecución computacional.

En el Anexo 1 se presenta el código usado en Matlab para generar un archivo data en formato txt que puede ser leído por LIGGGHTS y que genera un conglomerado granular cúbico uniforme. El mismo ha sido usado para las primeras iniciativas de este proyecto, pero debido a la compleja estructura real del hormigón ha sido necesario realizar el procedimiento detallado a continuación.

En este estudio, el procedimiento de obtención del input data es mediante la inserción aleatoria de partículas definidas de acuerdo a la dosificación y granulometría característicos definidos en la TABLA 3.26. Para luego guardar el estado final de esta simulación, que corresponde al conglomerado granular representativo, con el comando `write_data` de LIGGGHTS. De esta manera se forman cubos de arista 15 cm.

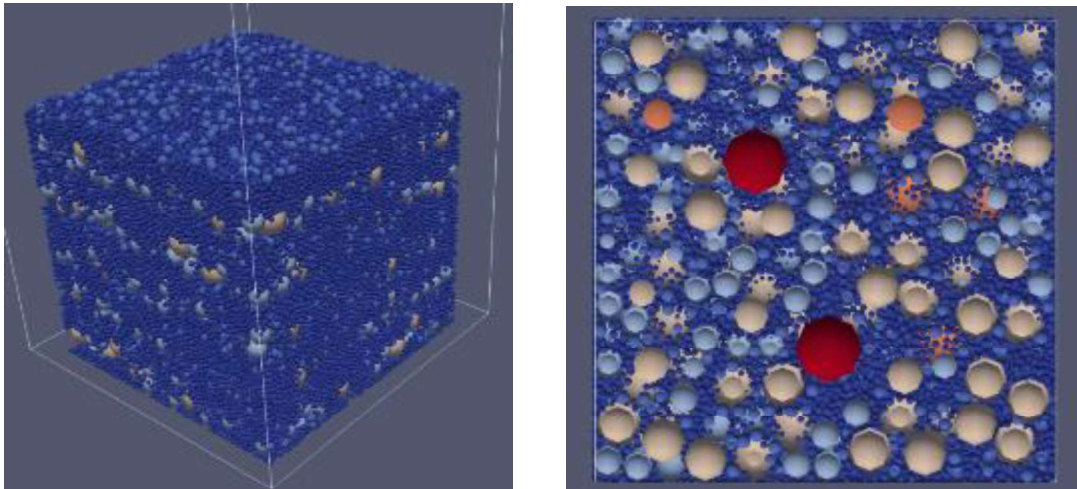
En la FIGURA 3.11 se puede apreciar la ejecución de esta simulación inicial y en la FIGURA 3.12 el estado final del conglomerado.

**FIGURA 3.11.** Proceso de inserción de partículas en el volumen de control.



FUENTE: Propia.

**FIGURA 3.12** Estado final del conglomerado granular, vista en 3D y en corte.



FUENTE: Propia.

### 3.9 ENERGÍA DE ADHESIÓN JKR TEÓRICO PARA EL HORMIGÓN

El proceso de calibración de la energía de adhesión JKR parte de las definiciones realizadas en el capítulo 2. Sección 2.2.9.1. Para lo cual se toman en cuenta las siguientes consideraciones:

- La adhesión JKR es representativa de la función de enlace que realiza el cemento en la matriz de hormigón, sin llegar a identificar las posibles causas del enlace, las cuales pueden ser de naturaleza interatómica; iónica, covalente, o intermolecular: Van Der Waals.
- Se considera que la fuerza pullout aproximadamente puede identificarse como la fuerza requerida para romper al hormigón a tensión, proveniente del ensayo de tensión directa con especímenes tipo dogbone.
- Se considera al área de trabajo a tensión de los ensayos experimentales como conformados por conglomerados granulares de partículas esféricas de diámetro constante; siendo la superficie de análisis JKR como la suma de contactos de radio  $a_1$  de todas las partículas que conforman el área de esfuerzo.
- Los diámetros de partículas evaluados corresponden únicamente a los diámetros promedios de agregado grueso y agregado fino. Por lo que se



obtiene una energía de adhesión representativa para cada uno de estos materiales.

En el estudio de Moreno y otros (2016) “Resistencia a tensión del concreto elaborado con agregado calizo de alta absorción” en donde se hace un análisis experimental de la capacidad a tensión del hormigón y se obtiene la relación ( 3.1 ) entre resistencia a tensión y resistencia a compresión:

$$f_t = 1,795\sqrt{f'_c} \quad ( 3.1 )$$

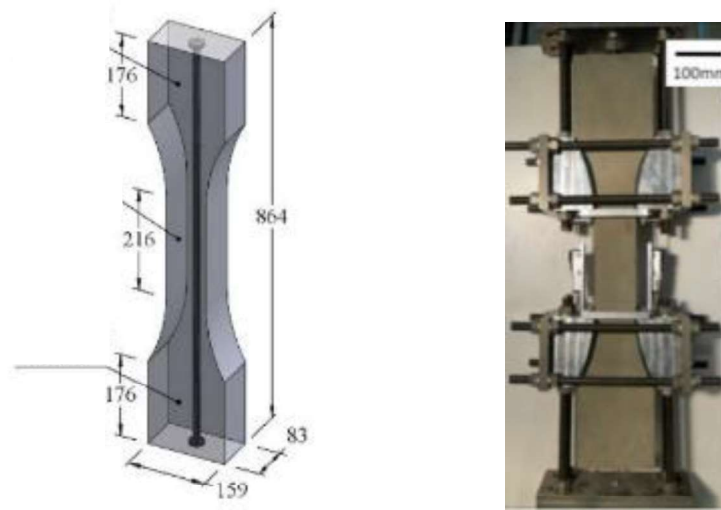
Dónde:

- $f_t$  : es la resistencia a tensión en  $\text{kg/cm}^2$
- $f'_c$  : es la resistencia a compresión en  $\text{kg/cm}^2$

Esta relación indica que  $f_t$  es aproximadamente un 12% de  $f'_c$  y es acorde a las curvas sugeridas por la ACI 318 para obtener la resistencia a tensión a partir de la resistencia a compresión.

El ensayo a tensión directa del hormigón se realiza a través de especímenes de geometría tipo dogbone (hueso de perro) así como se muestra en la FIGURA 3.13. En donde se mide la fuerza de tracción máxima soportada, ésta se puede relacionar directamente al área transversal central del espécimen para obtener el esfuerzo a tensión.

**FIGURA 3.13** Geometría de un espécimen dogbone para ensayo de tensión directa.



FUENTE: (Moreno, Trono, Ostertag, & Billington, 2011)

En el estudio experimental de resistencia del hormigón a tensión directa de Moreno y otros (2011) “Tension-Stiffening in Reinforced High performance fiber reinforced Cement- Based composites under Direct Tension”, para cuya determinación se hace a través de especímenes de geometría tipo dogbone se tienen como resultados que la resistencia a tensión es aproximadamente el 10% de la resistencia  $f'_c$ .

De estas relaciones se toma el menor de ellos para calcular el esfuerzo a tensión de los hormigones objeto de este estudio, es decir: 10% de  $f'_c$ . Como referencia de cálculo se toma en cuenta la resistencia de un hormigón normal, correspondiente a  $f'_c=210 \text{ kg/cm}^2$ . Por lo que se muestra el valor  $f_t$  relacionado en la TABLA 3.28.

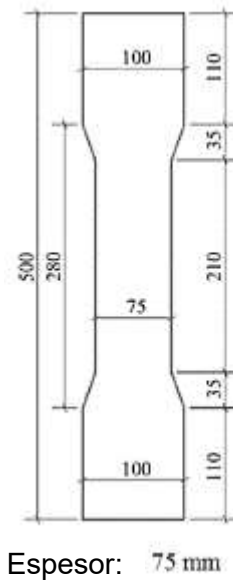
**TABLA 3.28** Cálculo de  $f_t$  en  $\text{kg/cm}^2$

$f'_c$ ( $\text{kg/cm}^2$ )	$f_t = 10\% f'_c$ ( $\text{kg/cm}^2$ )
210	21

FUENTE: Propia.

La geometría de espécimen dogbone a considerar en los próximos cálculos es la correspondiente a la FIGURA 3.14.

**FIGURA 3.14** Geometría de espécimen dogbone.



FUENTE: (Kwan & Chu, 2018)

Esta geometría es adecuada, ya que en el estudio de Kwan y Chu (2018) “Direct tensión behaviour of Steel fibre reinforced concrete measured by a new test method” se describe que esta geometría minimiza los efectos de concentración de esfuerzos. Ya que el patrón de fisura es el que se muestra en la FIGURA 3.15.

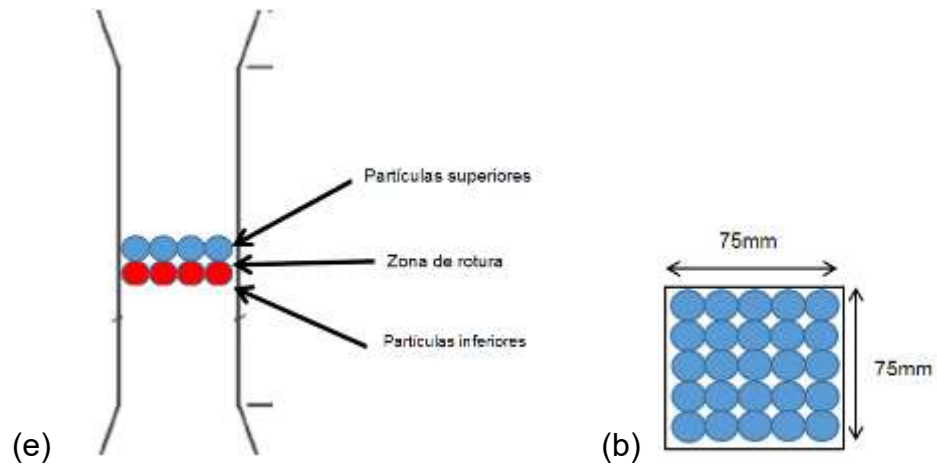
**FIGURA 3.15** Patrón de fisura a tensión del hormigón no reforzado en espécimen tipo DogBone.



FUENTE: (Kwan & Chu, 2018).

Partiendo del patrón de fisura mostrado en la FIGURA 3.15 se considera para la calibración de la energía de adhesión JKR en DEM que la distribución de partículas discretas en el espécimen tipo DogBone, en la zona de rotura es como se indica en la FIGURA 3.16.

**FIGURA 3.16** Esquema de partículas en la zona de rotura en el espécimen tipo dogbone en perfil (a) y en planta (b).



FUENTE: Propia.

El radio de las partículas a ser analizadas es un promedio de cada uno de los dos tipos de agregados que se consideran en el presente estudio. Estos cálculos se muestran en la TABLA 3.29. Así como también el cálculo del parámetro R del modelo JKR, a partir de la ecuación ( 2.35 ).

**TABLA 3.29** Cálculo de radio promedio y parámetro R de cada tipo de agregado

	<b>Radio Propuesta LIGGGHTS</b>  (m)	<b>Diámetro propuesto en LIGGGHTS</b>  (mm)	<b>Radio promedio de partículas</b>  (m)	<b>Parámetro R</b>
<b>Agregado grueso</b>	0,0125	25,00	0,0088	0,0044
	0,0100	20,00		
	0,0075	15,00		
	0,0050	10,00		
<b>Agregado fino</b>	0,0025	5,00	0,0018	0,0009
	0,00125	2,50		
	0,0015	3,00		

FUENTE: Propia.

Partiendo del esfuerzo a tensión calculado en la TABLA 3.28 y con el área transversal del espécimen tipo dogbone (ver FIGURA 3.14) en la zona de rotura (De acuerdo a la FIGURA 3.16) se calcula la fuerza pullout, y los resultados se muestran en la TABLA 3.30.

**TABLA 3.30.** Cálculo de fuerza pullout teórico JKR.

<b>f'c</b> (kg/cm <sup>2</sup> )	<b>ft = 10% f'c</b> (kg/cm <sup>2</sup> )	<b>Área transversal</b> (cm <sup>2</sup> )	<b>Fuerza Pullout</b> (kgf)	<b>Fuerza Pullout</b> (N)
210	21	56,25	1181,25	11584,11

FUENTE: Propia.

Para el propósito de hacer una calibración de la energía de adhesión JKR se considera que las partículas en la zona de rotura son todas del mismo diámetro; éste diámetro es el promedio encontrado en la TABLA 3.29 y que se encuentran perfectamente alineadas, así como se muestra en la FIGURA 3.16.

Para dar uso a la ecuación ( 2.46 ) presentada en el capítulo 2. Sección 2.2.9. Es necesario que se defina la Fuerza pullout por cada par de partículas; una superior y una inferior. Para este propósito se hace una discretización del área de fractura en círculos perfectamente alineados, como lo muestra la FIGURA 3.16 (b).

$$\gamma = \frac{2(F_{\text{pullout}})}{3\pi R}$$

En tal virtud; se presentan en la TABLA 3.31 los resultados de este análisis, encontrando el número de partículas que estarían en contacto en el área de rotura.

**TABLA 3.31** Cálculo de número de partículas en área de rotura.

	<b>Radio promedio de partículas</b> m	<b>Parámetro R</b>	<b>Diámetro promedio de las partículas</b> m	<b>Número de par de partículas en contacto en el área de rotura</b>
<b>Agregado grueso</b>	0,0088	0,0044	0,0175	18,36
<b>Agregado fino</b>	0,0018	0,0009	0,0035	459,18

FUENTE: Propia.

Entonces la fuerza pullout por cada par de partículas (inferior y superior en la zona de rotura) se muestra para el caso de este estudio en la TABLA 3.32. Con este resultado se hace un cálculo de una energía promedio de adhesión JKR el cual es característico de cada tipo de agregado; uno para agregado fino, y otro para agregado grueso. Esta energía se relaciona con el esfuerzo a compresión uniaxial a través de la fuerza pullout característica encontrada, de acuerdo a la TABLA 3.30.

**TABLA 3.32** Calculo de fuerza pullout por par de partículas y cálculo de energía de adhesión JKR teórico en J/m<sup>2</sup>.

f <sub>c</sub> (kg/cm <sup>2</sup> )	Fuerza Pullout total (N)	Agregado grueso				Agregado fino			
		Número de partículas en área de rotura	Fuerza Pullout por par de partículas (N)	Parámetro R (m)	Energía de adhesión JKR (J/m <sup>2</sup> )	Número de partículas en área de rotura	Fuerza Pullout por par de partículas (N)	Parámetro R (m)	Energía de adhesión JKR (J/m <sup>2</sup> )
210	11584,11	18,37	630,60	0,0044	3,04E+04	459,18	34,33	0,0009	8,28E+03

FUENTE: Propia.

### 3.10 DENSIDAD DE ENERGÍA DE COHESIÓN JKR EN LIGGGHTS

En el software LIGGGHTS se hace una simplificación del modelo de adhesión JKR teórico. Solamente modificando el modelo de contacto de Hertz al incluir una fuerza normal que es función del área de contacto entre partículas y la densidad de energía de cohesión característico del material en J/m<sup>3</sup>. Sin embargo, esta densidad de energía de cohesión no es relacionada propiamente a su definición como parámetro termodinámico o de solubilidad de materiales, sino, como un medio de acoplar la fuerza de adherencia y el área de contacto de las partículas. Así como lo muestra la ecuación ( 3.2 ).

$$F_{JKR} = E_{cohesion}A \quad ( 3.2 )$$

Dónde:

- $F_{JKR}$  : Es la fuerza de adhesión JKR de LIGGGHTS
- $E_{cohesion}$  : es la densidad de energía de cohesión de LIGGGHTS
- $A$  : es el área de contacto entre partículas

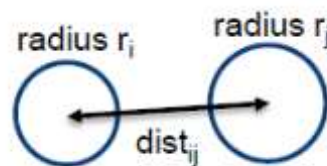
Para lo cual  $A$  se calcula mediante la siguiente ecuación ( 3.3 ).

$$A = -\frac{\pi}{4} * \frac{(dist - R_i - R_j)(dist + R_i - R_j)(dist - R_i + R_j)(dist + R_i + R_j)}{dist * dist} \quad ( 3.3 )$$

Dónde:

- $dist$  : es la distancia entre centros de las partículas en contacto:  $R_i+R_j+c$ ; siendo  $c$  la distancia de piel entre las partículas. Así como se muestra en la FIGURA 3.17.
- $R_i$  : es el radio de la partícula  $i$
- $R_j$  : es el radio de la partícula  $j$

**FIGURA 3.17** Diagrama de  $dist$  en LIGGGHTS



FUENTE: (Kloss & Queteschiner, 2010)

Del análisis realizado en el capítulo 3. Sección 3.9. Se tienen las fuerzas de pullout para cada par de partículas en la TABLA 3.30, bajo el enfoque de posicionamiento de partículas definido en la FIGURA 3.16.

El área de contacto entre partículas es altamente dependiente de su naturaleza en el rango elástico. Si bien el modelo de contacto de Hertz define una relación constitutiva entre la carga  $P$  y el radio de área de contacto (Referirse a la ecuación ( 2.34 )), no define explícitamente sus limitaciones y rangos de predicción. Es por ello que se han realizado experimentos físicos para determinar el alcance de esta teoría, en tal virtud, se ha encontrado que para la mayoría de materiales duros (por ejemplo; vidrio) el modelo de contacto de Hertz funciona adecuadamente en el rango desde  $a/R = 0,05$  hasta  $a/R = 0,3$ . A partir de este valor se considera que las partículas son suaves (por ejemplo; caucho) o que se está alcanzando el estado plástico del material; rango para el cual es necesario considerar modelos de contacto no contemplados en el presente proyecto de investigación (Johnson K. , 1985; O'Sullivan, 2010).



Entonces para el propósito de establecer una densidad de energía de cohesión representativa para el modelo del hormigón, el valor del radio de contacto  $a$  debe encontrarse en el rango antes mencionado, para que responda adecuadamente con los modelos de contacto que se están tratando en este estudio.

La consideración adicional a tomar en cuenta es que si se estima el radio  $a$  del área de contacto  $A$  para LIGGGHTS como el máximo valor permitido ( $a/R = 0,3$ ) se entendería que en ese estado de deformación de la partícula no habría más capacidad, por lo que no se podría permitir generar fuerza de repulsión; solamente existiría equilibrio. En contra parte: si se consideraría el área de contacto como el mínimo valor ( $a/R = 0,05$ ) entonces se permite un amplio rango de deformación que implica una alta capacidad de generar fuerzas de repulsión, y con ello se estaría facilitando el desenlace inmediato de las partículas.

Por lo que es prudente evaluar el comportamiento de la sumatoria de fuerzas en un par de partículas; en los cuales actúan la fuerza de Hertz (repulsión) y la fuerza de adhesión (atracción) simultáneamente, entonces se encuentra el punto de equilibrio característico, en el cual las fuerzas actuantes equivalen a la fuerza pullout; para el presente caso de estudio (ver TABLA 3.30). Entonces; se definen ambas fuerzas en función del radio de contacto  $a$ .

De acuerdo a la ecuación ( 2.34 ) la función de fuerza de Hertz es dependiente de parámetros del material  $K$  y  $R$ , y de acuerdo a la ecuación ( 3.2 ) la función de fuerza de adhesión JKR en LIGGGHTS es dependiente de la densidad de energía de cohesión y radio de contacto. Por lo que estos parámetros se resumen a continuación en la TABLA 3.33 para los agregados del modelo del hormigón.

**TABLA 3.33** Parámetros de calibración de densidad de energía de cohesión JKR en LIGGGHTS.

	<b>Agregado grueso</b>	<b>Agregado fino</b>
<b>Radio promedio</b>	0,0088 m	0,00176 m
<b>Parámetro R</b>	0,0044 m	0,00088 m
<b>Rango superior (0,3R=a)</b>	0,00022 m	0,000044 m
<b>Rango inferior (0,05R=a)</b>	0,00132 m	0,0001936 m
<b>Módulo de Young</b>	7,00E+10 Pa	7,00E+10 Pa
<b>Módulo Poisson</b>	0,2	0,3
<b>k</b>	4,37E-12	4,14E-12
<b>Parámetro K</b>	9,72E+10 Pa	1,03E+11 Pa

FUENTE: Propia.

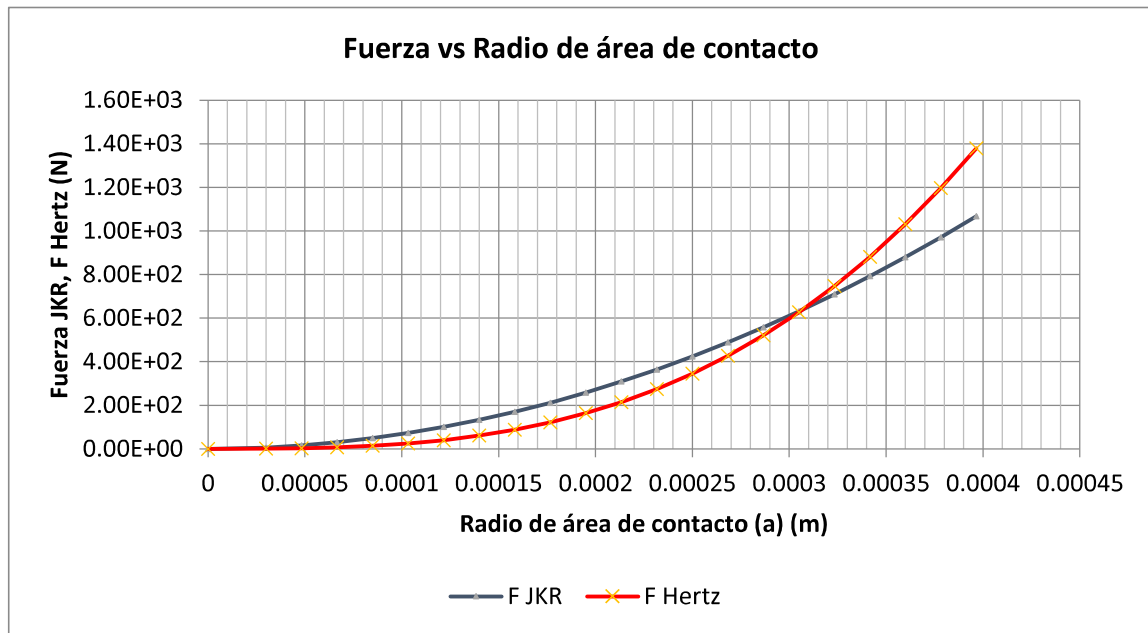
Al ejecutar las funciones que se indican a continuación en las ecuaciones ( 3.4 ), ( 3.5 ) y ( 3.6 ). Se obtienen la FIGURA 3.18 y FIGURA 3.19.

$$F_{\text{Hertz}} = \frac{a^3 K}{R} \quad (3.4)$$

$$F_{\text{JKR}} = a^2 \pi E_{\text{cohesion}} \quad (3.5)$$

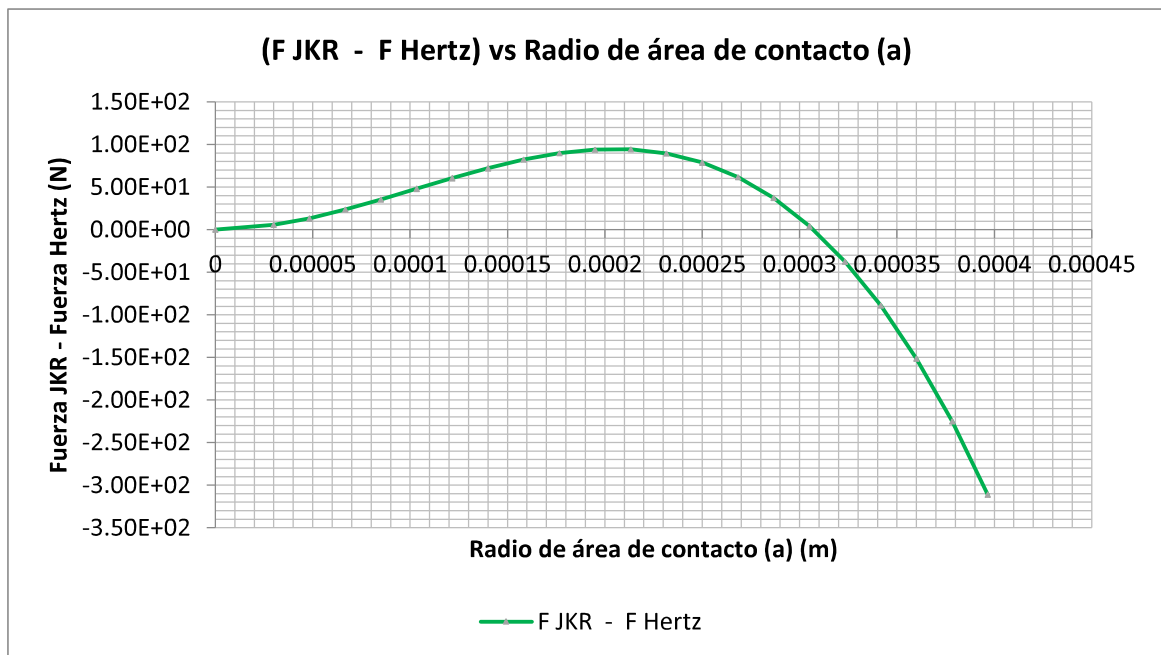
$$\sum F = F_{\text{JKR}} - F_{\text{Hertz}} \quad (3.6)$$

**FIGURA 3.18** Curva Fuerza JKR y Fuerza Hertz vs radio de área de contacto (a), para el caso con Densidad de energía de cohesión de  $2,16E+09 \text{ J/m}^3$



FUENTE: Propia.

**FIGURA 3.19** Curva Fuerza JKR menos Fuerza Hertz vs radio de área de contacto (a), para el caso con Densidad de energía de cohesión de  $2,16E+09 \text{ J/m}^3$



FUENTE: Propia.

Para cada densidad de energía de cohesión se define una función de fuerza JKR característica. La función de fuerza de Hertz no es dependiente de la adhesión, por lo que siempre es la misma. La función de sumatoria de fuerzas es la resta de ambas, por lo que en un punto de equilibrio la fuerza JKR es igual en magnitud a la fuerza Hertz pero de sentido contrario. En este punto de deformación y contacto la partícula no se mueve.

El punto de equilibrio queda caracterizado por un área de contacto y por su radio (a). En este punto de equilibrio tanto la fuerza JKR como la fuerza Hertz deben ser igual a la fuerza pullout definida anteriormente. Porque hacia la derecha del punto de contacto se presentarán fuerzas de repulsión que contribuyen a la separación de la partícula, y hacia la izquierda del punto de equilibrio se presentan fuerzas de atracción. Es por esto que el punto de equilibrio debe contener a la fuerza pullout. Ya que considerando que en el punto de equilibrio las partículas no se mueven; la única fuerza externa capaz de sacar a una partícula de este estado debe ser la fuerza pullout.

Entonces encontrar la densidad de energía de cohesión corresponde a un procedimiento iterativo en donde se encuentra el punto de contacto en el cual las fuerzas sean iguales a la fuerza de pullout. Para este propósito se hace una tabla de cálculo como se muestra a continuación en la TABLA 3.34. En la cual se puede variar el valor de energía de cohesión hasta encontrar el adecuado, y se evalúan las fuerzas hasta que éstas coincidan con el valor de fuerza pullout.

**TABLA 3.34** Cálculos iterativos para encontrar la energía de cohesión, para el caso con Densidad de energía de cohesión de  $2,16E9 \text{ J/m}^3$ .

		E cohesión 2,16E+09		J/m3
		LIGGGHTS	Hertz	
Radio de área de contacto (a) (m)	Área (a) (m <sup>2</sup> )	F JKR (N)	F Hertz (N)	F JKR - F Hertz (N)
0	0	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
0,00003	3E-09	6,11E+00	5,97E-01	5,51E+00
4,83E-05	7E-09	1,59E+01	2,49E+00	1,34E+01
6,67E-05	1E-08	3,02E+01	6,55E+00	2,36E+01

**TABLA 3.34 CONTINUACION**

8,50E-05	2E-08	4,90E+01	1,36E+01	3,55E+01
1,03E-04	3E-08	7,25E+01	2,44E+01	4,81E+01
1,22E-04	5E-08	1,00E+02	3,98E+01	6,07E+01
1,40E-04	6E-08	1,33E+02	6,06E+01	7,24E+01
1,58E-04	8E-08	1,70E+02	8,77E+01	8,24E+01
1,77E-04	1E-07	2,12E+02	1,22E+02	9,00E+01
1,95E-04	1E-07	2,58E+02	1,64E+02	9,42E+01
2,13E-04	1E-07	3,09E+02	2,15E+02	9,43E+01
2,32E-04	2E-07	3,64E+02	2,75E+02	8,95E+01
2,50E-04	2E-07	4,24E+02	3,45E+02	7,89E+01
2,68E-04	2E-07	4,89E+02	4,27E+02	6,17E+01
2,87E-04	3E-07	5,58E+02	5,21E+02	3,71E+01
<b>3,05E-04</b>	<b>3E-07</b>	<b>6,31E+02</b>	<b>6,27E+02</b>	<b>4,33E+00</b>
3,23E-04	3E-07	7,09E+02	7,47E+02	-3,75E+01
3,42E-04	4E-07	7,92E+02	8,81E+02	-8,91E+01
3,60E-04	4E-07	8,79E+02	1,03E+03	-1,51E+02
3,78E-04	4E-07	9,71E+02	1,20E+03	-2,25E+02
3,97E-04	5E-07	1,07E+03	1,38E+03	-3,11E+02

Descripción: En negrita se puede notar que para este caso la fuerza pullout es aproximadamente 630 N.

FUENTE: Propia.

La TABLA 3.30 muestra la fuerza pullout que tiene utilidad para calcular mediante la TABLA 3.34 la densidad de energía de cohesión así como otros parámetros que se ingresan en LIGGGHTS para modelar hormigón, los resultados con resumidos en la TABLA 3.35 tanto para agregado grueso como para agregado fino.

**TABLA 3.35** Densidad de energía de cohesión JKR para ingresar en LIGGGHTS.

f <sub>c</sub> (kg/cm <sup>2</sup> )	Fuerza Pullout total (N)	Agregado grueso				Agregado fino			
		Número de partículas en área de rotura	Fuerza Pullout por par de partículas (N)	radio de equilibrio a (m <sup>2</sup> )	Densidad de energía de cohesión (J/m <sup>3</sup> )	Número de partículas en área de rotura	Fuerza Pullout por par de partículas (N)	radio de equilibrio a (m <sup>2</sup> )	Densidad de energía de cohesión (J/m <sup>3</sup> )
210	11584,11	18,37	630,60	3,10E-04	2,16E+09	459,18	34,33	6,79E-05	2,47E+09

### **3.11 FACTOR DE CORRECCIÓN EN DENSIDAD DE ENERGÍA DE COHESIÓN JKR EN LIGGGHTS**

La discusión a tener en cuenta en esta sección corresponde al análisis exhaustivo realizado en la sección 3.9 y 3.10 del presente capítulo realizado para obtener la densidad de energía de cohesión para ingresar en LIGGGHTS y sus limitaciones.

Partiendo de que se ha establecido la densidad de energía de cohesión a partir del marco teórico JKR, y considerando que no es posible realizar mediciones de manera experimental con el hormigón, se puede atribuir cierto error a la asunción inicial de tomar el valor fuerza pullout como la fuerza de tensión del hormigón. Ya que físicamente no solamente puede estar involucrada la cohesión en la realidad del enlace entre agregados. Por lo que efectivamente debe existir un factor de corrección en los valores de la TABLA 3.35.

Estos factores de corrección no pueden obtenerse de manera analítica, por lo que es necesario un proceso iterativo, el en cual se ponen a prueba arbitrariamente ciertos valores de densidad de energía de cohesión en el software LIGGGHTS para evaluar el comportamiento del material. Estos valores parten de la TABLA 3.35.

En la FIGURA 3.20 y FIGURA 3.21 se muestra gráficamente el modelo discreto de hormigón con las respectivas densidades de energía de cohesión mostrado en la TABLA 3.35. El conglomerado en este estado no resiste carga, solamente se evalúa la estabilidad de la geometría cúbica. Se puede notar que las partículas tienden a dispersarse aleatoriamente, formando grumos, mismos que dañan la geometría cúbica.

Cabe recalcar que debe existir un proceso de estabilización inicial, a casusa del procedimiento de formación del input data. En el mismo no se aplica carga, hasta que las partículas alcancen un estado de velocidad y fuerza neta cero. En el caso de la FIGURA 3.21 se puede apreciar que el mencionado estado no es alcanzado, y la geometría del espécimen se encuentra cambiando.

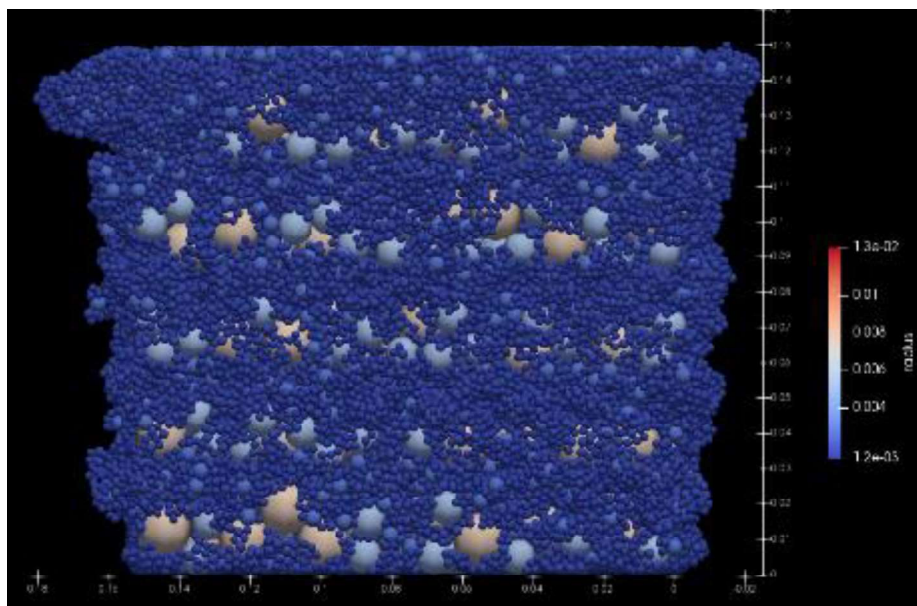
Como información adicional; al modelo se lo sometió a compresión uniaxial encontrándose la curva esfuerzo vs tiempo de simulación que se muestra en la

FIGURA 3.22, en la misma se hace notorio la incapacidad del conglomerado para soportar carga.

Por las razones antes expuestas se puede estimar que los valores de densidad de energía de cohesión de la TABLA 3.35 no son adecuados para ingresar en LIGGGHTS directamente. Existe un límite de estabilidad permisible, el mismo se verifica, mediante ensayo y error, que es el correspondiente al valor mostrado en la TABLA 3.36; resultado que es aplicado a este estudio, el cual muestra ser estable y concordante con el marco teórico JKR.

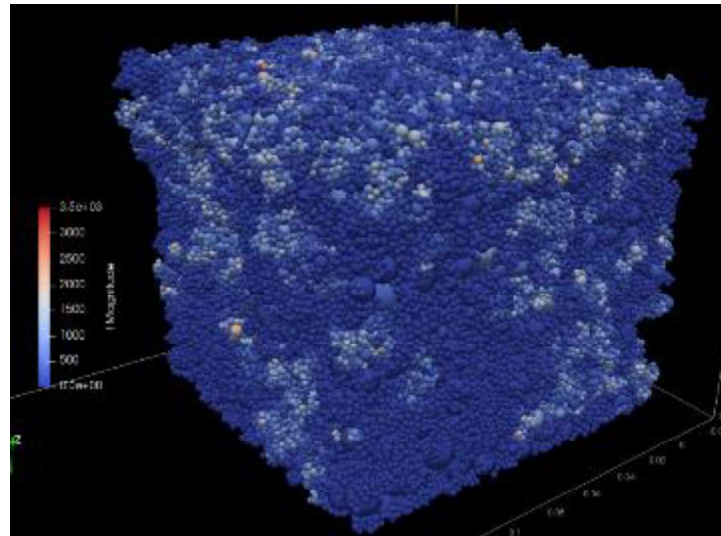
De esta manera, queda un factor de corrección de 0,85 para la densidad de energía de cohesión para LIGGGHTS encontrada con medios teóricos.

**FIGURA 3.20** Vista en perfil del conglomerado con Densidad de energía de cohesión  $2.16\text{E}+09 \text{ J/m}^3$  para el agregado grueso y  $2.47\text{E}+09 \text{ J/m}^3$  para el agregado fino



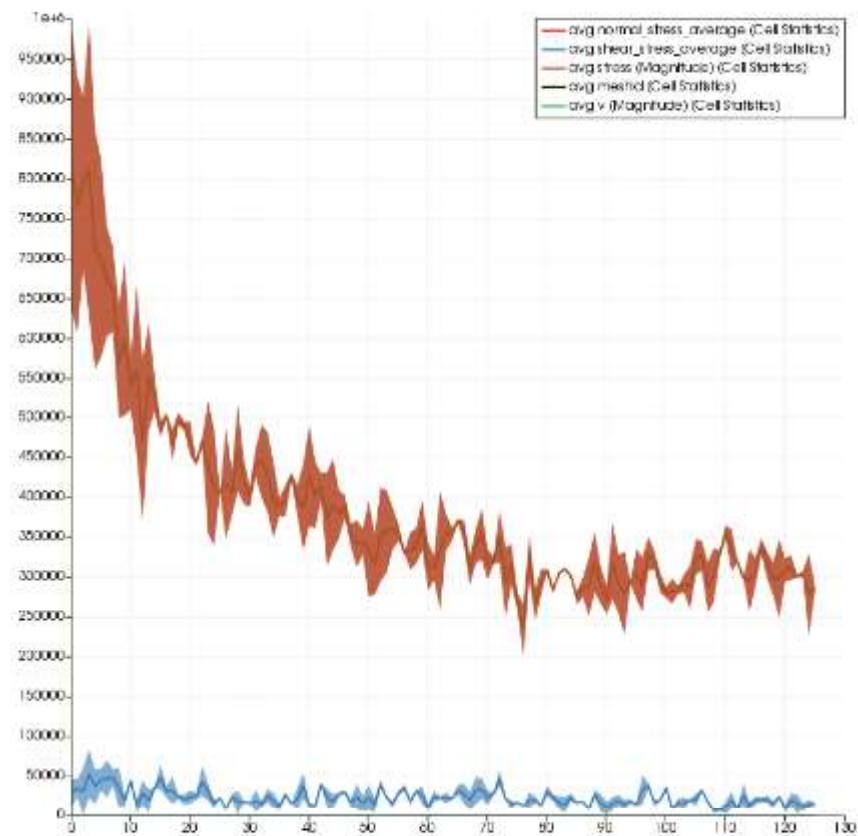
FUENTE: Propia.

**FIGURA 3.21** Vista 3D del conglomerado con Densidad de energía de cohesión  $2.16\text{E}+09 \text{ J/m}^3$  para el agregado grueso y  $2.47\text{E}+09 \text{ J/m}^3$  para el agregado fino



FUENTE: Propia.

**FIGURA 3.22.** Curva esfuerzo (Pa) vs tiempo ( $5 \times 10^{-7}$  seg) para el hormigón representado con Densidad de energía de cohesión  $2.16\text{E}+09 \text{ J/m}^3$  para el agregado grueso y  $2.47\text{E}+09 \text{ J/m}^3$  para el agregado fino





**TABLA 3.36** Densidad de energía de cohesión LIGGGHTS corregida

f'c (kg/cm <sup>2</sup> )	Agregado grueso			Agregado fino		
	Densidad de energía de cohesión calculada (J/m <sup>3</sup> )	Factor de corrección	Densidad de energía de cohesión corregida (J/m <sup>3</sup> )	Densidad de energía de cohesión calculada (J/m <sup>3</sup> )	Factor de corrección	Densidad de energía de cohesión corregida (J/m <sup>3</sup> )
210	2,16E+09	0,85	1,82E+09	2,47E+09	0,85	2,09E+09

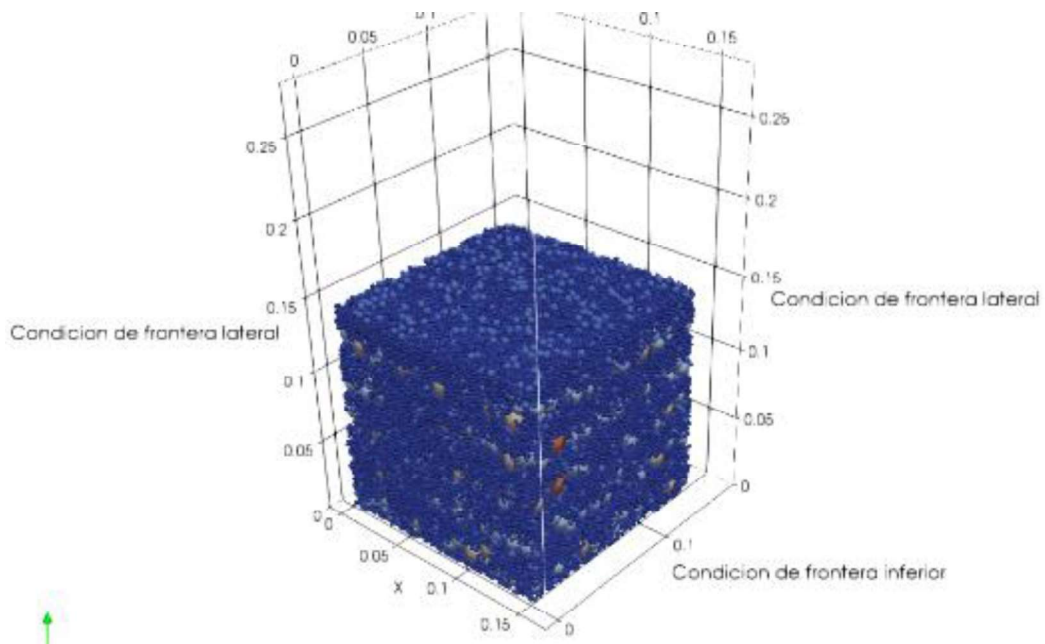
FUENTE: Propia.

## 3.12 CONDICIONES DE FRONTERA

### 3.12.1 PARED RÍGIDA

En LIGGGHTS esta condición se define como un plano en el cual las partículas no pueden pasar, y en donde se aplica la ley de acción y reacción. Por lo que es la condición de frontera con la cual se está trabajando para el presente estudio. Esta condición de frontera se aplica en la base del espécimen, simulando el bastidor de base de la máquina de compresión uniaxial, se presenta en la FIGURA 3.23 la representación de la condición de frontera de pared rígida. También se aplica esta condición a una distancia de 0.3 a partir de los límites del espécimen en posiciones X e Y, estos planos sirven para limitar el desplazamiento de partículas que salen disparadas producto de la compresión.

**FIGURA 3.23** Esquema de condiciones de frontera del modelo DEM del hormigón

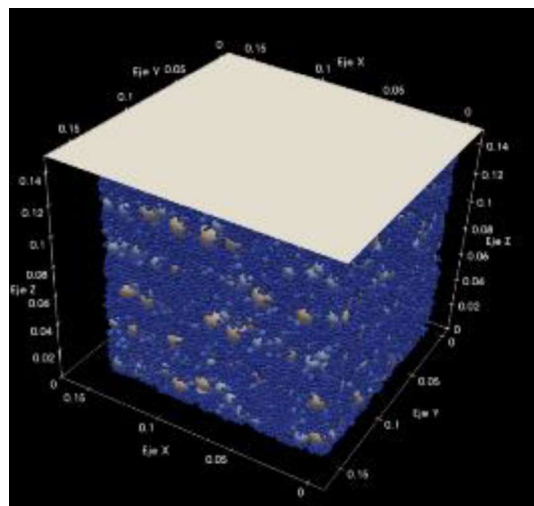


FUENTE: Propia.

### 3.12.2 MOVIMIENTO DEL PISTÓN DE COMPRESIÓN

La condición de frontera en la parte superior del espécimen de hormigón corresponde al pistón de compresión, que para el fin de simulación es una pared rígida móvil, que se desplaza verticalmente, así como se muestra en la FIGURA 3.24.

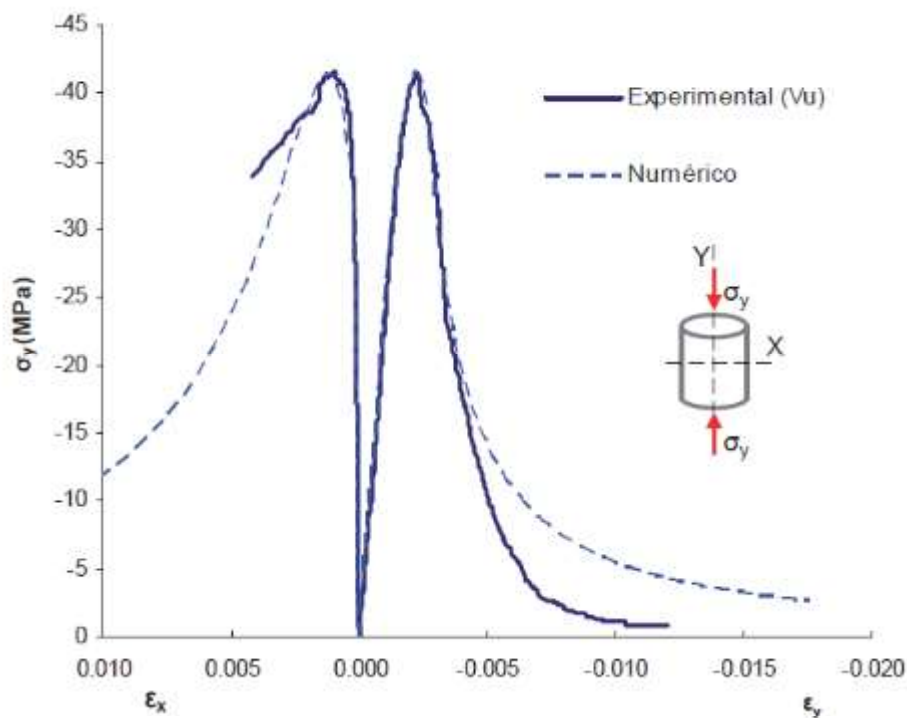
**FIGURA 3.24** Condición de frontera superior del modelo DEM del hormigón: Pistón de compresión



El movimiento del pistón de compresión está de acuerdo a lo señalado por la norma ASTM C39/C39M-14 sección 7.5.1; en la que se indica que el espécimen debe ser cargado a  $0,25 \pm 0,05$  MPa/s para generar un proceso de carga cuasi estático.

La FIGURA 3.25, señala que, para hormigones de peso normal, se alcanza en promedio una deformación unitaria correspondiente a 0,003 en su estado de carga máxima. Misma deformación unitaria que es aprobada para el diseño de hormigón armado en la norma NEC-SE-HM 2015.

**FIGURA 3.25** Curva esfuerzo vs deformación unitaria típica para el hormigón en compresión uniaxial



FUENTE: (Aráoz & Luccioni, 2011)

Entonces el desplazamiento probable para alcanzar el esfuerzo máximo uniaxial es 0,45mm. Luego de esto el material debe entrar en un proceso de desgaste, reduciendo su resistencia y continuando con la deformación axial. Para el propósito de evaluar este proceso de desgaste se simularán 0.15 mm adicionales. Quedando establecido el desplazamiento total del pistón en 0.6 mm a partir de que entra en contacto con el espécimen de hormigón. En concordancia con la velocidad de carga

recomendada por la norma ASTM C39/C39M-14, el pistón de compresión debe desplazarse a 0,06 mm por segundo.

### 3.13 ESTABILIDAD E INCREMENTO DEL TIEMPO

La estabilidad del modelo, así como el incremento del tiempo (time step) queda definida por la transferencia de energía de Rayleigh.

#### 3.13.1 TRANSFERENCIA DE ENERGÍA DE RAYLEIGH

De acuerdo a lo expuesto en el capítulo 2, la ecuación ( 2.47 ) permite obtener el tiempo de transferencia de energía de Rayleigh.

$$T_R = \pi R \frac{\sqrt{\rho/G}}{(0,1632\nu + 0,8766)}$$

En donde:

- R : es el mínimo radio de las partículas
- $\rho$  : es la densidad de la partícula
- $\nu$  : es el módulo de Poisson
- G : es el módulo de corte, y se calcula con la ecuación ( 2.48 ).

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}$$

Como ejemplo se procede a realizar para la arena, el valor del módulo de corte es:

$$G = \frac{7 * 10^{10} \text{Pa}}{2(1 + 0,3)} = 2,69 * 10^{10} \text{Pa}$$

Con este valor se calcula el tiempo de Rayleigh, considerando la arena de menor diámetro en LIGGGHTS:

$$T_R = \pi(0,00125\text{m}) \frac{\sqrt{(2632 \text{ kg/m}^3)/(2,69 * 10^{10} \text{Pa})}}{(0,1632 * 0,3 + 0,8766)}$$

$$T_R = 1,327 * 10^{-6} \text{ seg}$$

### 3.13.2 TIME STEP

El valor  $\Delta t$  a usarse en el modelamiento computacional discreto debe estar en el rango que se indica en la ecuación ( 2.49 ).

$$\Delta t < (0,1T_R - 0,3T_R)$$

$$\Delta t = 0,1T_R = 0,1 * 1,327 * 10^{-6} = 1,32 * 10^{-7} \text{ seg}$$

$$\Delta t = 0,3T_R = 0,3 * 1,327 * 10^{-6} = 3,98 * 10^{-7} \text{ seg}$$

Entonces el time step considerado para todas las simulaciones es de:  $5 * 10^{-7}$  seg

## 3.14 SCRIPT CARACTERÍSTICO

### 3.14.1 SCRIPT CARACTERÍSTICO PARA GENERACIÓN DE INPUT DATA

```
#Script de llenado para generar INPUT DATA
# Autor: Mario De La Torre
# e-mail: zumack_mc@yahoo.com

atom_style          granular
atom_modify         map array
boundary            m m m
newton              off
hard_particles      yes

communicate         single vel yes

units               si

region              reg block 0.0 0.15 0.0 0.15 0. 0.28 units box
create_box          2 reg

neighbor            0.002 bin
neigh_modify        delay 0

#Material properties required for new pair styles
fix                 m1 all property/global youngsModulus peratomtype 7e10 7e10
fix                 m2 all property/global poissonsRatio peratomtype 0.2 0.3
fix                 m3 all property/global coefficientRestitution peratomtypepair
2 0.77 0.74 0.74 0.7
fix                 m4 all property/global coefficientFriction peratomtypepair 2
0.893 0.796 0.796 0.7
fix                 m5 all property/global characteristicVelocity scalar -0.02

#New pair style

pair_style          gran model hertz tangential history
pair_coeff           * *

timestep            0.000001

fix                 gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0

variable sizeX equal 0.151# DimensiÃ³n en X para entre paredes
```

```
variable sizeY equal 0.151 # Dimensi3n en Y para entre paredes
```

```
fix wall_bottom all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 zplane 0.0
fix wall_up all wall/gran model hertz tangential history primitive type 1
zplane 0.25
fix wall_left all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane 0.0
fix wall_rigth all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane ${sizeX}
fix wall_front all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane 0.0
fix wall_back all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane ${sizeY}
```

```
#region for insertion
```

```
region bc block 0.0 0.15 0.0 0.15 0.181 0.21 units box # 2.9cm
de alto
group nve_group region reg
```

```
region bq block 0.0 0.15 0.0 0.15 0.155 0.18 units box # 2,5cm
de alto
group nve_group2 region reg
```

```
region bp block 0.0 0.15 0.0 0.15 0.211 0.248 units box # 3.7cm
de alto
group nve_group3 region reg
```

```
#distributions for insertion
```

```
fix pts1 all particletemplate/sphere 15485863 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.0125 # 2,5cm grava
```

```
fix pts2 all particletemplate/sphere 67867967 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.01 # 2cm grava
fix pts3 all particletemplate/sphere 32452843 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.0075 # 1.5cm grava
fix pts4 all particletemplate/sphere 15485867 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.005 # 1cm grava
```

```
fix pts5 all particletemplate/sphere 67867967 atom_type 2
density constant 2632 radius constant 0.0025 # 5mm arena
fix pts6 all particletemplate/sphere 32452843 atom_type 2
density constant 2632 radius constant 0.0015 # 3mm otra arena
fix pts7 all particletemplate/sphere 15485867 atom_type 2
density constant 2632 radius constant 0.00125 # 2.5mm otra arena
```

```
fix pdd1 all particledistribution/discrete 32452867 3 pts2
0.1 pts3 0.45 pts4 0.45 # Parte del ripio
```

```
fix pdd2 all particledistribution/discrete 86028157 3 pts5
0.27 pts6 0.26 pts7 0.47 #Arena
```

```
fix pdd3 all particledistribution/discrete 86028157 1 pts1 1
# Corresponde al ripio mas grueso
```

```
#particle insertion
```

```
fix ins nve_group insert/pack seed 49979687 distributiontemplate
pdd1 &
maxattempt 1000 insert_every 1500000 overlapcheck yes
all_in yes vel constant 0.0 0.0 -0.0 &
region bc particles_in_region 300 ntry_mc 1000
```

```

fix          ins2 nve_group2 insert/pack seed 86028121 distributiontemplate
pdd2 &
          maxattempt 10000 insert_every 150000 overlapcheck yes
all_in yes vel constant 0.0 0.0 -0.0 &
          region bq particles_in_region 2000 ntry_mc 10000

fix          ins3 nve_group3 insert/pack seed 15485867 distributiontemplate
pdd3 &
          maxattempt 100 insert_every 2000000 overlapcheck yes
all_in yes vel constant 0.0 0.0 -0.0 &
          region bp particles_in_region 2 ntry_mc 10000

#apply nve integration to all particles that are inserted as single
particles

fix          integr nve_group nve/sphere
fix          integr2 nve_group2 nve/sphere
fix          integr3 nve_group3 nve/sphere

#output settings, include total thermal energy

compute          rke all erotate/sphere
thermo_style      custom step atoms ke c_rke vol
thermo            1000
thermo_modify     lost ignore norm no

#insert the first particles so that dump is not empty

run              1

dump             dmp all custom/vtk 10000 post2/noCohesion_*.vtk id type type
x y z ix iy iz vx vy vz fx fy fz omegax omegay omegaz radius

write_data data2/data*.

run              2100000

write_data data2/data*.

unfix ins3

run              4000000

write_data data2/data*.

unfix ins

run 1650000

write_data data2/data*.

unfix ins2

run 500000

write_data data2/data*.

```

### 3.14.2 SCRIPT CARACTERÍSTICO DE COMPRESIÓN UNIAXIAL

```

#
# Modelo de fisura del hormigon
# Autor: Mario De La Torre
# e-mail: zumack_mc@yahoo.com
#

atom_style granular
atom_modify map array
boundary      m m m
newton        off
hard_particles yes # E grande

communicate single vel yes
processors * * *

units          si

read_data data/data.data # Datos del llenado con granulometria

*****
*****

neighbor      0.0001 bin
neigh_modify  delay 0

#Propiedades de materiales: grava, arena y acero

fix           m1 all property/global youngsModulus peratomtype 7e10 7e10
2.07e11
fix           m2 all property/global poissonsRatio peratomtype 0.2 0.3 0.3
fix           m3 all property/global coefficientRestitution peratomtypepair
3 0.77 0.74 0.74 0.74 0.7 0.7 0.74 0.7 0.7
fix           m4 all property/global coefficientFriction peratomtypepair 3
0.893 0.796 0.65 0.796 0.7 0.55 0.65 0.55 0.4
fix           m5 all property/global characteristicVelocity scalar -0.0

fix           m6 all property/global cohesionEnergyDensity peratomtypepair
3 1.92e9 2.06e9 0.0 2.06e9 2.2e9 0.0 0.0 0.0 0.0

*****
*****

#New pair style

pair_style gran model hertz tangential history cohesion sjkr
pair_coeff * *

variable dt equal 0.000005 # Obtenido con transferencia de energia de
Rayleigh
timestep ${dt}

fix           gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0

variable sizeX equal 0.451 # DimensiÃ³n en X para entre paredes
variable sizeY equal 0.451 # DimensiÃ³n en Y para entre paredes

fix wall_bottom all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 zplane 0.0
fix wall_left all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane -0.3
fix wall_rigth all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane ${sizeX}
fix wall_front all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane -0.3

```



```

fix wall_back    all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane ${sizeY}

#####
#####

variable startZ    equal 0.1518 # Posicion inicial del piston de compresion
variable endZ      equal 0.145 # 5mm de desplazamiento. Son 0,5mm de
deformacion hasta que se alcance la maxima resistencia, lo demas es para
el proceso de desgaste
variable ts_move   equal 10000000 # La aplicacion es de 0,1mm por segundo.
Tiempo de simulacion de 50 seg. Calculado con valor de time step

variable dz        equal ${endZ}-${startZ}
variable cvel      equal ${dz}/(${ts_move}*${dt})
variable rvel      equal -1*${cvel}

print "velocity of piston: ${rvel}"

fix piston_m      all mesh/surface/stress &
                  file meshes/piston_hormigon.stl &
                  type 3 &
                  move 0. 0. ${startZ}
fix piston        all wall/gran model hertz tangential history mesh  n_meshes
1 meshes piston_m

fix piston_force  all ave/time 1 200 200 f_piston_m[1] f_piston_m[2]
f_piston_m[3] f_piston_m[4] f_piston_m[5] f_piston_m[6] f_piston_m[7]
f_piston_m[8] f_piston_m[9] file post/piston_force_hormigon.txt

#apply nve integration to all particles

fix              integr all nve/sphere

#####
#####

#output settings, include total thermal energy

compute          1 all erotate/sphere
thermo_style     custom step atoms ke c_1 vol
thermo           1000
compute_modify   thermo_temp dynamic yes

compute fc       all pair/gran/local id pos force
force_normal force_tangential contactArea delta

compute dsp all displace/atom

compute contact all contact/atom

compute st all stress/atom

compute katom_energy all ke/atom #Energia cinetica por atomo
compute kinetic_energy all ke #Energia cinetica global

#####
#####

#insert the first particles so that dump is not empty

fix piston_move  all move/mesh mesh piston_m linear 0. 0. ${cvel}
run              1

write_data data2/data*.

```

```

*****
*****

dump      custom1 all custom/vtk 20000 post_custom/hormigon_contact*.vtk
id type type x y z ix iy iz vx vy vz fx fy fz omegax omegay omegaz radius

dump      stress1 all mesh/vtk 20000 post_mesh/hormigon_mesh*.vtk id
stress stresscomponents vel

dump      forcechain all local/gran/vtk 20000 post_forcechain/fc*.vtk
fc
dump fc2 all local 10000 post_forcechain_txt/fc*.txt c_fc[1] c_fc[2]
c_fc[3] c_fc[4] c_fc[5] c_fc[6] c_fc[7] c_fc[8] c_fc[9] c_fc[10] c_fc[11]
c_fc[12] c_fc[13] c_fc[14] c_fc[15] c_fc[16] c_fc[17] c_fc[18] c_fc[19]
c_fc[20] # x1 y1 z1 x2 y2 z2 id1 id2 periodic fx fy fz area # delta
force_tangential force_normal

dump      dsp1 all custom/vtk 20000 post_desplazamiento/dsp*.vtk id
type c_dsp[1] c_dsp[2] c_dsp[3] c_dsp[4]

dump      contact all custom/vtk 20000 post_contact/contact*.vtk id
c_contact

dump      stratom1 all custom/vtk 20000
post_stress_atom/stress_atom*.vtk id type c_st[1] c_st[2] c_st[3] c_st[4]
c_st[5] c_st[6]

dump      k_atom_energy all custom/vtk 20000 post_keatom/keatom*.vtk id
c_katom_energy

*****
*****

#run more timesteps to insert large particles

run      ${ts_move} upto
unfix piston_move

write_data data2/data*.

```

### 3.14.3 SCRIPT CARACTERÍSTICO SLURM PARA CLUSTER

```
#!/bin/bash

#SBATCH -J liggghts_simulation
#SBATCH -n 128
#SBATCH -p quinde-G8-4650
#SBATCH --qos=extended

module purge
module load openmpi/2.1.1-intel
module load singularity/2.4.5-intel

#SBATCH --singularity
image=/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts.img

####Directorio donde se encuentra el archivo a ser usado
####con liggghts

cd /home/mdelatorre/Hormigon_alto

mpirun -np 128 singularity exec --writable --overlay
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts_overlay.img
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts.img
./liggghts < in.hormigon2
```

## **CAPÍTULO 4**

### **ANÁLISIS DE RESULTADOS**

#### **4.1 INTRODUCCIÓN**

En el presente capítulo se presentan los resultados obtenidos de las diferentes simulaciones realizadas de los hormigones correspondientes. Para evaluar la respectiva respuesta mecánica y compararlos.

Todas las simulaciones han sido realizadas en LIGGGHTS que es un software Open Source en DEM. Posterior a ello se ha realizado el post procesamiento de resultados en el programa ParaView.

El análisis a realizar es de tipo numérico, el ensamble de partículas es poli disperso, que corresponde a la granulometría citada en el capítulo 3. En el mismo hay dos tipos de partículas las cuales son representativas del agregado grueso y del agregado fino. El cemento está implícito en la densidad de energía de cohesión JKR de LIGGGHTS atribuida a la resistencia a tensión experimental del hormigón.

Entonces existe una relación entre la densidad de energía de cohesión JKR, granulometría del agregado grueso y capacidad a compresión uniaxial. Se estudia progresivamente la influencia de los parámetros meso mecánicos en las respuestas estructurales; potenciales de fisuras del modelo discreto del hormigón.

#### **4.2 CURVA ESFUERZO - DEFORMACIÓN**

En este apartado se presentan las curvas esfuerzo - deformación del conglomerado representativo como un medio continuo, este esfuerzo es la sumatoria de fuerzas individuales de las partículas del borde superior del conglomerado, dividido para el área del pistón de compresión. Así como se especifica en el capítulo 2, sección 2.3.5.

Sin embargo, este enfoque es limitado debido a que la naturaleza del hormigón es dispersa, siendo que el mayor esfuerzo uniaxial puede presentarse dentro del conglomerado, y no necesariamente en el borde superior. Pero el experimento de

compresión uniaxial en la realidad; registra únicamente el esfuerzo sensible en el pistón de compresión de la máquina, por lo que las curvas presentadas a continuación se pueden relacionar con el proceso de medición experimental.

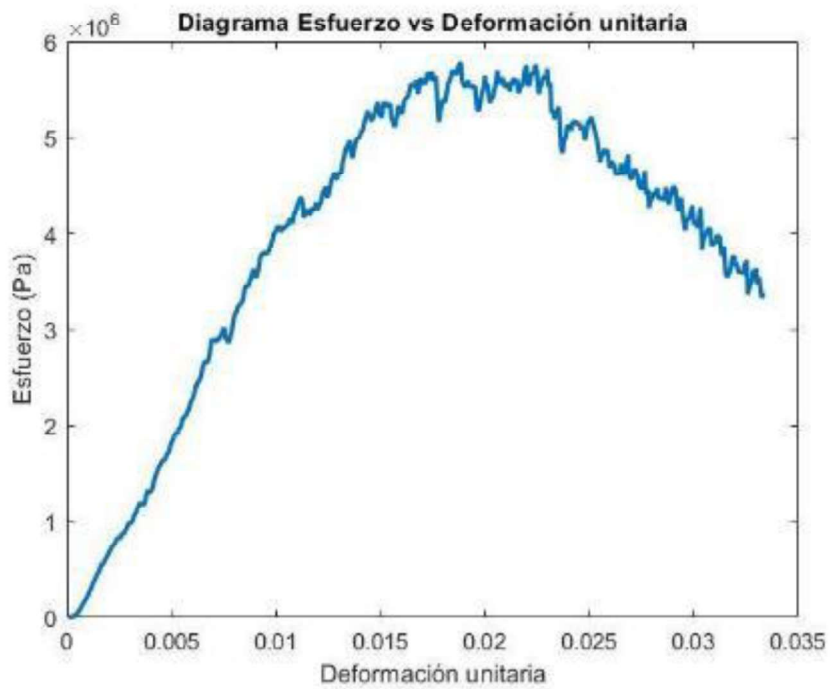
Se presentan gráficos con respecto a la deformación unitaria, deformación absoluta, y tiempo respectivamente. Con lo que se puede visualizar detalladamente el instante en el cual se alcanza la máxima resistencia y posterior proceso de desgaste.

#### **4.2.1 HORMIGÓN A**

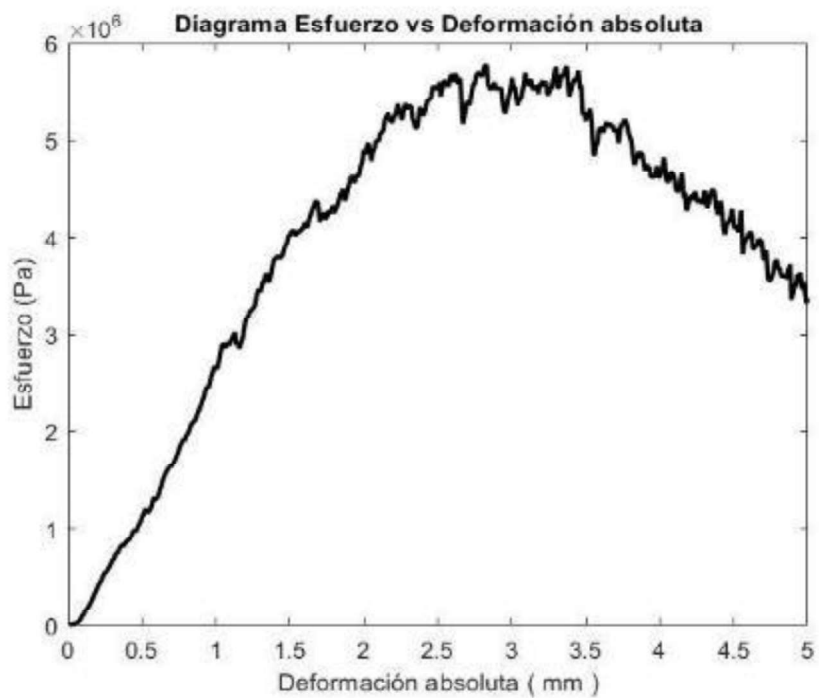
A continuación se muestran los resultados de la simulación computacional de compresión uniaxial para el modelo numérico discreto del hormigón de A; en la FIGURA 4.1 se muestra la curva esfuerzo versus deformación unitaria, en la FIGURA 4.2 se muestra la curva esfuerzo versus deformación absoluta y en la FIGURA 4.3 se muestra la curva esfuerzo versus tiempo de carga. Si bien los valores numéricos de esfuerzo registrados en el pistón de compresión no son objetivos con la realidad experimental del material, se puede evidenciar la tendencia del modelo a comportarse de forma muy aproximada. Se puede visualizar el desgaste como la disminución de esfuerzo con respecto a un incremento de deformación residual.

El proceso de carga simula la realidad, progresivamente se alcanzan esfuerzos mayores conforme avanza el desplazamiento del pistón de compresión; simulando la deformación del espécimen, teniendo ciertos puntos de retorno correspondientes a un reacomodo de las partículas del conglomerado; ya que son libres de desplazarse individualmente. Luego del punto de esfuerzo máximo se puede entender que el modelo todavía puede deformarse conforme su capacidad es reducida. Se infiere que esto es causado debido a que las partículas son desplazadas lentamente de su punto de equilibrio, generando menos redes de fuerza de contacto en el sentido vertical: eje Z.

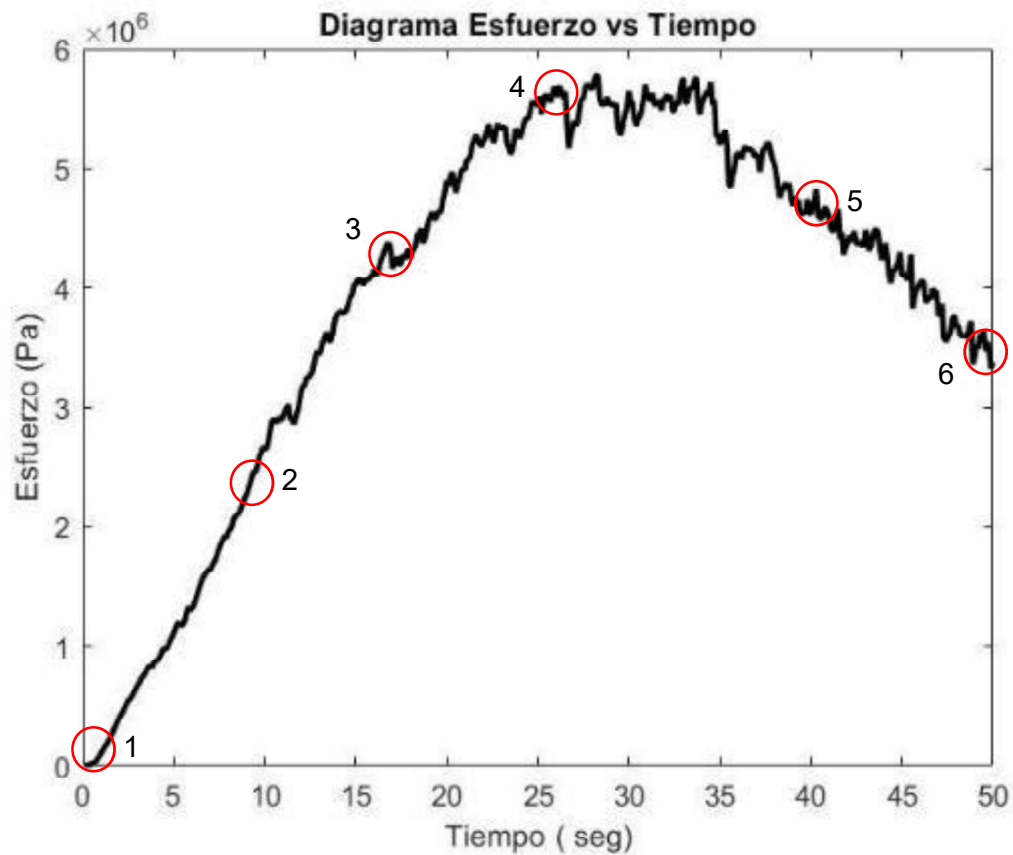
**FIGURA 4.1** Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria del modelo discreto del hormigón A.



**FIGURA 4.2** Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta del modelo discreto del hormigón A.



**FIGURA 4.3** Diagrama Esfuerzo vs Tiempo del modelo discreto del hormigón A.



Los tiempos de interés de análisis de respuestas meso mecánicas para este modelo de hormigón son los que se indican en la FIGURA 4.3 con círculos en rojo, los mismos que son relevantes en la descripción de diferentes fases del proceso de carga y desgaste. Son los que se describen a continuación:

N°	Tiempo (seg)	N° Time Step
1	0	0
2	9,70	19'400,000
3	16,70	33'400,000
4	26,20	52'400,000
5	40,30	80'600,000
6	49,60	99'200,000

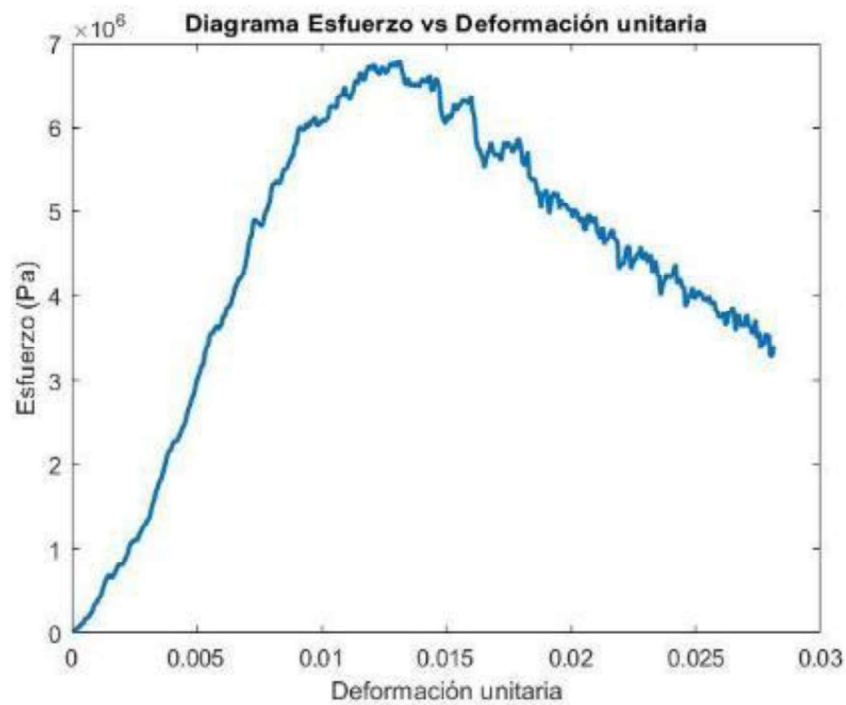
### 4.2.2 HORMIGÓN B

A continuación se muestran los resultados de la simulación computacional de compresión uniaxial para el modelo numérico discreto del hormigón B; en la FIGURA 4.4 se muestra la curva esfuerzo versus deformación unitaria, en la FIGURA 4.5 se muestra la curva esfuerzo versus deformación absoluta y en la FIGURA 4.6 se muestra la curva esfuerzo versus tiempo de carga. Si bien los valores numéricos de esfuerzo registrados en el pistón de compresión no son objetivos con la realidad experimental del material, se puede evidenciar la tendencia del modelo a comportarse de forma muy aproximada. Se puede visualizar el desgaste como la disminución de esfuerzo con respecto a un incremento de deformación residual.

El proceso de carga simula la realidad, progresivamente se alcanzan esfuerzos mayores conforme avanza el desplazamiento del pistón de compresión; simulando la deformación del espécimen, teniendo ciertos puntos de retorno correspondientes a un reacomodo de las partículas del conglomerado; ya que son libres de desplazarse individualmente. Luego del punto de esfuerzo máximo se puede entender que el modelo todavía puede deformarse conforme su capacidad es reducida. Se infiere que esto es causado a que las partículas son desplazadas lentamente de su punto de equilibrio, generando menos redes de fuerza de contacto en el sentido vertical: eje Z.



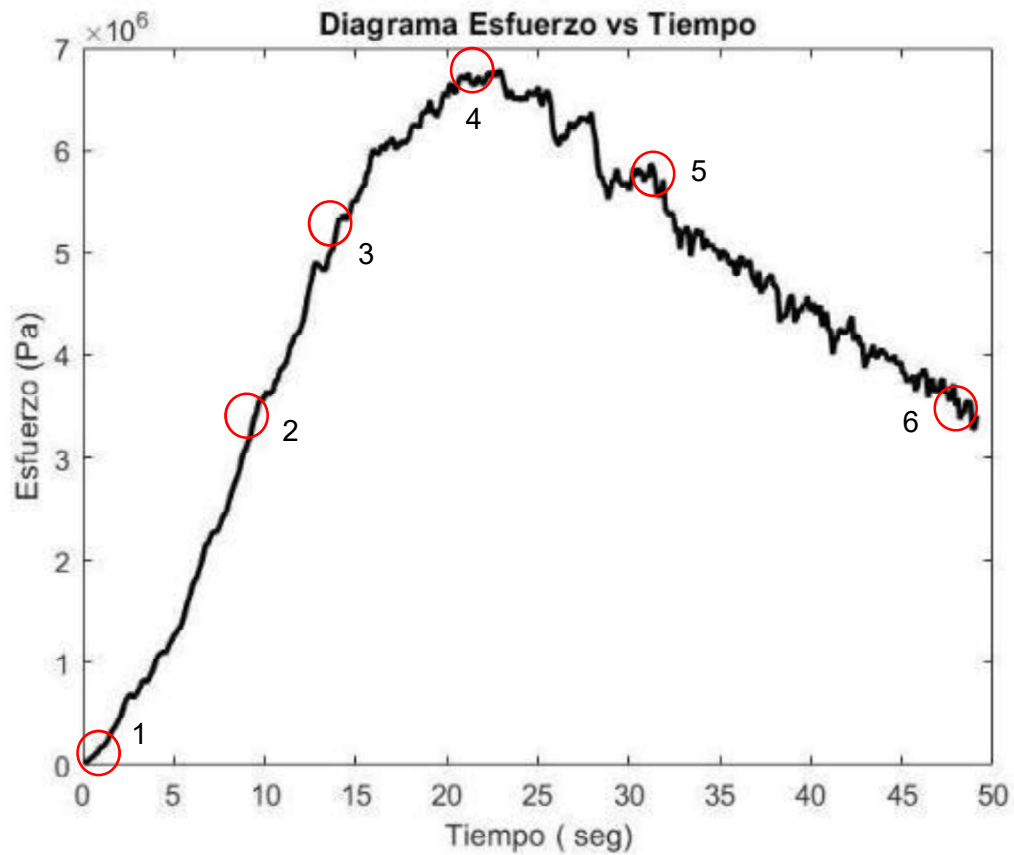
**FIGURA 4.4** Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria del modelo discreto del hormigón B.



**FIGURA 4.5** Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta del modelo discreto del hormigón B.



**FIGURA 4.6** Diagrama Esfuerzo vs Tiempo del modelo discreto del hormigón B.



Los tiempos de interés de análisis de respuestas meso mecánicas para este modelo de hormigón son los que se indican en la FIGURA 4.6 con círculos en rojo, los mismos que son relevantes en la descripción de diferentes fases del proceso de carga y desgaste. Son los que se describen a continuación:

N°	Tiempo (seg)	N° Time Step
1	0	0
2	9,42	18'840,000
3	13,92	27'840,000
4	22,93	45'860,000
5	33,76	67'520,000
6	49,12	98'240,000

### 4.2.3 HORMIGÓN C

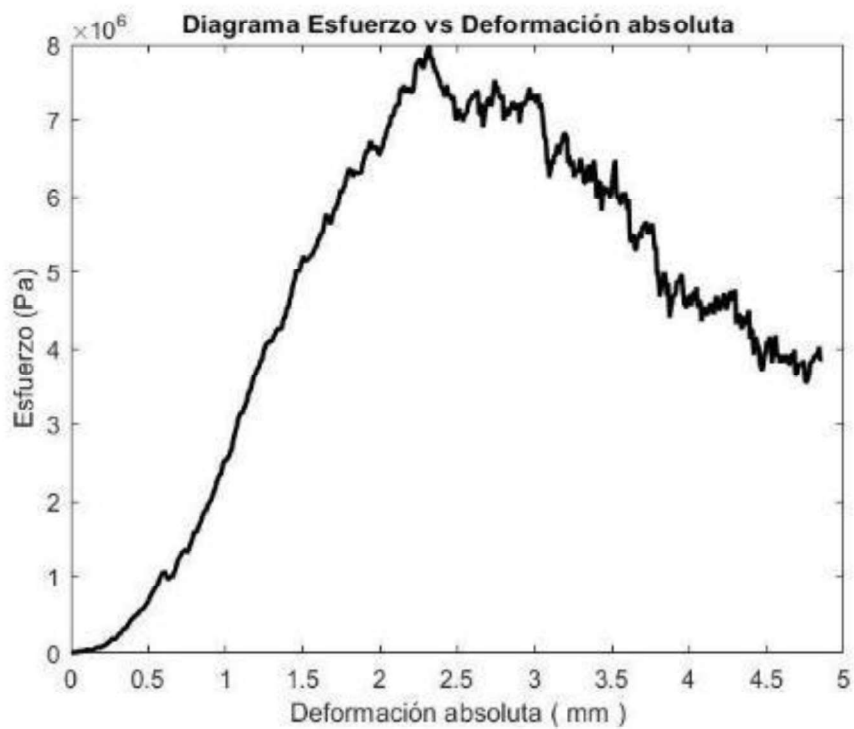
A continuación se muestran los resultados de la simulación computacional de compresión uniaxial para el modelo numérico discreto del hormigón C; en la FIGURA 4.7 se muestra la curva esfuerzo versus deformación unitaria, en la FIGURA 4.8 se muestra la curva esfuerzo versus deformación absoluta y en la FIGURA 4.9 se muestra la curva esfuerzo versus tiempo de carga. Si bien los valores numéricos de esfuerzo registrados en el pistón de compresión no son objetivos con la realidad experimental del material, se puede evidenciar la tendencia del modelo a comportarse de forma muy aproximada. Se puede visualizar el desgaste como la disminución de esfuerzo con respecto a un incremento de deformación residual.

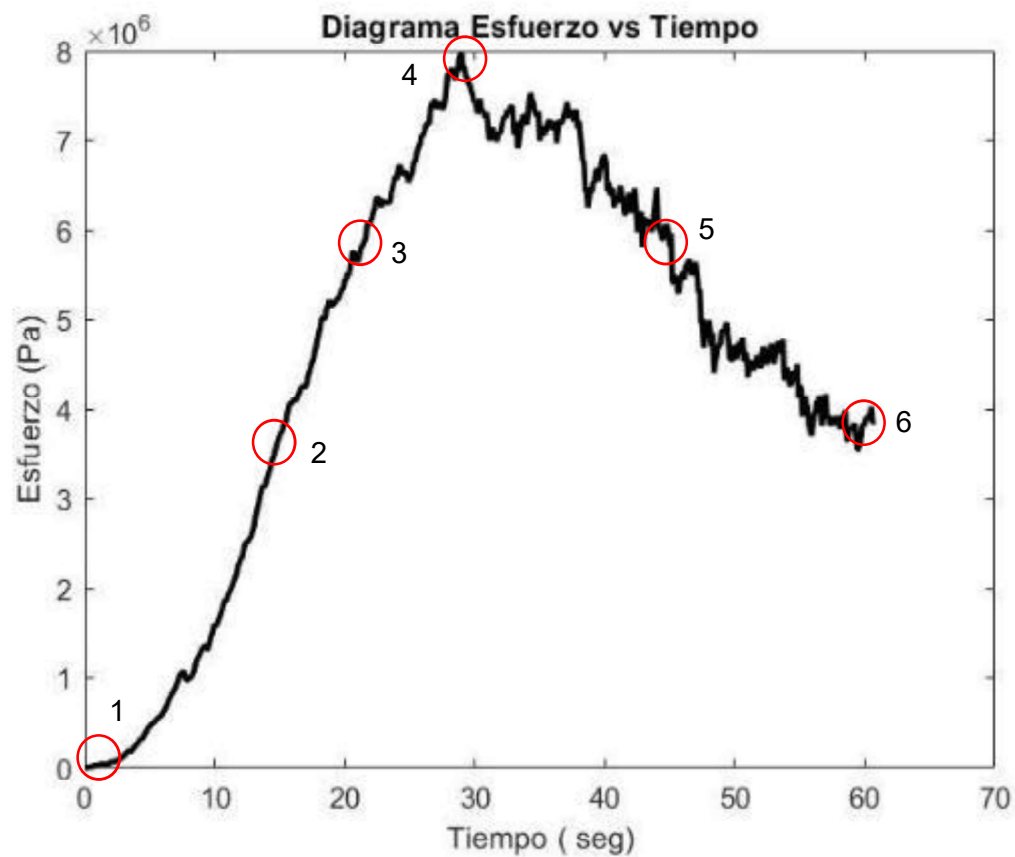
El proceso de carga simula la realidad, progresivamente se alcanzan esfuerzos mayores conforme avanza el desplazamiento del pistón de compresión; simulando la deformación del espécimen, teniendo ciertos puntos de retorno correspondientes a un reacomodo de las partículas del conglomerado; ya que son libres de desplazarse individualmente. Luego del punto de esfuerzo máximo se puede entender que el modelo todavía puede deformarse conforme su capacidad es reducida. Se infiere que esto es causado a que las partículas son desplazadas rápidamente de su punto de equilibrio, generando menos redes de fuerza de contacto en el sentido vertical: eje Z.

**FIGURA 4.7** Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria del modelo discreto del hormigón C.



**FIGURA 4.8** Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta del modelo discreto del hormigón C.



**FIGURA 4.9** Diagrama Esfuerzo vs Tiempo del modelo discreto del hormigón C.

Los tiempos de interés de análisis de respuestas meso mecánicas para este modelo de hormigón son los que se indican en la FIGURA 4.9 con círculos en rojo, los mismos que son relevantes en la descripción de diferentes fases del proceso de carga y desgaste. Son los que se describen a continuación:

N°	Tiempo (seg)	N° Time Step
1	0	0
2	9,42	18'840,000
3	13,92	27'840,000
4	22,93	45'860,000
5	33,76	67'520,000
6	49,12	98'240,000

#### 4.2.4 COMPARACIÓN DE CAPACIDAD UNIAXIAL

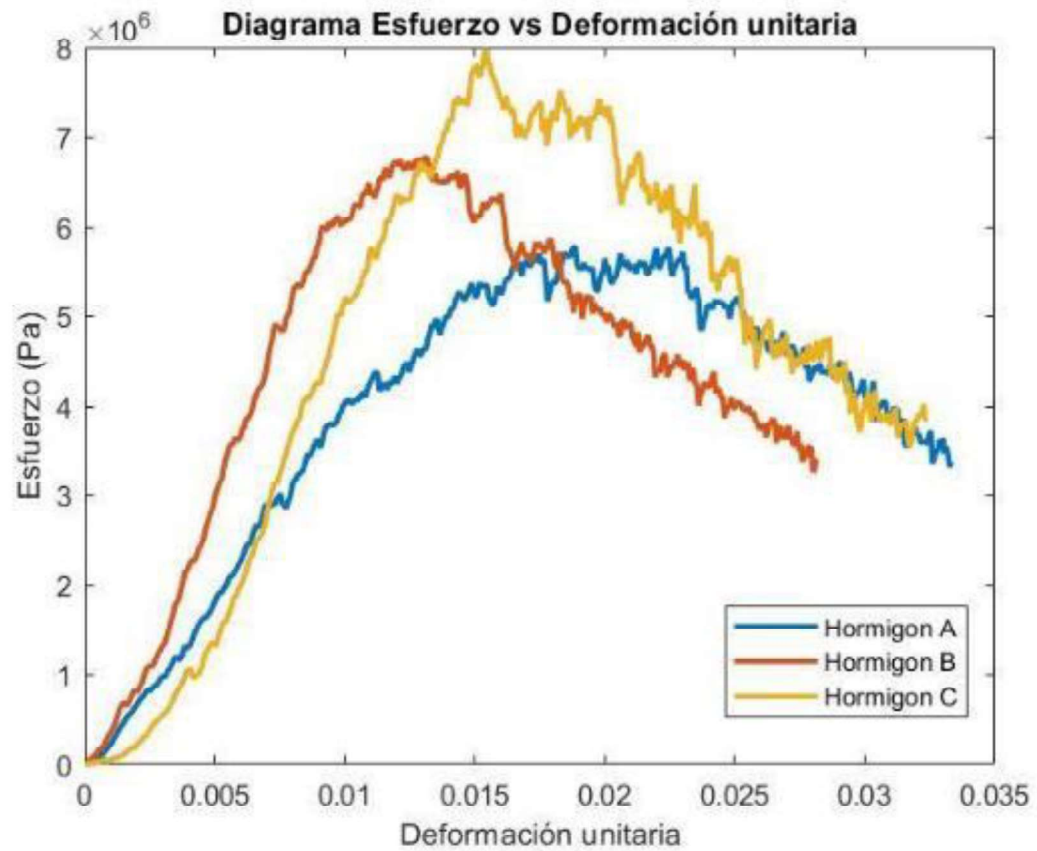
Se han generado hormigones A, B y C de acuerdo a la variación del tamaño nominal del agregado grueso; generando de esta manera diferentes proporciones de componentes bajo el procedimiento expuesto en el capítulo 3. Los efectos de la variación de este parámetro se pueden visualizar a continuación. En la FIGURA 4.10 se puede apreciar el diagrama de esfuerzo en [Pa] versus la deformación unitaria, en ella se diferencia claramente la resistencia máxima alcanzada por cada modelo discreto de hormigón generado.

El hormigón A tiende a deformarse ampliamente con respecto a los hormigones de B y C, además, luego de alcanzar el pico de esfuerzo, el esfuerzo resistente decrece lentamente. Por lo que se puede inferir que este modelo es el más flexible de los tres.

El hormigón B requiere la menor deformación para alcanzar el pico de esfuerzo, lo que indica que es el menos flexible de los tres. Sin embargo, su proceso de desgaste es prolongado, y la disminución de esfuerzo es lenta. Por lo que se puede inferir que es un hormigón cuya falla es progresiva.

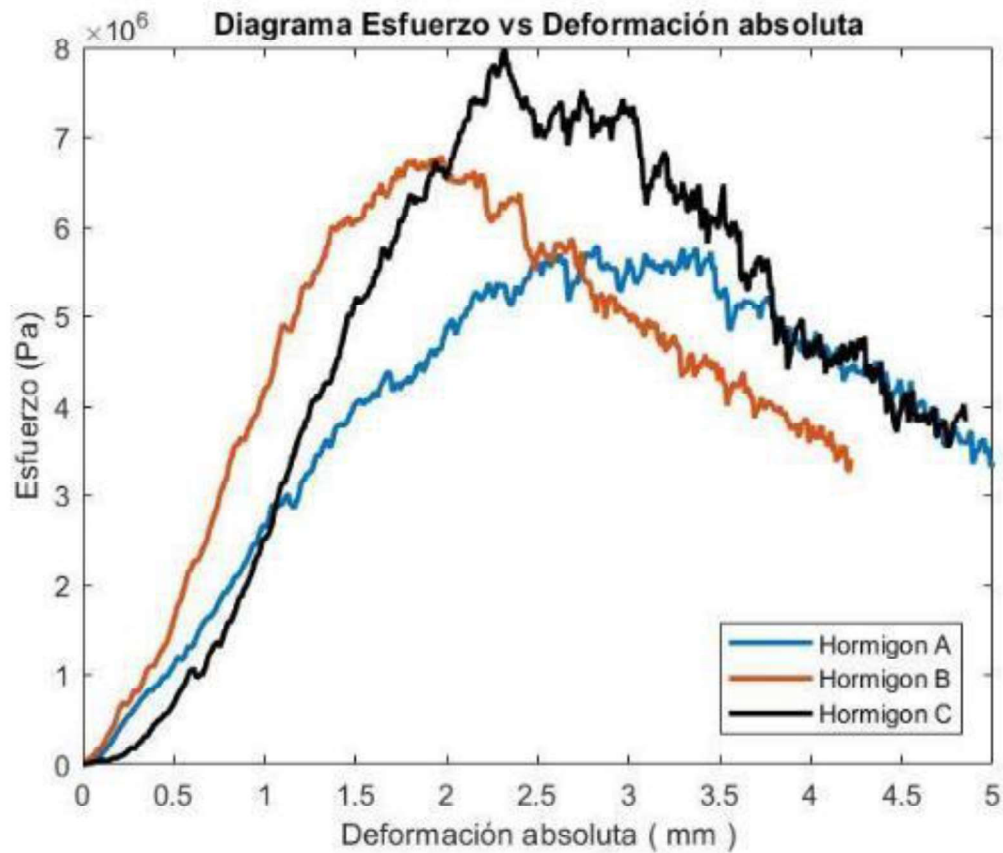
El hormigón C requiere mayor deformación para alcanzar el pico de esfuerzo máximo, en cuanto alcanza el mismo se mantiene en él por poco tiempo, disminuyendo rápidamente la capacidad conforme incrementa la deformación. Por lo que se puede inferir que este modelo es el más frágil de los tres.

**FIGURA 4.10** Diagrama Esfuerzo vs Deformación unitaria combinado de los modelos discretos de hormigón A, B y C.



En la FIGURA 4.11 se puede apreciar el gráfico esfuerzo en [Pa] versus deformación absoluta en mm, el comportamiento de los materiales tiene las mismas tendencias antes descritas para la FIGURA 4.10.

**FIGURA 4.11** Diagrama Esfuerzo vs Deformación absoluta combinado de los modelos discretos de hormigón A, B y C.



En la FIGURA 4.12 se puede apreciar el esfuerzo registrado en el pistón de compresión conforme pasa el tiempo de simulación computacional, el tiempo está en segundos y es consecuente con la velocidad de aplicación de carga recomendado por la norma ASTM C39/C39M-18.

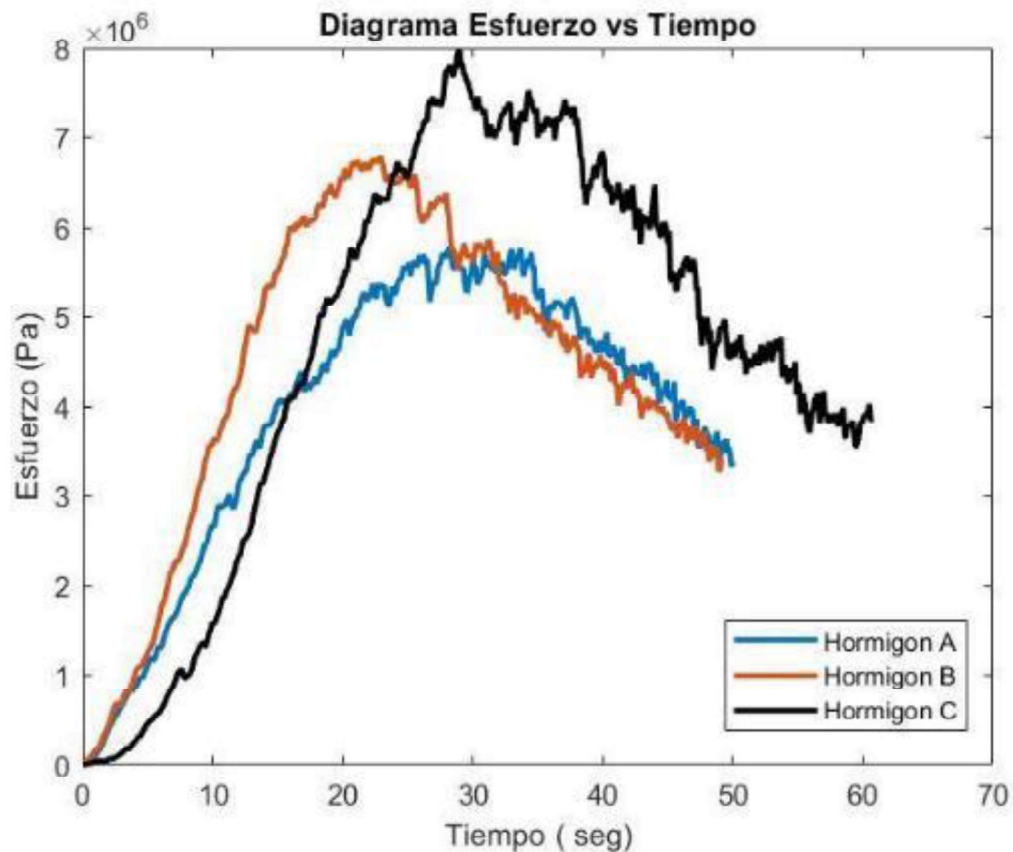
El tiempo de simulación requerido para el hormigón A y para el hormigón B es el mismo. El hormigón C requiere mayor tiempo de simulación porque a los 50 segundos apenas disminuye la resistencia con respecto a lo alcanzado por el hormigón A.

El hormigón A tarda 25 segundos en alcanzar el pico de esfuerzo, y tarda 25 segundos en disminuir gradualmente su capacidad uniaxial. El hormigón B tarda 20 segundos en alcanzar el pico de esfuerzo máximo, pero se tarda 30 segundos en disminuir gradualmente su capacidad uniaxial. Y el hormigón C alcanza el pico de



esfuerzo máximo en 29 segundos, mientras que requiere de 31 segundos para el proceso de desgaste.

**FIGURA 4.12** Diagrama Esfuerzo vs Tiempo combinado de los modelos discretos de hormigón A, B y C.



### 4.3 DESPLAZAMIENTOS POR PARTÍCULA

El desarrollo de fisuras del conglomerado granular es consecuencia directa de las traslaciones individuales de cada una de las partículas conformantes, considerando los desplazamientos lineales como el potencial de evolución de fisuras del espécimen, en este apartado se presentan esquemas de la tendencia del desplazamiento de las partículas individuales del conglomerado, que permiten identificar las zonas que presentan mayor cambio.

#### 4.3.1 HORMIGÓN A

A continuación, se presenta la visualización del cambio volumétrico del conglomerado granular representativo del hormigón A para los tiempos descritos

en la FIGURA 4.3. En la FIGURA 4.13 se presentan en 3D los cambios externos que sufre el ensamble en los puntos de interés. Hasta el tiempo 3 no hay deformaciones visibles; tiempo en el que el conglomerado es capaz de absorber carga manteniendo su estructura, a partir del tiempo 4 se presentan discontinuidades en la superficie, que son visibles en los tiempos 5 y 6; cuando el ensamble entra en proceso de desgaste y pierde estabilidad estructural.

Para visualizar los cambios que sufre el hormigón en su interior se han realizado dos cortes de sección, a 5cm y 10cm en la arista X del cubo, mostrados en las FIGURA 4.14 y FIGURA 4.15 respectivamente. En ambos casos se puede notar que conforme incrementa la carga, hasta el tiempo 3 la estructura del conglomerado se mantiene. A partir del tiempo 4; que es cuando se alcanza la máxima resistencia, el cubo se deforma tal que las partículas tienden a desplazarse hacia el exterior, generándose huecos internos entre las partículas de menor tamaño, que representan a la arena. Las separaciones visibles entre las partículas en los tiempos 5 y 6, son interpretadas como fisuras. Sin embargo, al tomar en cuenta el comportamiento de la curva de la FIGURA 4.3 es notorio que a partir del tiempo 4 existen discontinuidades, y disminuciones de capacidad producto de micro agrietamientos internos; separaciones entre las partículas más pequeñas, que son relevantes en el comportamiento de desgaste y que son visibles solamente al compararse con el conglomerado en el tiempo 1.

Las fisuras del hormigón tienen estrecha relación con el cambio de posición que sufren los agregados conformantes durante el proceso de carga. Es por ello que en la FIGURA 4.16 se presentan los desplazamientos totales de cada una de las partículas en un estado inicial y otro final (Tiempo 1 y tiempo 6 de la FIGURA 4.3), para dos diferentes enfoques de la vista en 3D del cubo. Se puede visualizar las zonas de mayor desplazamiento de partículas como flechas que indican dirección y magnitud del desplazamiento total producido hasta ese instante. En el tiempo 1 las partículas están en un proceso de estabilización por el incremento de carga inicial, solamente algunas de ellas son desplazadas producto del pequeño movimiento de las otras. En el tiempo 6 las partículas superiores se han desplazado hacia abajo producto del aplastamiento, y las partículas exteriores de la izquierda

son las que más se desplazan, por ende, son las más proclives a generar micro agrietamientos, es decir; que las fisuras se identificarán en estas zonas marcadas en rojo. En la parte inferior del cubo no se identifican grandes desplazamientos en relación a las zonas pintadas, y se forma un triángulo de ínfimos desplazamientos. Al relacionarlo con las formas de falla del hormigón detalladas en la norma ASTM C39/C39M-18, se puede identificar que el modelo DEM generado se comporta con el patrón de fractura Tipo 2 (Ver FIGURA 2.20).

Un seguimiento más detallado de los desplazamientos por partícula internos a través de los puntos de interés se muestra en las FIGURA 4.17 y FIGURA 4.18; que son secciones a 5cm y 10cm en la arista X del cubo respectivamente.

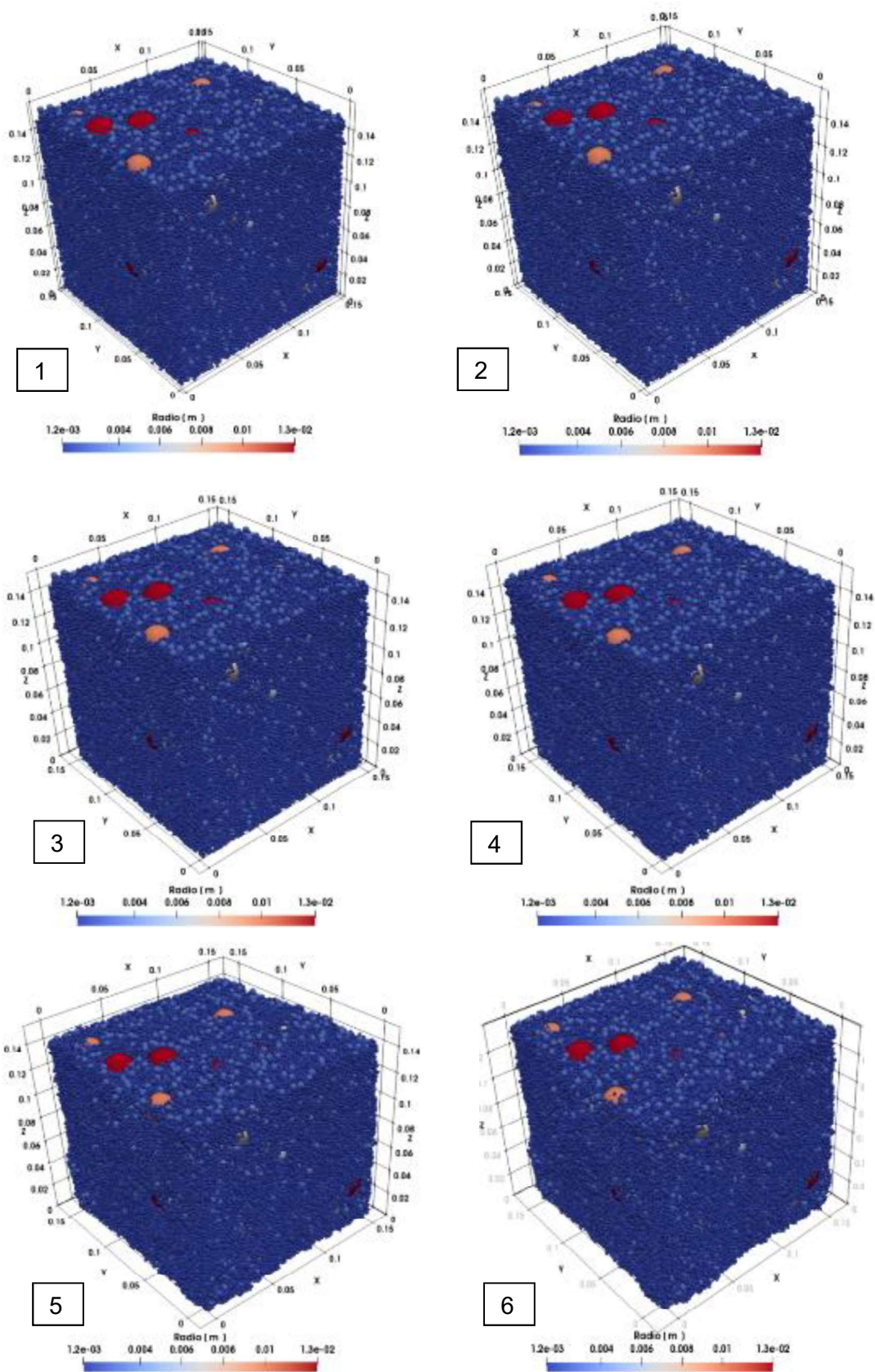
En la FIGURA 4.17 se muestra que para el tiempo 1 está el proceso de estabilización de las partículas, y las que más se están desplazando son las inferiores, en el tiempo 2 todas las partículas se están desplazando en todos los sentidos, existen zonas de mayor desplazamiento en la parte inferior derecha del conglomerado, en el tiempo 3 y 4 las partículas inferiores dejan de desplazarse progresivamente y son las partículas superiores las que desplazan rápidamente. A partir del tiempo 4 se puede notar la tendencia a generar el patrón de fractura triangular inferior visible en los tiempos 5 y 6.

En la FIGURA 4.18 se muestra el mismo comportamiento. Y en este punto es prudente destacar que las partículas que más se desplazan son las más pequeñas; que representan a la arena, mientras que las partículas representativas de grava no se desplazan sino hasta el tiempo 5 y 6; hacia los espacios dejados por la arena. También se identifica que las partículas de arena cercanas a las de grava no son capaces de empujarlas, por lo que se ven forzadas a rodearlas, este incremento progresivo en el desplazamiento lateral de la arena, ocasiona los primeros micro agrietamientos, que se propagan con el aumento de carga.

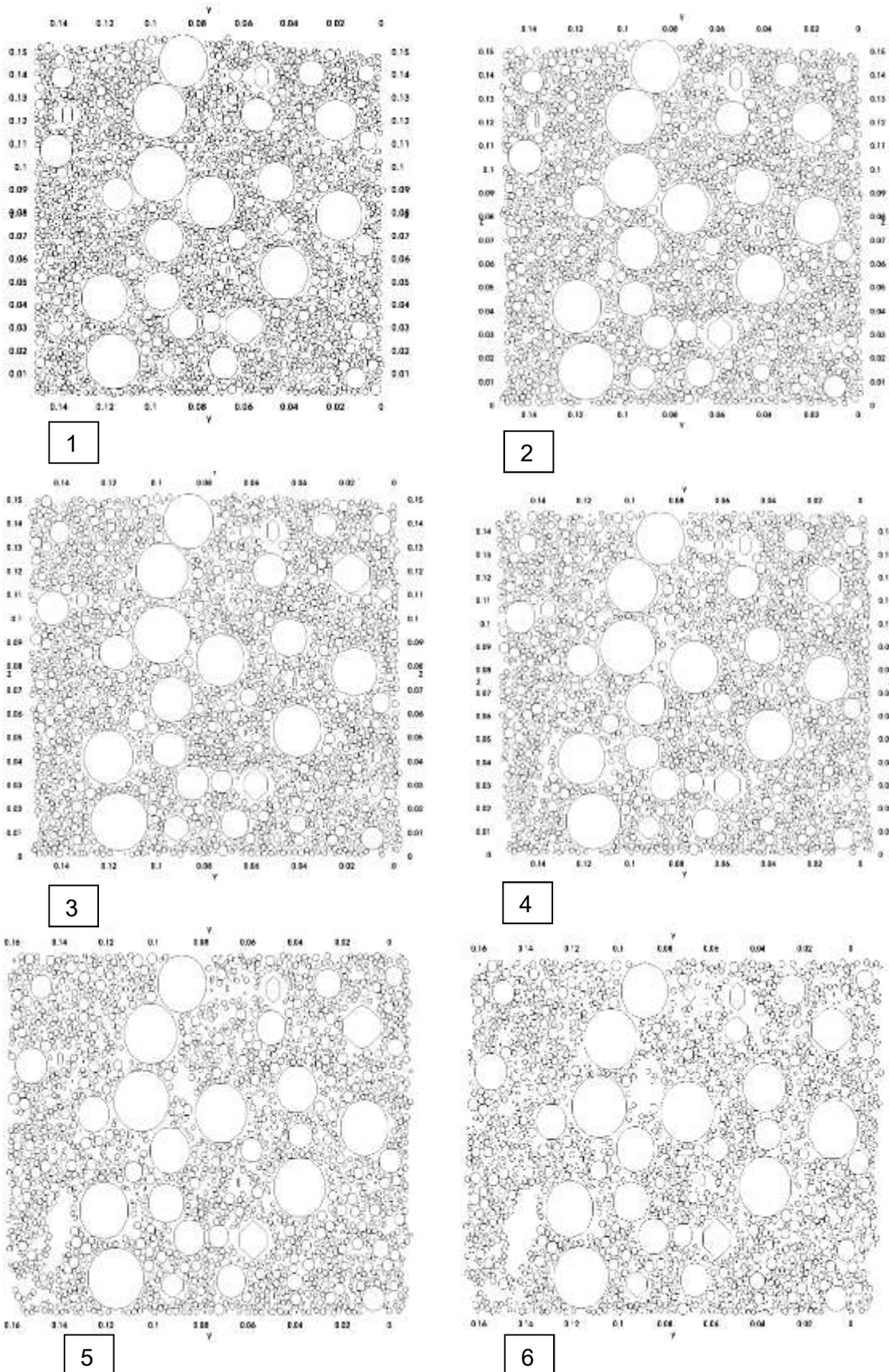
Entonces se puede interpretar que es adecuado tomar en cuenta el comportamiento del hormigón solamente hasta el tiempo 3 de carga, para el diseño estructural, ya que, si se toma el valor de resistencia del tiempo 4, se estaría garantizando el micro agrietamiento del elemento estructural. Se puede interpretar que del tiempo 3 al

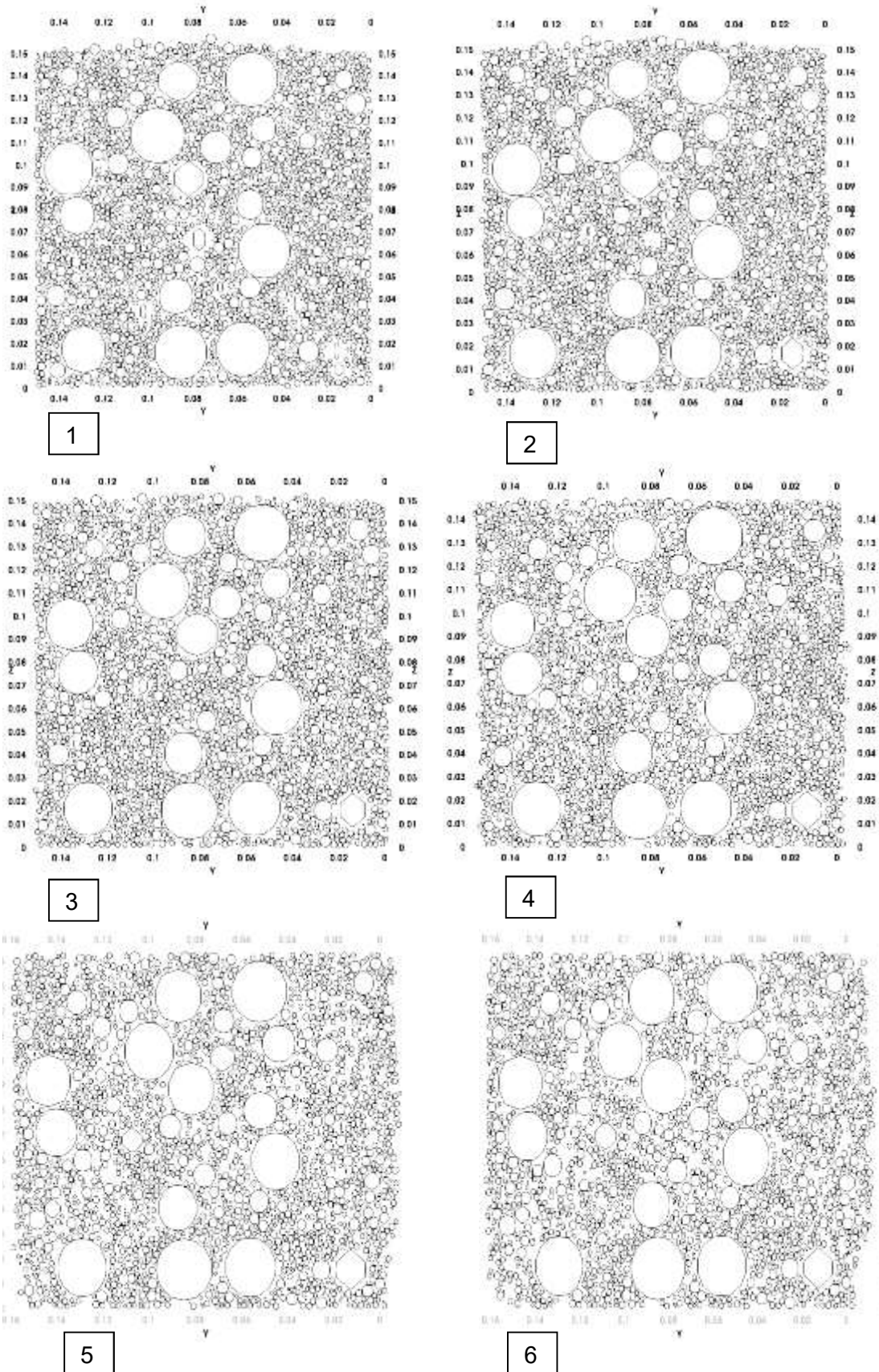
tiempo 4 empieza la fase de máxima capacidad, por lo que hasta esta capacidad uniaxial sería prudente evaluar los parámetros del hormigón que son aplicables al diseño de hormigón armado; interpretación de este trabajo, que se podría confirmar que sucede en la realidad mediante un experimento en el cual se pueda medir la traslación individual de agregado conformante.

FIGURA 4.13 Modelo hormigón A deformado en 3D

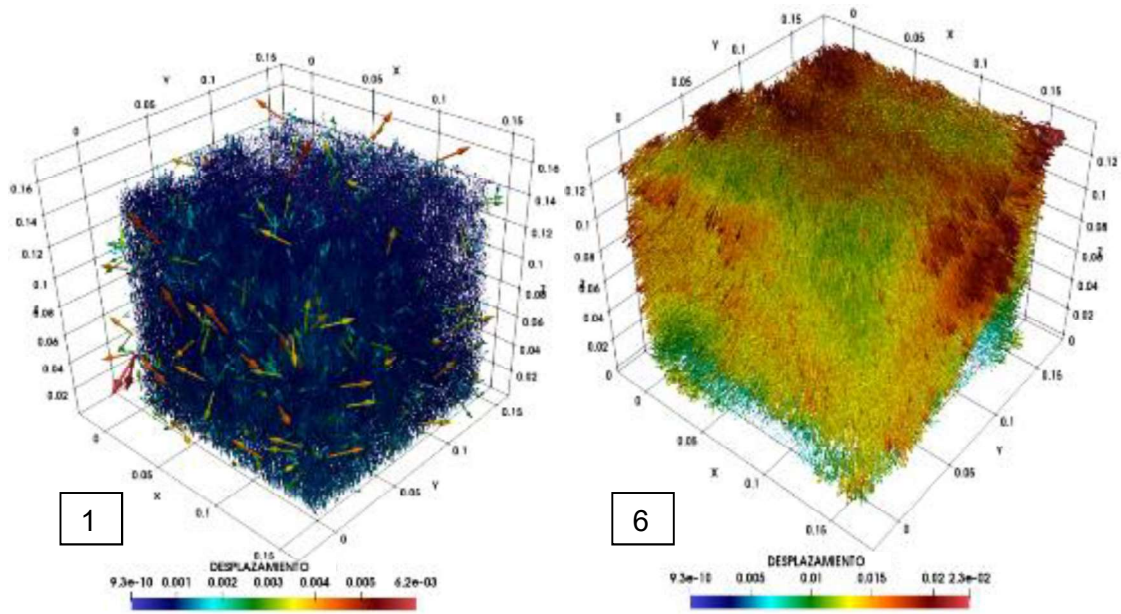


**FIGURA 4.14** Modelo hormigón A deformado en sección  $x=5\text{cm}$

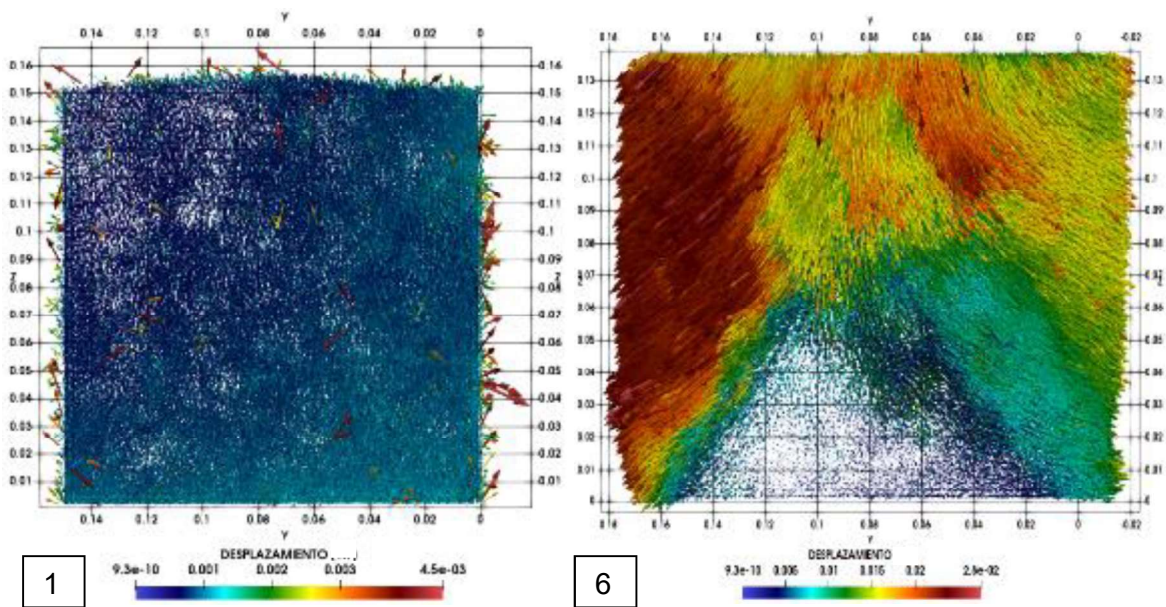


**FIGURA 4.15** Modelo hormigón A deformado en sección  $x=10\text{cm}$ 

**FIGURA 4.16** Vistas en 3D de desplazamiento total por partícula del hormigón A. Antes y al final de la compresión uniaxial.



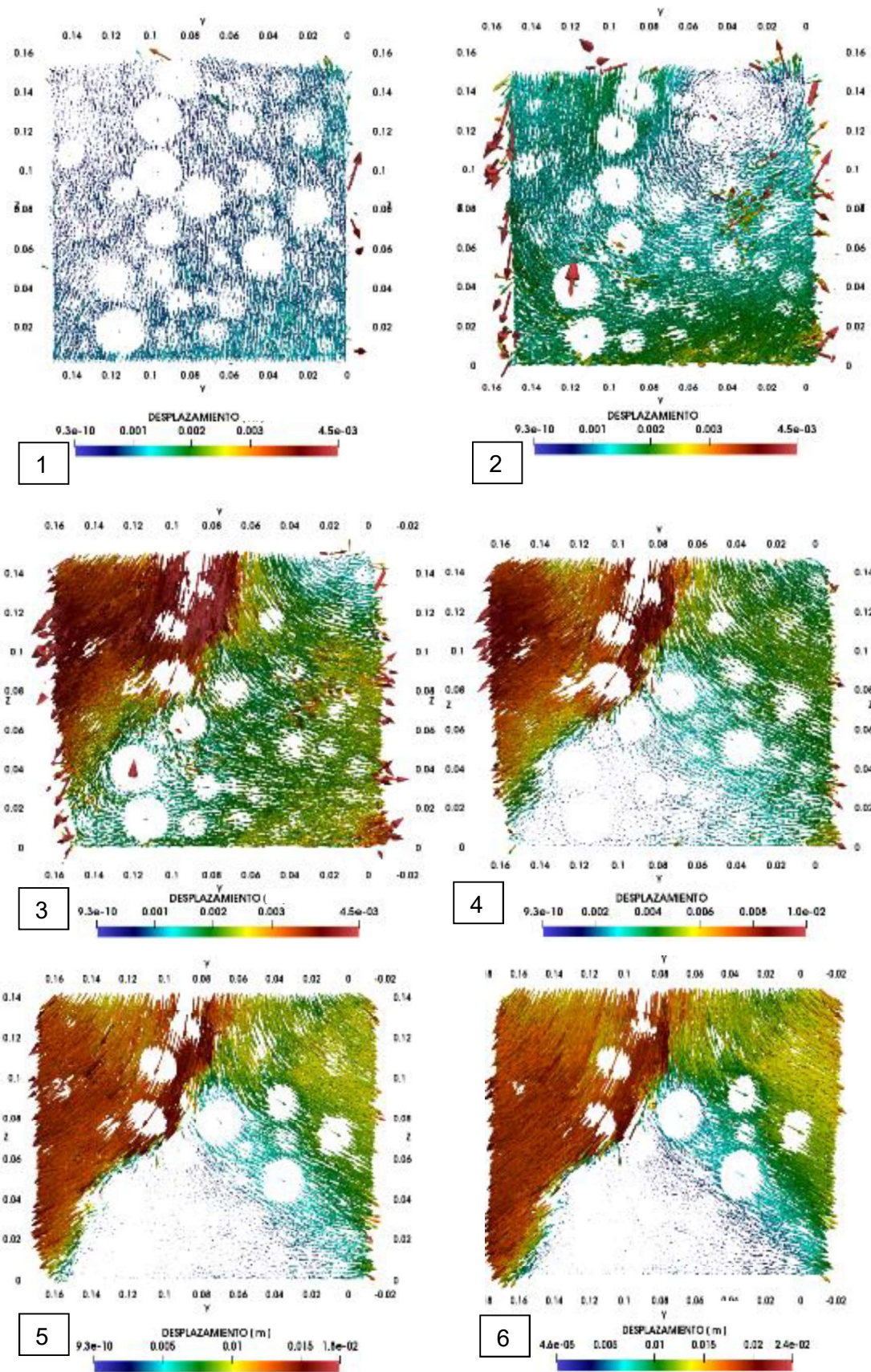
(a) Vista en 3D isométrico



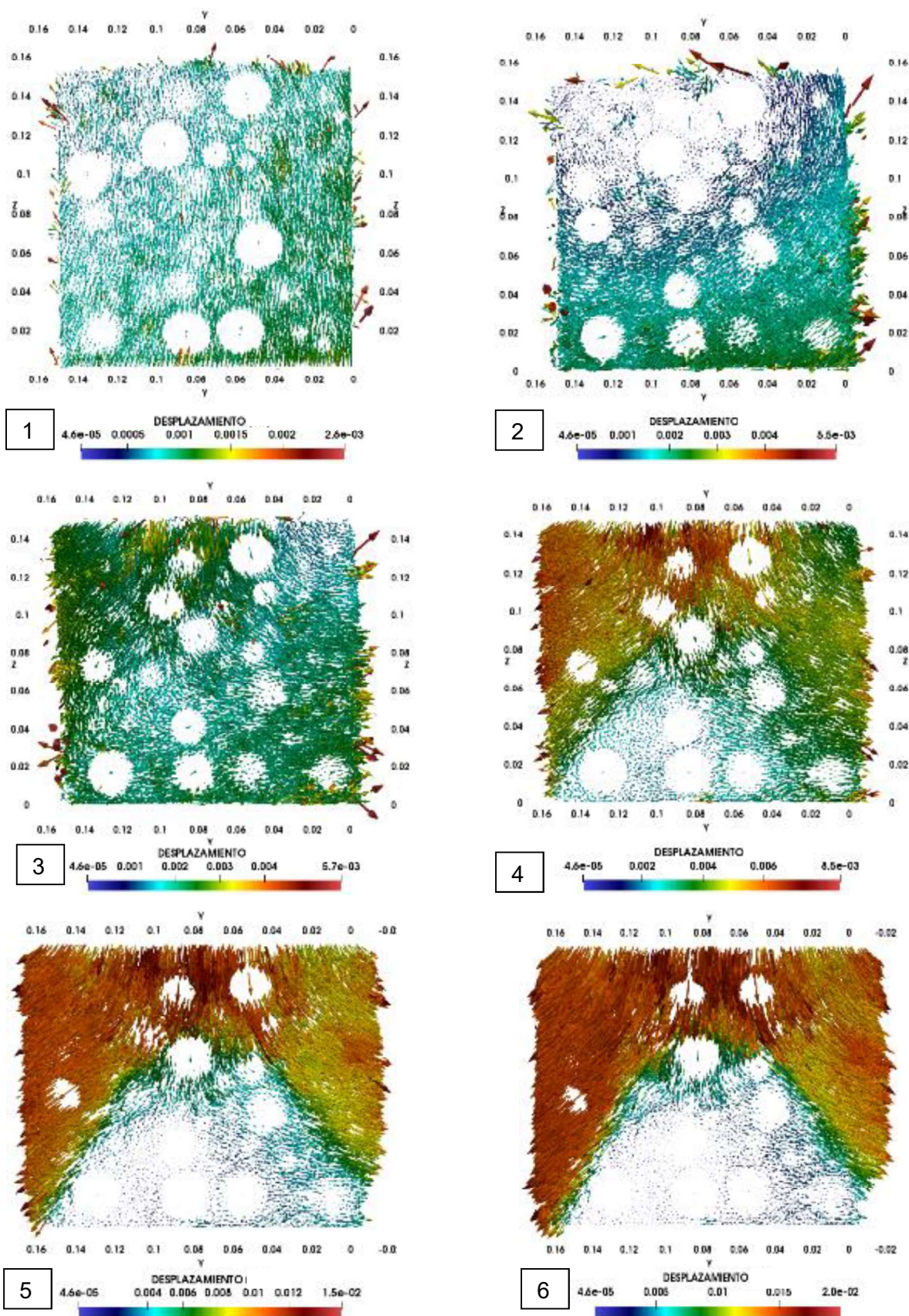
(b) Vista en 3D frontal



**FIGURA 4.17** Desplazamientos por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón A



**FIGURA 4.18** Desplazamientos por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón A



### 4.3.2 HORMIGÓN B

A continuación, se presenta la visualización del cambio volumétrico del conglomerado granular representativo del hormigón A para los tiempos descritos en la FIGURA 4.6. En la FIGURA 4.19 se presentan en 3D los cambios externos que sufre el ensamble en los puntos de interés. Hasta el tiempo 3 no hay deformaciones visibles; tiempo en el que el conglomerado es capaz de absorber carga manteniendo su estructura, a partir del tiempo 4 se presentan discontinuidades en la superficie, que son visibles en los tiempos 5 y 6; cuando el ensamble entra en proceso de desgaste y pierde estabilidad estructural.

Para visualizar los cambios que sufre el hormigón en su interior se han realizado dos cortes de sección, a 5cm y 10cm en la arista X del cubo, mostrados en las FIGURA 4.20 y FIGURA 4.21 respectivamente. En ambos casos se puede notar que conforme incrementa la carga, hasta el tiempo 3 la estructura del conglomerado se mantiene. A partir del tiempo 4; que es cuando se alcanza la máxima resistencia, el cubo se deforma tal que las partículas tienden a desplazarse hacia el exterior, generándose huecos internos entre las partículas de menor tamaño, que representan a la arena. Las separaciones visibles entre las partículas en los tiempos 5 y 6, son interpretadas como fisuras. Sin embargo, al tomar en cuenta el comportamiento de la curva de la FIGURA 4.6 es notorio que a partir del tiempo 4 existen discontinuidades, y disminuciones de capacidad producto de micro agrietamientos internos; separaciones entre las partículas más pequeñas, que son relevantes en el comportamiento de desgaste y que son visibles solamente al compararse con el conglomerado en el tiempo 1.

Las fisuras del hormigón tienen estrecha relación con el cambio de posición que sufren los agregados conformantes durante el proceso de carga. Es por ello que en la FIGURA 4.22 se presentan los desplazamientos totales de cada una de las partículas en un estado inicial y otro final (Tiempo 1 y tiempo 6 de la FIGURA 4.6), para dos diferentes enfoques de la vista en 3D del cubo. Se puede visualizar las zonas de mayor desplazamiento de partículas como flechas que indican dirección y magnitud del desplazamiento total producido hasta ese instante. En el tiempo 1 las partículas están en un proceso de estabilización por el incremento de carga

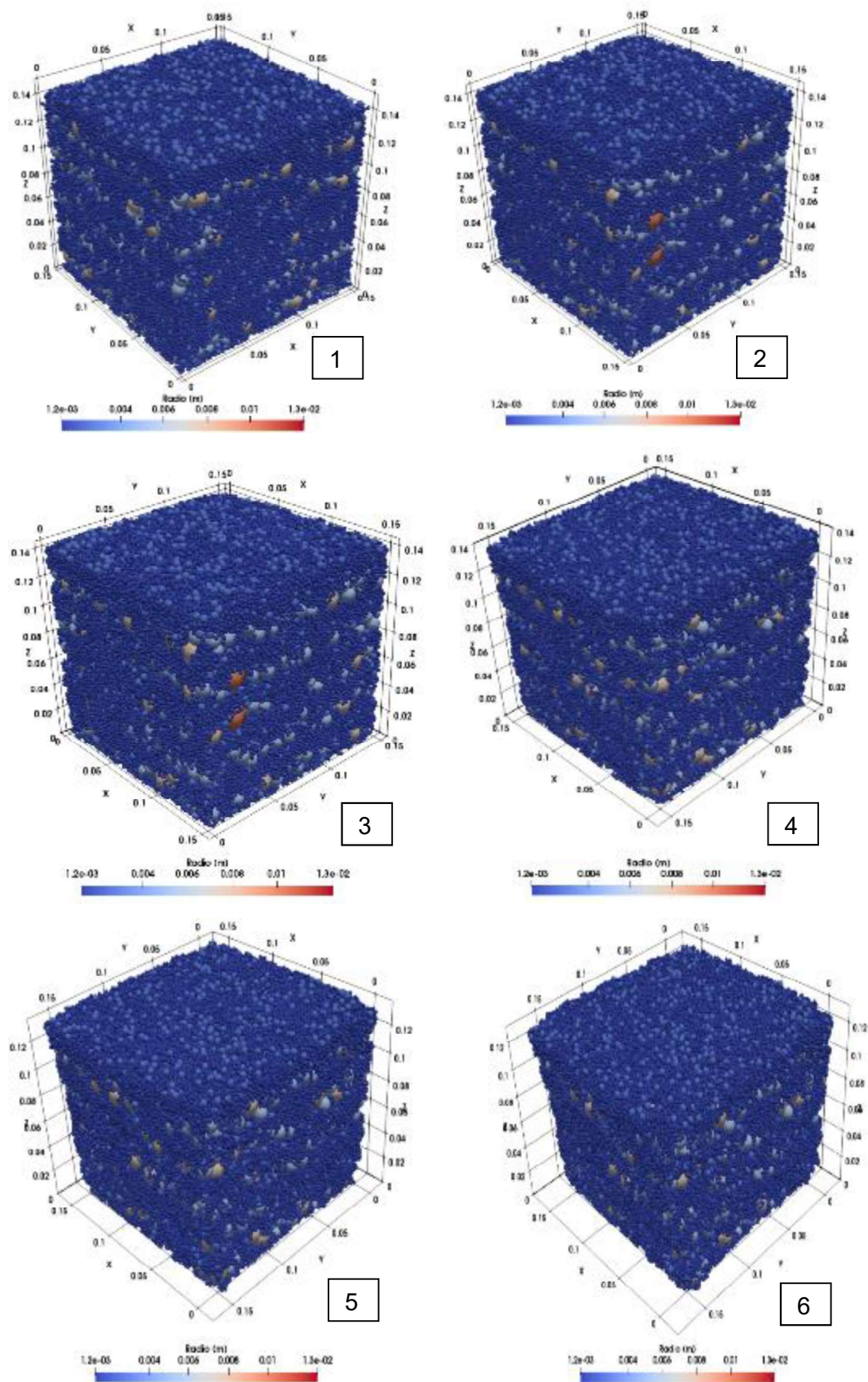
inicial, solamente algunas de ellas son desplazadas producto del pequeño movimiento de las otras. En el tiempo 6 las partículas superiores se han desplazado hacia abajo producto del aplastamiento, y las partículas exteriores de la izquierda son las que más se desplazan, por ende, son las más proclives a generar micro agrietamientos, es decir; que las fisuras se identificarán en estas zonas marcadas en rojo. En la parte inferior del cubo no se identifican grandes desplazamientos en relación a las zonas pintadas, y se forma un triángulo de ínfimos desplazamientos. Al relacionarlo con las formas de falla del hormigón detalladas en la norma ASTM C39/C39M-18, se puede identificar que el modelo DEM generado se comporta con el patrón de fractura Tipo 2 (Ver FIGURA 2.20).

Un seguimiento más detallado de los desplazamientos por partícula internos a través de los puntos de interés se muestra en las FIGURA 4.23 y FIGURA 4.24; que son secciones a 5cm y 10cm en la arista X del cubo respectivamente.

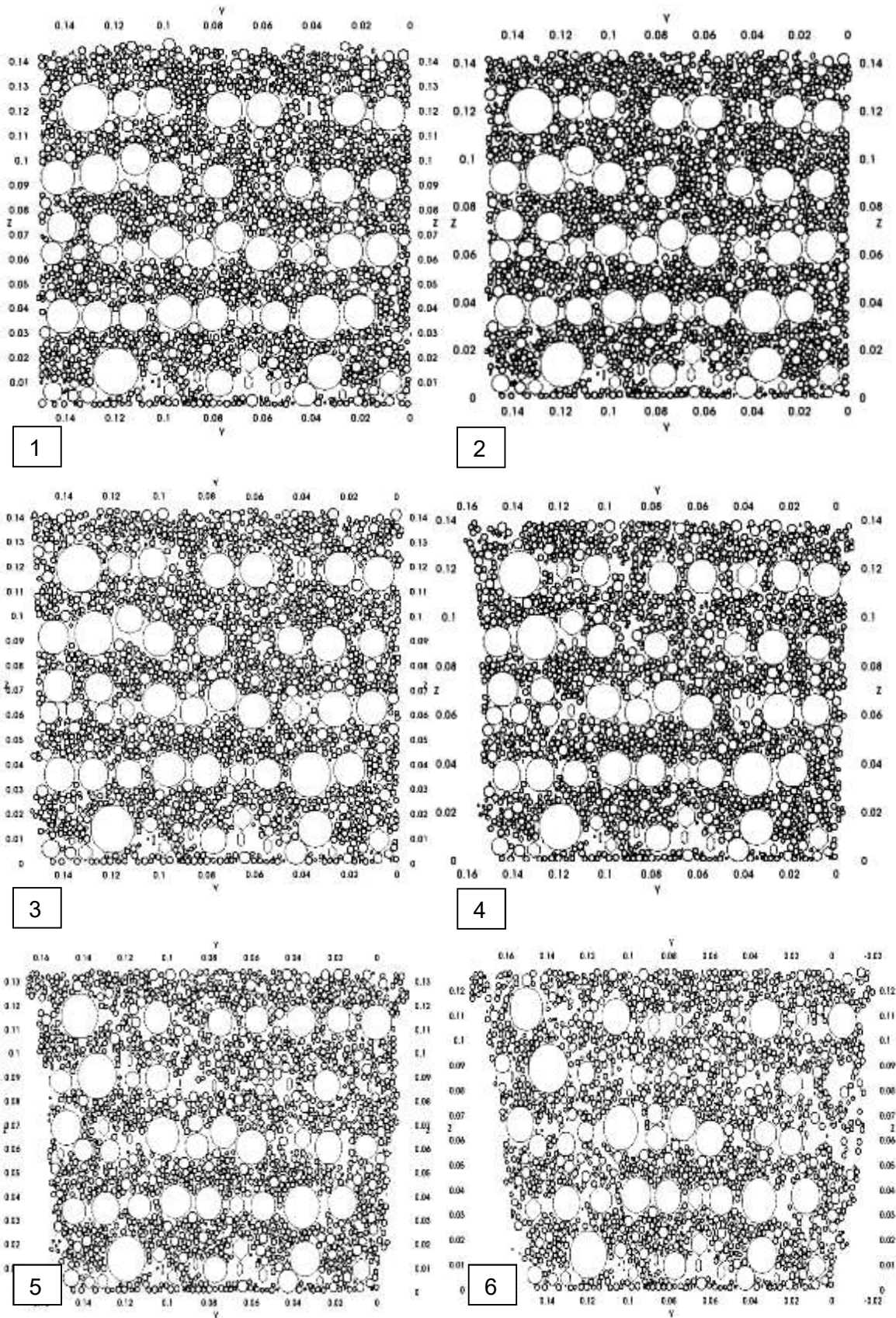
En la FIGURA 4.23 se muestra que para el tiempo 1 está el proceso de estabilización de las partículas, y las que más se están desplazando son las inferiores, en el tiempo 2 todas las partículas se están desplazando en todos los sentidos, existen zonas de mayor desplazamiento en la parte superior izquierda del conglomerado, en el tiempo 3 y 4 las partículas inferiores dejan de desplazarse progresivamente y son las partículas superiores las que desplazan rápidamente. A partir del tiempo 4 se puede notar la tendencia a generar el patrón de fractura triangular inferior visible en los tiempos 5 y 6.

En la FIGURA 4.24 se muestra el mismo comportamiento. Y en este punto es prudente destacar que las partículas que más se desplazan son las más pequeñas; que representan a la arena, mientras que las partículas representativas de grava no se desplazan sino hasta el tiempo 5 y 6; hacia los espacios dejados por la arena. También se identifica que las partículas de arena cercanas a las de grava no son capaces de empujarlas, por lo que se ven forzadas a rodearlas, este incremento progresivo en el desplazamiento lateral de la arena, ocasiona los primeros micro agrietamientos, que se propagan con el aumento de carga.

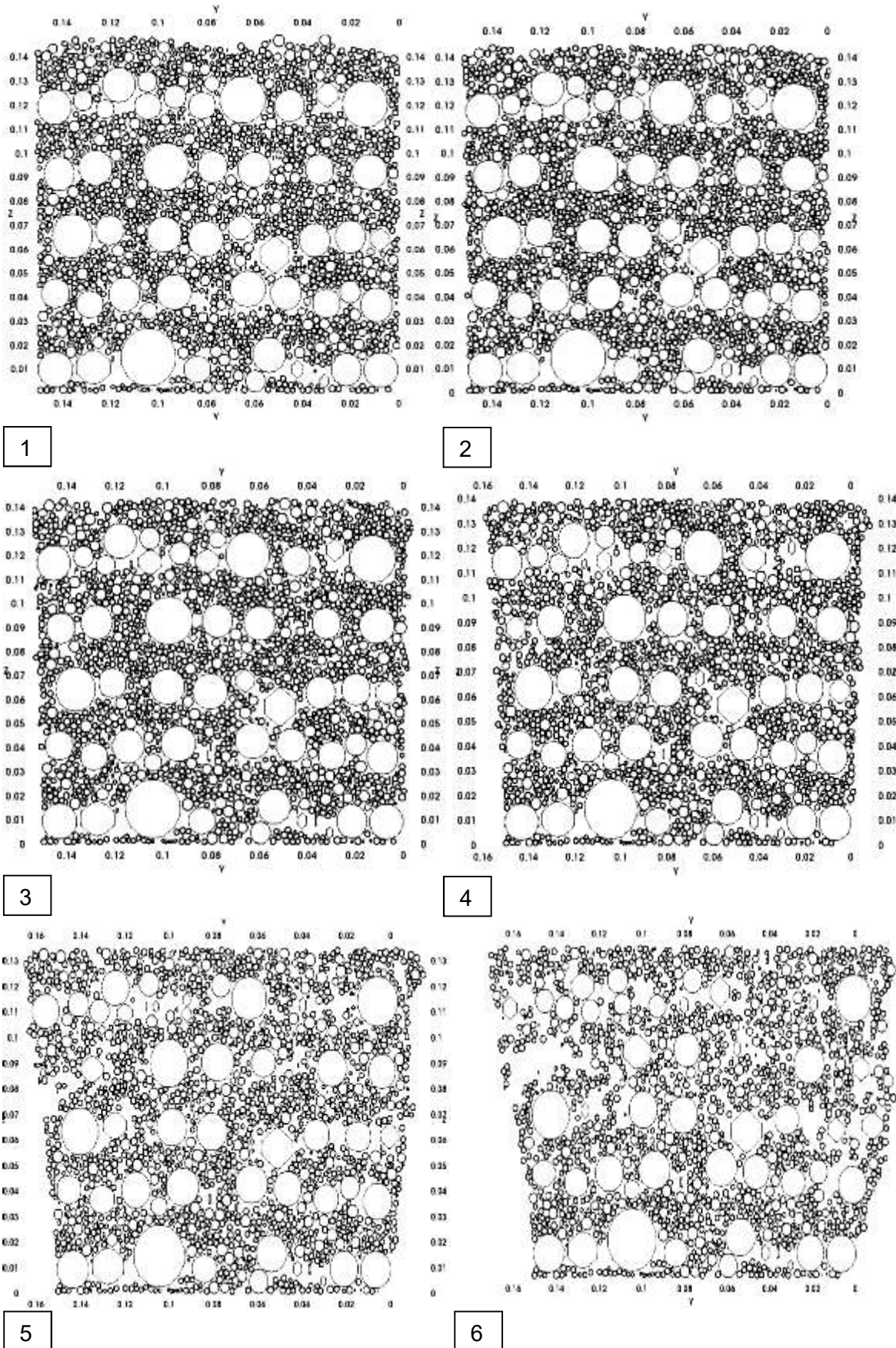
Entonces se puede interpretar que es adecuado tomar en cuenta el comportamiento del hormigón solamente hasta el tiempo 3 de carga, para el diseño estructural, ya que, si se toma el valor de resistencia del tiempo 4, se estaría garantizando el micro agrietamiento del elemento estructural. Se puede interpretar que del tiempo 3 al tiempo 4 empieza la fase de máxima capacidad, por lo que hasta esta capacidad uniaxial sería prudente evaluar los parámetros del hormigón que son aplicables al diseño de hormigón armado; interpretación de este trabajo, que se podría confirmar que sucede en la realidad mediante un experimento en el cual se pueda medir la traslación individual de agregado conformante.

**FIGURA 4.19** Modelo hormigón B deformado en 3D.

**FIGURA 4.20** Modelo hormigón B deformado en sección  $x=5\text{cm}$

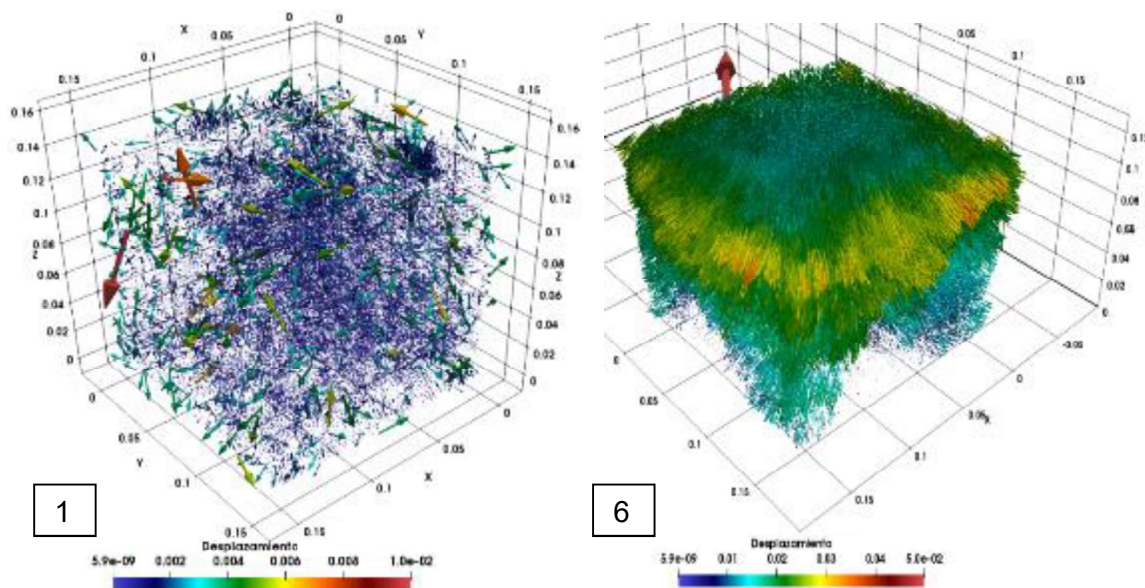


**FIGURA 4.21** Modelo hormigón B deformado en sección  $x=10\text{cm}$

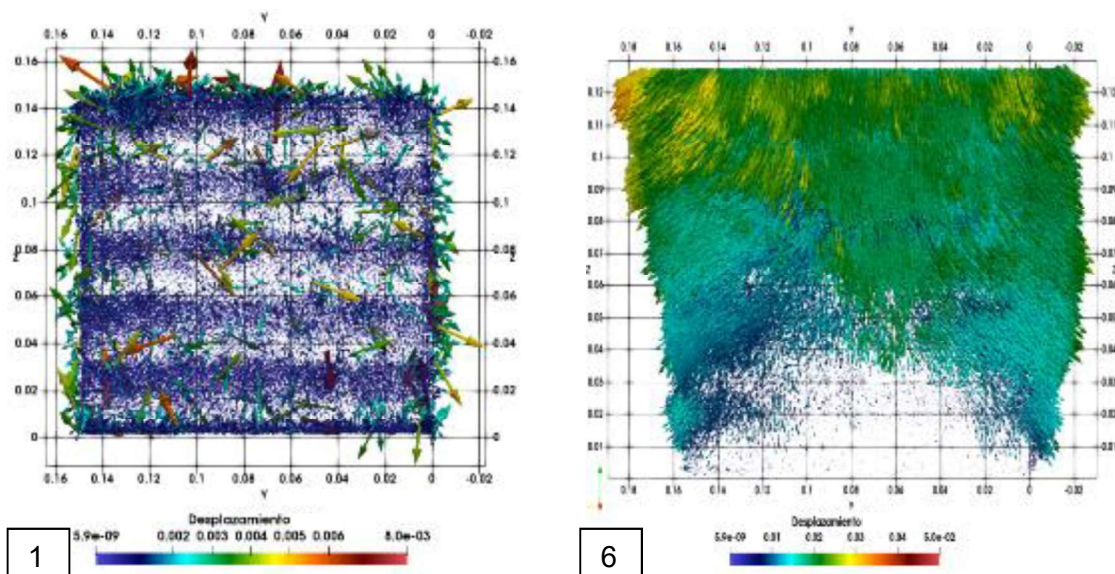




**FIGURA 4.22** Vistas en 3D de desplazamiento total por partícula del hormigón B. Antes y al final de la compresión uniaxial.

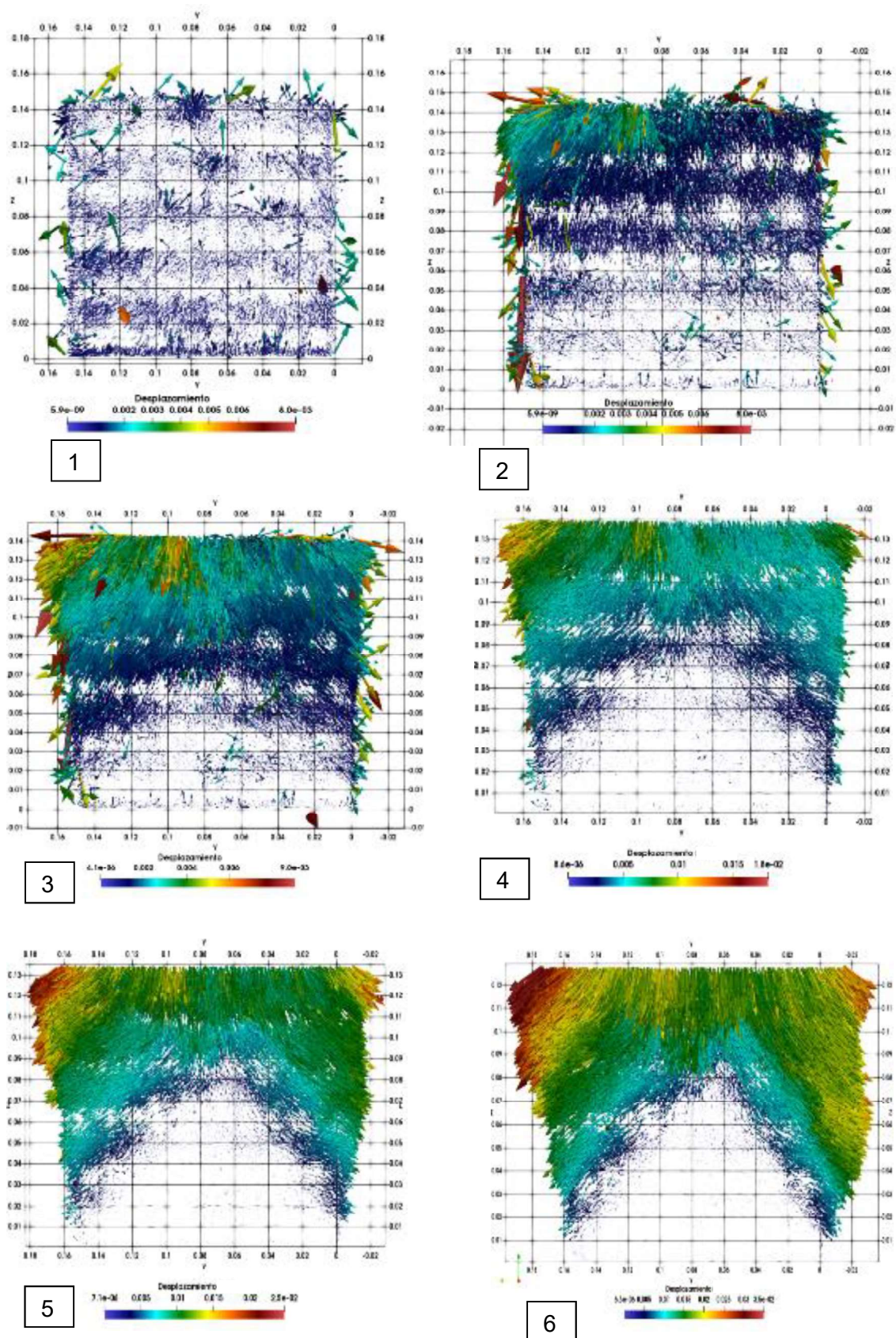


(a) Vista en 3D isométrico

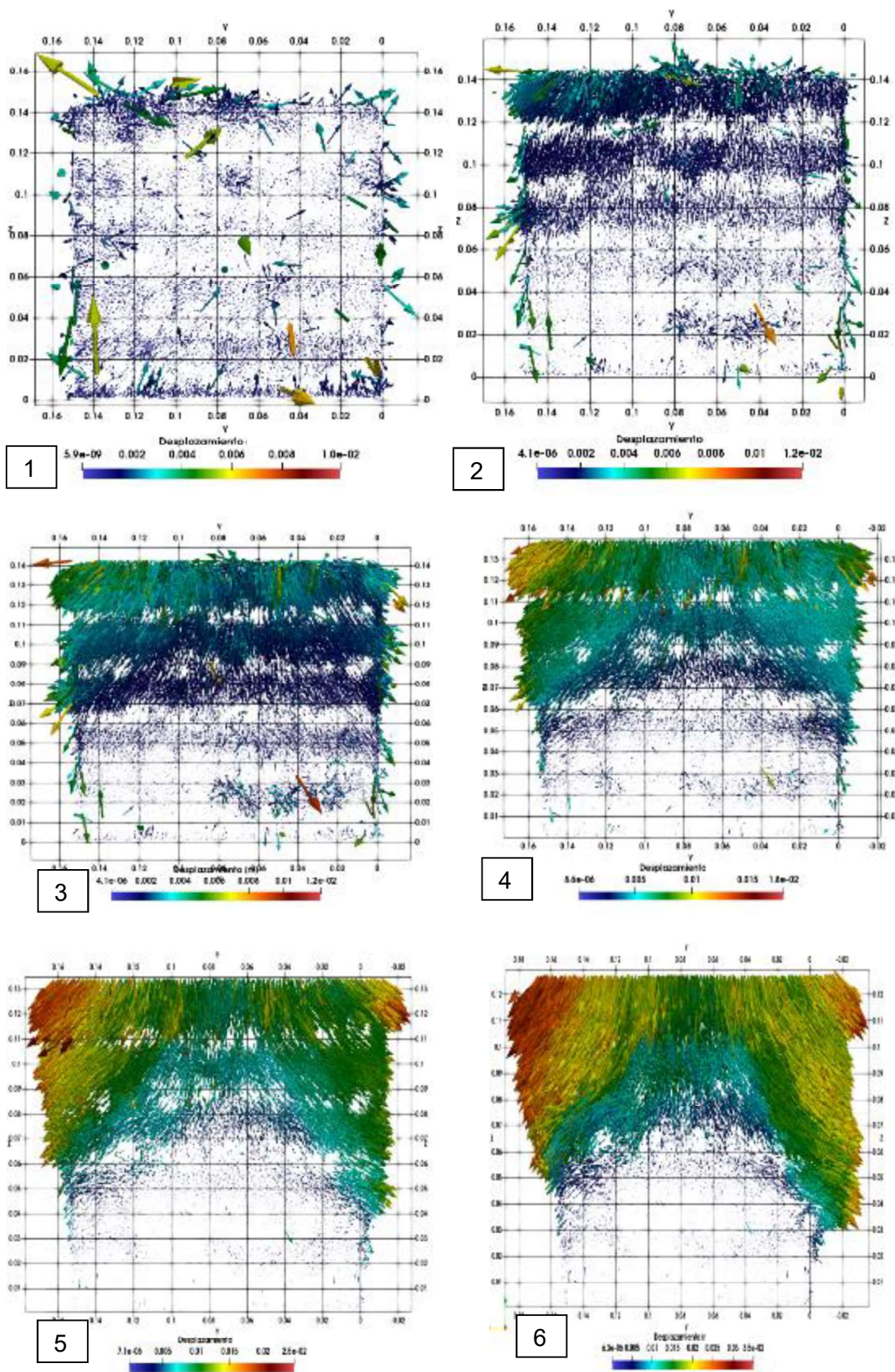


(b) Vista en 3D frontal

**FIGURA 4.23** Desplazamientos por partícula en sección x=5cm en hormigón B



**FIGURA 4.24** Desplazamientos por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  en hormigón B



### 4.3.3 HORMIGÓN C

A continuación, se presenta la visualización del cambio volumétrico del conglomerado granular representativo del hormigón A para los tiempos descritos en la FIGURA 4.9. En la FIGURA 4.25 se presentan en 3D los cambios externos que sufre el ensamble en los puntos de interés. Hasta el tiempo 3 no hay deformaciones visibles; tiempo en el que el conglomerado es capaz de absorber carga manteniendo su estructura, a partir del tiempo 4 se presentan discontinuidades en la superficie, que son visibles en los tiempos 5 y 6; cuando el ensamble entra en proceso de desgaste y pierde estabilidad estructural.

Para visualizar los cambios que sufre el hormigón en su interior se han realizado dos cortes de sección, a 5cm y 10cm en la arista X del cubo, mostrados en las FIGURA 4.26 y FIGURA 4.27 respectivamente. En ambos casos se puede notar que conforme incrementa la carga, hasta el tiempo 3 la estructura del conglomerado se mantiene. A partir del tiempo 4; que es cuando se alcanza la máxima resistencia, el cubo se deforma tal que las partículas tienden a desplazarse hacia el exterior, generándose huecos internos entre las partículas de menor tamaño, que representan a la arena. Las separaciones visibles entre las partículas en los tiempos 5 y 6, son interpretadas como fisuras. Sin embargo, al tomar en cuenta el comportamiento de la curva de la FIGURA 4.9 es notorio que a partir del tiempo 4 existen discontinuidades, y disminuciones de capacidad producto de micro agrietamientos internos; separaciones entre las partículas más pequeñas, que son relevantes en el comportamiento de desgaste y que son visibles solamente al compararse con el conglomerado en el tiempo 1.

Las fisuras del hormigón tienen estrecha relación con el cambio de posición que sufren los agregados conformantes durante el proceso de carga. Es por ello que en la FIGURA 4.28 se presentan los desplazamientos totales de cada una de las partículas en un estado inicial y otro final (Tiempo 1 y tiempo 6 de la FIGURA 4.9), para dos diferentes enfoques de la vista en 3D del cubo. Se puede visualizar las zonas de mayor desplazamiento de partículas como flechas que indican dirección y magnitud del desplazamiento total producido hasta ese instante. En el tiempo 1 las partículas están en un proceso de estabilización por el incremento de carga

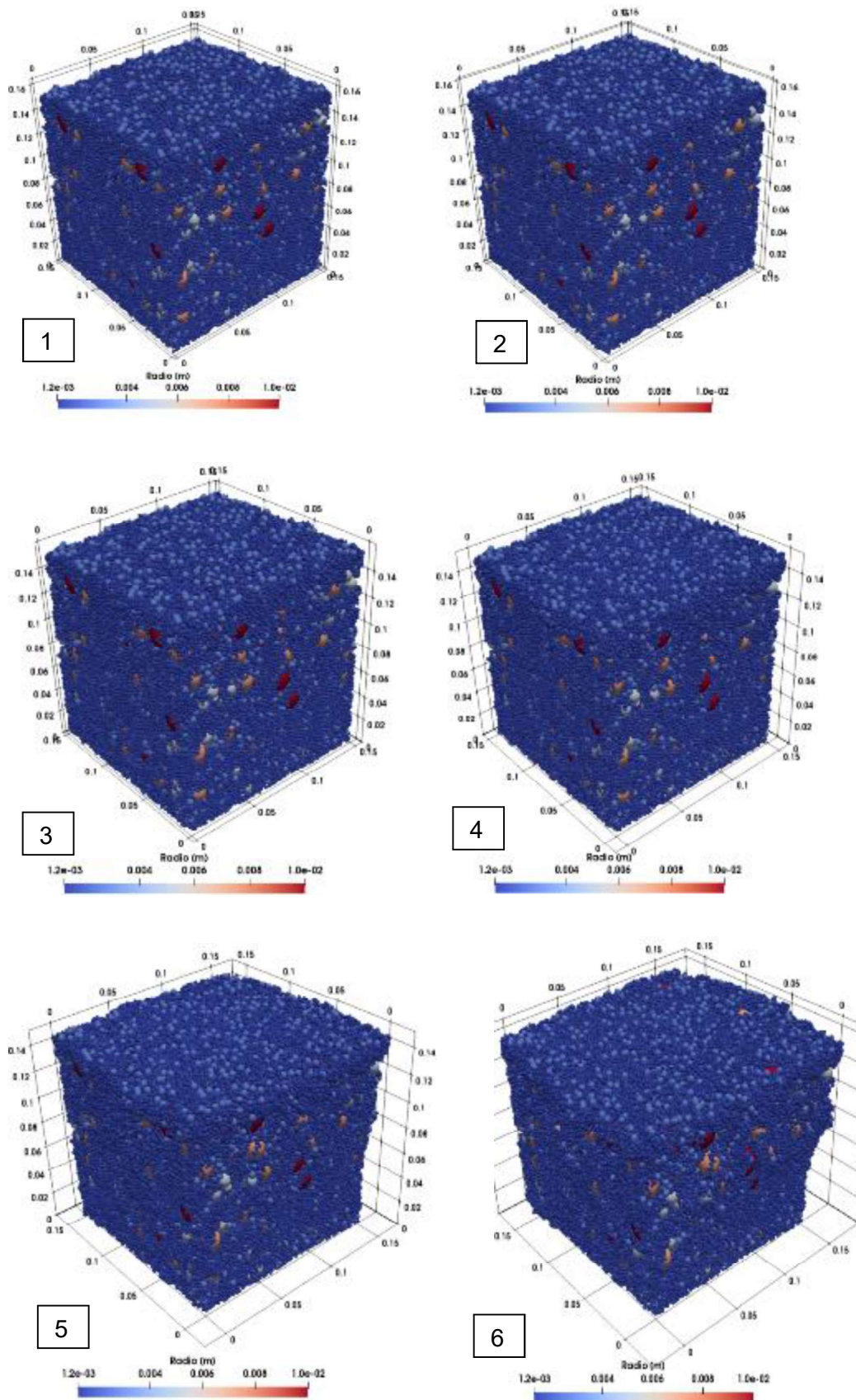
inicial, solamente algunas de ellas son desplazadas producto del pequeño movimiento de las otras. En el tiempo 6 las partículas superiores se han desplazado hacia abajo producto del aplastamiento, y las partículas exteriores de la derecha son las que más se desplazan, por ende, son las más proclives a generar micro agrietamientos, es decir; que las fisuras se identificarán en estas zonas marcadas en rojo. En la parte inferior del cubo no se identifican grandes desplazamientos en relación a las zonas pintadas, y se forma un triángulo de ínfimos desplazamientos. Al relacionarlo con las formas de falla del hormigón detalladas en la norma ASTM C39/C39M-18, se puede identificar que el modelo DEM generado se comporta con el patrón de fractura Tipo 2 (Ver FIGURA 2.20).

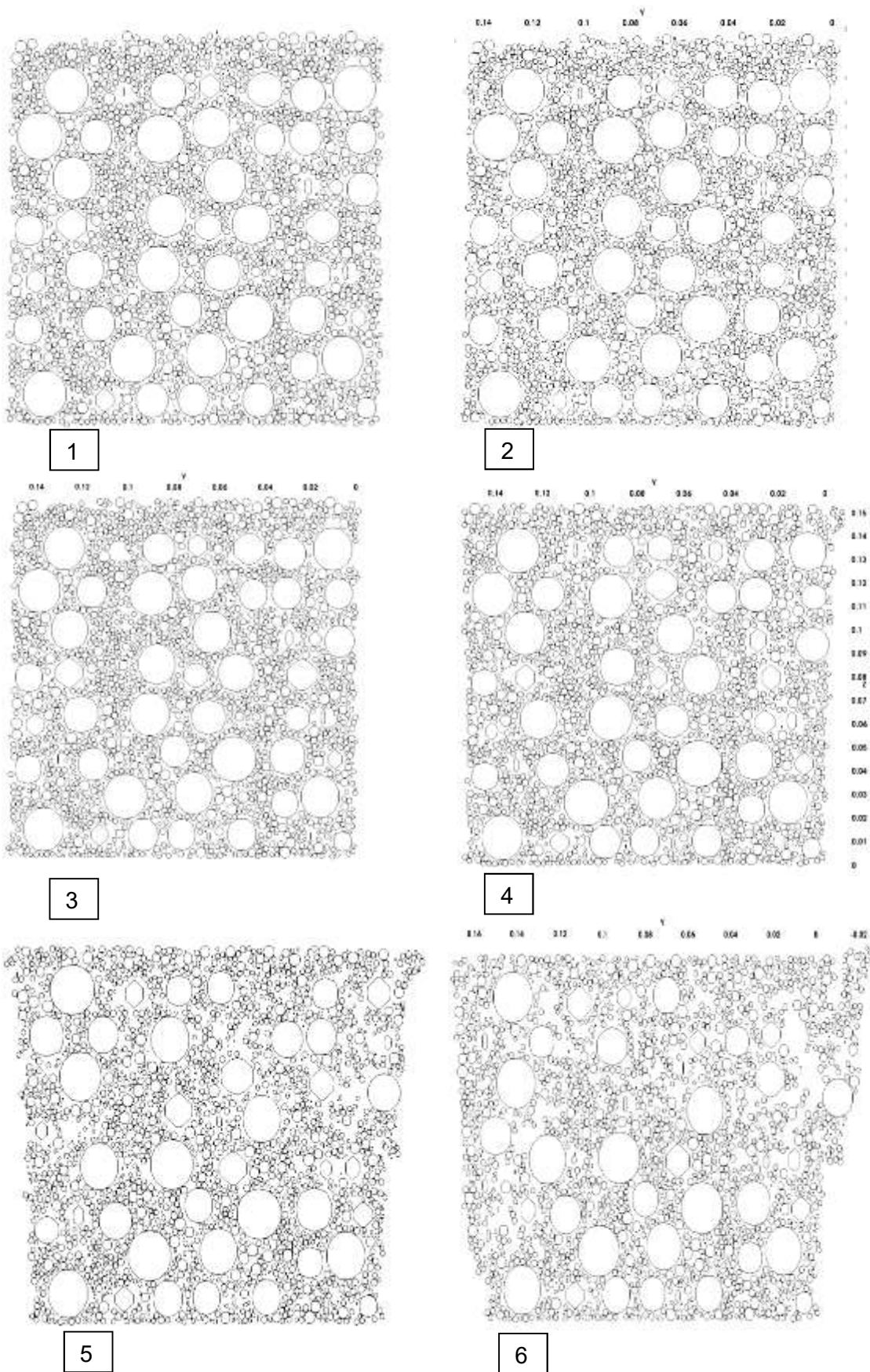
Un seguimiento más detallado de los desplazamientos por partícula internos a través de los puntos de interés se muestra en las FIGURA 4.29 y FIGURA 4.30; que son secciones a 5cm y 10cm en la arista X del cubo respectivamente.

En la FIGURA 4.29 se muestra que para el tiempo 1 está el proceso de estabilización de las partículas, y las que más se están desplazando son las superiores, en el tiempo 2 todas las partículas se están desplazando en todos los sentidos, existen zonas de mayor desplazamiento en la parte derecha y superior del conglomerado, en el tiempo 3 y 4 las partículas inferiores dejan de desplazarse progresivamente y son las partículas superiores las que desplazan rápidamente. A partir del tiempo 4 se puede notar la tendencia a generar el patrón de fractura triangular inferior visible en los tiempos 5 y 6.

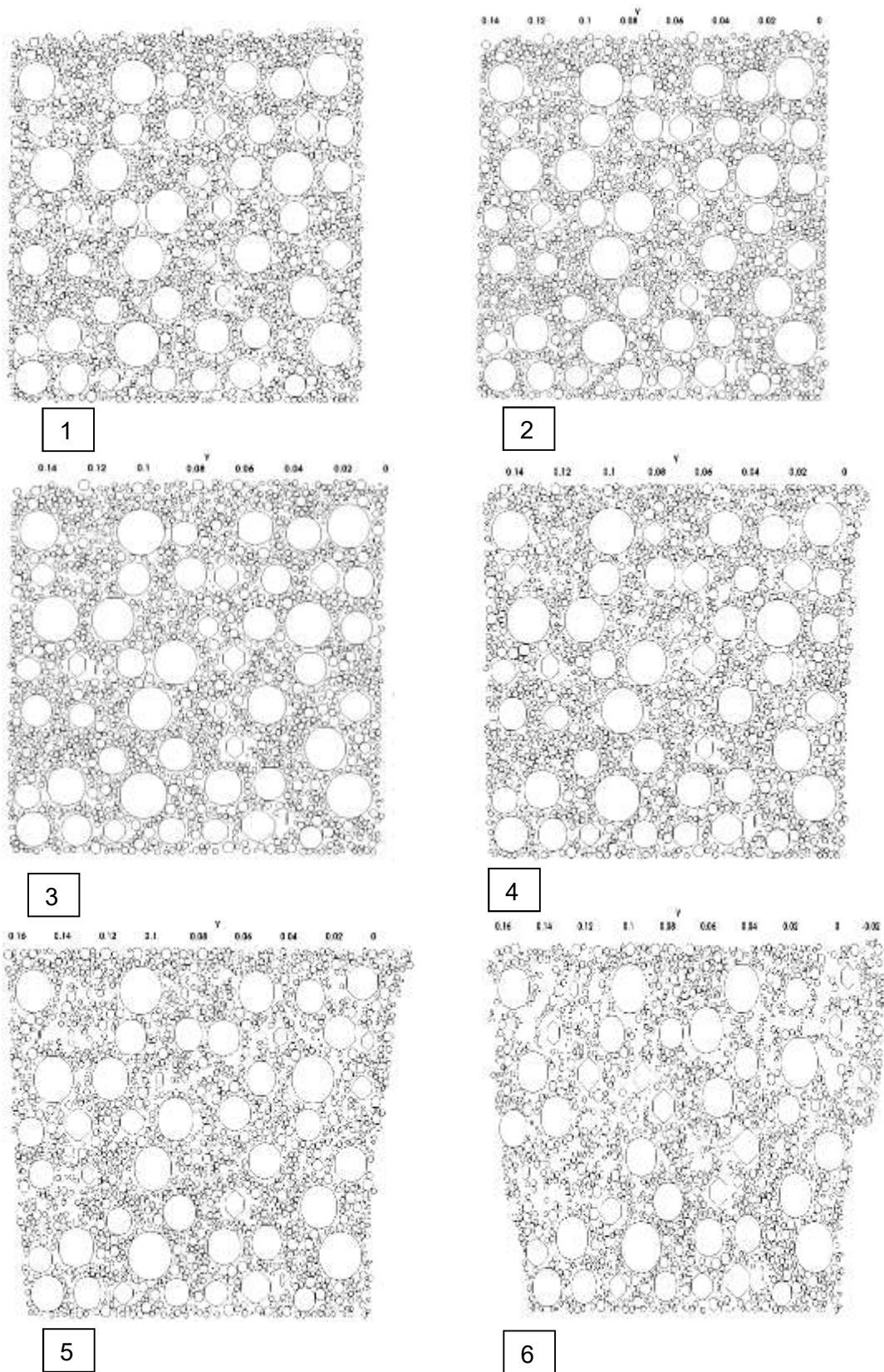
En la FIGURA 4.30 se muestra el mismo comportamiento. Y en este punto es prudente destacar que las partículas que más se desplazan son las más pequeñas; que representan a la arena, mientras que las partículas representativas de grava no se desplazan sino hasta el tiempo 5 y 6; hacia los espacios dejados por la arena. También se identifica que las partículas de arena cercanas a las de grava no son capaces de empujarlas, por lo que se ven forzadas a rodearlas, este incremento progresivo en el desplazamiento lateral de la arena, ocasiona los primeros micro agrietamientos, que se propagan con el aumento de carga.

Entonces se puede interpretar que es adecuado tomar en cuenta el comportamiento del hormigón solamente hasta el tiempo 3 de carga, para el diseño estructural, ya que, si se toma el valor de resistencia del tiempo 4, se estaría garantizando el micro agrietamiento del elemento estructural. Se puede interpretar que del tiempo 3 al tiempo 4 empieza la fase de máxima capacidad, por lo que hasta esta capacidad uniaxial sería prudente evaluar los parámetros del hormigón que son aplicables al diseño de hormigón armado; interpretación de este trabajo, que se podría confirmar que sucede en la realidad mediante un experimento en el cual se pueda medir la traslación individual de agregado conformante.

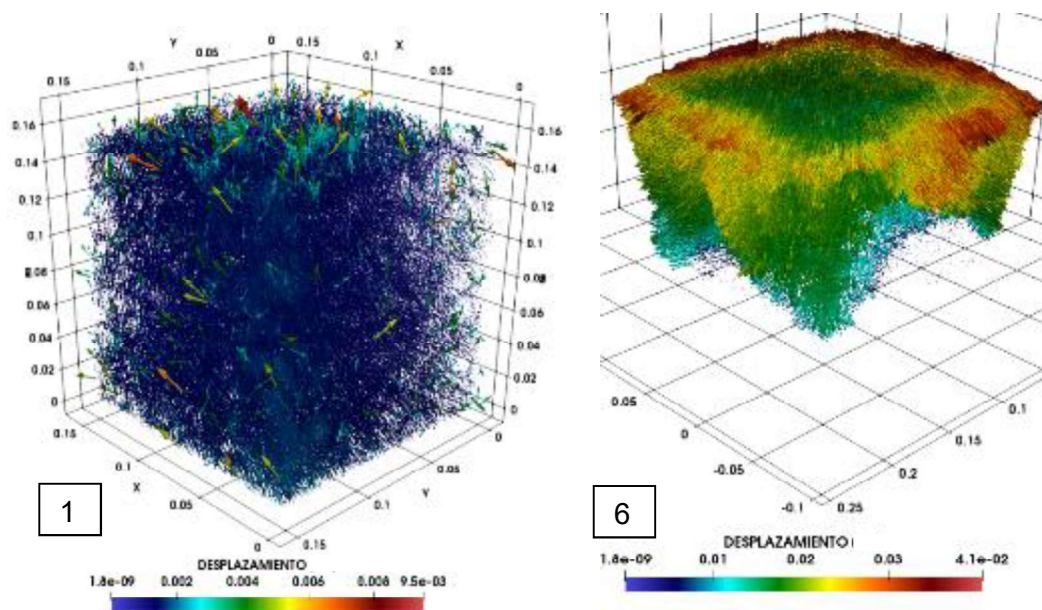
**FIGURA 4.25** Modelo hormigón C deformado en 3D.

**FIGURA 4.26** Modelo hormigón C deformado en sección x=5cm

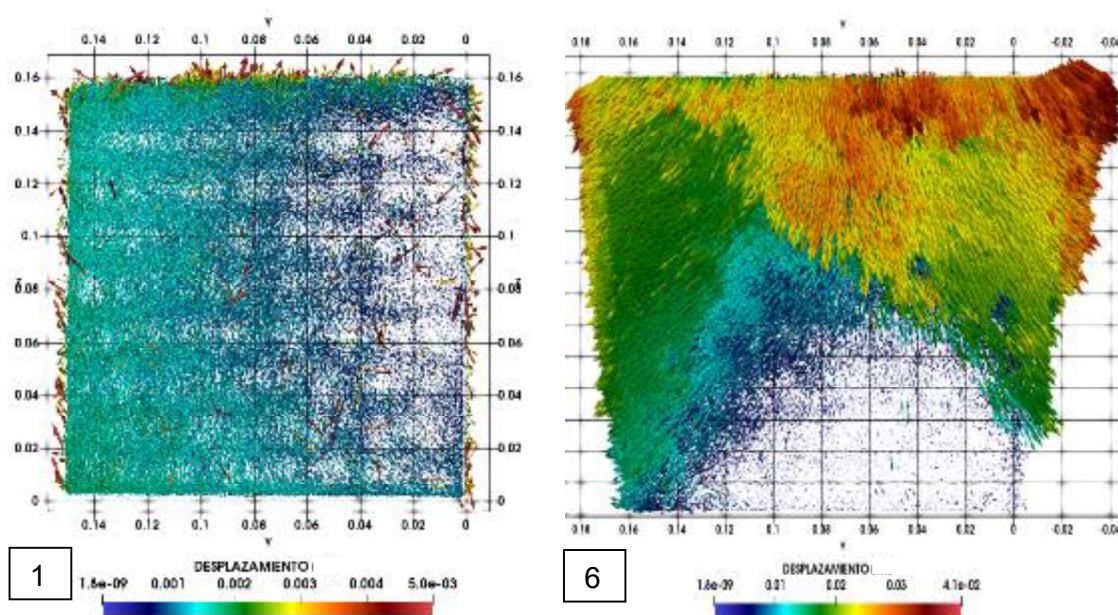


**FIGURA 4.27** Modelo hormigón C deformado en sección  $x=10\text{cm}$ 

**FIGURA 4.28** Vistas en 3D de desplazamiento total por partícula del hormigón C. Antes y al final de la compresión uniaxial.

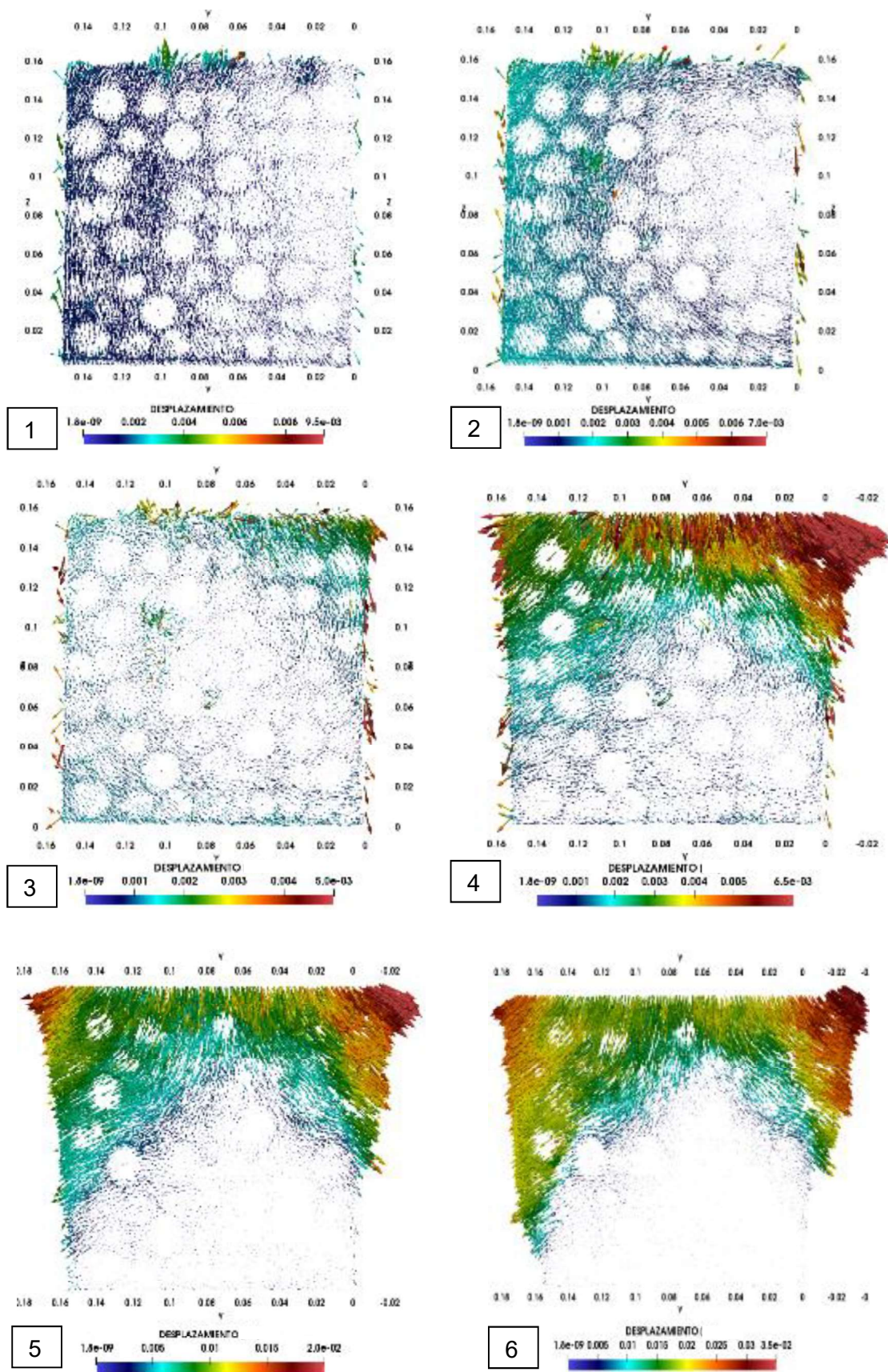


(a) Vista 3D isométrico

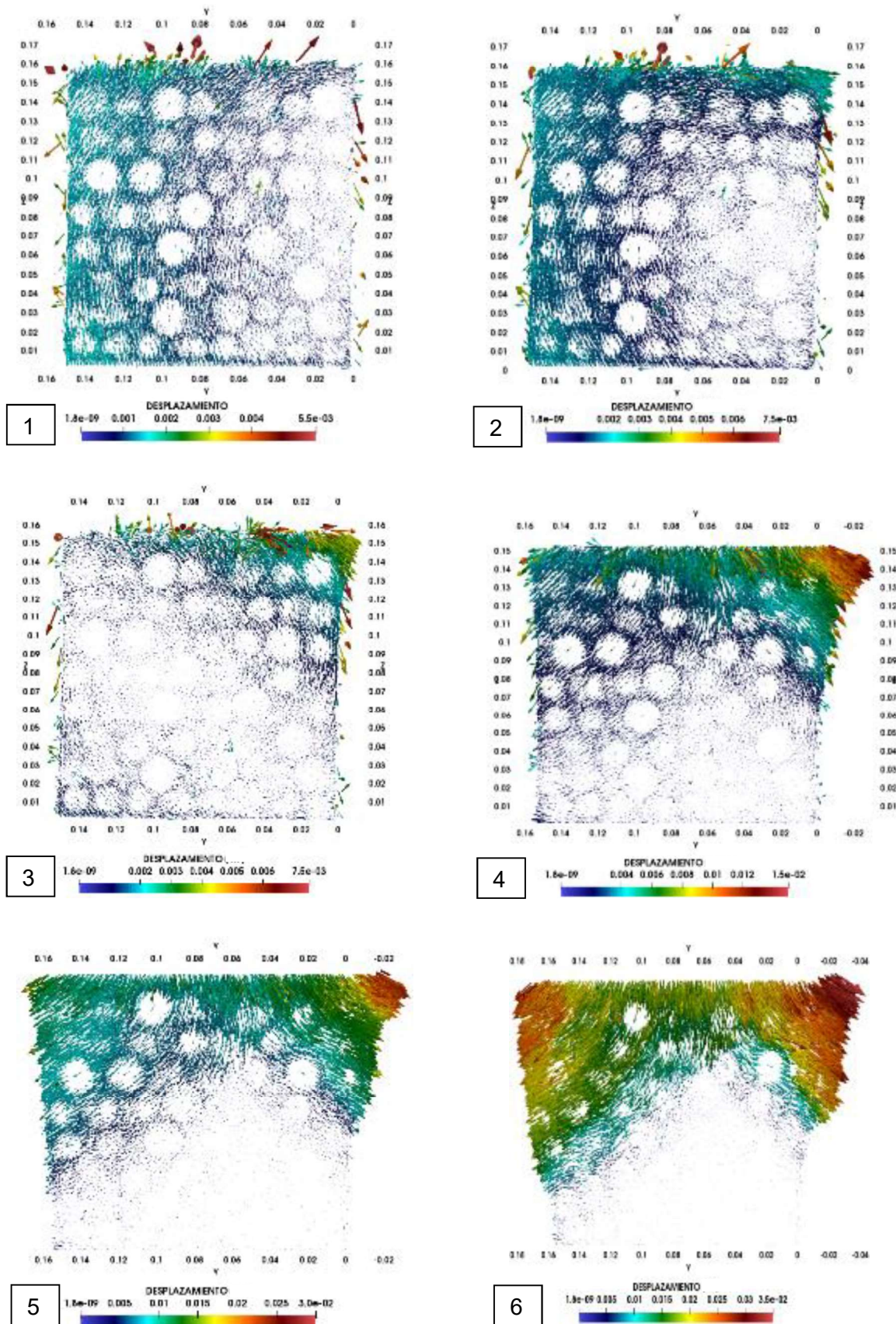


(b) Vista 3D frontal

**FIGURA 4.29** Desplazamientos por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  en hormigón C



**FIGURA 4.30** Desplazamientos por partícula en sección x=10cm en hormigón C



## 4.4 CADENAS DE FUERZAS

En esta sección se describen los resultados de las fuerzas de contacto; representados como cadenas de fuerzas. Las mismas se presentan como esquemas de redes de fuerza de secciones interiores en el conglomerado; escogidos arbitrariamente a 5 cm y 10 cm en la arista X del cubo, así como a 14 cm (Ya que aquí se presentaba los mayores desplazamientos por partícula) y a 10 cm (Ya que aquí se presenta menores desplazamientos por partícula) en la arista Z del cubo.

### 4.4.1 HORMIGÓN A

En la FIGURA 4.31 se presentan vistas del cubo de hormigón en 3D, para el tiempo de interés 1 y 6, de acuerdo a lo expuesto en la FIGURA 4.3. Del que se puede visualizar la forma de las redes de fuerza al inicio y final del proceso de carga, es posible evidenciar la deformación que se produce en el conglomerado como un conjunto, así como las cadenas de fuerza tienden a tomar forma y convertirse en redes interconectadas.

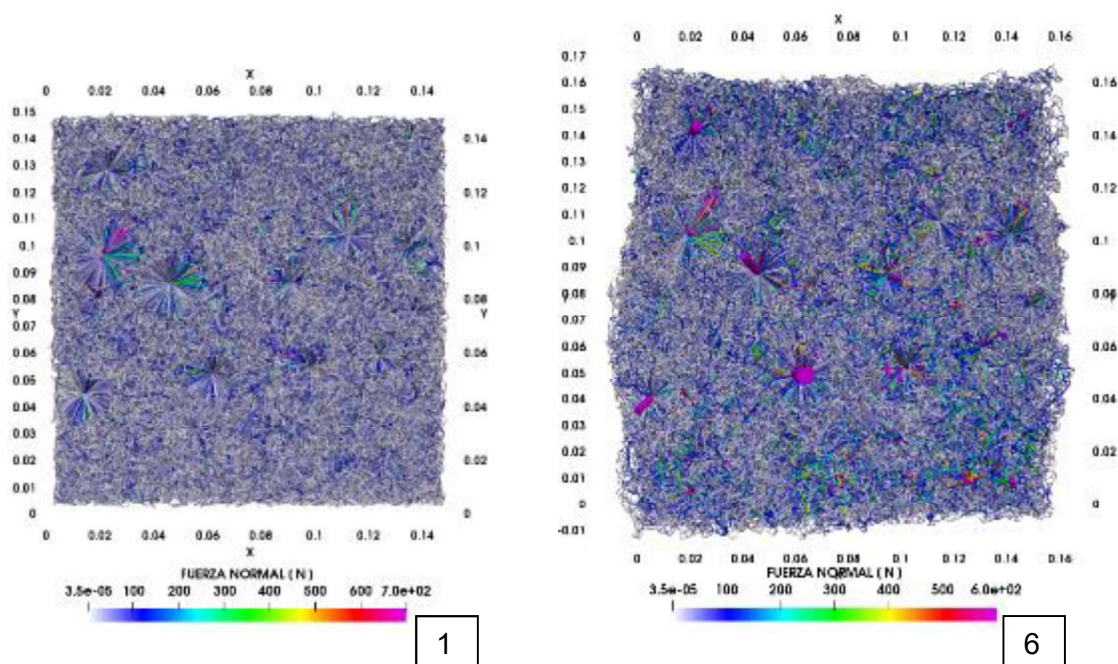
Para visualizar la interacción de las cadenas de fuerzas interiores del modelo, se han realizado cortes a 5 cm y 10 cm al cubo de hormigón. En las FIGURA 4.32 y FIGURA 4.33 se puede ver que existe la tendencia a que las redes de fuerza se concentren en el agregado grueso, hasta el tiempo 3 se tiene que las redes de fuerza en rojo crece progresivamente y es el principal potencial de resistencia uniaxial. Mientras que a partir del tiempo 4 se pierde capacidad debido al desplazamiento del agregado fino; que provoca el desenlace de cadenas de fuerza resistentes, por lo que se hace una redistribución de cadenas de fuerza, haciendo que la concentración de ellas se vaya perdiendo de las partículas iniciales y sean otras partículas las que asuman cadenas de fuerza mayores. Sin embargo, durante todo el proceso de carga existe la tendencia de que las mayores cadenas de fuerza se concentren en el agregado grueso y que las redes de fuerza que se rompan correspondan al agregado fino.

En los tiempos de interés 5 y 6 se evidencia que se generan huecos, desarrollados progresivamente por los micro agrietamientos producto del desplazamiento del

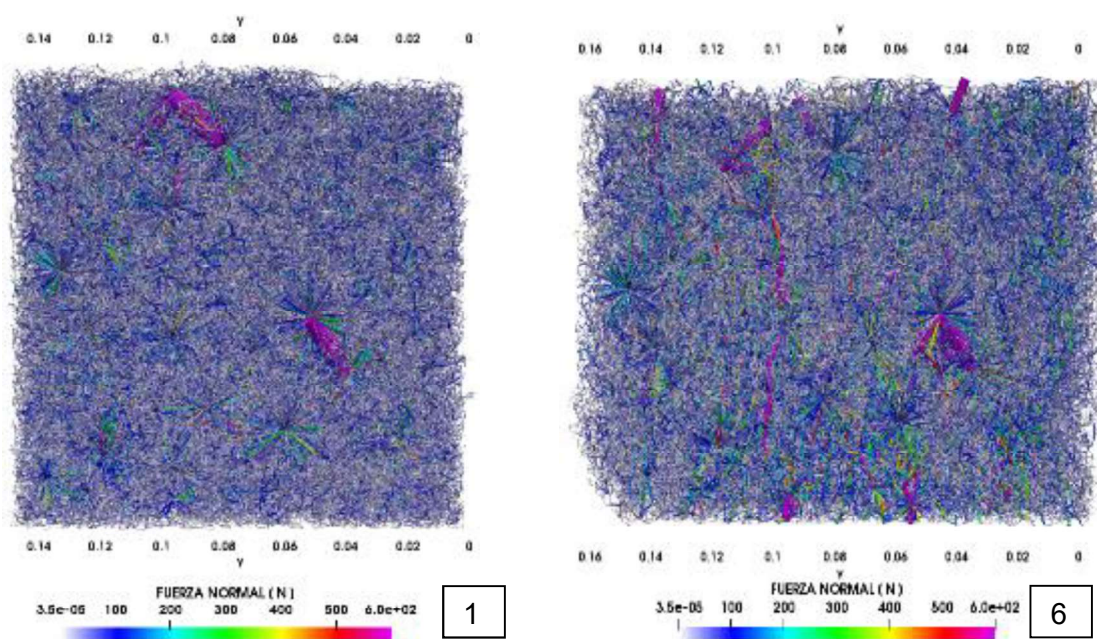
agregado fino, tales discontinuidades de las redes de fuerza se interpretan como fisuras macroscópicas. Los desenlaces en las redes de fuerza tienden a ser en forma diagonal al cubo, lo que se puede relacionar con las FIGURA 4.17 y FIGURA 4.18 en donde se evidencia la tendencia del desplazamiento de partículas tal que se genera un triángulo inferior.

En la FIGURA 4.34 y FIGURA 4.35 se tienen cortes en planta a  $z=14\text{cm}$  y  $z=10\text{cm}$  respectivamente, en donde el interés es observar la interacción de las cadenas de fuerza como distribución por zonas, las cuales indican que existe concentración de fuerzas en el agregado grueso, y que aunque lateralmente el enlace JKR es confinante no es relevante en la capacidad uniaxial del hormigón. De igual manera se evidencia el crecimiento de la magnitud de fuerza hasta el tiempo 3 conforme incrementa la carga, para luego, a partir del tiempo 4, se desarrolle la redistribución de cadenas de fuerza conforme incrementan de tamaño los huecos interpretados como fisuras. En estas vistas se identifica que a pesar de que los desenlaces de redes de fuerza se producen en todo el cubo de hormigón, las mayores deformaciones se trasladan hacia los bordes del mismo, este resultado se relaciona al comportamiento de desplazamientos identificado en la FIGURA 4.16; en la cual se nota que la mayor tendencia de desplazamiento se concentra en los bordes exteriores del cubo.

**FIGURA 4.31** Vistas en 3D de cadenas de fuerza del hormigón A, en planta (a) y en elevación (b). Antes y al final de la compresión uniaxial.

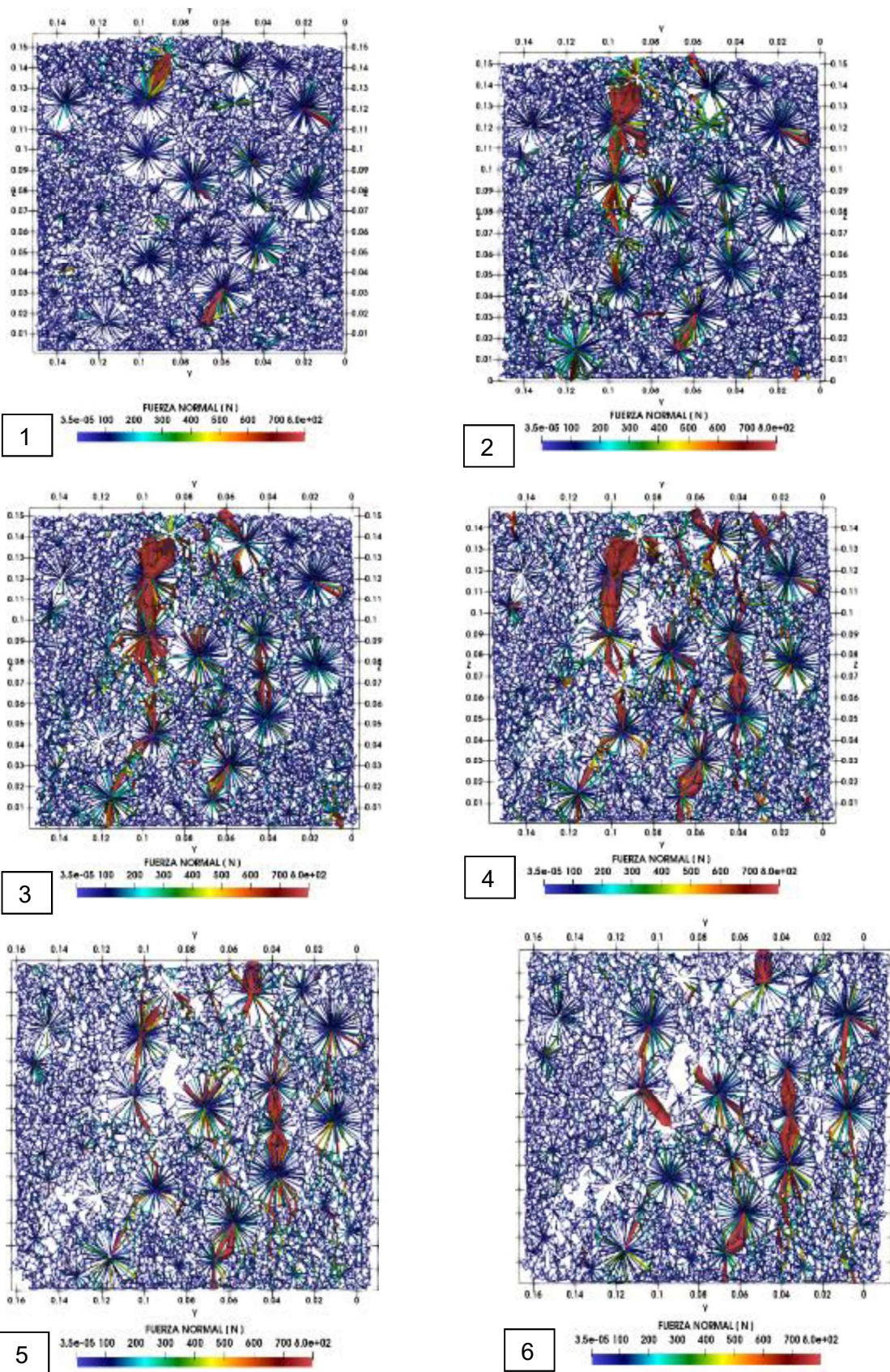


(a)



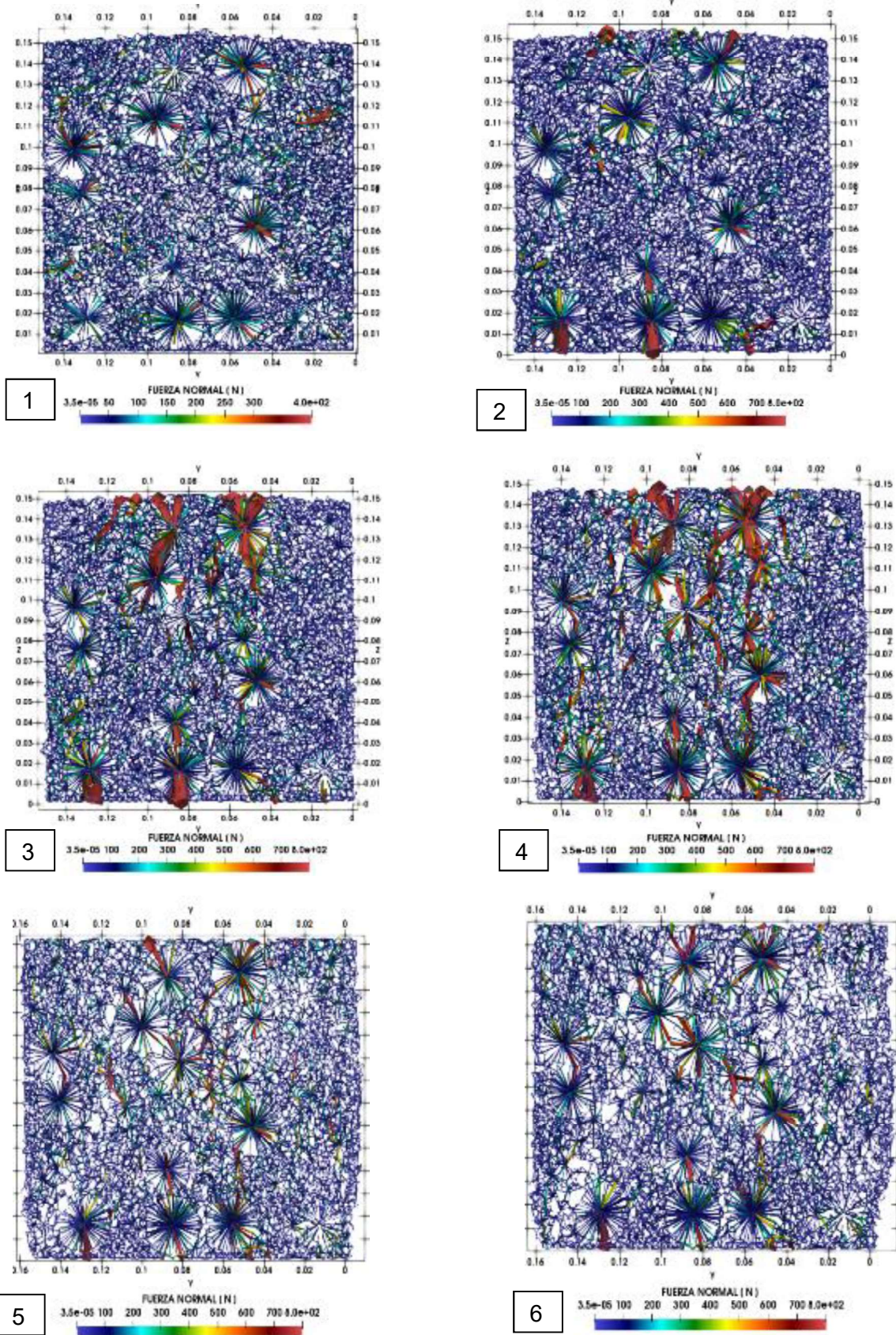
(b)

**FIGURA 4.32** Cadenas de fuerzas en sección  $x=5$  cm del hormigón A

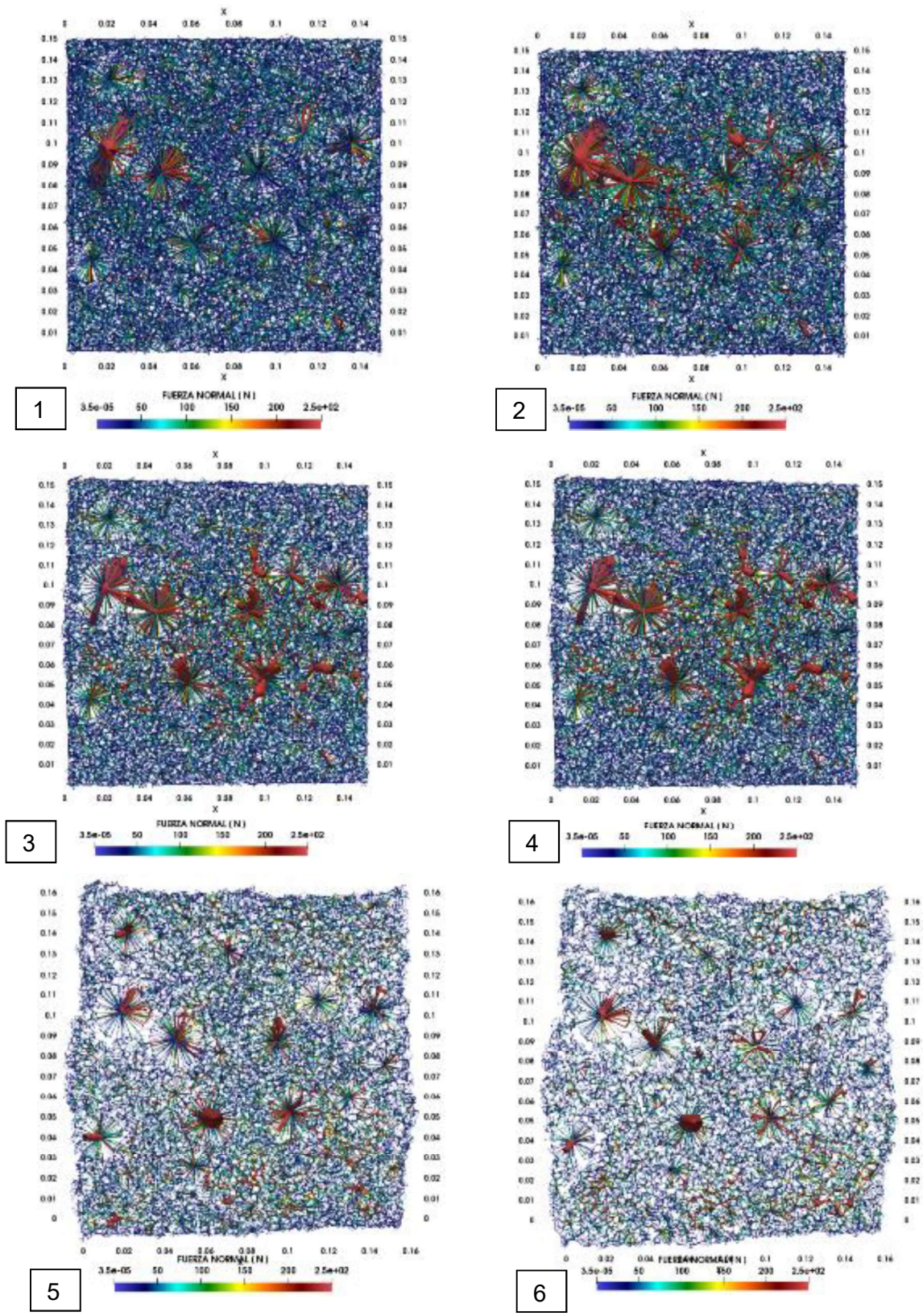




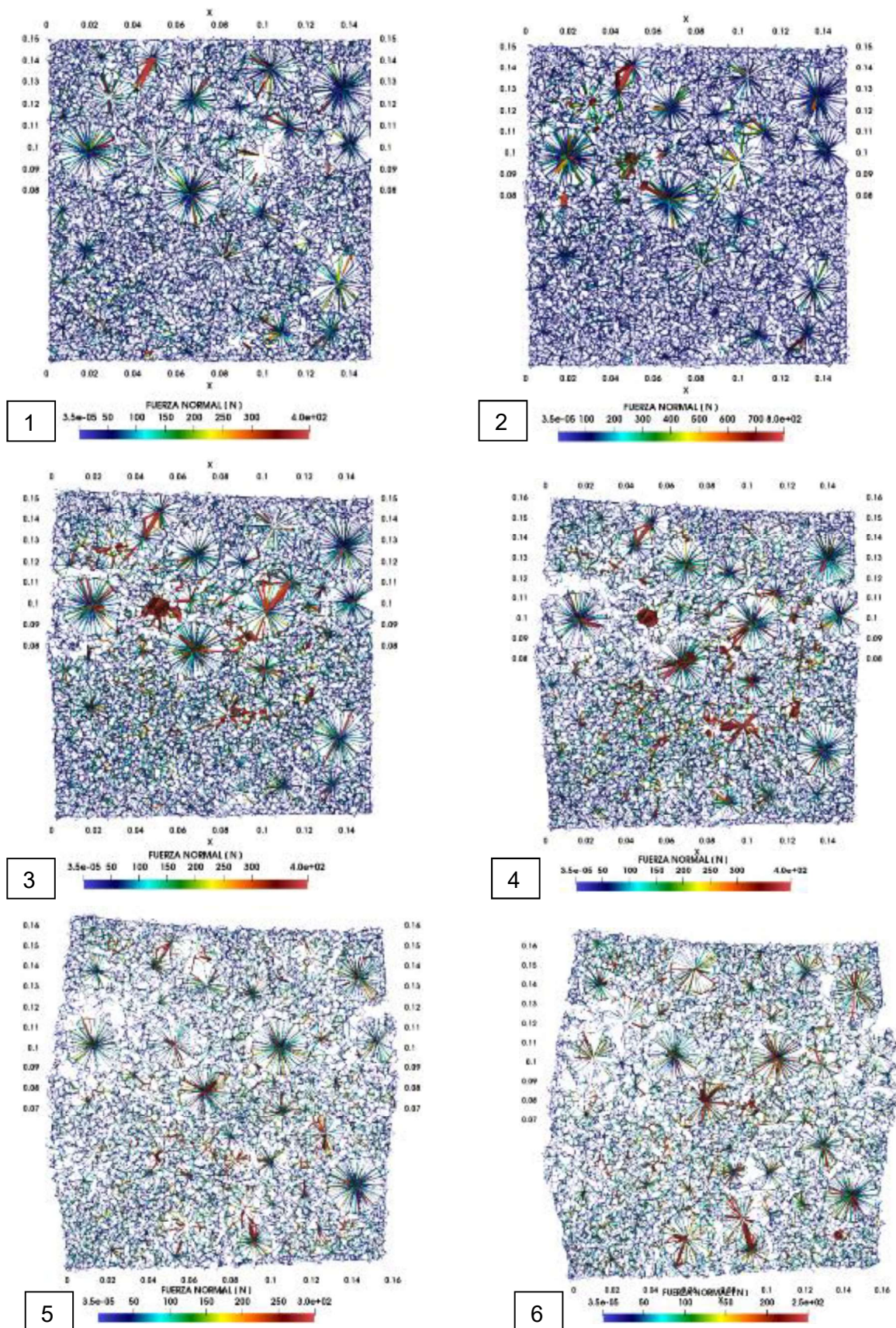
**FIGURA 4.33** Cadenas de fuerzas en sección x=10 cm del hormigón A



**FIGURA 4.34** Cadenas de fuerzas en sección z=14 cm del hormigón A



**FIGURA 4.35** Cadenas de fuerzas en sección  $z=10$  cm del hormigón A



#### 4.4.2 HORMIGÓN B

En la FIGURA 4.36 se presentan vistas del cubo de hormigón en 3D, para el tiempo de interés 1 y 6, de acuerdo a lo expuesto en la FIGURA 4.6. Del que se puede visualizar la forma de las redes de fuerza al inicio y final del proceso de carga, es posible evidenciar la deformación que se produce en el conglomerado como un conjunto, así como las cadenas de fuerza tienden a tomar forma y convertirse en redes interconectadas.

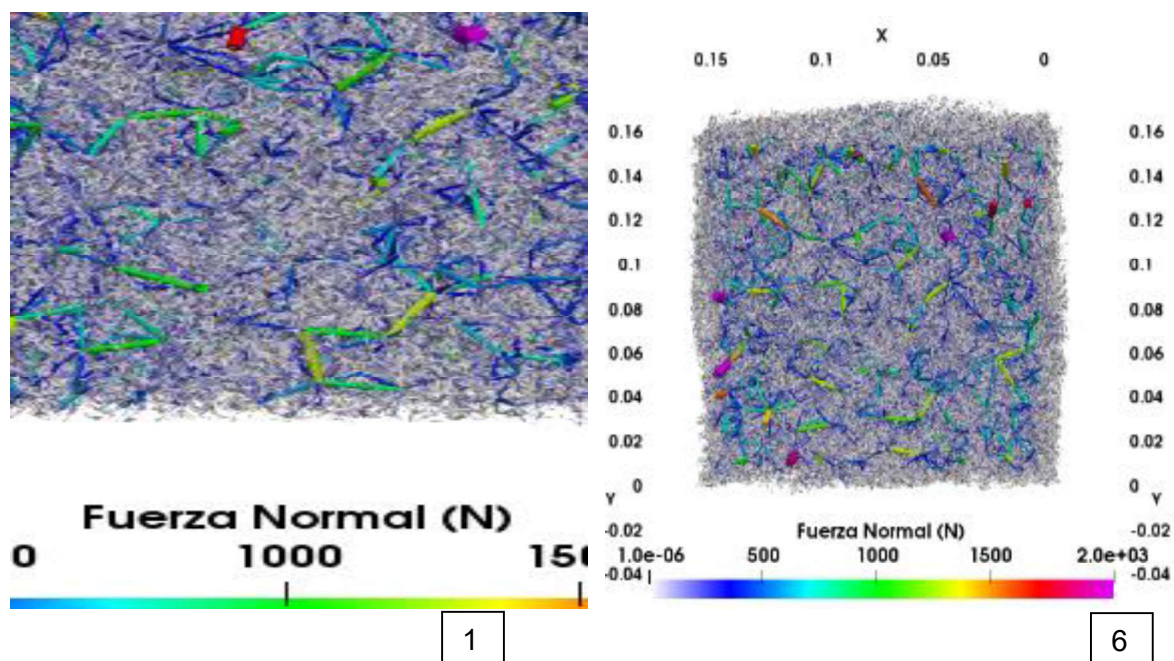
Para visualizar la interacción de las cadenas de fuerzas interiores del modelo, se han realizado cortes a 5 cm y 10 cm al cubo de hormigón. En las FIGURA 4.37 y FIGURA 4.38 se puede ver que existe la tendencia a que las redes de fuerza se concentren en el agregado grueso, hasta el tiempo 3 se tiene que las redes de fuerza en rojo crecen progresivamente y es el principal potencial de resistencia uniaxial. Mientras que a partir del tiempo 4 se pierde capacidad debido al desplazamiento del agregado fino; que provoca el desenlace de cadenas de fuerza resistentes, por lo que se hace una redistribución de cadenas de fuerza, haciendo que la concentración de ellas se vaya perdiendo de las partículas iniciales y sean otras partículas las que asuman cadenas de fuerza mayores. Sin embargo, durante todo el proceso de carga existe la tendencia de que las mayores cadenas de fuerza se concentren en el agregado grueso y que las redes de fuerza que se rompan correspondan al agregado fino.

En los tiempos de interés 5 y 6 se evidencia que se generan huecos, desarrollados progresivamente por los micro agrietamientos producto del desplazamiento del agregado fino, tales discontinuidades de las redes de fuerza se interpretan como fisuras macroscópicas. Los desenlaces en las redes de fuerza tienden a ser en forma diagonal al cubo, lo que se puede relacionar con las FIGURA 4.23 y FIGURA 4.24 en donde se evidencia la tendencia del desplazamiento de partículas tal que se genera un triángulo inferior.

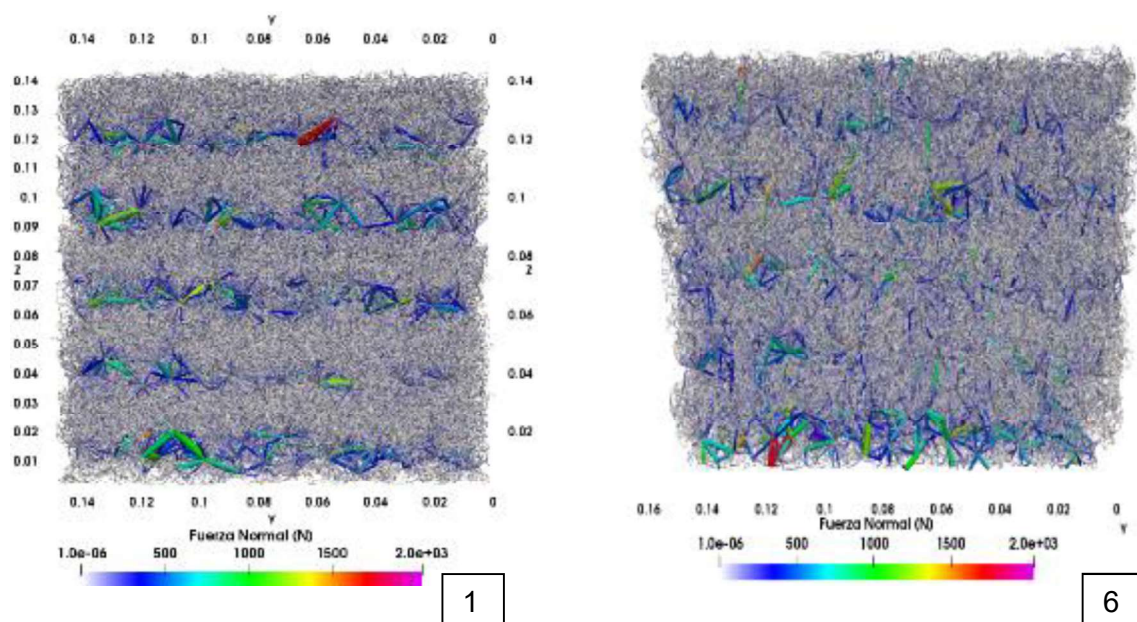
En la FIGURA 4.39 y FIGURA 4.40 se tienen cortes en planta a  $z=14\text{cm}$  y  $z=10\text{cm}$  respectivamente, en donde el interés es observar la interacción de las cadenas de fuerza como distribución por zonas, las cuales indican que existe concentración de

fuerzas en el agregado grueso, y que aunque lateralmente el enlace JKR es confinante no es relevante en la capacidad uniaxial del hormigón. De igual manera se evidencia el crecimiento de la magnitud de fuerza hasta el tiempo 3 conforme incrementa la carga, para luego, a partir del tiempo 4, se desarrolle la redistribución de cadenas de fuerza conforme incrementan de tamaño los huecos interpretados como fisuras. En estas vistas se identifica que a pesar de que los desenlaces de redes de fuerza se producen en todo el cubo de hormigón, las mayores deformaciones se trasladan hacia los bordes del mismo, este resultado se relaciona al comportamiento de desplazamientos identificado en la FIGURA 4.22; en la cual se nota que la mayor tendencia de desplazamiento se concentra en los bordes exteriores del cubo.

**FIGURA 4.36** Vistas en 3D de cadenas de fuerza del hormigón B, en planta (a) y en elevación (b). Antes y al final de la compresión uniaxial.

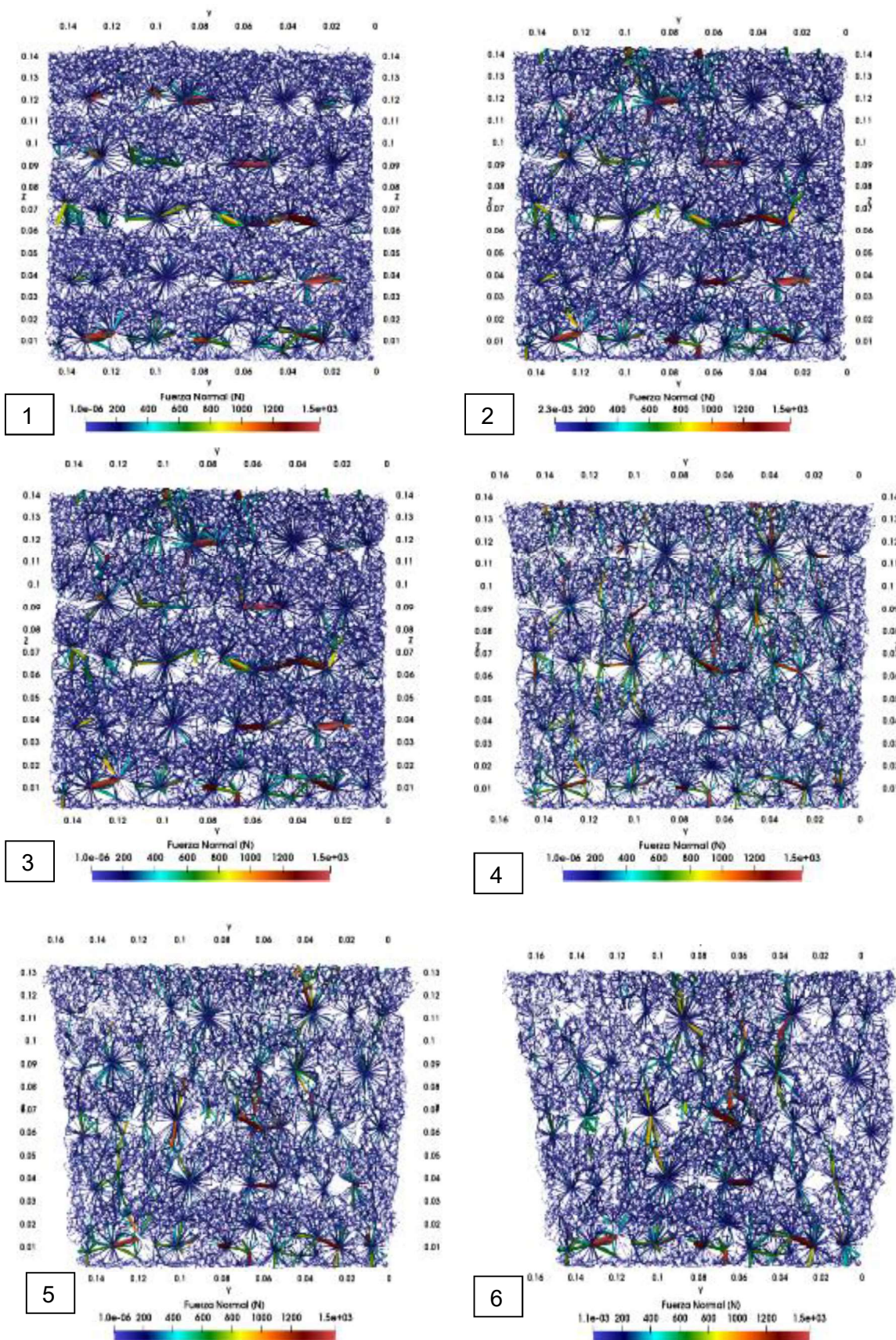


(a)

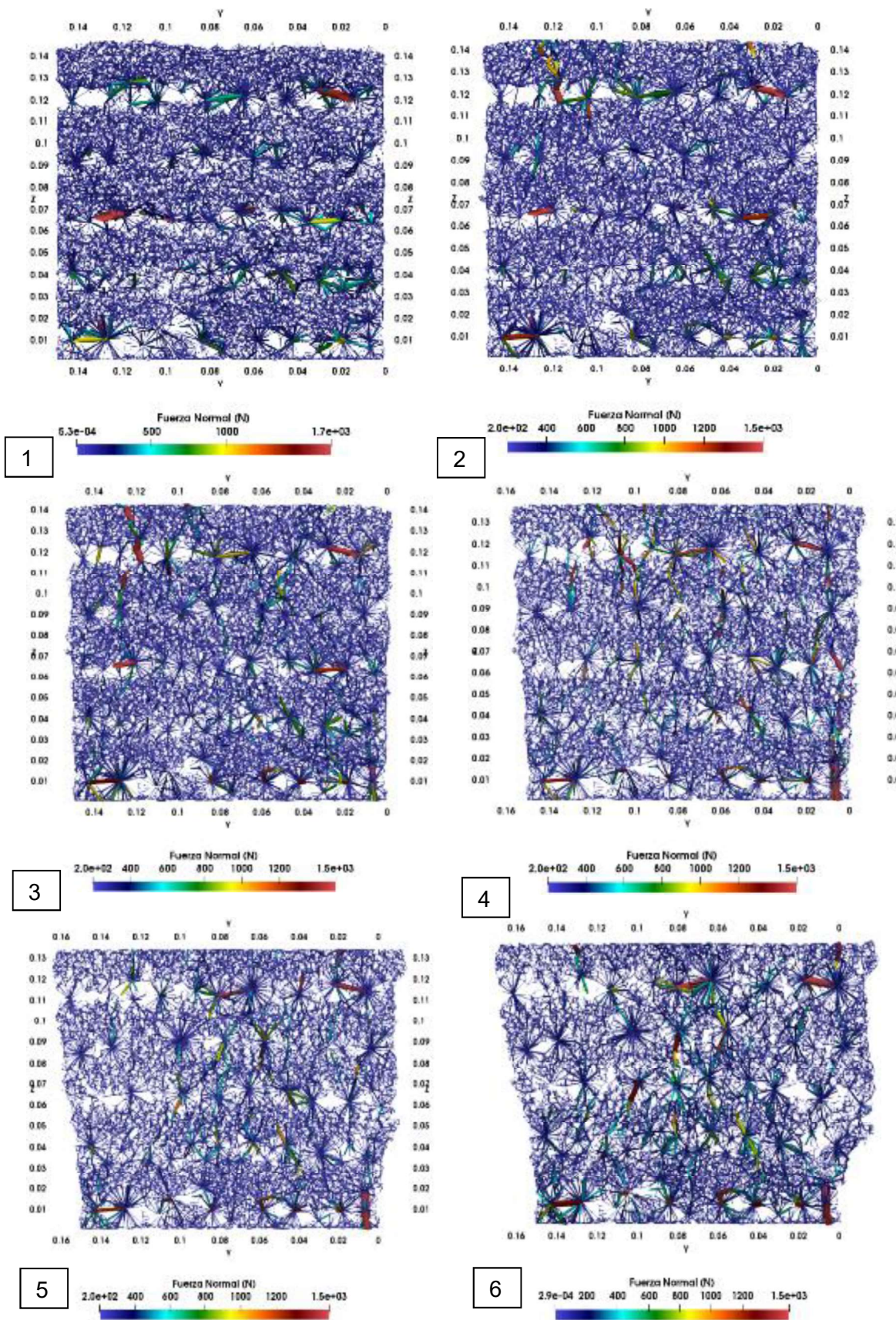


(b)

**FIGURA 4.37** Cadenas de fuerzas en sección  $x=5$  cm del hormigón B

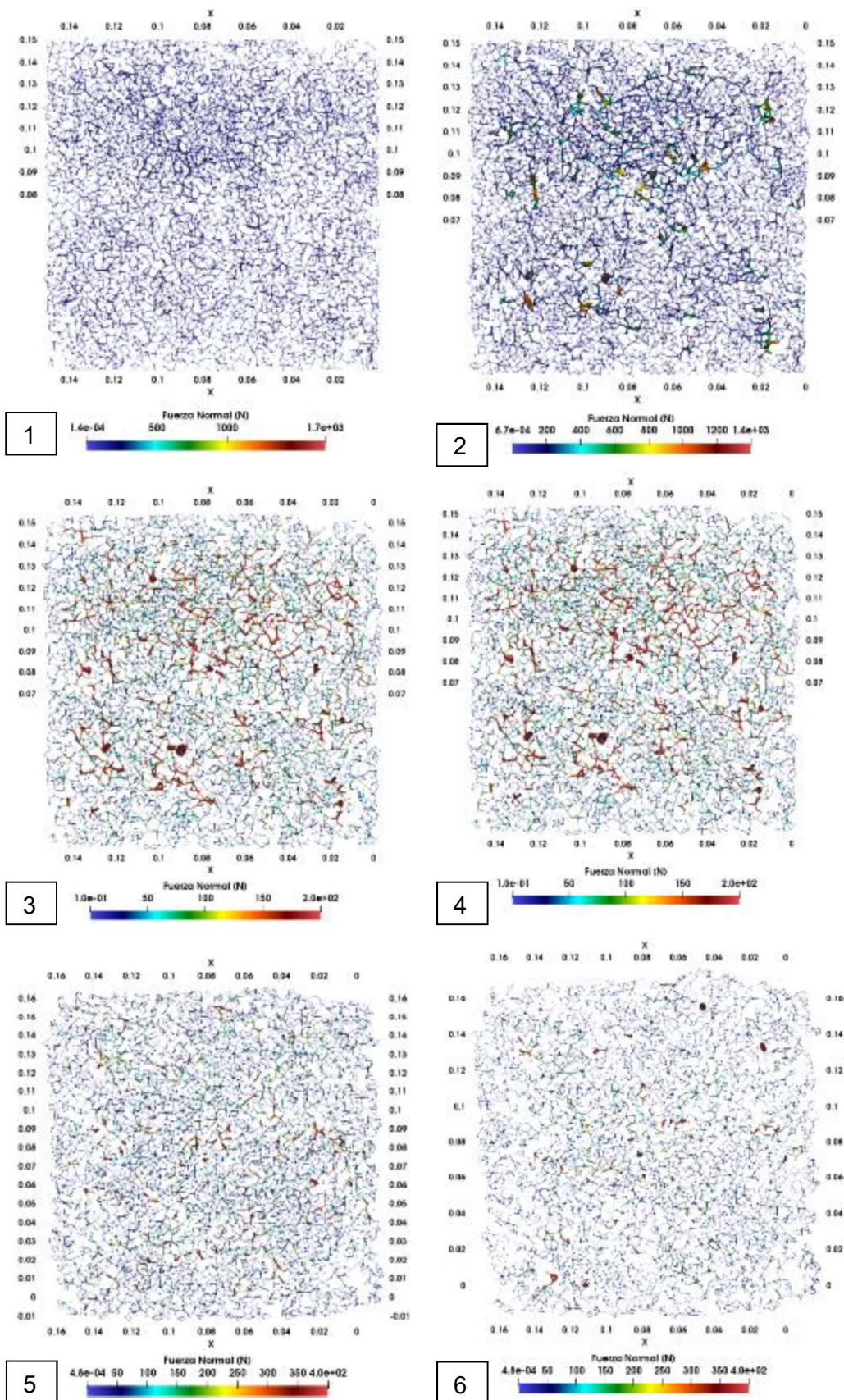


**FIGURA 4.38** Cadenas de fuerzas en sección x=10 cm del hormigón B

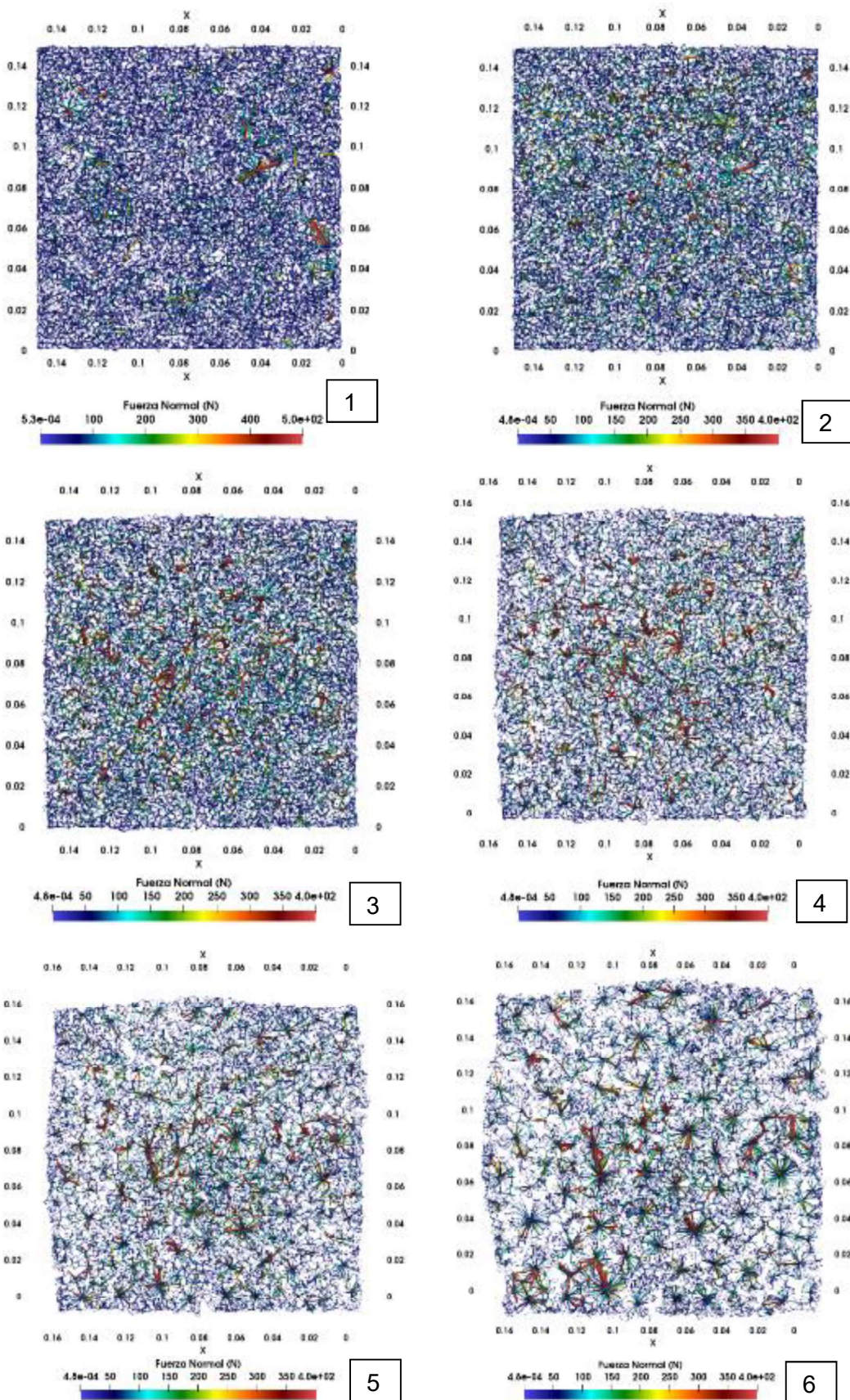




**FIGURA 4.39** Cadenas de fuerzas en sección z=14 cm del hormigón B



**FIGURA 4.40** Cadenas de fuerzas en sección z=10 cm del hormigón B



#### 4.4.3 HORMIGÓN C

En la FIGURA 4.41 se presentan vistas del cubo de hormigón en 3D, para el tiempo de interés 1 y 6, de acuerdo a lo expuesto en la FIGURA 4.9. Del que se puede visualizar la forma de las redes de fuerza al inicio y final del proceso de carga, es posible evidenciar la deformación que se produce en el conglomerado como un conjunto, así como las cadenas de fuerza tienden a tomar forma y convertirse en redes interconectadas.

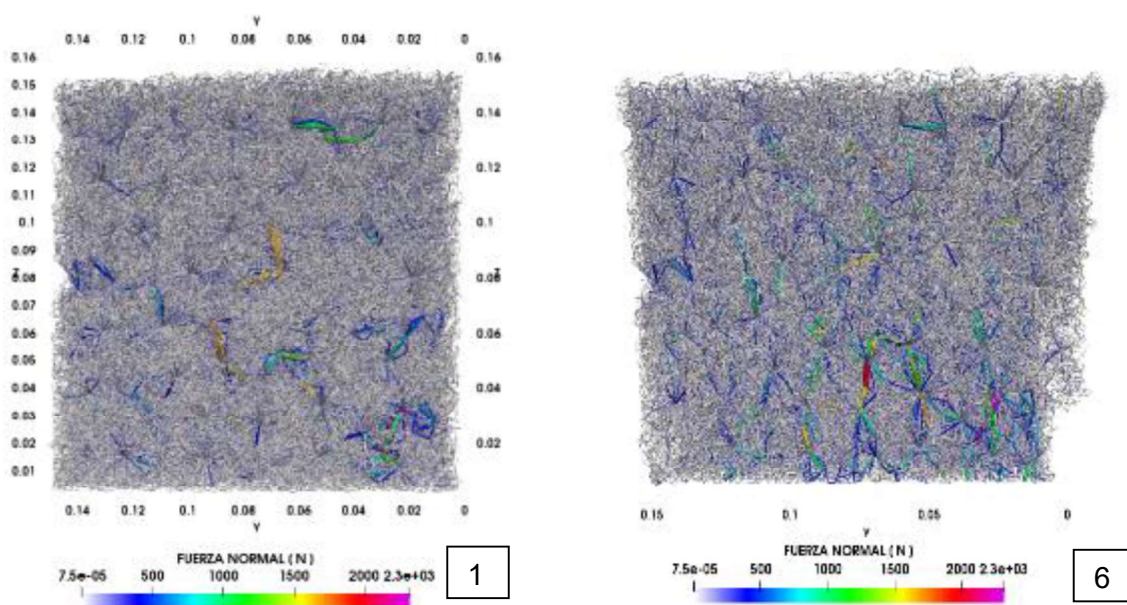
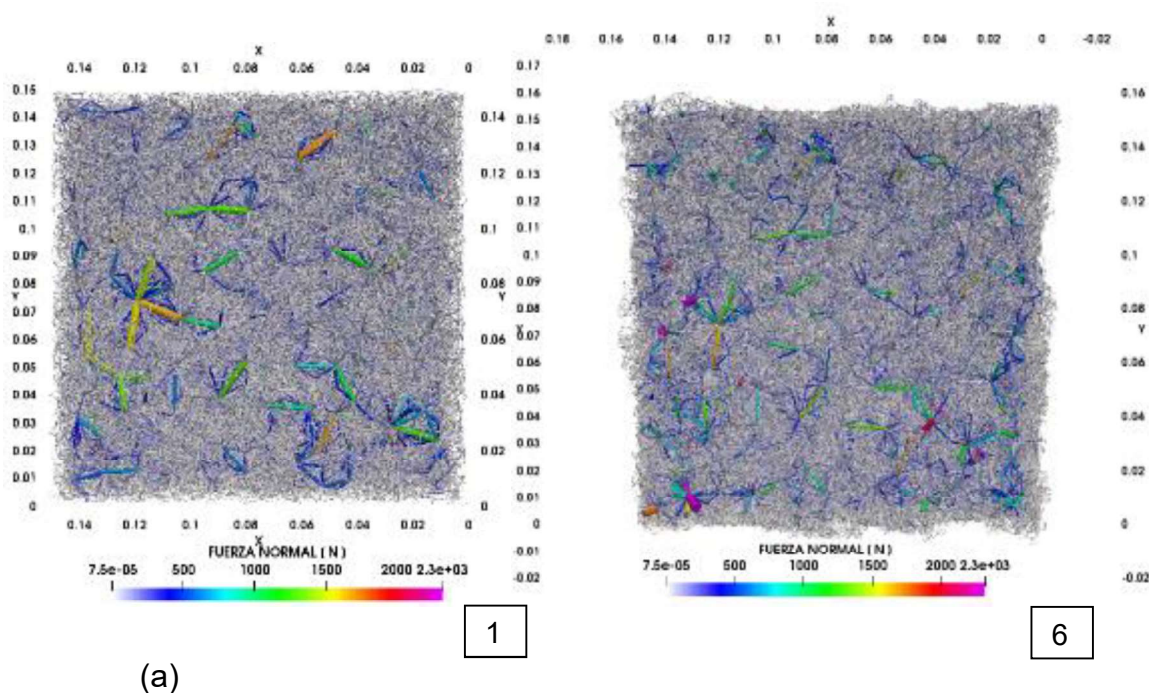
Para visualizar la interacción de las cadenas de fuerzas interiores del modelo, se han realizado cortes a 5 cm y 10 cm al cubo de hormigón. En las FIGURA 4.42 y FIGURA 4.43 se puede ver que existe la tendencia a que las redes de fuerza se concentren en el agregado grueso, hasta el tiempo 3 se tiene que las redes de fuerza en rojo crece progresivamente y es el principal potencial de resistencia uniaxial. Mientras que a partir del tiempo 4 se pierde capacidad debido al desplazamiento del agregado fino; que provoca el desenlace de cadenas de fuerza resistentes, por lo que se hace una redistribución de cadenas de fuerza, haciendo que la concentración de ellas se vaya perdiendo de las partículas iniciales y sean otras partículas las que asuman cadenas de fuerza mayores. Sin embargo, durante todo el proceso de carga existe la tendencia de que las mayores cadenas de fuerza se concentren en el agregado grueso y que las redes de fuerza que se rompan correspondan al agregado fino.

En los tiempos de interés 5 y 6 se evidencia que se generan huecos, desarrollados progresivamente por los micro agrietamientos producto del desplazamiento del agregado fino, tales discontinuidades de las redes de fuerza se interpretan como fisuras macroscópicas. Los desenlaces en las redes de fuerza tienden a ser en forma diagonal al cubo, lo que se puede relacionar con las FIGURA 4.29 y FIGURA 4.30 en donde se evidencia la tendencia del desplazamiento de partículas tal que se genera un triángulo inferior.

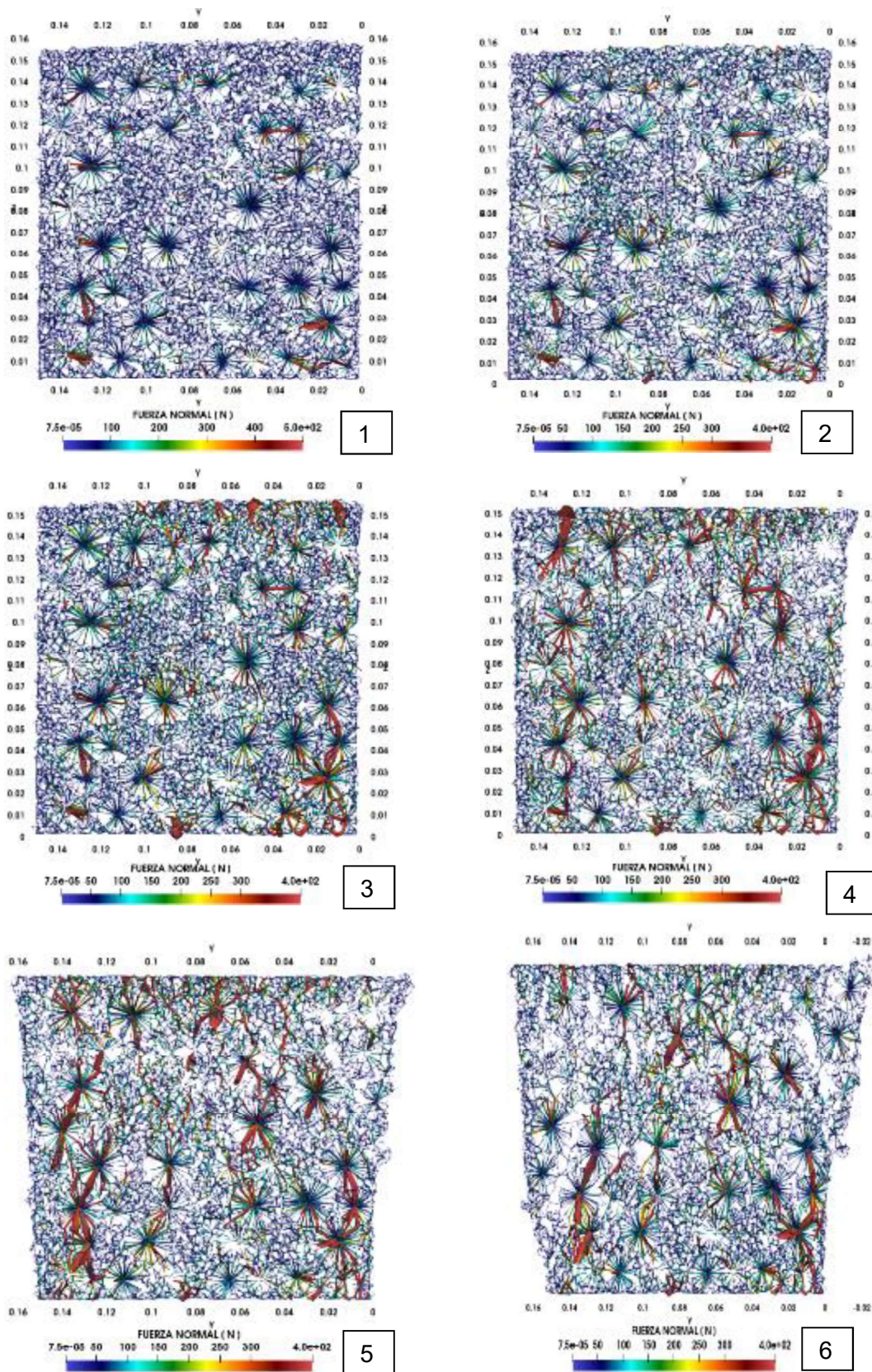
En la FIGURA 4.44 y FIGURA 4.45 se tienen cortes en planta a  $z=14\text{cm}$  y  $z=10\text{cm}$  respectivamente, en donde el interés es observar la interacción de las cadenas de fuerza como distribución por zonas, las cuales indican que existe concentración de

fuerzas en el agregado grueso, y que aunque lateralmente el enlace JKR es confinante no es relevante en la capacidad uniaxial del hormigón. De igual manera se evidencia el crecimiento de la magnitud de fuerza hasta el tiempo 3 conforme incrementa la carga, para luego, a partir del tiempo 4, se desarrolle la redistribución de cadenas de fuerza conforme incrementan de tamaño los huecos interpretados como fisuras. En estas vistas se identifica que a pesar de que los desenlaces de redes de fuerza se producen en todo el cubo de hormigón, las mayores deformaciones se trasladan hacia los bordes del mismo, este resultado se relaciona al comportamiento de desplazamientos identificado en la FIGURA 4.28; en la cual se nota que la mayor tendencia de desplazamiento se concentra en los bordes exteriores del cubo.

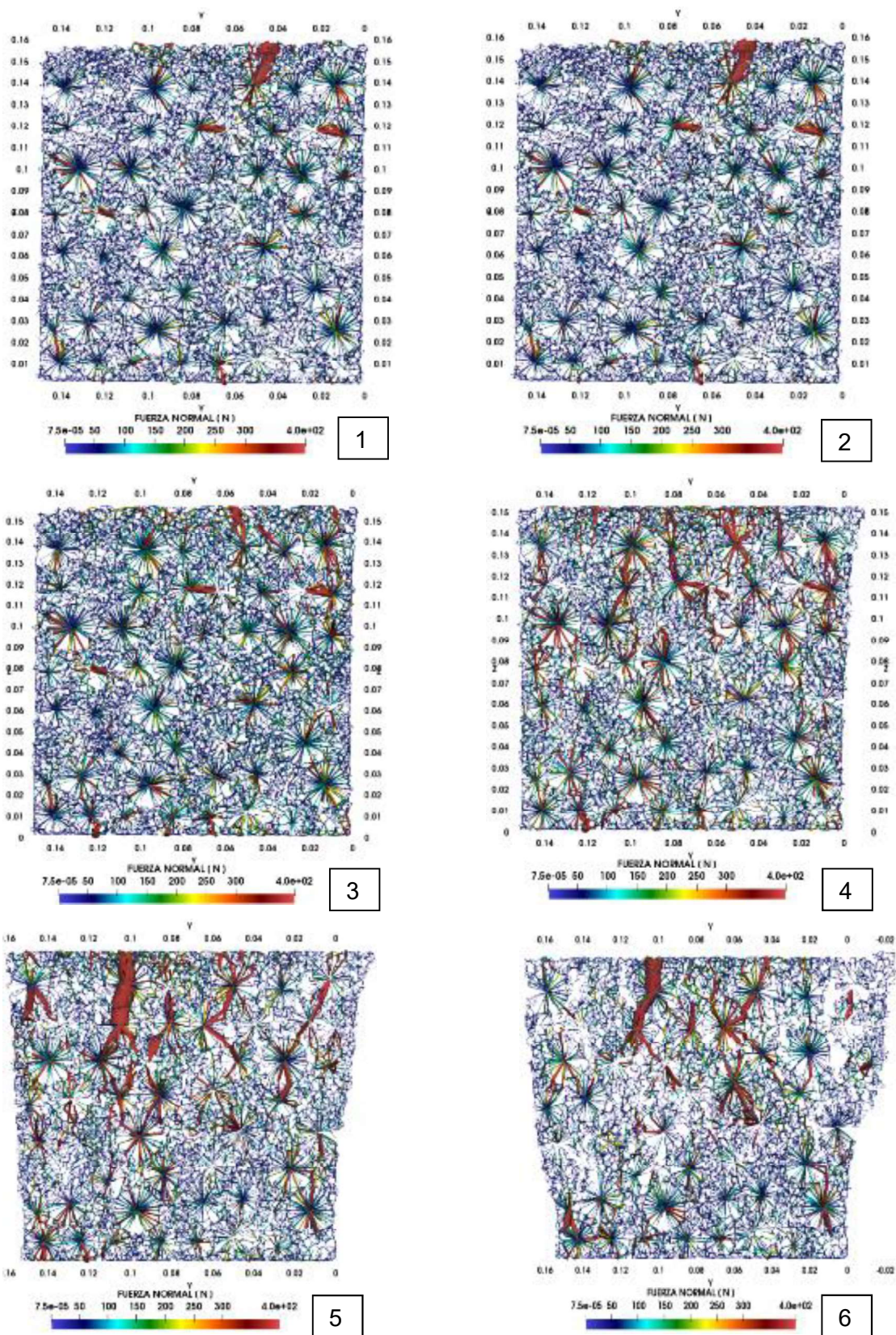
**FIGURA 4.41** Vistas en 3D de cadenas de fuerza del hormigón C, en planta (a) y en elevación (b). Antes y al final de la compresión uniaxial.



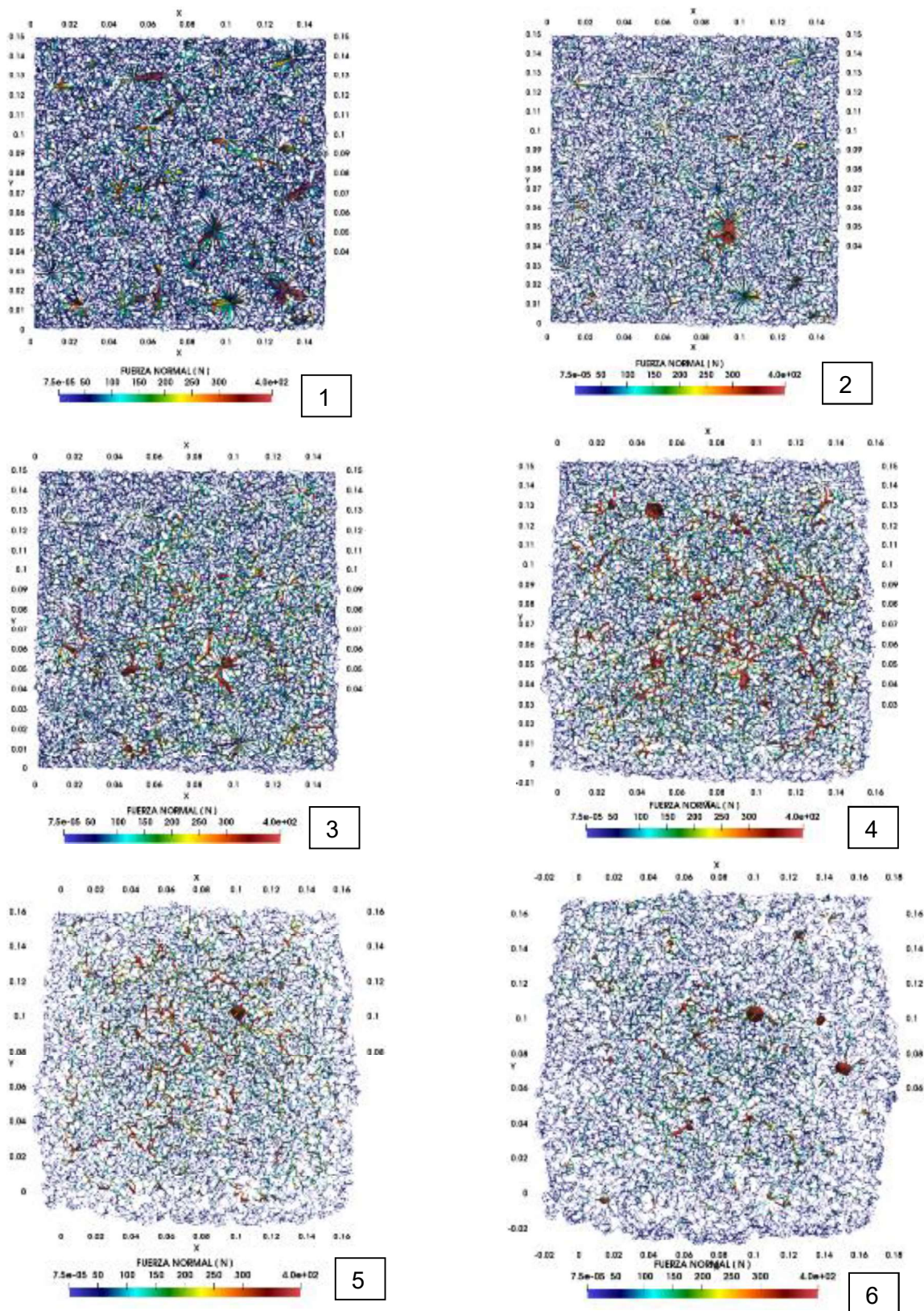
**FIGURA 4.42** Cadenas de fuerzas en sección  $x=5$  cm del hormigón C



**FIGURA 4.43** Cadenas de fuerzas en sección  $x=10$  cm del hormigón C

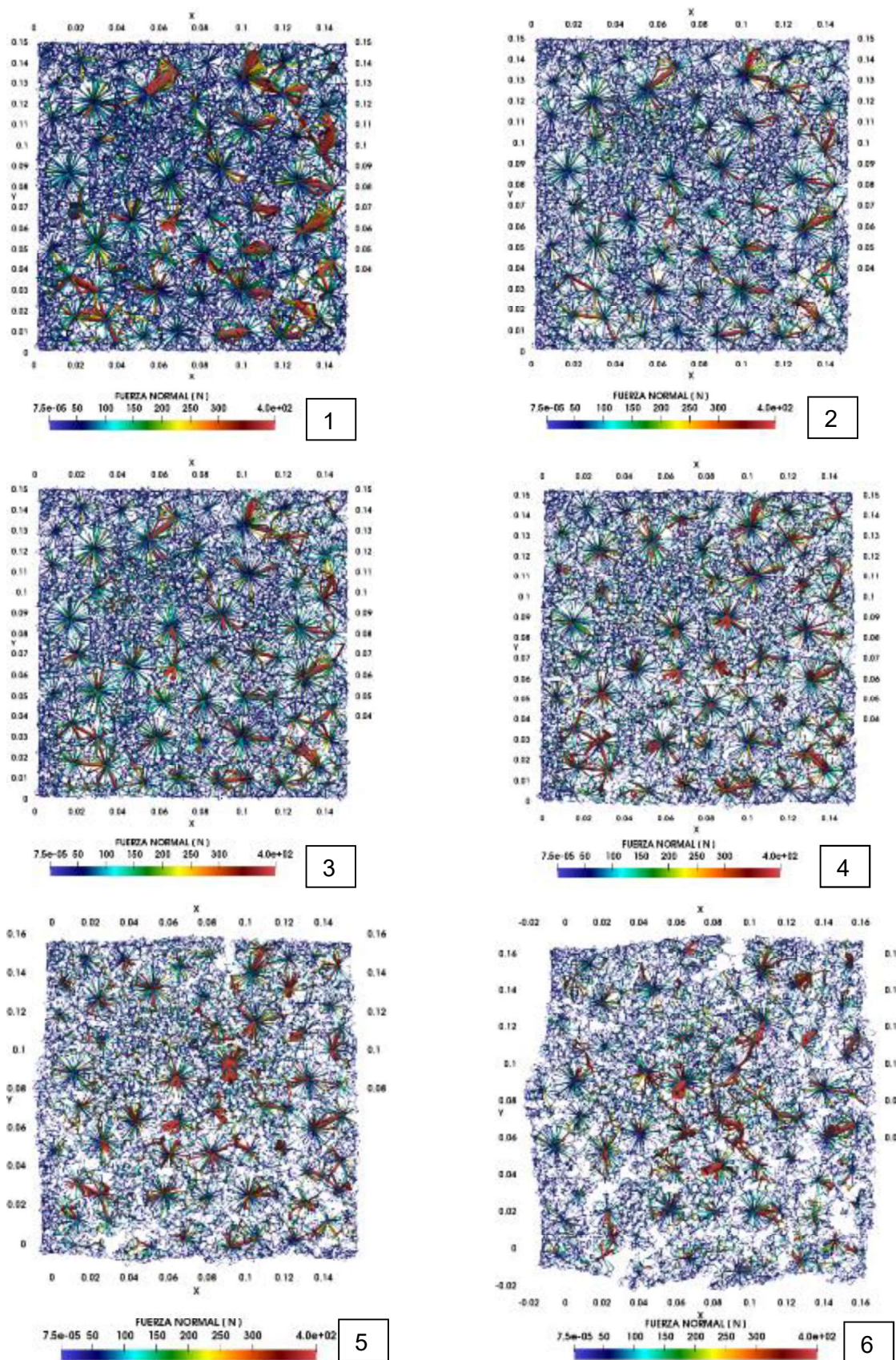


**FIGURA 4.44** Cadenas de fuerzas en sección z=14 cm del hormigón C





**FIGURA 4.45** Cadenas de fuerzas en sección  $z=10$  cm del hormigón C



## 4.5 ESFUERZOS INTERNOS

En este apartado se presentan los resultados de esfuerzos internos; correspondientes a distribuciones de esfuerzos internos, mismos que son resultado del cálculo por volumen de celda de material realizado por LIGGGHTS conforme se expresa en la sección 2.3.6 del capítulo 2. Cuyo resultado es un tensor esfuerzo por celda; en el cual hay componentes de esfuerzo axial y esfuerzo cortante. Para cada uno de ellos se presenta una distribución espacial en 3D.

### 4.5.1 HORMIGÓN A

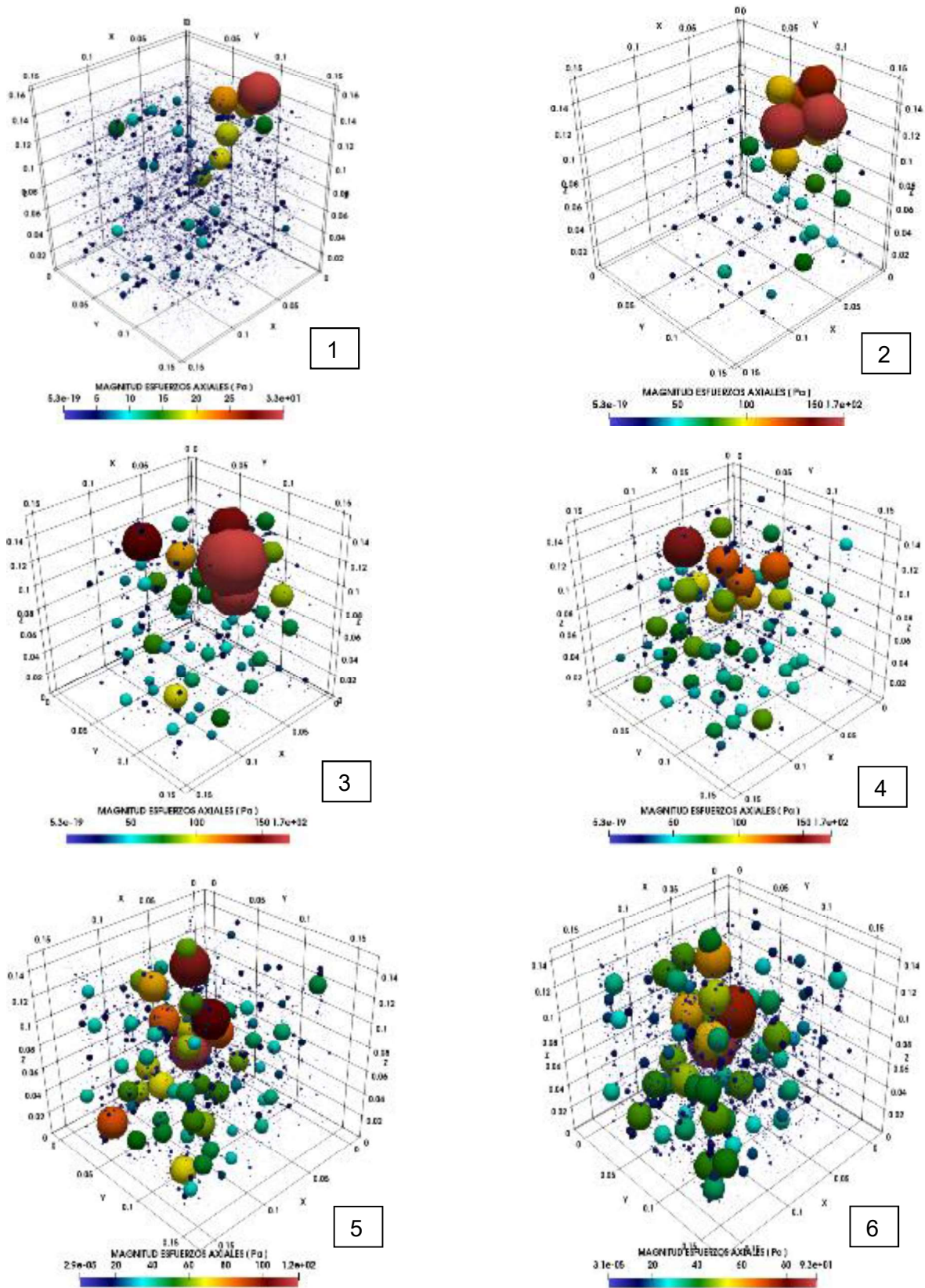
En la FIGURA 4.46, se presentan la distribución de la magnitud de los componentes axiales del tensor esfuerzo por celda de material, que se identifica por posición y magnitud. Las esferas no representan al agregado, sino que indican posición y magnitud de un esfuerzo axial en el conglomerado granular. De esta manera se puede identificar la distribución de esfuerzos al interior del cubo de hormigón conforme se aplica la carga de compresión uniaxial. Se identifica que hasta el tiempo 3 los mayores esfuerzos se concentran en la zona de aplicación de carga; que es en la parte superior del cubo. A partir del tiempo 4, se reconoce que los esfuerzos tienden a distribuirse de manera más uniforme dentro del cubo, y en el proceso de desgaste del tiempo 5 y 6 los esfuerzos tienden a concentrarse al interior del conglomerado. Este desarrollo de zonas de esfuerzos tiene relación con las cadenas de fuerzas presentadas en las FIGURA 4.33 y FIGURA 4.34, en las cuales se evidencia la tendencia de concentrar las mayores fuerzas de contacto en los agregados gruesos interiores, mientras que los agregados de los bordes son los que menores fuerzas y esfuerzos presentan.

Al ser los agregados de borde los que menores esfuerzos presentan se identifica que son más proclives a ser desplazadas, y esta afirmación es congruente con las FIGURA 4.17 y FIGURA 4.18 en donde las zonas de mayor desplazamiento son las de bordes laterales.

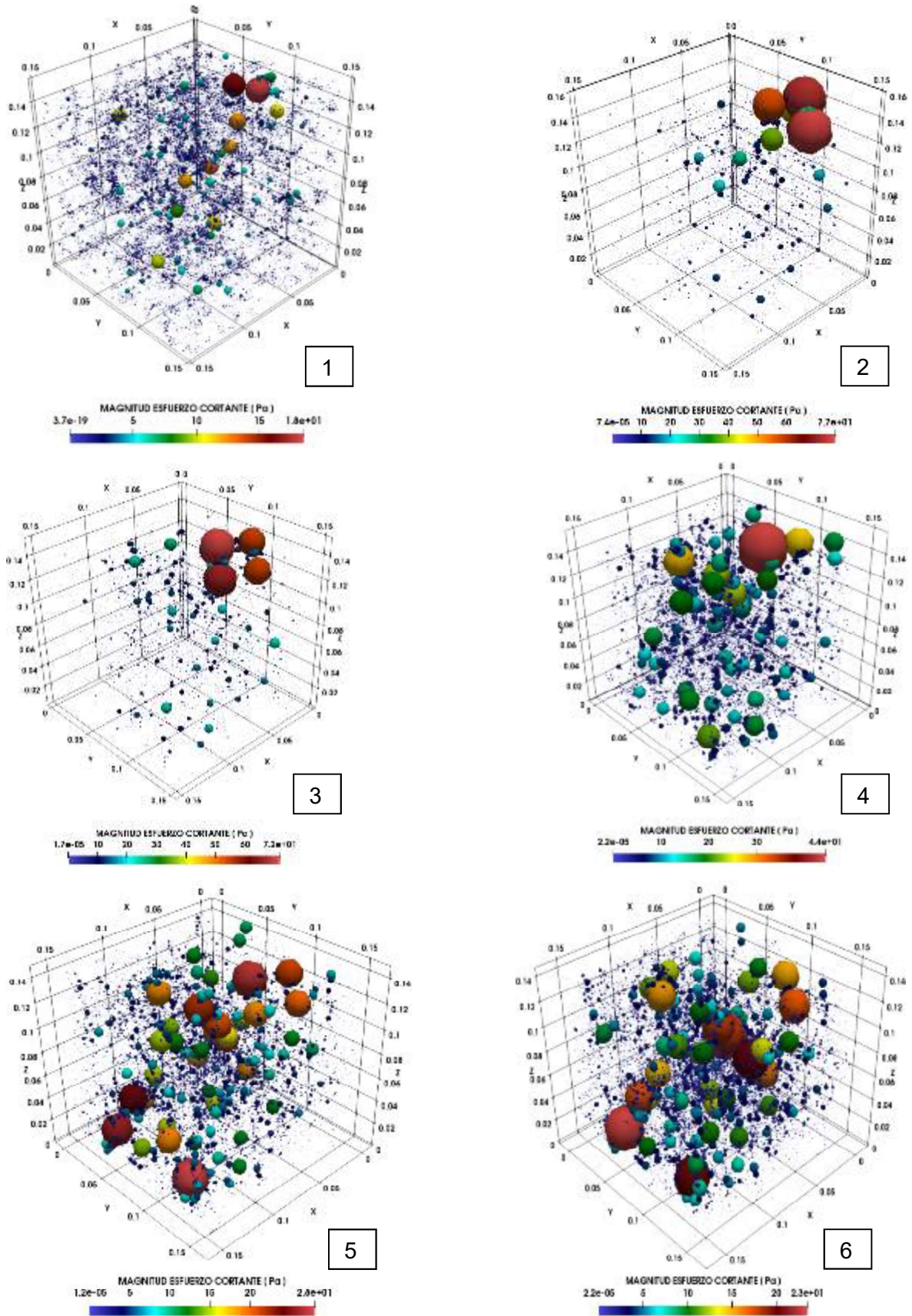
En la FIGURA 4.47 se presenta la distribución de magnitud de componentes de esfuerzos cortantes del tensor esfuerzo por celda de material, las esferas indican posición y magnitud. Se identifica un comportamiento similar al descrito para la

FIGURA 4.46, sin embargo, en el proceso de desgaste en el tiempo 5 y 6 se identifica aporte de esfuerzo cortante por parte del agregado fino, esto indica la resistencia a rotación del mismo.

**FIGURA 4.46** Distribución de Esfuerzos Axiales internos del hormigón A



**FIGURA 4.47** Distribución de Esfuerzos Cortantes internos del hormigón A



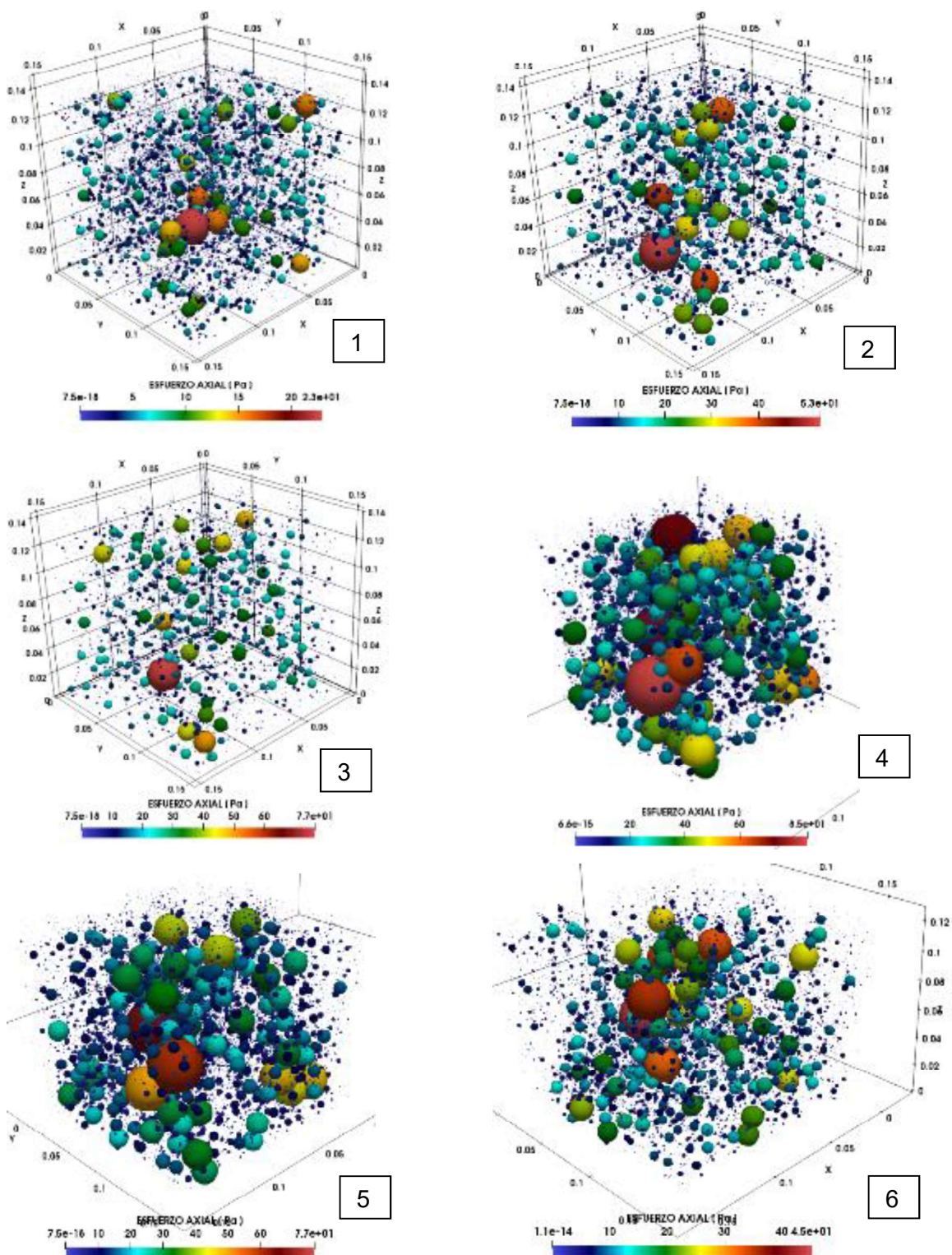
#### 4.5.2 HORMIGÓN B

En la FIGURA 4.48, se presentan la distribución de la magnitud de los componentes axiales del tensor esfuerzo por celda de material, que se identifica por posición y magnitud. Las esferas no representan al agregado, sino que indican posición y magnitud de un esfuerzo axial en el conglomerado granular. De esta manera se puede identificar la distribución de esfuerzos al interior del cubo de hormigón conforme se aplica la carga de compresión uniaxial. Se identifica que hasta el tiempo 3 los mayores esfuerzos se concentran en la zona de aplicación de carga; que es en la parte superior del cubo. A partir del tiempo 4, se reconoce que los esfuerzos tienden a distribuirse de manera más uniforme dentro del cubo, y en el proceso de desgaste del tiempo 5 y 6 los esfuerzos tienden a concentrarse al interior del conglomerado. Este desarrollo de zonas de esfuerzos tiene relación con las cadenas de fuerzas presentadas en las FIGURA 4.37 y FIGURA 4.38, en las cuales se evidencia la tendencia de concentrar las mayores fuerzas de contacto en los agregados gruesos interiores, mientras que los agregados de los bordes son los que menores fuerzas y esfuerzos presentan.

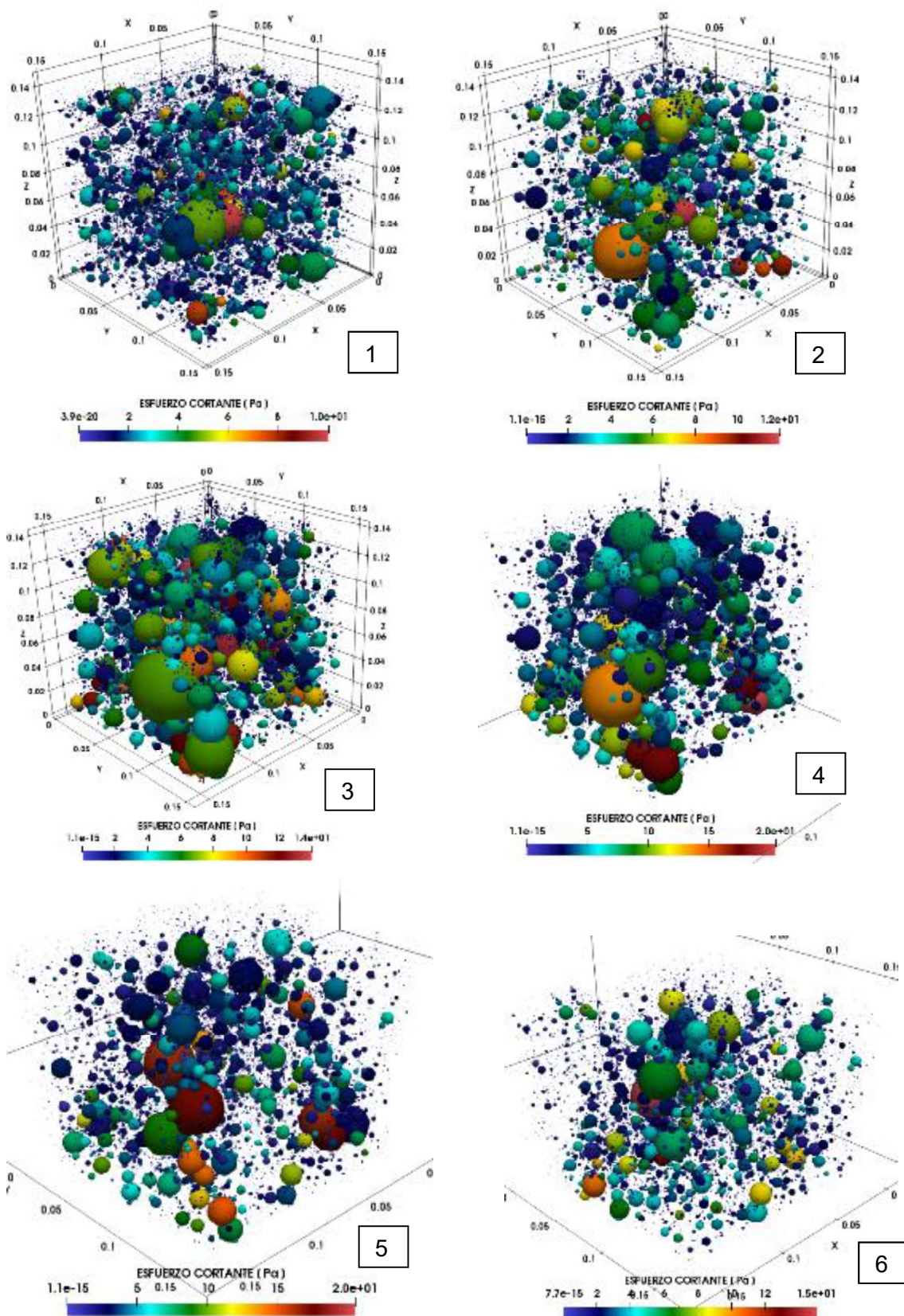
Al ser los agregados de borde los que menores esfuerzos presentan se identifica que son más proclives a ser desplazadas, y esta afirmación es congruente con las FIGURA 4.23 y FIGURA 4.24 en donde las zonas de mayor desplazamiento son las de bordes laterales.

En la FIGURA 4.49 se presenta la distribución de magnitud de componentes de esfuerzos cortantes del tensor esfuerzo por celda de material, las esferas indican posición y magnitud. Se identifica un comportamiento similar al descrito para la FIGURA 4.48, sin embargo, en el proceso de desgaste en el tiempo 5 y 6 se identifica aporte de esfuerzo cortante por parte del agregado fino, esto indica la resistencia a rotación del mismo.

**FIGURA 4.48** Distribución de Esfuerzos Axiales internos del hormigón B



**FIGURA 4.49** Distribución de Esfuerzos Cortantes internos del hormigón B





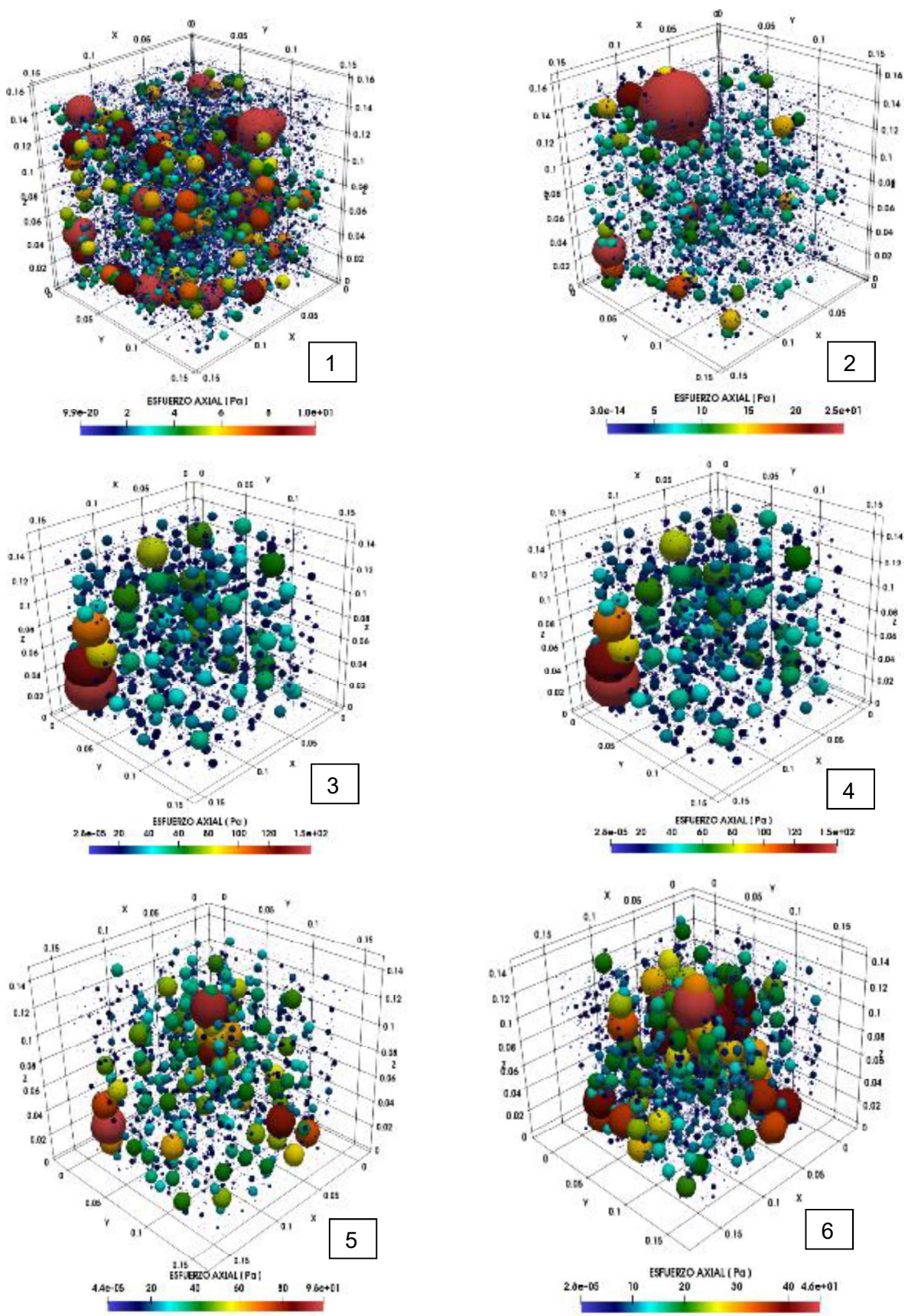
### 4.5.3 HORMIGÓN C

En la FIGURA 4.50, se presentan la distribución de la magnitud de los componentes axiales del tensor esfuerzo por celda de material, que se identifica por posición y magnitud. Las esferas no representan al agregado, sino que indican posición y magnitud de un esfuerzo axial en el conglomerado granular. De esta manera se puede identificar la distribución de esfuerzos al interior del cubo de hormigón conforme se aplica la carga de compresión uniaxial. Se identifica que hasta el tiempo 3 los mayores esfuerzos se concentran en la zona de aplicación de carga; que es en la parte superior del cubo. A partir del tiempo 4, se reconoce que los esfuerzos tienden a distribuirse de manera más uniforme dentro del cubo, y en el proceso de desgaste del tiempo 5 y 6 los esfuerzos tienden a concentrarse al interior del conglomerado. Este desarrollo de zonas de esfuerzos tiene relación con las cadenas de fuerzas presentadas en las FIGURA 4.42 y FIGURA 4.43, en las cuales se evidencia la tendencia de concentrar las mayores fuerzas de contacto en los agregados gruesos interiores, mientras que los agregados de los bordes son los que menores fuerzas y esfuerzos presentan.

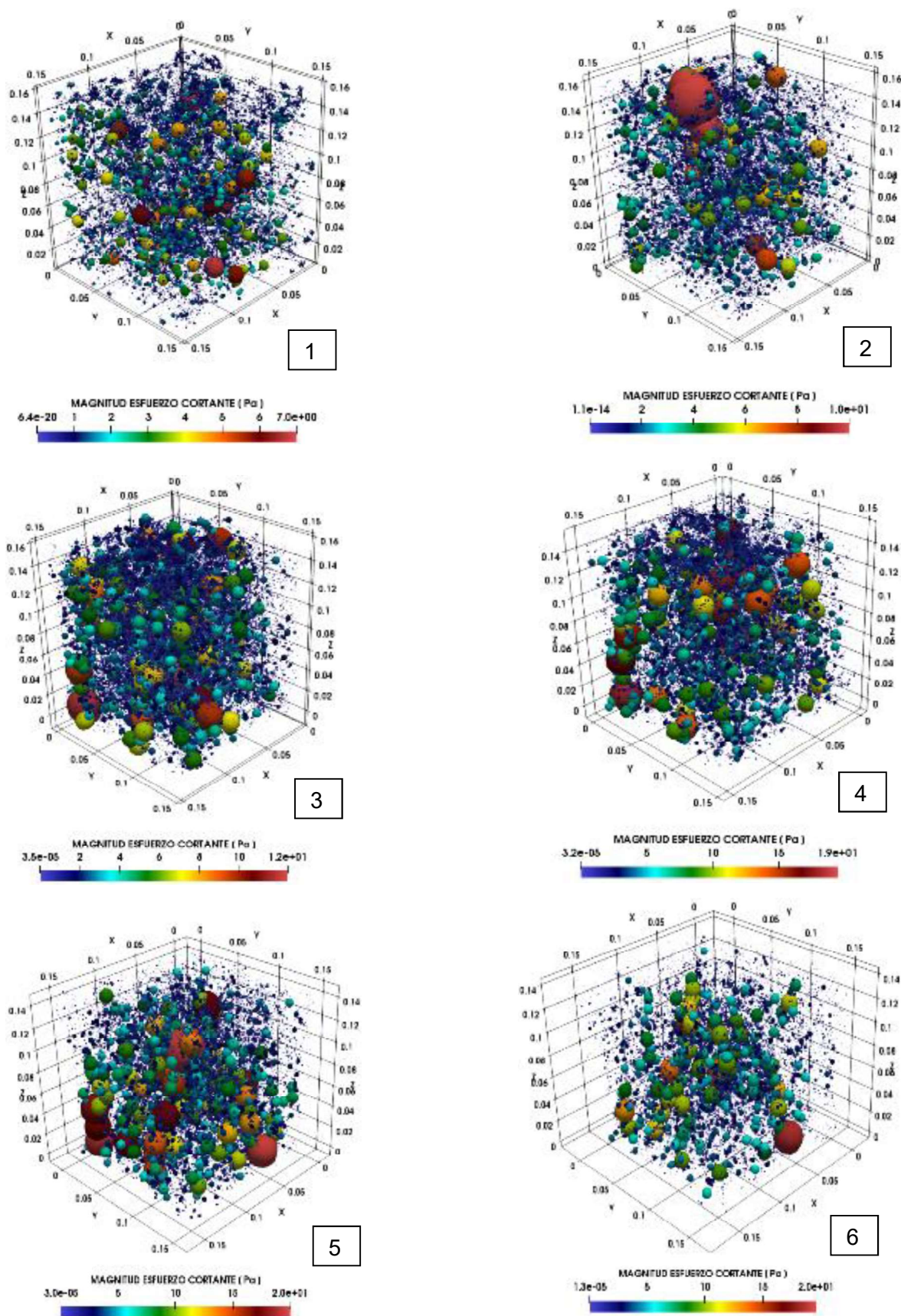
Al ser los agregados de borde los que menores esfuerzos presentan se identifica que son más proclives a ser desplazadas, y esta afirmación es congruente con las FIGURA 4.26 y FIGURA 4.27 en donde las zonas de mayor desplazamiento son las de bordes laterales.

En la FIGURA 4.51 se presenta la distribución de magnitud de componentes de esfuerzos cortantes del tensor esfuerzo por celda de material, las esferas indican posición y magnitud. Se identifica un comportamiento similar al descrito para la FIGURA 4.50, sin embargo, en el proceso de desgaste en el tiempo 5 y 6 se identifica aporte de esfuerzo cortante por parte del agregado fino, esto indica la resistencia a rotación del mismo.

**FIGURA 4.50** Distribución de Esfuerzos Axiales internos del hormigón C



**FIGURA 4.51** Distribución de Esfuerzos Cortantes internos del hormigón C



## **4.6 TENDENCIA DE FISURA**

En esta sección se presentan las tendencias de fisura como la disposición del conglomerado a mantenerse en conjunto; consecuencia de los contactos entre partículas específicamente. Por ello se presenta un gráfico del número total de contactos existentes con respecto al tiempo, conforme se aplica carga.

Se presenta además como tendencia de fisura, secciones arbitrarias representativas internas del conglomerado: a 5 cm y 10 cm, para destacar las zonas de mayor velocidad angular, y mayor fuerza neta, que son los causantes del consecuente desplazamiento. Estos parámetros son identificados como zonas que representan la tendencia del agregado a desplazarse o rotar, conforme se aplica carga.

### **4.6.1 HORMIGÓN A**

Para identificar la pérdida de contactos entre los agregados componentes del hormigón conforme es aplicada carga de compresión se ha realizado un análisis de contactos existentes en Matlab, a través de la evaluación del desarrollo de las cadenas de fuerzas. En la FIGURA 4.52 se observa el diagrama de número de contactos contra el tiempo, el cual es el número de contactos existentes entre todas las partículas del conglomerado en cada instante de tiempo durante la simulación. Los enlaces JKR son el origen de que los agregados formen un cubo; y en cuanto pierden contacto es que se producen agrietamientos en el hormigón.

En el diagrama de número de contactos vs tiempo se puede identificar que hasta los 13 segundos se trata de mantener la estructura del hormigón; procurando mantener los enlaces iniciales representados en este esquema por el número de contactos. A partir de este tiempo es que se pierden contactos uniformemente; es decir, el material se desgasta internamente. A pesar de que de acuerdo a la FIGURA 4.3 en el tiempo 3 (16.7 segundos) todavía no se llega al pico máximo de capacidad uniaxial, en el mismo tiempo se puede notar que sí se presentan menor número de contactos; lo que permite interpretar que el rango elástico del material no se puede determinar directamente del diagrama esfuerzo vs deformación

experimental, y que el mismo está en un pequeño porcentaje de la capacidad uniaxial del material.

Para identificar las zonas que tienen mayor número de contactos en el conglomerado se han realizado esquemas en 3D en ParaView mostradas en la FIGURA 4.53. En los cuales se identifican por esferas los números de contactos existentes en una determinada posición del ensamble granular, las formas son representaciones numéricas, y no deben interpretarse como agregados. En esta figura se visualiza la tendencia a que el mayor número de contactos se ubique en las zonas en donde se encuentra el agregado grueso; ya que los agregados colindantes de éstos corresponden al agregado fino, y es lógico que una partícula de grava se enlace con decenas de partículas de arena. El gráfico permite identificar que durante todo el proceso de carga el mayor número de contactos tiende a concentrarse en el agregado grueso, lo que indica que los micro agrietamientos y primeras fisuras se ubican en zonas de arena.

Para identificar por zonas del conglomerado, en donde los agregados tienden a moverse más durante el proceso de carga uniaxial, se ha elaborado la FIGURA 4.54 con ParaView, en donde se identifica con esferas la posición y magnitud de la energía cinética por partícula en ese instante de tiempo. En el tiempo 1 se identifica el movimiento de todas las partículas al iniciar a aplicar la carga, del tiempo 2 al tiempo 4 se visualiza que la mayor energía cinética se concentra el interior del conglomerado, en posiciones indistintas, en los tiempos 5 y 6 se identifica que las zonas exteriores del conglomerado tienden a desplazarse. El comportamiento dinámico de las partículas es aleatorio y no predecible, las zonas con mayor energía cinética crecen progresivamente durante la fase de carga y luego en la fase de desgaste se desvanecen.

La FIGURA 4.55 y FIGURA 4.56 muestran el valor de fuerza neta por partícula, en secciones a 5cm y 10cm al interior del cubo, entendiéndose la fuerza neta como la masa por aceleración; calculadas de acuerdo a las ecuaciones que gobiernan el DEM. Entonces se identifica que las mayores fuerzas se concentran en el agregado grueso. En el tiempo 1 todas las partículas son aceleradas al iniciar el proceso de carga, y conforme avanza la carga hasta el tiempo 4 las mayores fuerzas netas se

concentran en el agregado grueso. En el tiempo 4 se identifica que por zonas las partículas de arena también presentan alta fuerza neta, siendo más probable que sean ellas las que se desprendan más rápidamente, por la relación aceleración-masa. Tan pronto se alcanza el pico de esfuerzo uniaxial en el tiempo 4, las mayores fuerzas netas tienden a concentrarse nuevamente en el agregado grueso. Al considerar los valores numéricos que representan los distintos colores de la figura, se evidencia que la magnitud de fuerza neta por partícula tiende a disminuir en el tiempo de carga, esto tiene relación con la FIGURA 4.54 que también indica numéricamente que la energía cinética por partícula tiende a disminuir. Entonces las partículas tienden al reposo.

En las FIGURA 4.57 y FIGURA 4.58 se presentan las velocidades angulares por partícula a cortes realizados a 5cm y 10cm del interior de cubo respectivamente. Se identifica que en el tiempo 1, al inicio de aplicación de carga, las partículas presentan propensión a girar; siendo las más pequeñas las que tienen mayor velocidad angular. Desde el tiempo 2 en adelante se presentan zonas en las cuales el agregado fino tiende a rotar, mientras que en el resto del conglomerado trata de mantenerse estático. Las zonas pintadas; de mayor rotación, forman diagonales, mismas que se pueden relacionar con los gráficos de desplazamientos de la sección 4.3, ya que la forma de falla del conglomerado forma un triángulo inferior. De esta observación se puede interpretar que es la rotación de los agregados finos influyente en el patrón de falla del hormigón.

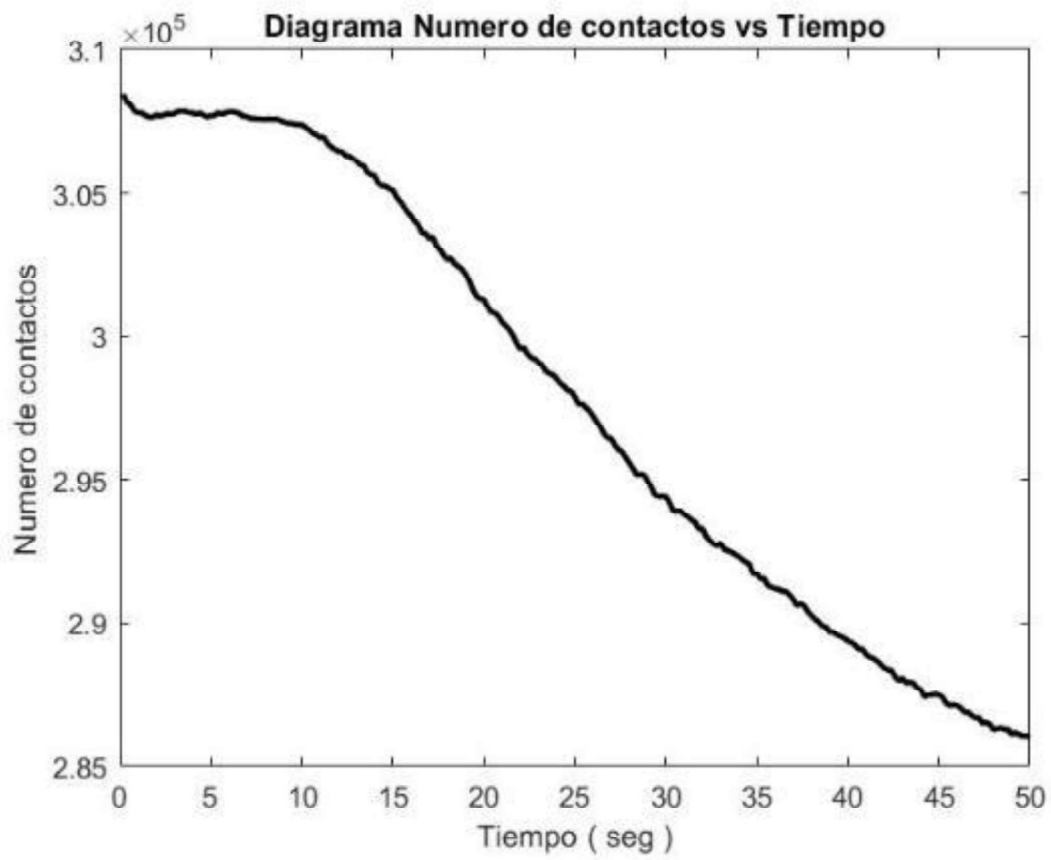
En las FIGURA 4.59 y FIGURA 4.60 se presentan las velocidades lineales por partícula en cortes realizados a 5cm y 10cm del interior del cubo respectivamente. Se identifica que en el tiempo 1, al inicio de la aplicación de carga, las partículas presentan propensión a desplazarse, siendo las más pequeñas las que tienen mayor velocidad lineal, a partir del tiempo 2 se conforman zonas en las cuales se presentan velocidades lineales, mientras que en el resto del conglomerado la tendencia es al reposo. En los tiempos 4, 5 y 6 se identifica una tendencia de las zonas de velocidad lineal mayor a formar diagonales en el cubo; pintados en color azul. En el tiempo de simulación todas las partículas tratan de llegar al reposo, y por ello numéricamente se evidencia la tendencia en disminución de la velocidad

lineal por partícula. Las zonas de mayor velocidad se pueden relacionar con los gráficos de desplazamiento de la sección 4.3, en la que se detalla la propensión del conglomerado a formar un triángulo inferior de falla. Por lo que se puede interpretar que la traslación de las partículas tiene influencia en la forma de falla del hormigón.

A partir de la observación de las figuras correspondientes a velocidad angular y velocidad lineal se identifica que el agregado grueso es el que menos se mueve, por lo que se interpreta que los primeros micro agrietamientos pueden presentarse en zonas de agregado fino. Sin embargo, al observar las figuras correspondientes a fuerza neta por partícula se identifica que la mayor fuerza neta se concentra en el agregado grueso, por lo que se interpreta que es el agregado grueso el que se encarga de transmitir las fuerzas a sus vecinas inmediatas. Esta observación guarda relación con las figuras de cadenas de fuerza mostradas en la sección 4.4, en donde se identifica que son los agregados gruesos los encargados de concentrar la mayor fuerza de contacto.

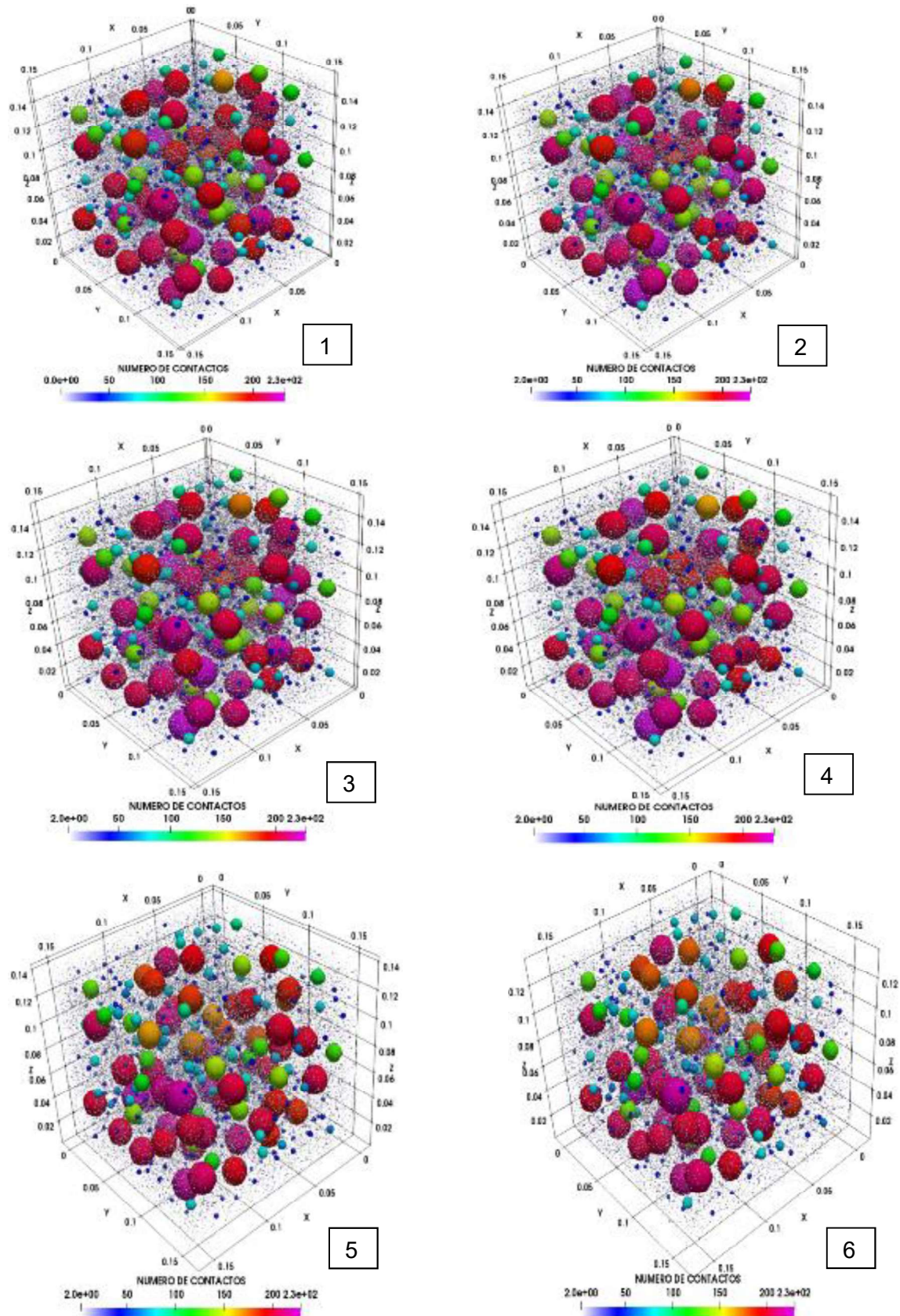
Entonces el mecanismo de fisura del modelo discreto del hormigón identificado, es que las fuerzas se transmiten al agregado más grueso y luego son distribuidas en los agregados finos colindantes, luego, éstos últimos tienden a moverse y rotar; generándose micro fisuras producto de mayor velocidad lineal o angular; mismas que son influentes en el patrón de falla del material.

**FIGURA 4.52** Diagrama número de contactos vs tiempo del conglomerado granular del modelo discreto del hormigón A.

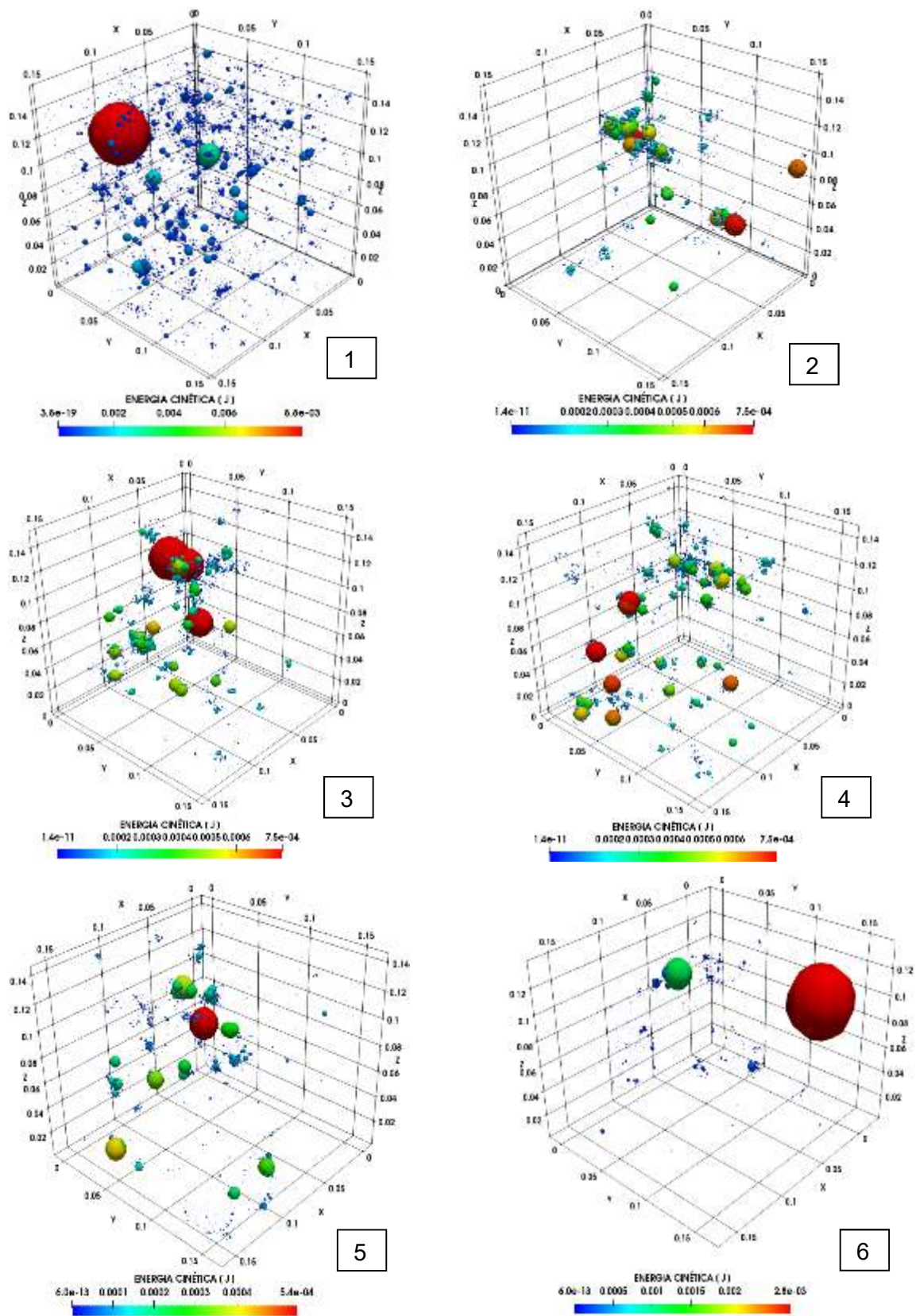




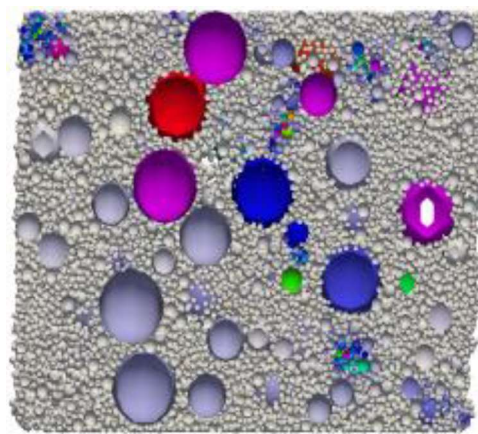
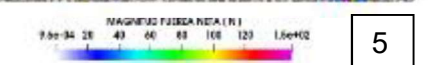
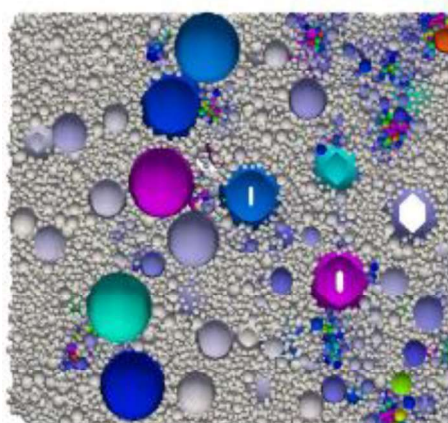
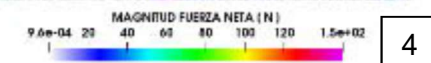
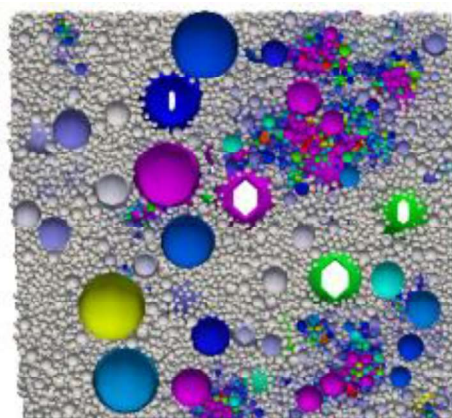
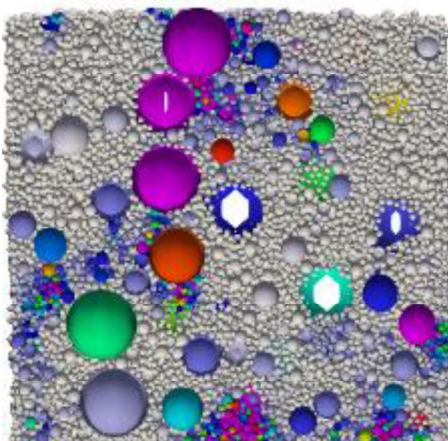
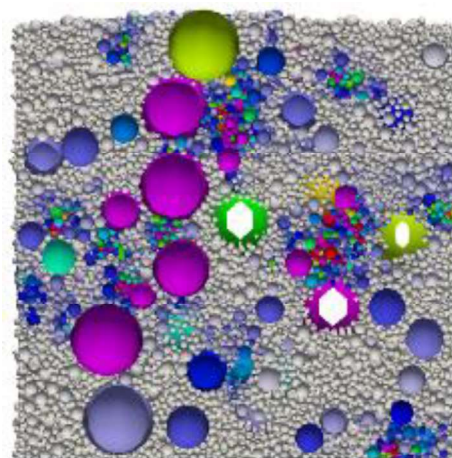
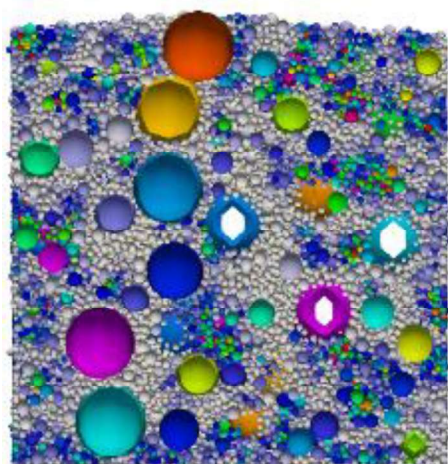
**FIGURA 4.53** Distribución de número de contactos por partícula del hormigón A



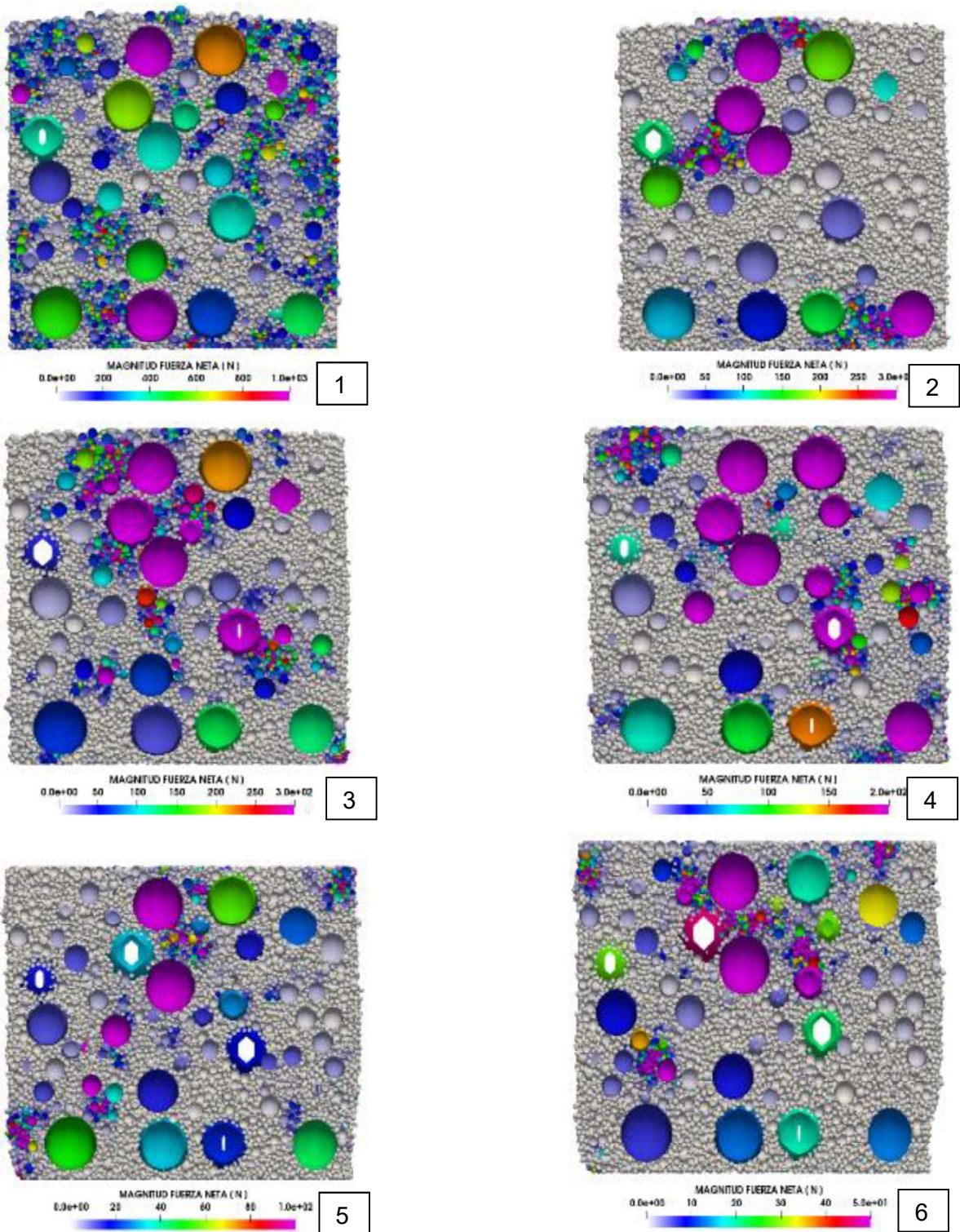
**FIGURA 4.54** Distribución de energía cinética en hormigón A, vista en 3D

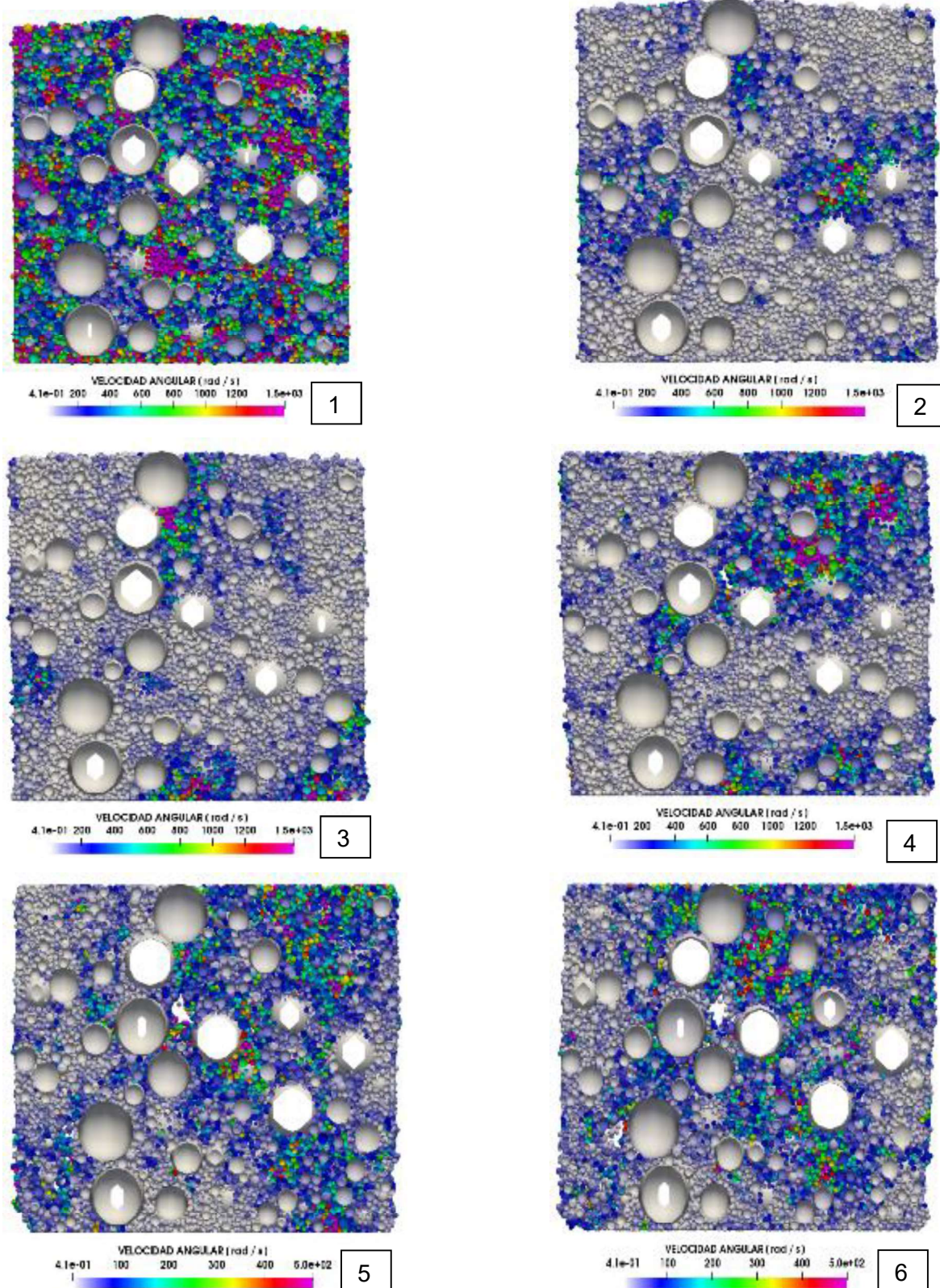


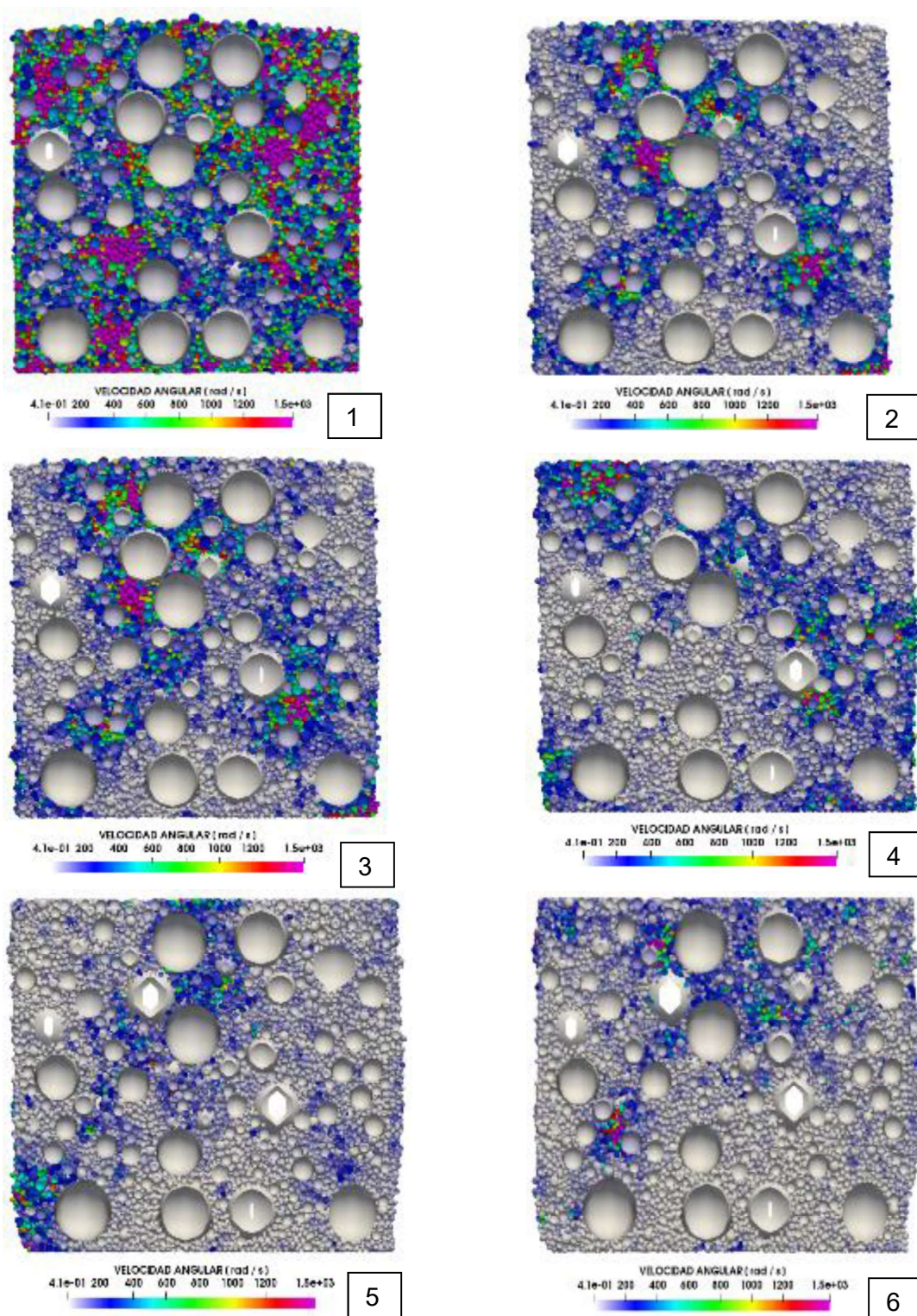
**FIGURA 4.55** Fuerza neta por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón A

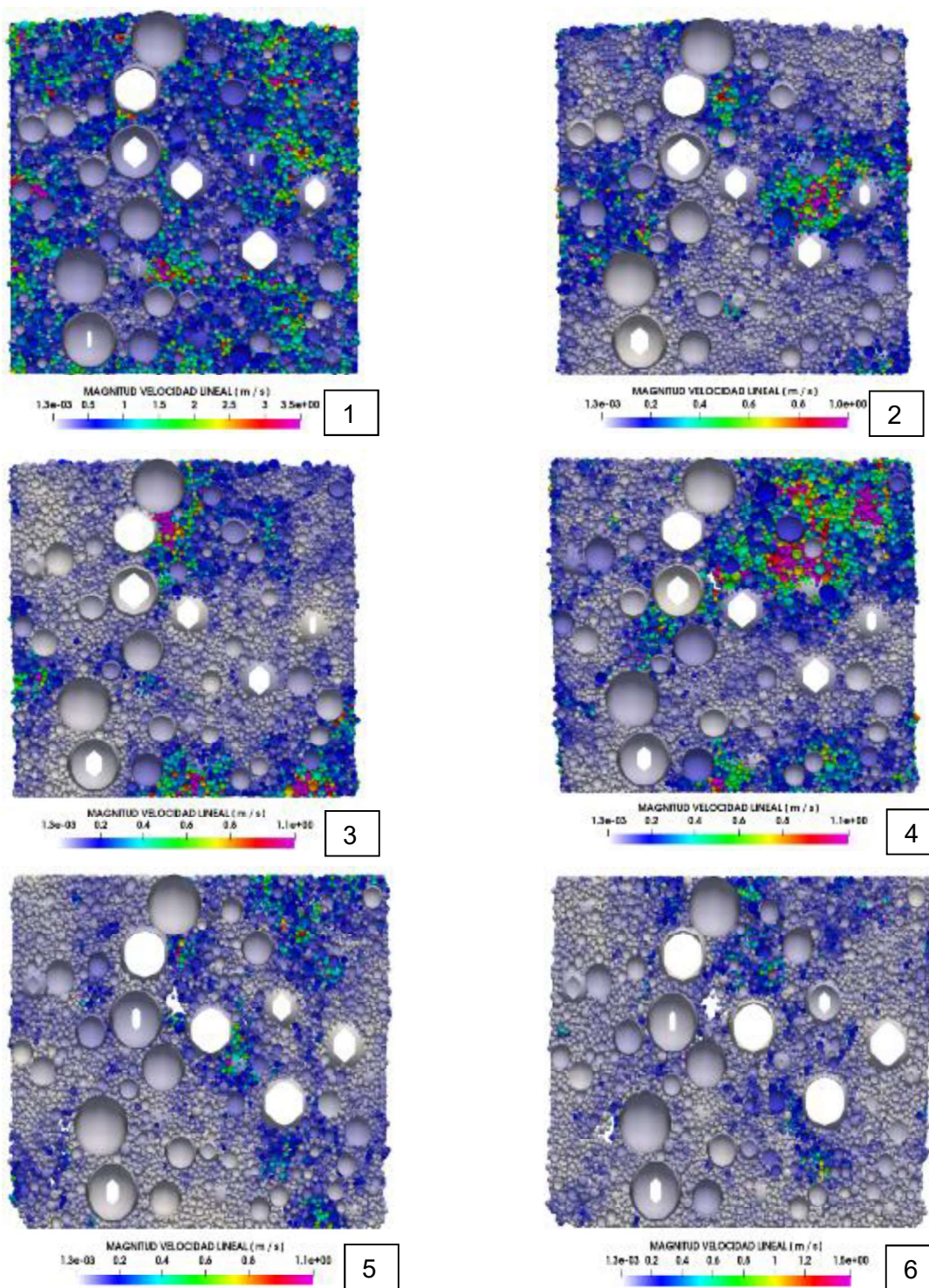


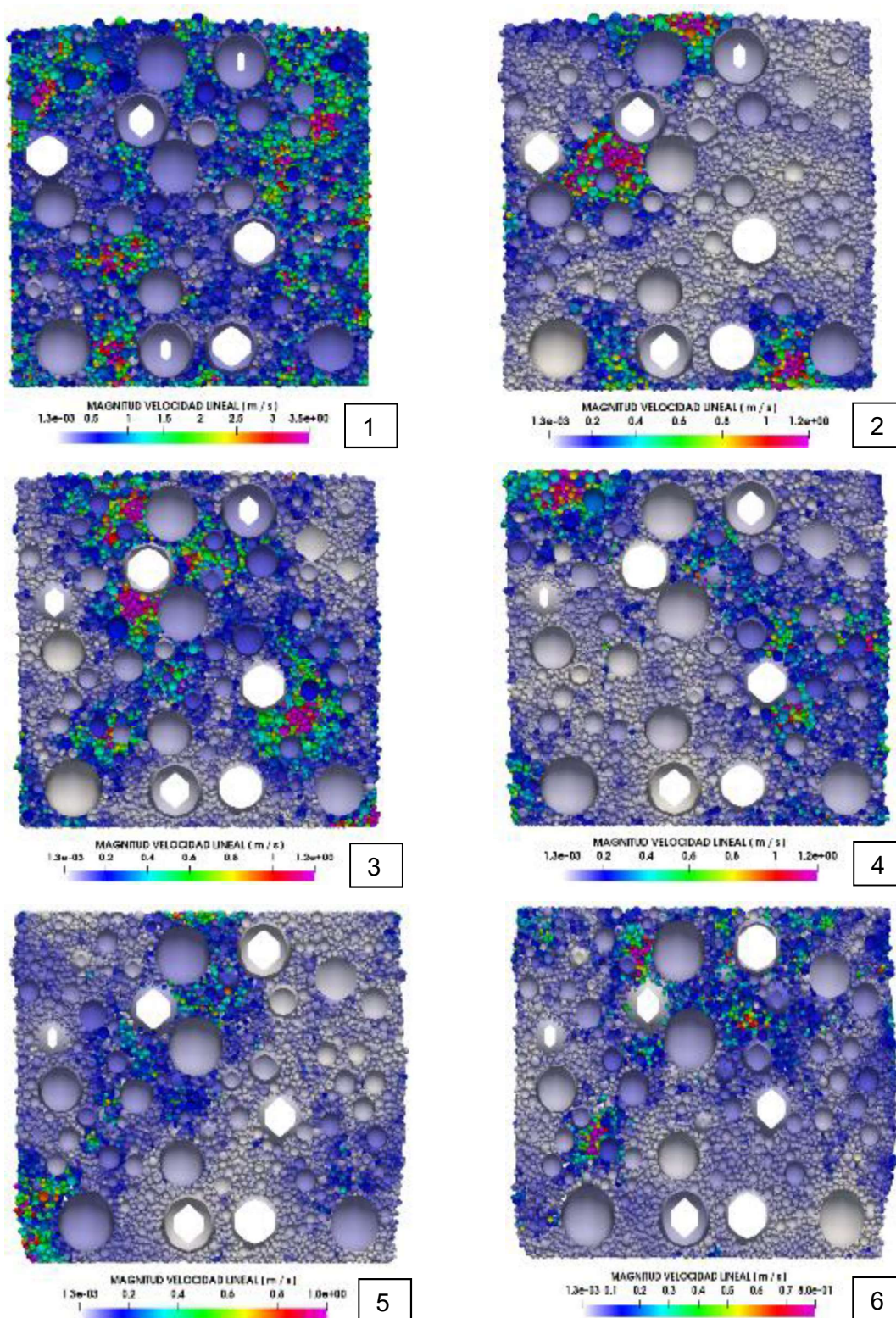
**FIGURA 4.56** Fuerza neta por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón A



**FIGURA 4.57** Velocidad angular por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón A

**FIGURA 4.58** Velocidad angular por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón A

**FIGURA 4.59** Velocidad lineal por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón A

**FIGURA 4.60** Velocidad lineal por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón A



#### 4.6.2 HORMIGÓN B

Para identificar la pérdida de contactos entre los agregados componentes del hormigón conforme es aplicada carga de compresión se ha realizado un análisis de contactos existentes en Matlab, a través de la evaluación del desarrollo de las cadenas de fuerzas. En la FIGURA 4.61 se observa el diagrama de número de contactos contra el tiempo, el cual es el número de contactos existentes entre todas las partículas del conglomerado en cada instante de tiempo durante la simulación. Los enlaces JKR son el origen de que los agregados formen un cubo; y en cuanto pierden contacto es que se producen agrietamientos en el hormigón.

En el diagrama de número de contactos vs tiempo se puede identificar que hasta los 13 segundos se trata de mantener la estructura del hormigón; procurando mantener los enlaces iniciales representados en este esquema por el número de contactos. A partir de este tiempo es que se pierden contactos uniformemente; es decir, el material se desgasta internamente. A pesar de que de acuerdo a la FIGURA 4.6 en el tiempo 3 (13.92 segundos) todavía no se llega al pico máximo de capacidad uniaxial, en el mismo tiempo se puede notar que sí se presentan menor número de contactos; lo que permite interpretar que el rango elástico del material no se puede determinar directamente del diagrama esfuerzo vs deformación experimental, y que el mismo está en un pequeño porcentaje de la capacidad uniaxial del material.

Para identificar las zonas que tienen mayor número de contactos en el conglomerado se han realizado esquemas en 3D en ParaView mostradas en la FIGURA 4.62. En los cuales se identifican por esferas los números de contactos existentes en una determinada posición del ensamble granular, las formas son representaciones numéricas, y no deben interpretarse como agregados. En esta figura se visualiza la tendencia a que el mayor número de contactos se ubique en las zonas en donde se encuentra el agregado grueso; ya que los agregados colindantes de éstos corresponden al agregado fino, y es lógico que una partícula de grava se enlace con decenas de partículas de arena. El gráfico permite identificar que durante todo el proceso de carga el mayor número de contactos

tiende a concentrarse en el agregado grueso, lo que indica que los microagrietamientos y primeras fisuras se ubican en zonas de arena.

Para identificar por zonas del conglomerado, en donde los agregados tienden a moverse más durante el proceso de carga uniaxial, se ha elaborado la FIGURA 4.63 con ParaView, en donde se identifica con esferas la posición y magnitud de la energía cinética por partícula en ese instante de tiempo. En el tiempo 1 se identifica el movimiento de todas las partículas al iniciar a aplicar la carga, del tiempo 2 al tiempo 4 se visualiza que la mayor energía cinética se concentra en el interior del conglomerado, en posiciones indistintas, en los tiempos 5 y 6 se identifica que las zonas exteriores del conglomerado tienden a desplazarse. El comportamiento dinámico de las partículas es aleatorio y no predecible, las zonas con mayor energía cinética crecen progresivamente durante la fase de carga y luego en la fase de desgaste se desvanecen.

La FIGURA 4.64 y FIGURA 4.65 muestran el valor de fuerza neta por partícula, en secciones a 5cm y 10cm al interior del cubo, entendiéndose la fuerza neta como la masa por aceleración; calculadas de acuerdo a las ecuaciones que gobiernan el DEM. Entonces se identifica que las mayores fuerzas se concentran en el agregado grueso. En el tiempo 1 todas las partículas son aceleradas al iniciar el proceso de carga, y conforme avanza la carga hasta el tiempo 4 las mayores fuerzas netas se concentran en el agregado grueso. En el tiempo 4 se identifica que por zonas las partículas de arena también presentan alta fuerza neta, siendo más probable que sean ellas las que se desprendan más rápidamente, por la relación aceleración-masa. Tan pronto se alcanza el pico de esfuerzo uniaxial en el tiempo 4, las mayores fuerzas netas tienden a concentrarse nuevamente en el agregado grueso. Al considerar los valores numéricos que representan los distintos colores de la figura, se evidencia que la magnitud de fuerza neta por partícula tiende a disminuir en el tiempo de carga, esto tiene relación con la FIGURA 4.63 que también indica numéricamente que la energía cinética por partícula tiende a disminuir. Entonces las partículas tienden al reposo.

En las FIGURA 4.66 y FIGURA 4.67 se presentan las velocidades angulares por partícula a cortes realizados a 5cm y 10cm del interior de cubo respectivamente.

Se identifica que en el tiempo 1, al inicio de aplicación de carga, las partículas presentan propensión a girar; siendo las más pequeñas las que tienen mayor velocidad angular. Desde el tiempo 2 en adelante se presentan zonas en las cuales el agregado fino tiende a rotar, mientras que en el resto del conglomerado trata de mantenerse estático. Las zonas pintadas; de mayor rotación, forman diagonales, mismas que se pueden relacionar con los gráficos de desplazamientos de la sección 4.3, ya que la forma de falla del conglomerado forma un triángulo inferior. De esta observación se puede interpretar que es la rotación de los agregados finos influyente en el patrón de falla del hormigón.

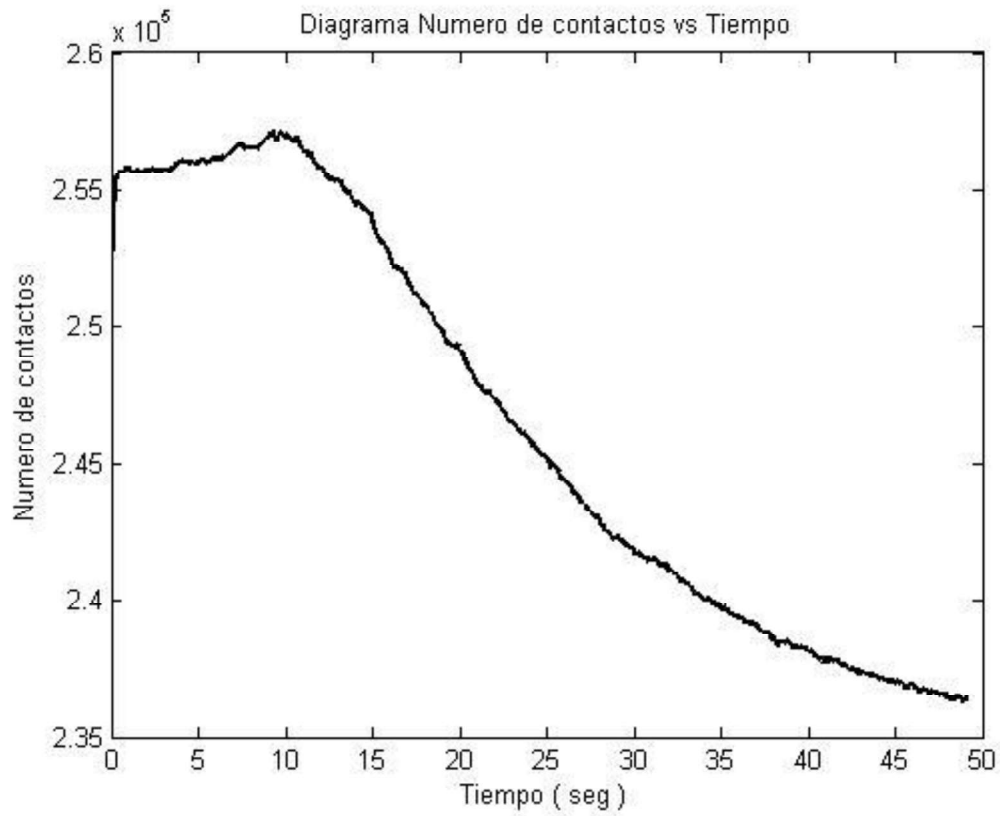
En las FIGURA 4.68 y FIGURA 4.69 se presentan las velocidades lineales por partícula en cortes realizados a 5cm y 10cm del interior del cubo respectivamente. Se identifica que en el tiempo 1, al inicio de la aplicación de carga, las partículas presentan propensión a desplazarse, siendo las más pequeñas las que tienen mayor velocidad lineal, a partir del tiempo 2 se conforman zonas en las cuales se presentan velocidades lineales, mientras que en el resto del conglomerado la tendencia es al reposo. En los tiempos 4, 5 y 6 se identifica una tendencia de las zonas de velocidad lineal mayor a formar diagonales en el cubo; pintados en color azul. En el tiempo de simulación todas las partículas tratan de llegar al reposo, y por ello numéricamente se evidencia la tendencia en disminución de la velocidad lineal por partícula. Las zonas de mayor velocidad se pueden relacionar con los gráficos de desplazamiento de la sección 4.3, en la que se detalla la propensión del conglomerado a formar un triángulo inferior de falla. Por lo que se puede interpretar que la traslación de las partículas tiene influencia en la forma de falla del hormigón.

A partir de la observación de las figuras correspondientes a velocidad angular y velocidad lineal se identifica que el agregado grueso es el que menos se mueve, por lo que se interpreta que los primeros micro agrietamientos pueden presentarse en zonas de agregado fino. Sin embargo, al observar las figuras correspondientes a fuerza neta por partícula se identifica que la mayor fuerza neta se concentra en el agregado grueso, por lo que se interpreta que es el agregado grueso el que se encarga de transmitir las fuerzas a sus vecinas inmediatas. Esta observación guarda relación con las figuras de cadenas de fuerza mostradas en la sección 4.4,

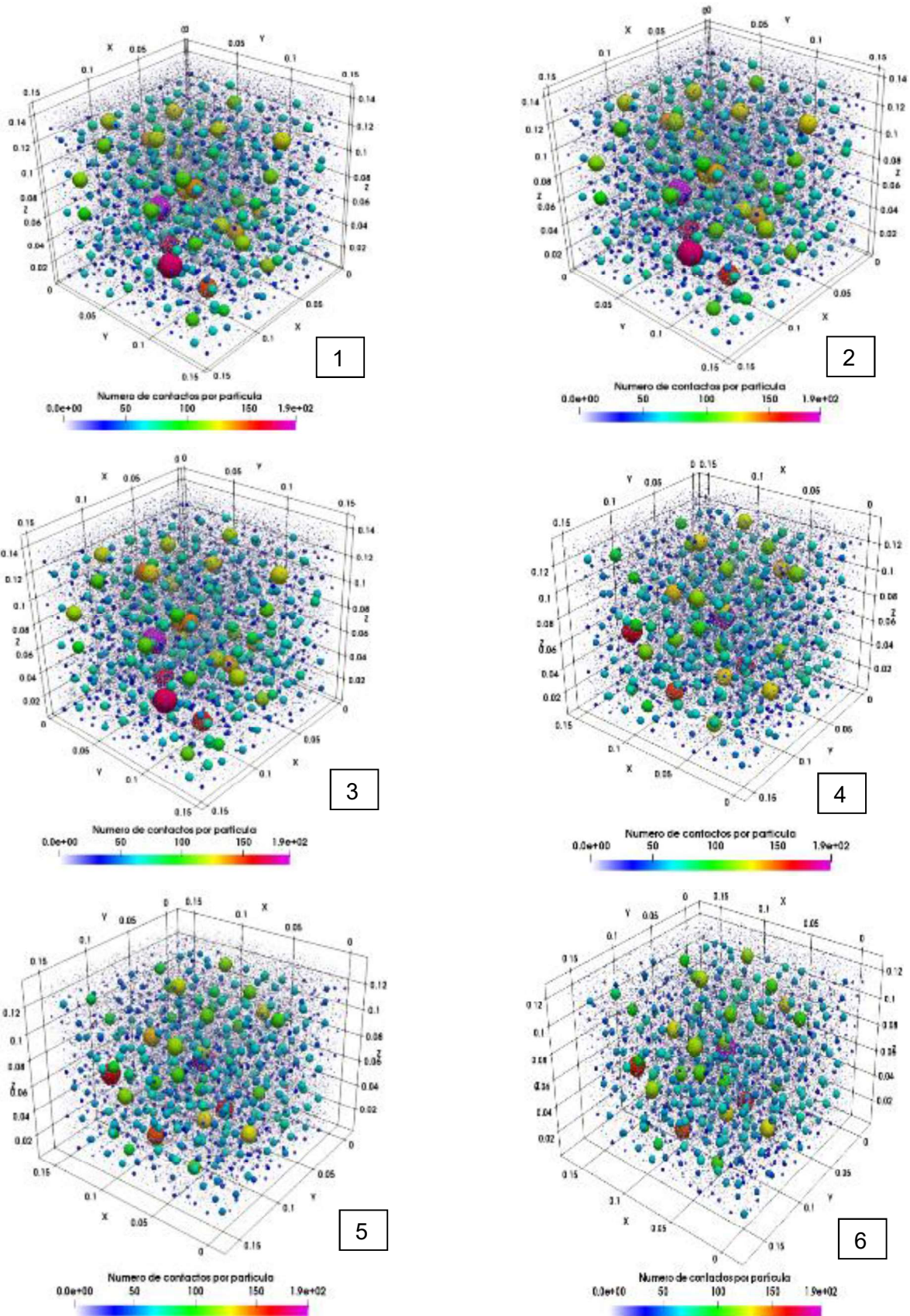
en donde se identifica que son los agregados gruesos los encargados de concentrar la mayor fuerza de contacto.

Entonces el mecanismo de fisura del modelo discreto del hormigón identificado, es que las fuerzas se transmiten al agregado más grueso y luego son distribuidas en los agregados finos colindantes, luego, éstos últimos tienden a moverse y rotar; generándose micro fisuras producto de mayor velocidad lineal o angular; mismas que son influentes en el patrón de falla del material.

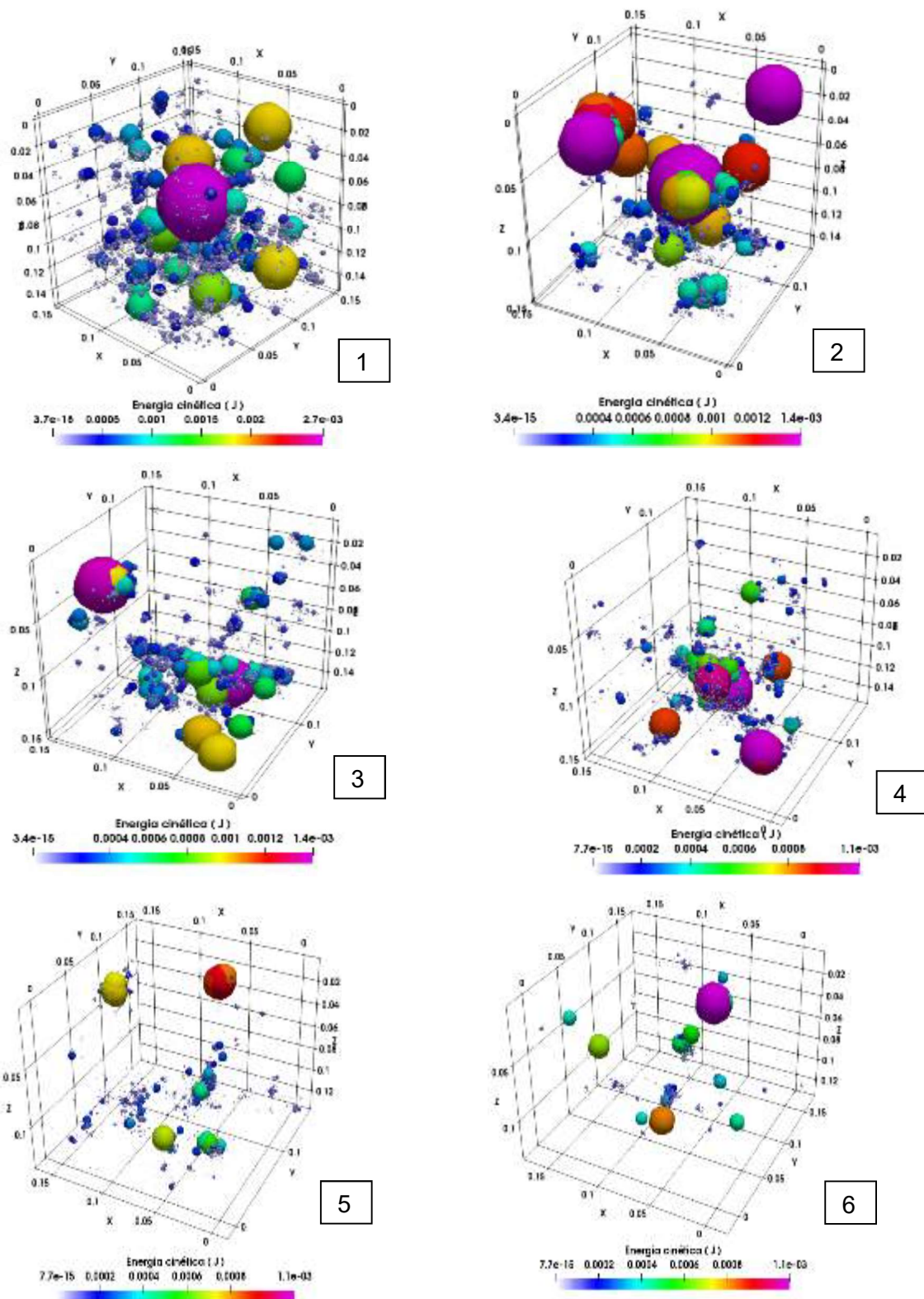
**FIGURA 4.61** Diagrama número de contactos vs tiempo del conglomerado granular del modelo discreto del hormigón B.

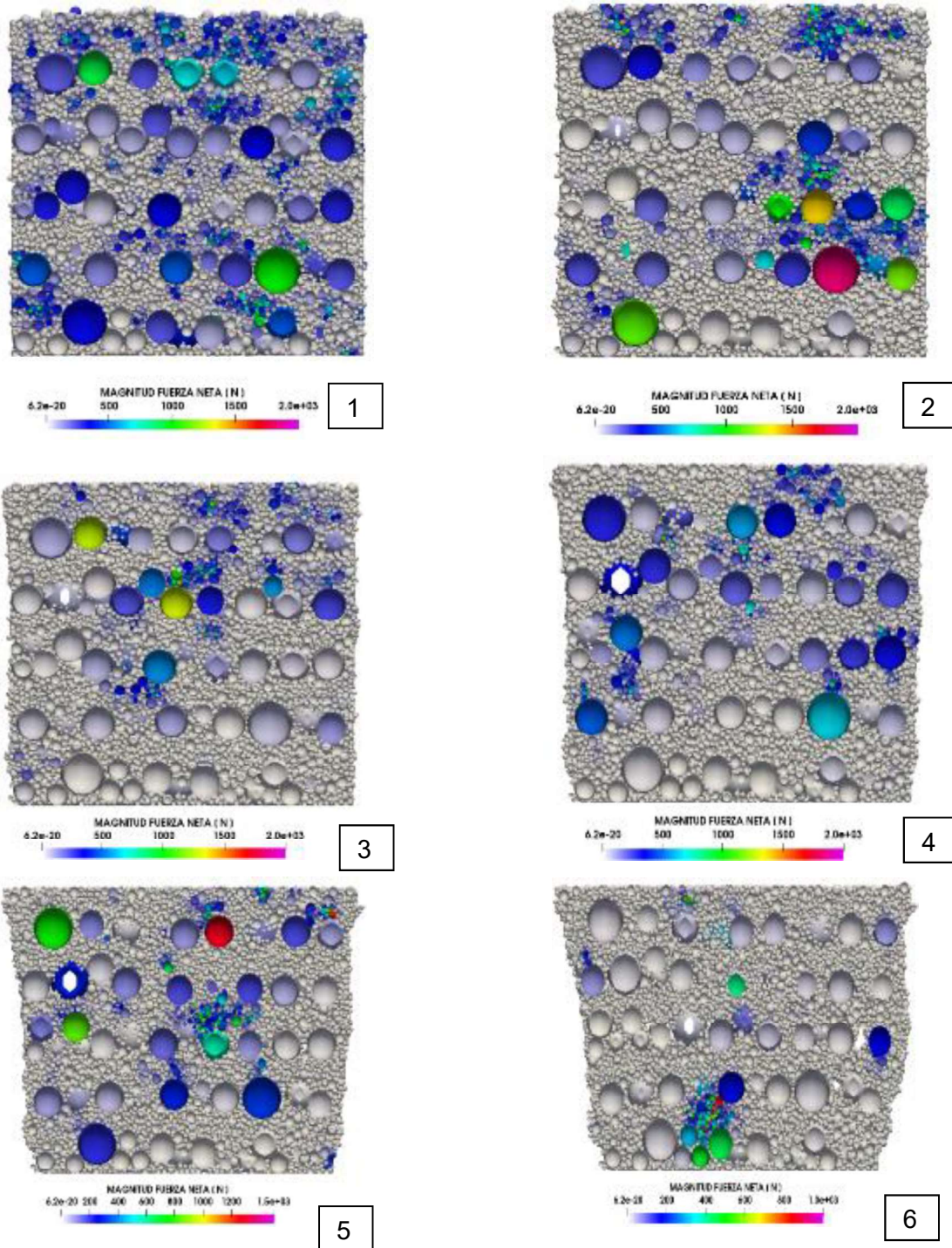


**FIGURA 4.62** Distribución de número de contactos por partícula del hormigón B



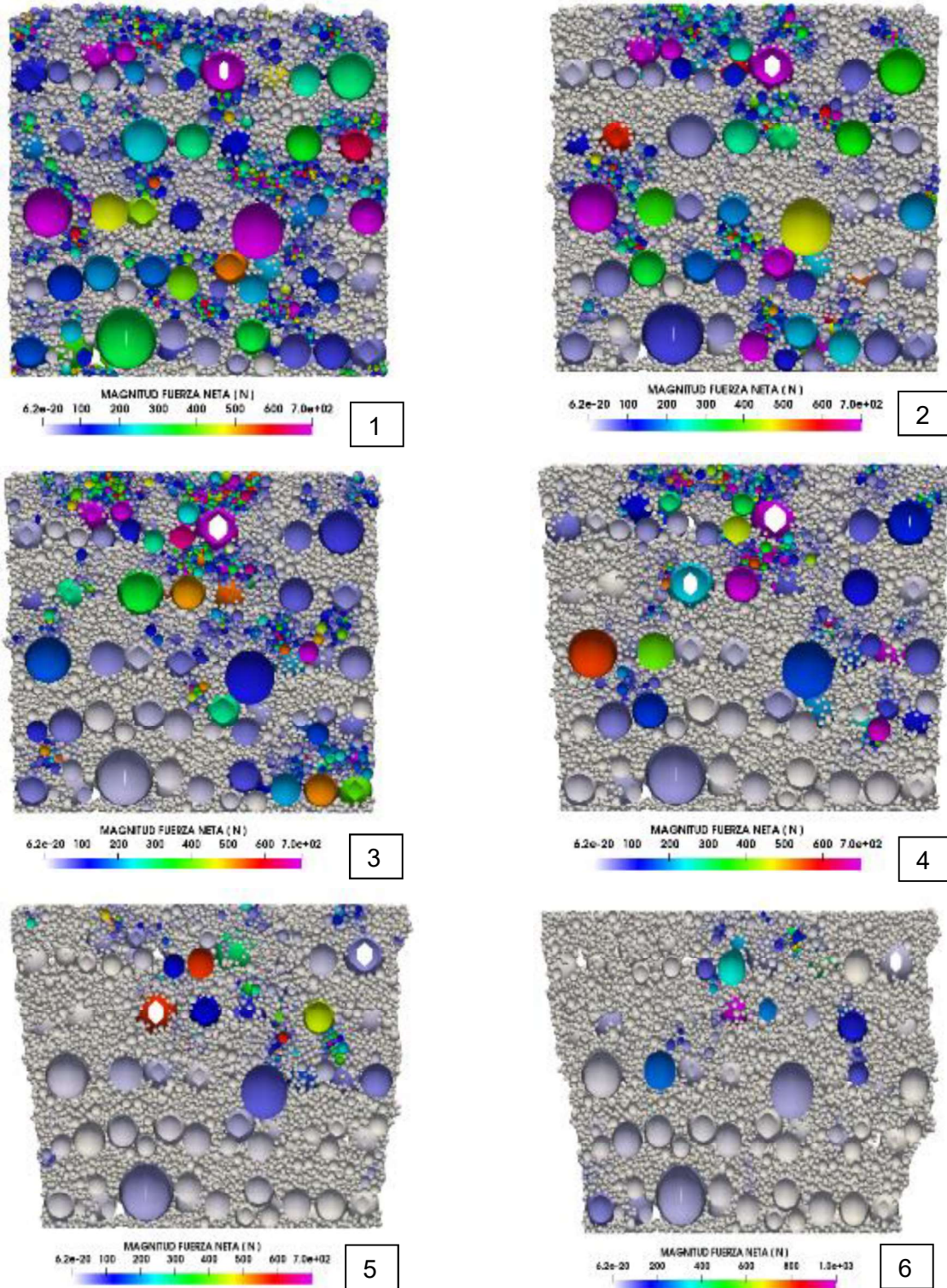
**FIGURA 4.63** Distribución de energía cinética en hormigón B, vista en 3D



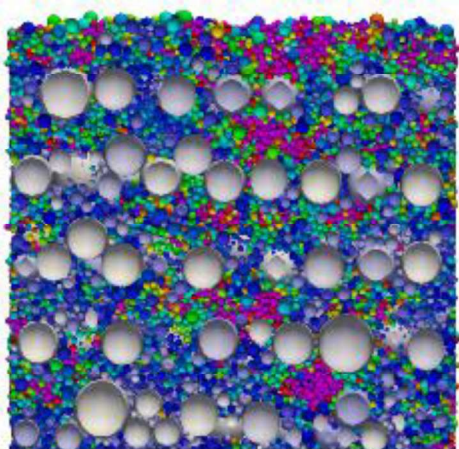
**FIGURA 4.64** Fuerza neta por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón B



**FIGURA 4.65** Fuerza neta por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón B

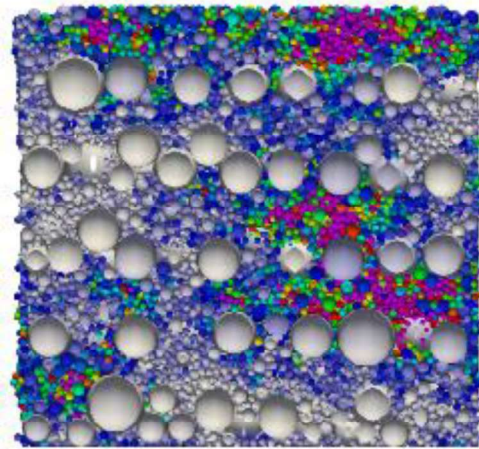


**FIGURA 4.66** Velocidad angular por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón B



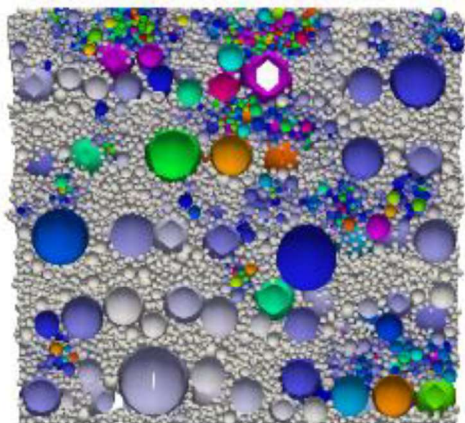
MAGNITUD VELOCIDAD ANGULAR (rad / s)  
3.0e+00 200 400 600 800 1000 1200 1.4e+03

1



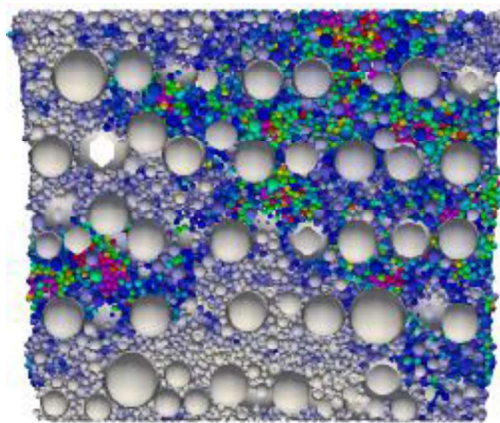
MAGNITUD VELOCIDAD ANGULAR (rad / s)  
3.0e+00 200 400 600 800 1000 1200 1.4e+03

2



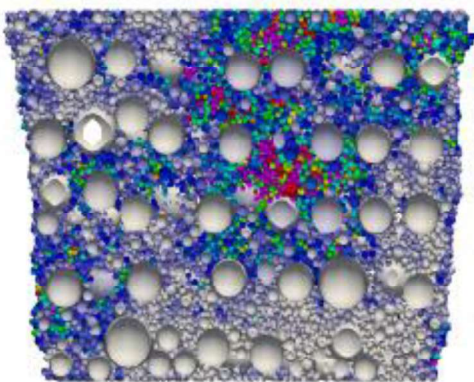
MAGNITUD FUERZA NETA (N)  
6.2e-20 100 200 300 400 500 600 7.0e+02

3



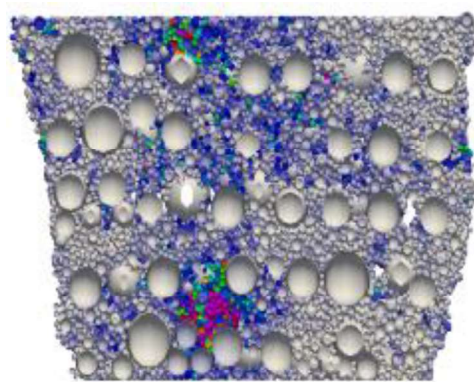
MAGNITUD VELOCIDAD ANGULAR (rad / s)  
3.0e+00 200 400 600 800 1000 1200 1.4e+03

4



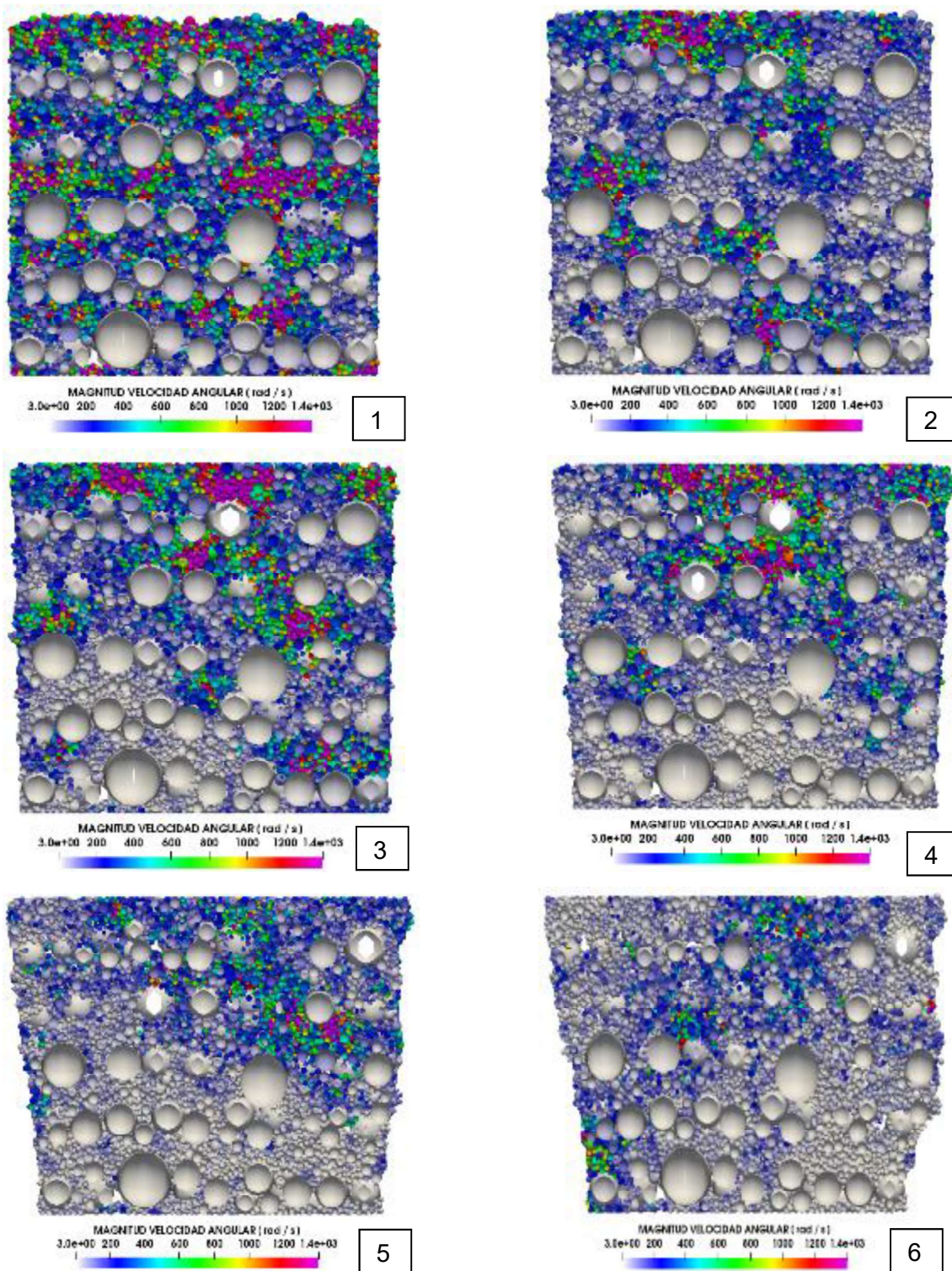
MAGNITUD VELOCIDAD ANGULAR (rad / s)  
3.0e+00 200 400 600 800 1000 1200 1.4e+03

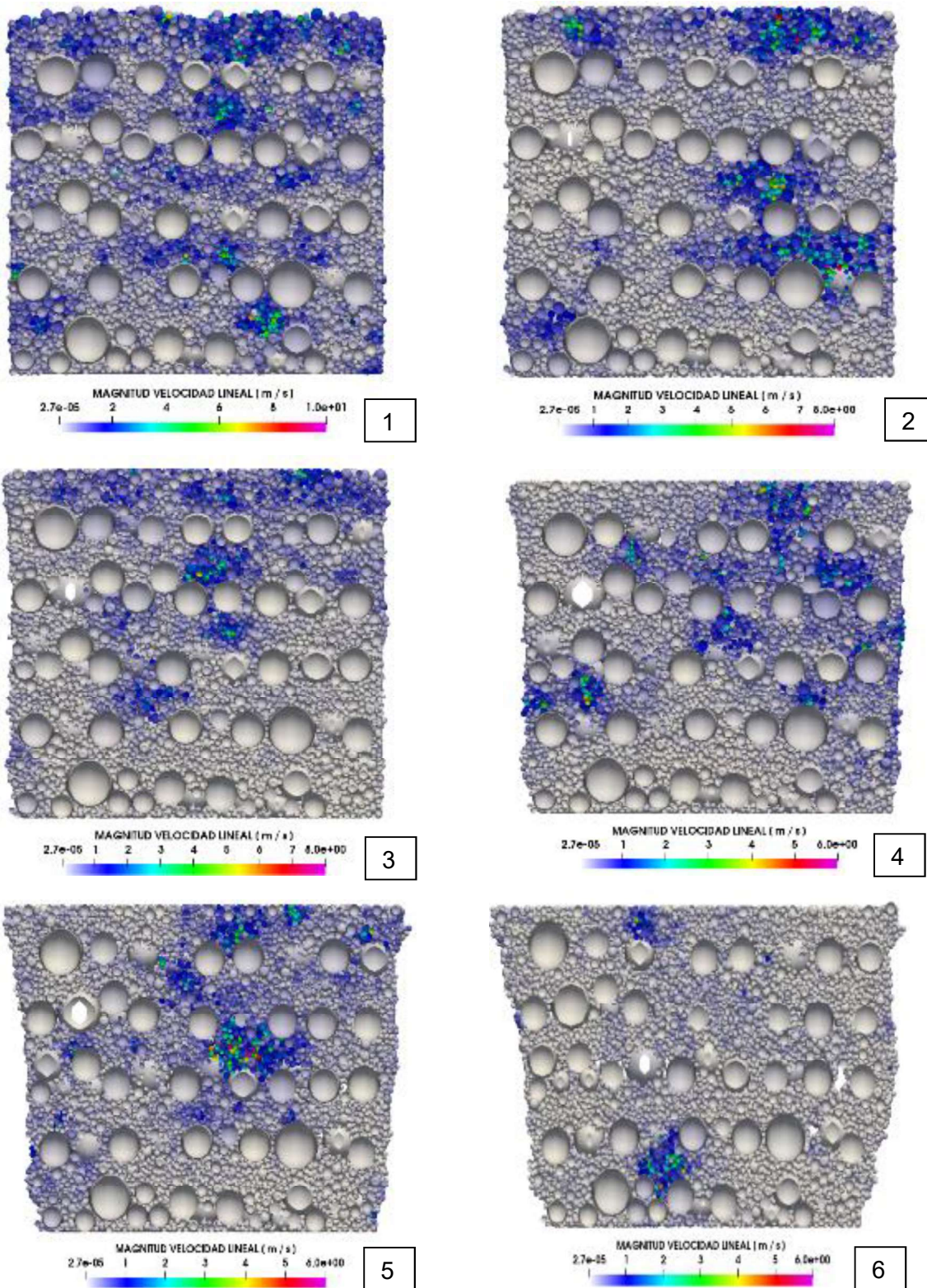
5



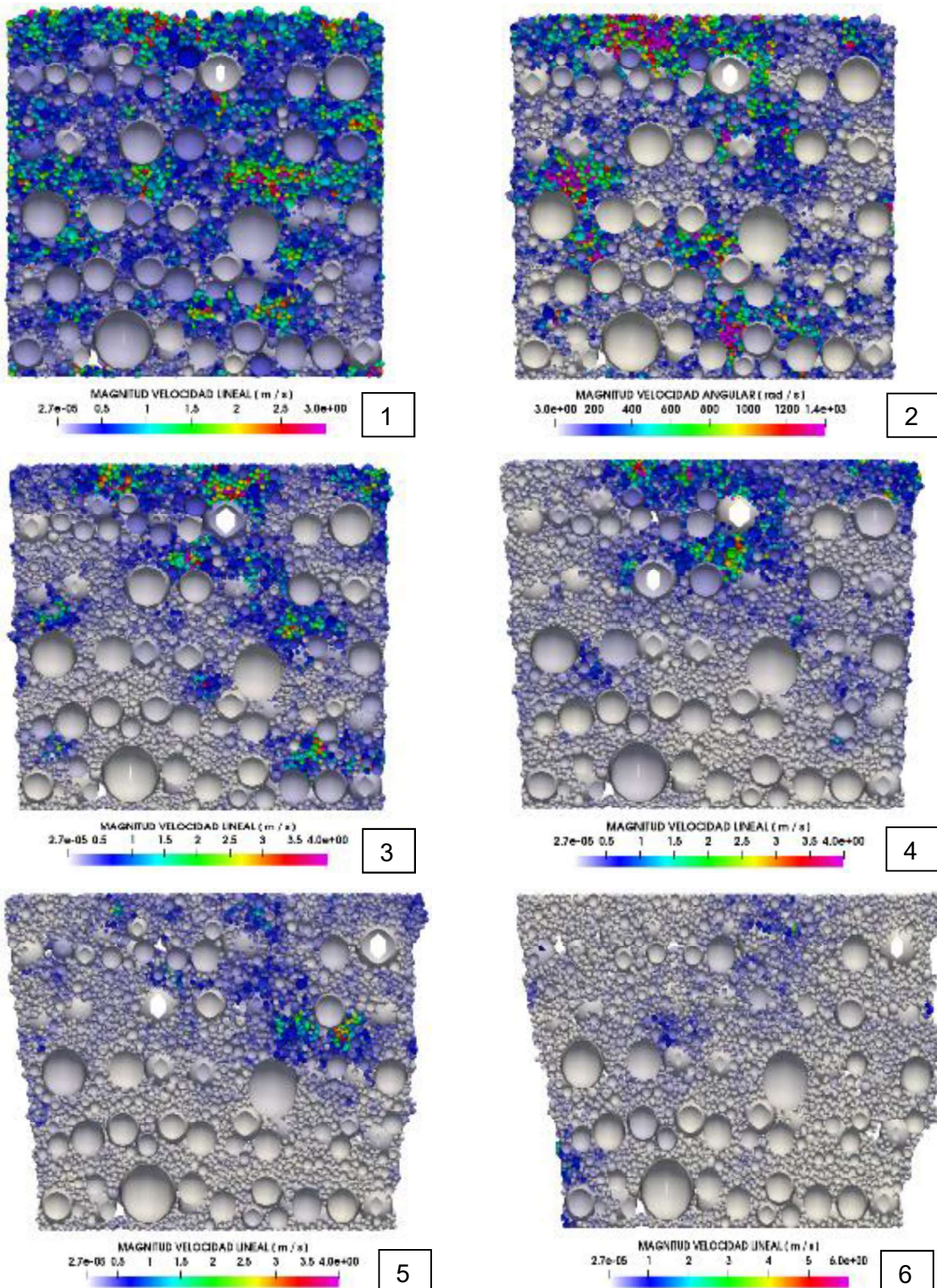
MAGNITUD VELOCIDAD ANGULAR (rad / s)  
3.0e+00 200 400 600 800 1000 1200 1.4e+03

6

**FIGURA 4.67** Velocidad angular por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón B

**FIGURA 4.68** Velocidad lineal por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón B

**FIGURA 4.69** Velocidad lineal por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón B



### 4.6.3 HORMIGÓN C

Para identificar la pérdida de contactos entre los agregados componentes del hormigón conforme es aplicada carga de compresión se ha realizado un análisis de contactos existentes en Matlab, a través de la evaluación del desarrollo de las cadenas de fuerzas. En la FIGURA 4.70 se observa el diagrama de número de contactos contra el tiempo, el cual es el número de contactos existentes entre todas las partículas del conglomerado en cada instante de tiempo durante la simulación. Los enlaces JKR son el origen de que los agregados formen un cubo; y en cuanto pierden contacto es que se producen agrietamientos en el hormigón.

En el diagrama de número de contactos vs tiempo se puede identificar que hasta los 13 segundos se trata de mantener la estructura del hormigón; procurando mantener los enlaces iniciales representados en este esquema por el número de contactos. A partir de este tiempo es que se pierden contactos uniformemente; es decir, el material se desgasta internamente. A pesar de que de acuerdo a la FIGURA 4.9 en el tiempo 3 (13.92 segundos) todavía no se llega al pico máximo de capacidad uniaxial, en el mismo tiempo se puede notar que sí se presentan menor número de contactos; lo que permite interpretar que el rango elástico del material no se puede determinar directamente del diagrama esfuerzo vs deformación experimental, y que el mismo está en un pequeño porcentaje de la capacidad uniaxial del material.

Para identificar las zonas que tienen mayor número de contactos en el conglomerado se han realizado esquemas en 3D en ParaView mostradas en la FIGURA 4.71. En los cuales se identifican por esferas los números de contactos existentes en una determinada posición del ensamble granular, las formas son representaciones numéricas, y no deben interpretarse como agregados. En esta figura se visualiza la tendencia a que el mayor número de contactos se ubique en las zonas en donde se encuentra el agregado grueso; ya que los agregados colindantes de éstos corresponden al agregado fino, y es lógico que una partícula de grava se enlace con decenas de partículas de arena. El gráfico permite identificar que durante todo el proceso de carga el mayor número de contactos

tiende a concentrarse en el agregado grueso, lo que indica que los microagrietamientos y primeras fisuras se ubican en zonas de arena.

Para identificar por zonas del conglomerado, en donde los agregados tienden a moverse más durante el proceso de carga uniaxial, se ha elaborado la FIGURA 4.72 con ParaView, en donde se identifica con esferas la posición y magnitud de la energía cinética por partícula en ese instante de tiempo. En el tiempo 1 se identifica el movimiento de todas las partículas al iniciar a aplicar la carga, del tiempo 2 al tiempo 4 se visualiza que la mayor energía cinética se concentra el interior del conglomerado, en posiciones indistintas, en los tiempos 5 y 6 se identifica que las zonas exteriores del conglomerado tienden a desplazarse. El comportamiento dinámico de las partículas es aleatorio y no predecible, las zonas con mayor energía cinética crecen progresivamente durante la fase de carga y luego en la fase de desgaste se desvanecen.

La FIGURA 4.73 y FIGURA 4.74 muestran el valor de fuerza neta por partícula, en secciones a 5cm y 10cm al interior del cubo, entendiéndose la fuerza neta como la masa por aceleración; calculadas de acuerdo a las ecuaciones que gobiernan el DEM. Entonces se identifica que las mayores fuerzas se concentran en el agregado grueso. En el tiempo 1 todas las partículas son aceleradas al iniciar el proceso de carga, y conforme avanza la carga hasta el tiempo 4 las mayores fuerzas netas se concentran en el agregado grueso. En el tiempo 4 se identifica que por zonas las partículas de arena también presentan alta fuerza neta, siendo más probable que sean ellas las que se desprendan más rápidamente, por la relación aceleración-masa. Tan pronto se alcanza el pico de esfuerzo uniaxial en el tiempo 4, las mayores fuerzas netas tienden a concentrarse nuevamente en el agregado grueso. Al considerar los valores numéricos que representan los distintos colores de la figura, se evidencia que la magnitud de fuerza neta por partícula tiende a disminuir en el tiempo de carga, esto tiene relación con la FIGURA 4.72 que también indica numéricamente que la energía cinética por partícula tiende a disminuir. Entonces las partículas tienden al reposo.

En las FIGURA 4.75 y FIGURA 4.76 se presentan las velocidades angulares por partícula a cortes realizados a 5cm y 10cm del interior de cubo respectivamente.

Se identifica que en el tiempo 1, al inicio de aplicación de carga, las partículas presentan propensión a girar; siendo las más pequeñas las que tienen mayor velocidad angular. Desde el tiempo 2 en adelante se presentan zonas en las cuales el agregado fino tiende a rotar, mientras que en el resto del conglomerado trata de mantenerse estático. Las zonas pintadas; de mayor rotación, forman diagonales, mismas que se pueden relacionar con los gráficos de desplazamientos de la sección 4.3, ya que la forma de falla del conglomerado forma un triángulo inferior. De esta observación se puede interpretar que es la rotación de los agregados finos influyente en el patrón de falla del hormigón.

En las FIGURA 4.77 y FIGURA 4.78 se presentan las velocidades lineales por partícula en cortes realizados a 5cm y 10cm del interior del cubo respectivamente. Se identifica que en el tiempo 1, al inicio de la aplicación de carga, las partículas presentan propensión a desplazarse, siendo las más pequeñas las que tienen mayor velocidad lineal, a partir del tiempo 2 se conforman zonas en las cuales se presentan velocidades lineales, mientras que en el resto del conglomerado la tendencia es al reposo. En los tiempos 4, 5 y 6 se identifica una tendencia de las zonas de velocidad lineal mayor a formar diagonales en el cubo; pintados en color azul. En el tiempo de simulación todas las partículas tratan de llegar al reposo, y por ello numéricamente se evidencia la tendencia en disminución de la velocidad lineal por partícula. Las zonas de mayor velocidad se pueden relacionar con los gráficos de desplazamiento de la sección 4.3, en la que se detalla la propensión del conglomerado a formar un triángulo inferior de falla. Por lo que se puede interpretar que la traslación de las partículas tiene influencia en la forma de falla del hormigón.

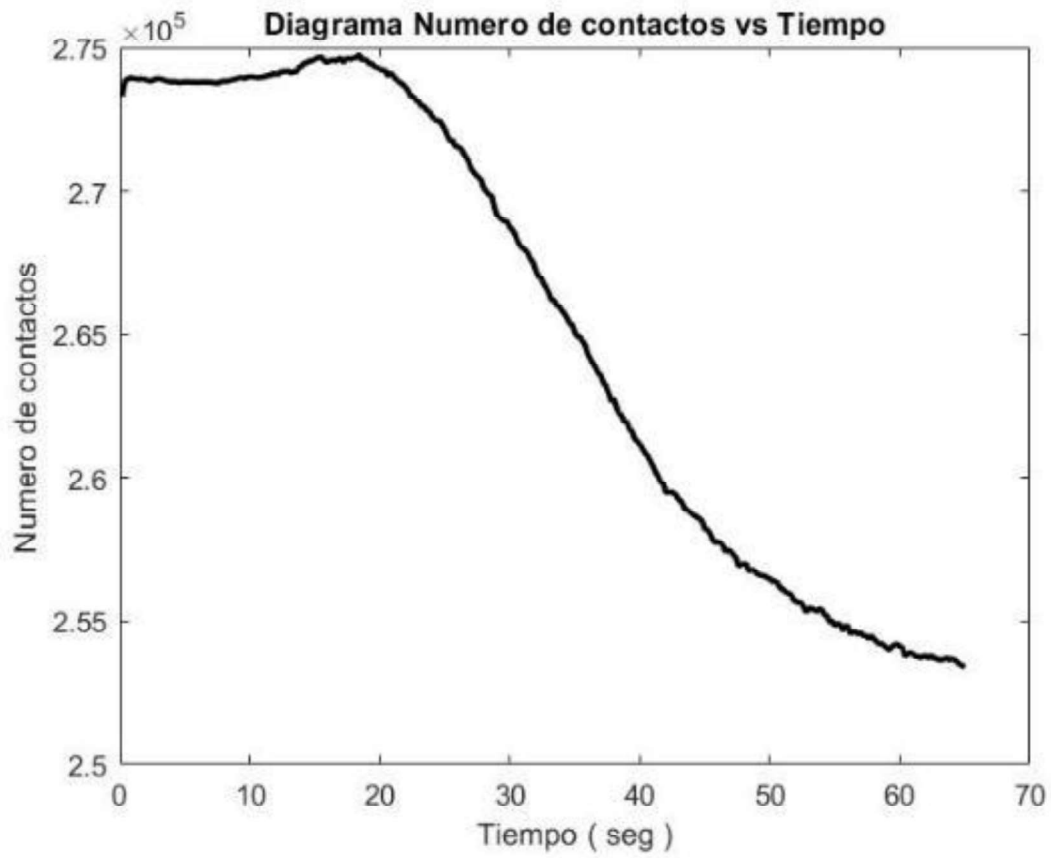
A partir de la observación de las figuras correspondientes a velocidad angular y velocidad lineal se identifica que el agregado grueso es el que menos se mueve, por lo que se interpreta que los primeros micro agrietamientos pueden presentarse en zonas de agregado fino. Sin embargo, al observar las figuras correspondientes a fuerza neta por partícula se identifica que la mayor fuerza neta se concentra en el agregado grueso, por lo que se interpreta que es el agregado grueso el que se encarga de transmitir las fuerzas a sus vecinas inmediatas. Esta observación guarda relación con las figuras de cadenas de fuerza mostradas en la sección 4.4,



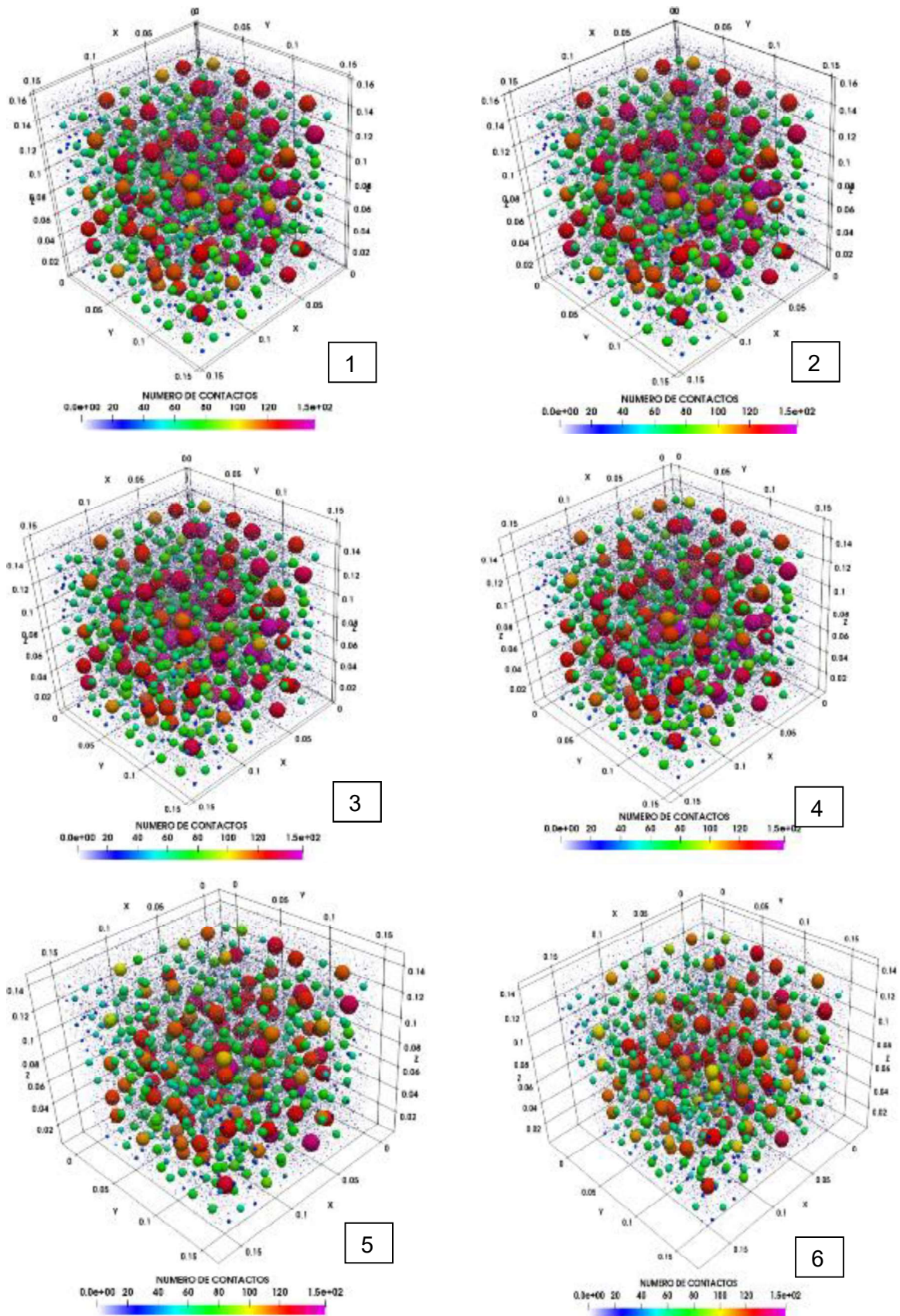
en donde se identifica que son los agregados gruesos los encargados de concentrar la mayor fuerza de contacto.

Entonces el mecanismo de fisura del modelo discreto del hormigón identificado, es que las fuerzas se transmiten al agregado más grueso y luego son distribuidas en los agregados finos colindantes, luego, éstos últimos tienden a moverse y rotar; generándose micro fisuras producto de mayor velocidad lineal o angular; mismas que son influentes en el patrón de falla del material.

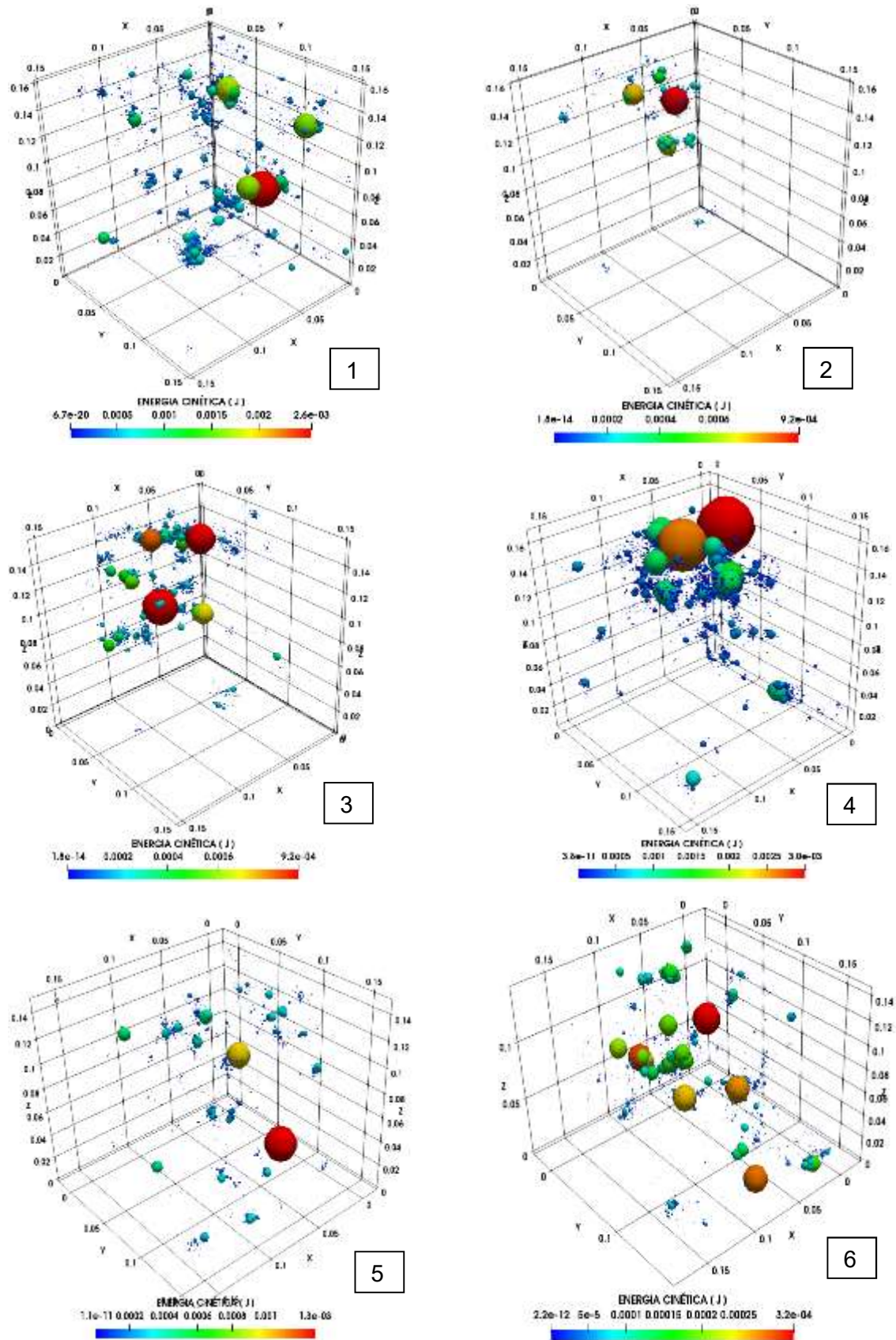
**FIGURA 4.70** Diagrama número de contactos vs tiempo del conglomerado granular del modelo discreto del hormigón C.

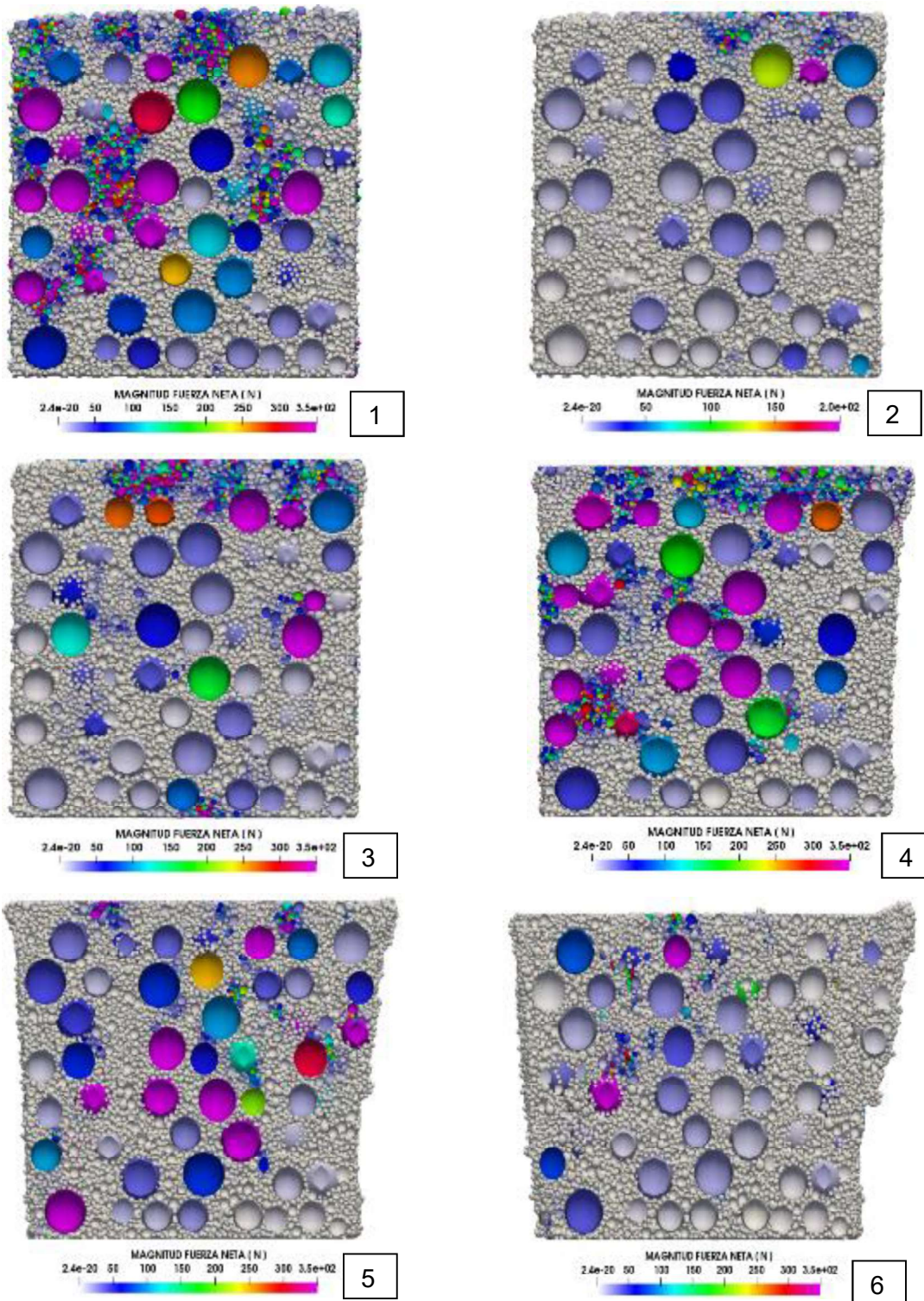


**FIGURA 4.71** Distribución de número de contactos por partícula del hormigón C

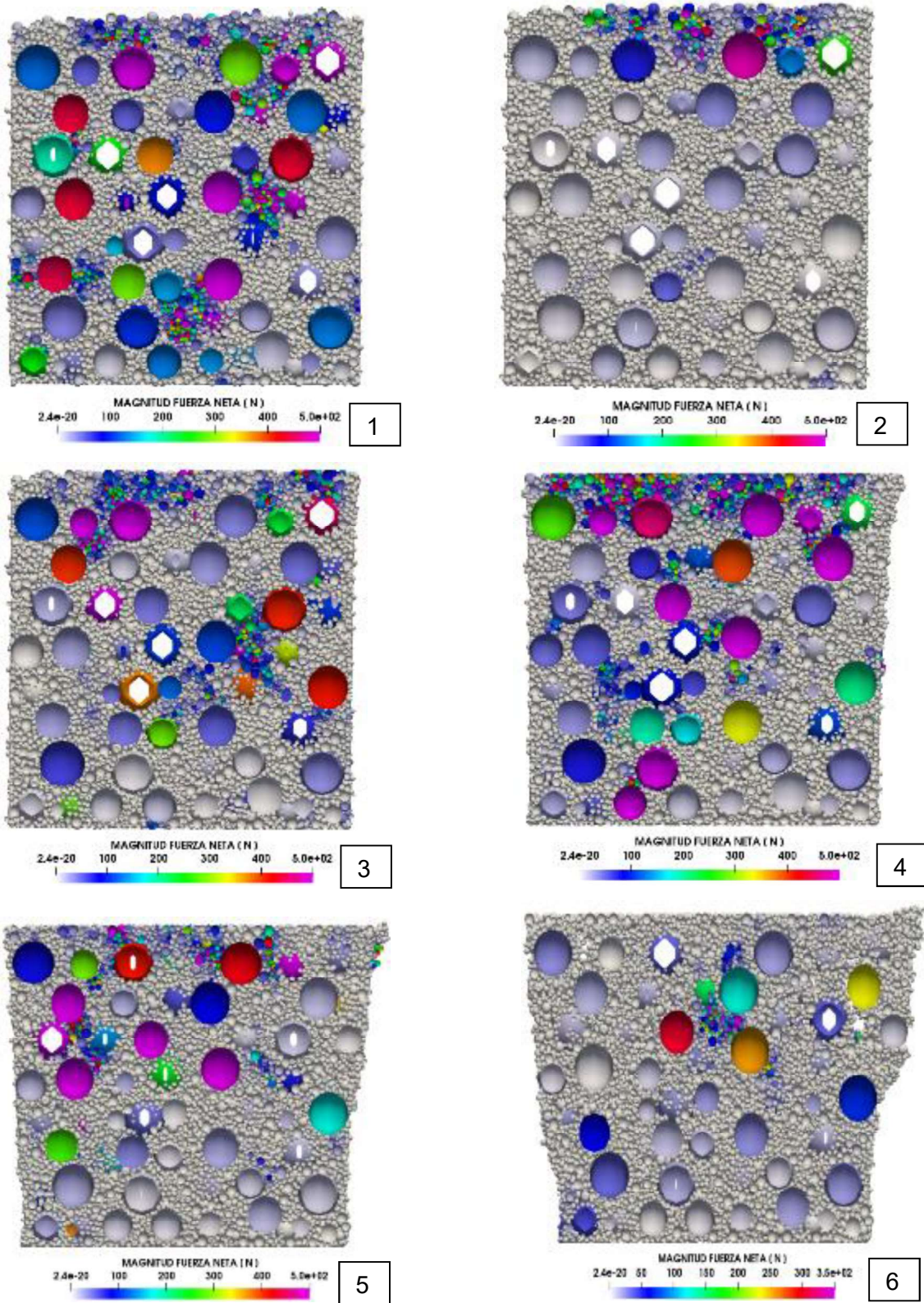


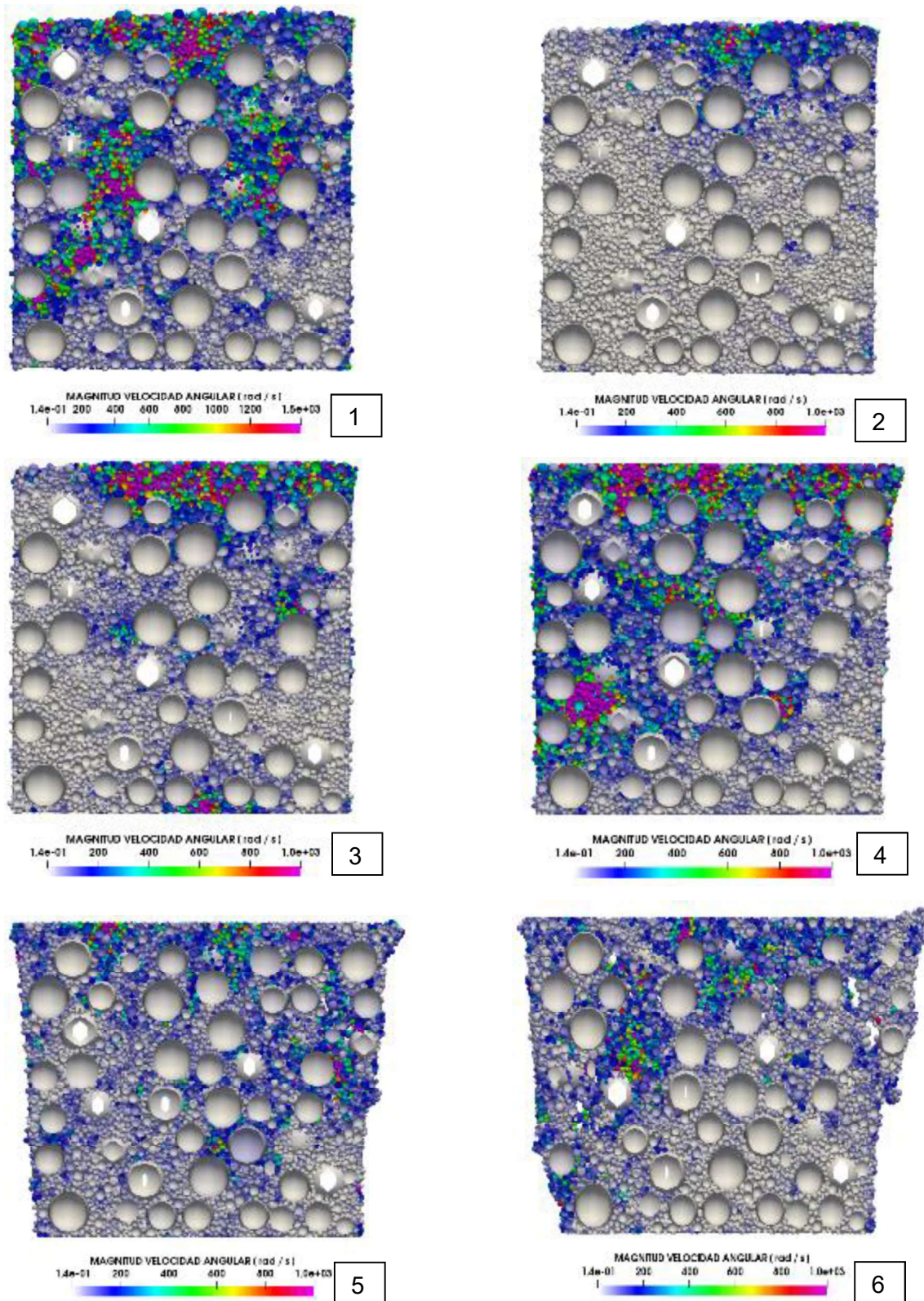
**FIGURA 4.72** Distribución de energía cinética en hormigón C, vista en 3D

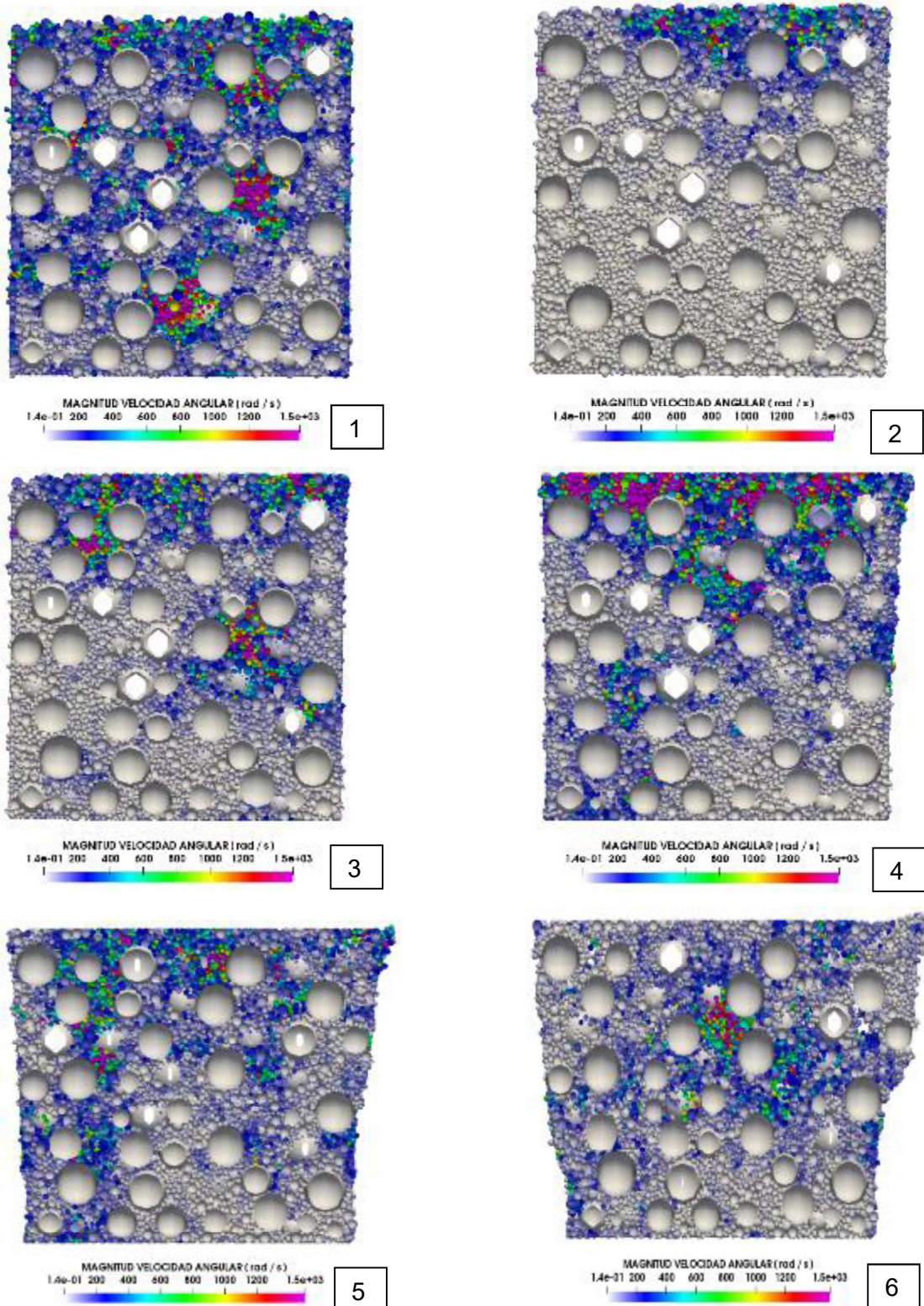


**FIGURA 4.73** Fuerza neta por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón C

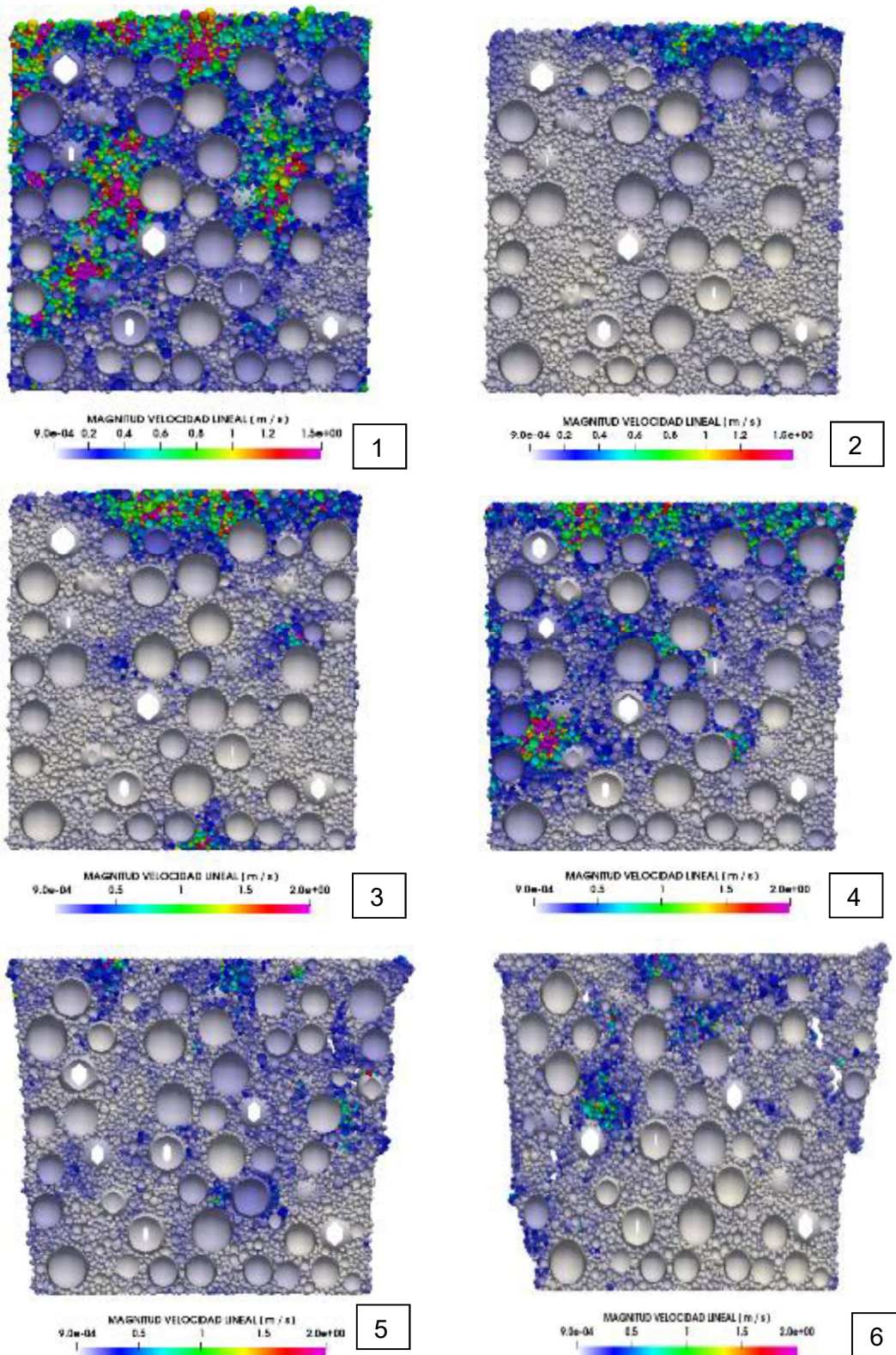
**FIGURA 4.74** Fuerza neta por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón C



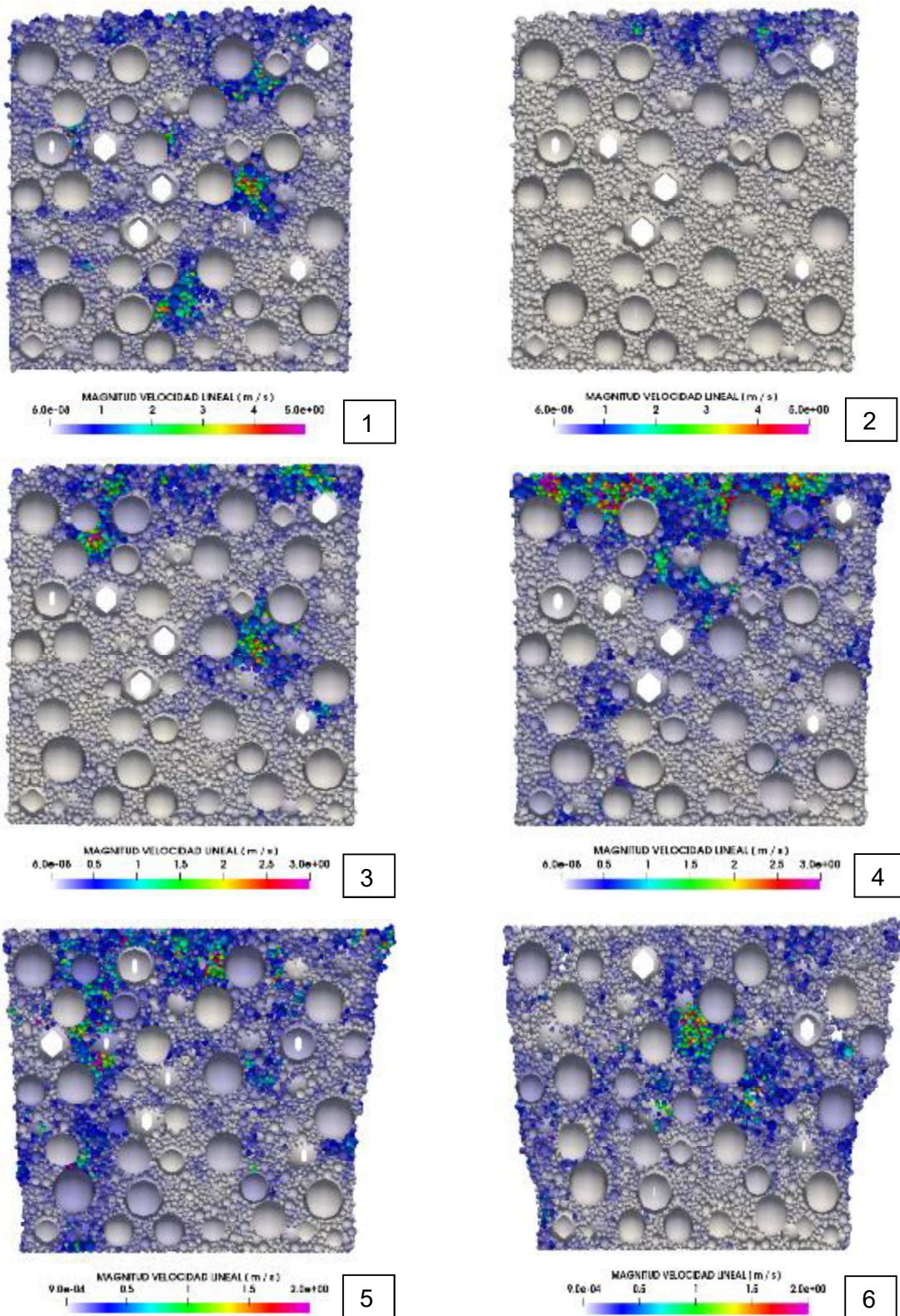
**FIGURA 4.75** Velocidad angular por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón C

**FIGURA 4.76** Velocidad angular por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón C



**FIGURA 4.77** Velocidad lineal por partícula en sección  $x=5\text{cm}$  del hormigón C

**FIGURA 4.78** Velocidad lineal por partícula en sección  $x=10\text{cm}$  del hormigón C



## CAPÍTULO 5

### CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

#### 5.1 CONCLUSIONES

En este capítulo se exponen las conclusiones obtenidas al realizar el estudio numérico computacional discreto de los mecanismos de fisura del hormigón. Se han obtenido significativas respuestas a los problemas planteados al inicio del presente proyecto.

1. El método de los elementos discretos permite identificar a los mecanismos de fisura de una matriz de hormigón sometida a compresión uniaxial, el fundamento de interacciones por contacto entre partículas conformantes posibilita describir el comportamiento mecánico del agregado pétreo; la cinemática de las partículas que conforman el modelo conforme se aplica carga, trae como consecuencia el rompimiento de enlaces JKR, estos desenlaces son interpretados como micro agrietamientos iniciales y posteriores fisuras macroscópicas visibles.
2. De acuerdo a la curva Esfuerzo-Deformación presentadas en la sección 4.2, para los tres modelos discretos representativos del hormigón generados en este estudio, se evidencia que el tamaño nominal de agregado grueso es influyente en la capacidad uniaxial máxima alcanzada, siendo que para mayor tamaño nominal de agregado grueso se observa menor capacidad uniaxial, mientras que para menor tamaño nominal de agregado se observa mayor capacidad uniaxial. Si bien este resultado se demuestra únicamente para los ensambles de este trabajo, es información de punto de partida a considerar en un estudio experimental o estadístico en DEM.
3. Considerando los resultados de los componentes laterales de desplazamiento por partícula de la sección 4.3, de acuerdo a los tiempos de interés presentados en los diagramas Esfuerzo vs Tiempo de la sección 4.2, se identifica que hasta el tiempo 3 el conglomerado mantiene su estructura estable; lo que indica que hasta este momento el modelo es capaz de absorber carga sin daños macroscópicos visibles, mientras que a partir del

tiempo 4, en el cual alcanza la máxima capacidad uniaxial, aparecen las primeras discontinuidades que son interpretadas como micro agrietamientos iniciales, entonces se clarifica lo expuesto en NEC-SE-HM 2015 sección 3.3.4 en el cual es mandatorio usar factores de reducción de  $f'_c$  para el diseño estructural en hormigón armado, y no es recomendable usar  $f'_c$  directamente ya que en este estado ya se ha superado la estabilidad estructural del material y es el punto de partida del proceso de desgaste irreversible.

4. Considerando los resultados de desplazamientos de la sección 4.3, de acuerdo a los tiempos de interés presentados en los diagramas Esfuerzo vs Tiempo de la sección 4.2, se identifica que conforme se incrementa la carga uniaxial son todos los agregados conformantes los que son alterados y tratan de cambiar su posición, al llegar a la capacidad máxima en el tiempo 4 se identifica que el conglomerado tiende a presentar la forma de fractura tipo 2 de acuerdo a la norma ASTM C39/C39M-18, por lo que se concluye que el modelo discreto del hormigón generado tiene capacidad de representar el comportamiento mecánico del material con buena aproximación.
5. A partir de la observación de cadenas de fuerzas se concluye que la concentración de mayores fuerzas de contacto normales por partícula está en el agregado grueso, así como se identifica una tendencia de los esfuerzos internos a ocupar las mismas zonas, y conforme se aplica carga ambas características crecen en magnitud progresivamente hasta que se alcanza la máxima capacidad uniaxial, entonces se concluye que el mayor agente resistente de carga uniaxial es el agregado grueso. Esto tiene relación con la observación de las fluctuaciones de desplazamiento por partícula, en la cual se identifica que el agregado fino es más proclive a desplazarse lateralmente, abriéndose camino en forma de diagonales hacia el exterior, al ejecutar esta acción aparecen desenlaces que crecen progresivamente hasta convertirse en fisuras visibles.
6. Considerando el diagrama de número de contactos vs tiempo expuesto en la sección 4.6, se identifica que para los tres casos de hormigón de este estudio aproximadamente se mantiene el número de contactos hasta el 30% de máxima capacidad uniaxial, luego del cual se empiezan a producir los

desenlaces en el agregado, disminuyendo entonces el número de contactos conforme se continua incrementando la carga. La tendencia del diagrama de pérdida de número de contactos en el conglomerado es una curva suavizada continua, entonces se concluye que el comportamiento de progresión de agrietamientos en el modelo discreto del hormigón es sucesivo. La pérdida de enlaces en forma continuada es de utilidad en el análisis no lineal de estructuras de hormigón armado por poder relacionarlo con la pérdida de rigidez de elementos estructurales conforme incrementa la carga, la relación con el tiempo de fisura del hormigón puede establecer el tiempo en el que la estructura colisionará.

7. Los gráficos de fuerza neta, velocidad angular y velocidad lineal de la sección 4.6, permiten identificar que es el agregado grueso el que absorbe las mayores fuerzas netas y presenta menores velocidades angulares y velocidades lineales, mientras que el agregado fino es más propenso a rotar o trasladarse. Entonces se concluye que el mecanismo de fisura del modelo discreto del hormigón con enlaces JKR desarrollado en este estudio, es que las fuerzas se transmiten al agregado más grueso y luego son distribuidas en los agregados finos colindantes, después, éstos últimos tienden a desplazarse y rotar, generándose micro fisuras producto de mayor velocidad lineal o angular; mismas que son influyentes en el patrón de fisura del material, ya que las zonas de rotura de cadenas de fuerza y las fluctuaciones de desplazamientos forman diagonales, generándose la forma de falla cónica descrita en la sección 4.3.
8. La metodología presentada en este estudio para representar hormigón y visualizar las tendencias o patrones de comportamiento mecánico desde una perspectiva meso mecánica es aplicable para investigadores que cuenten con limitados recursos computacionales. En contra parte al modelo BPM; el cual ha documentado demandar elevados recursos de procesamiento computacional que difícilmente pueden ser realizados por computadores personales, limitando este tipo de estudios para quienes tienen capacidad de adquisición.
9. El procesamiento computacional en paralelo aplicado en este estudio demuestra que se optimiza en gran medida el tiempo de simulación. Al

comparar el tiempo de modelación de una laptop i7 con 8 Gb de RAM versus la partición quinde G8 del clúster de la EPN se obtiene una disminución de tiempo de simulación de 10 días en promedio. Al tener más de un nodo disponible es posible correr más de una simulación simultáneamente, lo que acelera enormemente el proceso de obtención de resultados.

10. El modelo BPM a partir de su fundamento tiene la restricción de que los enlaces se presentan uno en cada punto de contacto, por lo que las partículas deben ser estrictamente de forma esférica; limitándose el estudio de conglomerados conformados de partículas o elementos de formas irregulares, ya que el procedimiento de generación de enlaces no sería adecuado. A diferencia, el modelo JKR introduce una propiedad adherente en cada partícula individual; haciendo que se pueda enlazar con sus vecinas inmediatas indiferentemente de la forma que tengan. Esto implica que para realizar modelación de adherencia entre cabillas de acero y hormigón el modelo de enlace más acertado sería el JKR.

## 5.2 RECOMENDACIONES

1. Para ingresar con gran nivel de aproximación la granulometría del hormigón con cierta dosificación es necesario tomar en cuenta que se genera una fracción de vacíos entre las partículas, que es mayor cuanto mayor es el tamaño de agregado grueso. Este proceso de aproximación en este estudio se hizo con ensayo y error, sin embargo, no se descarta la aplicación del método de Fuller o de Walker para dicho propósito.
2. Para establecer los límites inferior y superior de tamaños de partículas que van a conformar el ensamble poli disperso garantizando la estabilidad numérica; es necesario considerar las limitaciones de LIGGGHTS, considerando que el software aplica el algoritmo de binning para localizar los contactos entre partículas. Por lo que no se puede realizar ensambles de gran diferencia en tamaños, como por ejemplo diámetros de 1mm y 10cm en el mismo ensamble.
3. La densidad de energía de cohesión JKR en LIGGGHTS es dependiente del tamaño de las partículas específicamente, por lo que es necesario realizar

un proceso de calibración para cada nuevo conglomerado granular que presente partículas de otros diámetros. Solamente si se hace un conformado de partículas con los diámetros presentados en este estudio se puede usar directamente los valores de densidad de energía de cohesión aplicados en este trabajo.

4. Para mantener la estabilidad del servidor en el clúster de la EPN es necesario correr el script de LIGGGHTS a la mayor cantidad de núcleos disponible. Sin embargo, cabe recalcar que deben mantenerse dentro del mismo nodo, porque la comunicación MPI incrementa los procesos de comunicación entre ellos, pudiendo ser ineficiente a pesar de una mayor cantidad de procesadores.

### **5.3 TRABAJO A FUTURO**

Este proyecto de titulación sirve como punto de partida para la realización de análisis y modelado de hormigón a nivel meso mecánico bajo el marco de trabajo de tecnología del método de los elementos discretos.

Partiendo de los resultados obtenidos en el presente estudio se puede identificar los siguientes posibles proyectos de investigación a futuro:

1. Aplicar los valores de energía de adhesión JKR encontrados en este estudio para el propósito de simular distintos eventos con hormigón: adherencia con cabillas de acero, compresión triaxial, ensayo a flexión etc.
2. Aplicar el procedimiento de calibración expuesto en el presente estudio para el propósito de modelar hormigones de diferentes propiedades.

Con el propósito de discutir los resultados encontrados en este estudio se puede hacer las siguientes modificaciones a las condiciones de simulación computacional:

1. Simular compresión uniaxial con especímenes de geometría cilíndrica normalizada.
2. Considerar la forma real de los agregados en la representación del hormigón.
3. Aplicar el modelo de enlace BPM para representar al hormigón.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abu-Lebdeh, T. M., Fini, E., & Lumpkin, M. (2012). Flexural and Tensile Characteristics of Micro Fiber-Reinforced Very High Strength Concrete Thin Panels. *American Journal of Engineering and Applied Sciences*, 184-197.
- ACI 318-14. (2014). *Building Code Requirements for Structural Concrete (ACI 318-08) and Commentary*. American Concrete Institute. Farmington Hills, MI 48331 U.S.A.
- ACI211.1-91. (2002). *Standard Practice for Selecting Proportions for Normal, Heavyweight, and Mass Concrete*. USA: American Concrete Institute.
- André, D., Iordanoff, I., Charles, J.-I., & Néauport, J. (2012). Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 113–125.
- Aráoz, G., & Luccioni, B. (2011). Modelación del hormigón en regimen de alto confinamiento. *Mecánica Computacional Vol XXX*, págs. 571-595.
- Argel, R., & Zúñiga, L. (2009). *Calculo de la correlación entre el esfuerzo a la compresión y el módulo de rotura para concretos hidráulicos fabricados con materiales de la zona norte de Bolívar*. Cartagena: Universidad tecnológica de Bolívar: Tesis de pre grado.
- ASTM C109 / C109M. (2016). *Standard Test Method for Compressive Strength of Hydraulic Cement Mortars (Using 2-in. or [50-mm] Cube Specimens)*. ASTM International, West Conshohocken, PA.
- ASTM C39/C39M. (2018). *Standard Test Method for Compressive Strength of Cylindrical Concrete Specimens*. ASTM International, West Conshohocken, PA.
- Ballaz, I. (2005). *Flujo y atascos de un medio granular en la descarga de silos*. Pamplona. España: Universidad de Navarra: Ph.D. Thesis.



- Baltazar, J. (2015). Correlación de la resistencia a la compresión en cubos y cilindros. *CONSTRUCCIÓN Y TECNOLOGÍA EN CONCRETO*, 30-33.
- Barthel, E. (2014). Adhesive elastic contacts: JKR and more. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 41-62.
- Beckmann, B., Schick Tanz, K., Reischl, D., & Curbach, M. (2012). DEM simulation of concrete fracture. *Architektur und technische Wissenschaften GmbH & Co. KG, Berlin · Structural Concrete* 13, 213-220.
- Bradley, R. (1932). The cohesive force between solid surfaces and the surface energy of solids. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 853-862.
- Brodu, N., Dijkstra, J., & Behringer, R. (2015). Multiple-contact discrete-element model for simulating dense granular media. *PHYSICAL REVIEW*, 46-51.
- CFDEM Project. (30 de 10 de 2018). Obtenido de <https://www.cfdem.com/media/DEM/docu/Manual.html>
- Chindaprasirt, P., Hatanaka, S., Mishima, N., Yuasa, Y., & Chareerat, T. (2009). Effects of binder strength and aggregate size on the compressive strength and void ratio of porous concrete. *International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials Volume 16*,, Page 714.
- Coello, J., Miguel, V., Ferrer, C., Calatayud, A., & Martínez, A. (2008). Ensayos de rozamiento plano sobre aceros inoxidables austeníticos con diferente acabado superficial. Determinación de las condiciones de adhesión en el rozamiento. *REVISTA DE METALURGIA*, 44 (6), 503-512.
- Cundall, P. A., & Strack, O. D. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique* 29, N° 1, 47-65.
- Derjaguin, B. (1934). Untersuchungen über die reibung und. *IV Kolloid-Z.* 69, 55–164.

- Derjaguin, B., Muller, V., & Toporov, Y. P. (November 1975). Effect of Contact Deformations on the Adhesion of Particles. *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 53, No. 2,, 314-326.
- Durda, D. D., Movshovitz, N., Richardson, D. C., Asphaug, E., & Morgan, A. (2011). Experimental determination of the coefficient of restitution for meter-scale granite spheres. *Icarus*, 849–855.
- Guamushig, C. (2016). *Modelamiento y simulación multifísica de materiales granulares*. Quito. Escuela Politécnica Nacional. Ingeniería Mecánica: Tesis de pre grado.
- Gupta, S. (2006). *A DISCRETE NUMERICAL MODEL FOR STUDYING MICRO-MECHANICAL RELATIONSHIP IN GRANULAR ASSEMBLIES*. Department of Civil Engineering. INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY KANPUR. Training Report Submitted. In Partial Fulfilment of the Requirements for the Course of CE-390.
- Gyurkó, Z., Bagi, K., & Borosnyói, A. (2014). Discrete Element Modelling of uniaxial compression test of hardened concrete. *építôanyag - Journal of Silicate Based and Composite Materials*, 113-119.
- Harmsen, T. E. (2002). *Diseño de estructuras de concreto armado* . Lima: Pontificia Universidad Católica del Perú.
- Hassoun, M. N., & Al-Manasser, A. (2015). *Structural Concrete Theory and Design* . Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.
- Heelt. (2018). Ensayos en Hormigón. *Testing Equipos de ensayo para la industria de la construcción*. Testing Equipos de ensayo para la industria de la construcción: [http://www.heelt.net/catalogos/50\\_58\\_es.pdf](http://www.heelt.net/catalogos/50_58_es.pdf).
- Humbolt. (2018). Concreto. USA: [www.humboldtmg.com](http://www.humboldtmg.com).
- Israelachvili, J. N. (2011). *Intermolecular and Surface Forces*. San Diego. California. USA: Elsevier Inc.

- Jankowski, R. (2009). Experimental study on earthquake-induced pounding between structural elements made of different building materials. *EARTHQUAKE ENGINEERING AND STRUCTURAL DYNAMICS*, 343–354. DOI: 10.1002/eqe.941.
- Jara, G., & Fort-Lopez, L. (2009). Evaluación de la fricción entre suelos y materiales compuestos. *Revista de la Construcción Volumen 8 No 1*, 103-113.
- Jebahi, M., André, D., Terreros, I., & Iordanoff, I. (2015). *Discrete Element Method to Model 3D Continuous Materials*. Great Britain: John Wiley & Sons, Inc.
- Johnson, K. (1985). *Contact Mechanics*. Cambridge: Press Syndicate of the University of Cambridge.
- Johnson, K. L., Kendall, K., & Roberts, A. D. (1971). Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. *Proc. R. Soc. Lond. A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 301-313.
- Keppler, I., & Csatar, A. (2011). DETERMINATION OF GRANULAR ASSEMBLIES' DISCRETE ELEMENT MATERIAL PARAMETERS BY MODELLING THE STANDARD SHEAR. MODELLING THE STANDARD SHEAR TEST. *Sustainable Construction and Design*, 269-274.
- Kloss, C., & Queteschiner, D. (2010). Discrete Element Method. *Introduction to Dynamic Particle Simulation* (págs. 1 - 69). CFDEM Project.
- Kloss, C., Goniva, C., Hager, A., Amberger, S., & Pirker, S. (2012). Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM. *Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 12*, 140-152.
- Kwan, A., & Chu, S. (2018). Direct tension behaviour of steel fibre reinforced concrete measured by a new test method. *Engineering Structures*, 324-336.
- Lamond, J., & Pielert, J. (2006). *Significance of Tests and Properties of Concrete and Concrete-Making Materials*. West Conshohocken, PA: ASTM International.

- Lommen, S., Schott, D., & Lodewijks, G. (2014). DEM speedup: Stiffness effects on behavior of bulk material. *Particuology*, 107–112.
- Luding, S. (2005). *Molecular Dynamics Simulations of Granular Materials in The Physics of Granular Media*. Wiley-VCH Verlag GmbH Co. KGaA. p. 297-324.
- Marinack, M. C., Musgrave, R. E., & Higgs, C. F. (2013). Experimental Investigations on the Coefficient of Restitution of Single Particles. *Tribology Transactions*, 56:4,, 572-580, DOI: 10.1080/10402004.2012.748233.
- Marshall, J. (2009). Discrete-element modeling of particulate aerosol flows. *Journal of Computational Physics*, 1541–1561.
- Mc Cormac, J., & Brown, R. H. (2011). *Diseño de concreto reforzado*. C.V., México: Alfaomega Grupo Editor, S.A.
- ModeMat. (11 de 10 de 2018). Manual de Usuario del Sistema HPC-MODEMAT. Ecuador, Quito. Escuela Politécnica Nacional.
- Moreno, D., Trono, W., Ostertag, C., & Billington, S. (2011). Tension-Stiffening in Reinforced High Performance Fiber-Reinforced Cement-Based Composites under Direct Tension. *Conference Paper in RILEM Bookseries*, 263–270.
- Moreno, E. I., Solís-Carcaño, R. G., Varela-Rivera, J., & Gómez, M. A. (2016). Resistencia a tensión del concreto elaborado con agregado calizo de alta absorción. *CONCRETO Y CEMENTO. INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO, VOL. 8 NÚM. 1*, 35-45.
- NEC-SE-HM. (2015). *Elementos de hormigón armado*. Quito- Ecuador: Ministerio de la vivienda.
- Nguyen, N. H., Bui, H. H., Nguyen, G. D., & Kodikara, J. (2017). A cohesive damage-plasticity model for DEM and its application for numerical investigation of soft rock fracture properties. *International Journal of Plasticity*, 175-196.
- Nguyen, V. P., Stroeven, M., & Johannes Sluys, L. (2011). Multiscale failure modeling of concrete: Micromechanical modeling, discontinuous

- homogenization and parallel computations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 139–156.
- Nitka, M., & Tejchman, J. (2015). Modelling of concrete behaviour in uniaxial compression and tension with DEM. *Granular Matter* 17, pp 145–164. <https://doi.org/10.1007/s10035-015-0546-4>.
- Obermayr, M., Dressler, K., Vrettos, C., & Eberhard, P. (2013). A bonded-particle model for cemented sand. *Computers and Geotechnics*, 299–313.
- ONNCCE. (2014). *Norma Mexicana NMX-C-155-ONNCCE-2014 INDUSTRIA DE LA CONSTRUCCIÓN-CONCRETO HIDRÁULICO-DOSIFICACIÓN EN MASA-ESPECIFICACIONES Y MÉTODOS DE ENSAYO*. México D.F.: Organismo Nacional de Normalización y Certificación de la Construcción y Edificación, S.C.
- Oñate, E., & Rojek, J. (2004). Combination of discrete element and finite element methods for dynamic analysis of geomechanics problems . *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193, 3087–3128.
- O'Sullivan, C. (2010). *Particulate Discrete Element Modelling*. (1.a ed). New York: Spon Press.
- Potyondy, D., & Cundall, P. (2004). Abonded-particle model for rock. *International Journal of Rock Mchanics and Mining Sciences*, 1329–1364.
- Rabbani, A., & Neetu. (2017). Influence of size of aggregates on the Compressive strength of concrete. *International Journal of Engineering Development and Research*, 27-30.
- Reis, P. M. (2004). *Dynamics of Granular Segregation in driven Binary Monolayers*. Manchester: University of Manchester: Ph.D. Thesis.
- Rodrigues, E. A., Manzoli, O. L., Bitencourt, L. A., & N., T. (2017). An adaptive concurrent multiscale model for concrete based on coupling finite elements. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, PII: S0045-7825(17)30636-9.

- Sfer, D., Etse, G., & Carol, I. (2002). Estudio del comportamiento del hormigón a nivel mesomecánico. *Mecánica Computacional Vol. XXI*, 992-1011.
- Sinaie, S. (2016). Application of the discrete element method for the simulation of size effects in concrete samples. *International Journal of Solids and Structures*, 1-10.
- Sinaie, S., Heidarpour, A., & Zhao, X. (2016). A micro-mechanical parametric study on the strength degradation of concrete due to temperature exposure using the discrete element method. *International Journal of Solids and Structures*, 165–177.
- SISA, A. (2018). Hoja técnica del Acero tipo SISA L6. México.
- Suchorzewski, J., Tejchman, J., & Nitka, M. (2017). Discrete element method simulations of fracture in concrete under uniaxial compression based on its real internal structure. *International Journal of Damage Mechanics*, 1–30.
- Sykut, J., Molenda, M., & Horabik, J. (2007). Discrete Element Method (DEM) as a tool for investigating properties of granular materials. *Polish Journal of food and Nutrition Sciences. Vol. 57, No. 2(A)*, 169-173.
- Tasdemir, C., & Tasdemir, M. A. (1996). EFFECTS OF SILICA FUME AND AGGREGATE SIZE ON THE BRITTLINESS OF CONCRETE. *Cement and Concrete Research, Vol. 26*, pp. 63-68.
- Thornton, C., & Randall, C. (1988). Applications of theoretical contact mechanics to solid particle system simulations. *Micromechanics of Granular Materials*, edited by M. Satake and J.T. Jenkins, 133-142.
- Thulane, B. R., & Sabelo, N. (2016). The Effect of Aggregate Size on the Compressive Strength of Concrete. *Journal of Agricultural Science and Engineering Vol. 2*, pp. 66-69.
- Vanegas, J. M., & Robles, J. P. (2008). *Estudio experimental de las propiedades mecánicas del concreto reciclado para su uso en edificaciones*

*convencionales*. Bogotá: Pontificia Universidad Javeriana. Tesis de pre grado.

Vanegas, L., & Wahab, M. A. (2008). Determinación del coeficiente de fricción entre cerdas de acero de cepillos laterales para barrer calles. *Scientia et Technica Año XIV No 39*, Universidad Tecnológica de Pereira. ISSN 0122-1701.

Verlet, L. (1967). Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *PHYSICAL REVIEW*, 98-103.

Wang Zhuolin, L. F., & Gu, X. (2008). Numerical Simulation of Failure Process of Concrete Under Compression Based on Mesoscopic Discrete Element Model. *TSINGHUA SCIENCE AND TECHNOLOGY*, 19-25.

Winkler, P., Jentsch, H., Salehi Sadaghiani, M. R., & Witt, K. (2016). Numerical Investigation of the Particle Skeleton of Widely Graded Soils prone to Suffusion. *Bauhaus-Universität Weimar, Department of Geotechnical Engineering, Weimar, Germany*.

Wriggers, P. (2006). *Computational Contact Mechanics*. Berlin: Springer-Verlag.

Zhang, S., Zhang, C., Liao, L., & Wang, C. (2018). Numerical study of the effect of ITZ on the failure behaviour of concrete by using particle element modelling. *Construction and Building Materials*, 776–789.

Zhao, J., & Shan, T. (2013). Coupled CFD–DEM simulation of fluid–particle interaction in geomechanics. *Powder Technology*, 248–258.

Zhu, P., Abe, M., & Fujino, Y. (2002). Modelling three-dimensional non-linear seismic performance of elevated bridges with emphasis on pounding of girders. *EARTHQUAKE ENGINEERING AND STRUCTURAL DYNAMICS*, 31:1891–1913 (DOI: 10.1002/eqe.194).

## **ANEXOS**



**ANEXO N° 1**  
**CÓDIGO EN MATLAB PARA GENERAR INPUT DATA DE**  
**LIGGGHTS**

```

% Codificación para generar el input data para LIGGGTHS
%A partir de las dimensiones del cubo
%y diametros de particulas
clear
clc
%Variables en unidades sistema internacional
L=0.15; %metros Dimension de una arista del cubo
D=0.006; %metros Diametro
Densidad=2400 % kg/m3 Densidad
%L debe ser multiplo de D, caso contrario este programa no funciona
%Ej: L=10cm; D=2mm, 5mm, 2,5mm. L=15cm; D=3mm
%Calculos previos
np=L/D; %numero de particulas por arista
nt=(np)^3; % numero total de particulas
%Vectores de posicion
X=zeros(np,1);
Y=zeros(np,1);
Z=zeros(np,1);
X(1,1)=D/2;
Y(1,1)=D/2;
Z(1,1)=D/2;
for n=2: np
X(n,1)=X(n-1,1)+D;
Y(n,1)=Y(n-1,1)+D;
Z(n,1)=Z(n-1,1)+D;
end
M=zeros(nt,7);
for n=1: nt;
M(n,1)=n;
M(n,2)=1;
M(n,3)=D;
M(n,4)=Densidad;
end;
npp=nt/(np*np);
npq=nt/np;
Y1=zeros(npq,1);
for j=1: npq;
cc=floor((j-1)/np);
Y1(j,1)=Y(cc+1);
end;
for i=1: nt;
ccc=floor((i-1)/npq);
M(i,5)=X(ccc+1);
M(i,6)=Y1(i-ccc*npq);
end ;
for k=1: nt;
c=floor((k-1)/np);
M(k,7)=X(k-c*np);
end;
%Velocidades
V=zeros(nt,7);
for n=1: nt;
V(n,1)=n; %ID atomo
V(n,2)=0;
V(n,3)=0;
V(n,4)=0;
V(n,5)=0;
V(n,6)=0;
end;
disp(M);
disp(V);

```

```
% Creacion de archivo notepad Input Data
texto=fopen('data1506.txt','wt');
formatSpec='%4.f %4.f %8.4f %8.2f %8.6f %8.6f %8.6f \n';
fprintf(texto,'Archivo Data para LIGGGHTS, autor: Mario De La Torre,
e-mail: zumack_mc@yahoo.com \n \n');
fprintf(texto,'%d atoms \n',nt);
fprintf(texto,'1 atom types \n \n');
x1=2*L;
y1=2*L;
z1=2*L;
zloo=L*0;
fprintf(texto,'-%d ',x1);
fprintf(texto,'%d xlo xhi \n',x1);
fprintf(texto,'-%d ',y1);
fprintf(texto,'%d ylo yhi \n',y1);
fprintf(texto,'%d ',zloo);
fprintf(texto,'%d zlo zhi \n \n',z1);
fprintf(texto,'Atoms \n \n');
fprintf(texto,formatSpec,M');
fprintf(texto,' \n');
fprintf(texto,'Velocities \n \n');
fprintf(texto,formatSpec,v');
winopen('notepadm.txt')
```

**ANEXO N° 2**  
**CALCULOS DE DOSIFICACION DE HORMIGON**

**DOSIFICACIÓN DE HORMIGÓN A**

<b>RESISTENCIA DE DISEÑO</b>		
Resistencia Específica $f'c$	=	210 kg/cm <sup>2</sup>
<b>PROPIEDADES DE LOS MATERIALES</b>		
<b>CEMENTO</b>		
Cemento Portland tipo IP, marca comercial "SELVALEGRE"		
Peso de (1) saco	=	50 kg
Peso específico	=	3150 kg/m <sup>3</sup>
<b>AGREGADO GRUESO</b>		
Tamaño nominal	=	1 in
Densidad real DSSS	=	2606 kg/m <sup>3</sup>
Densidad suelta	=	1572 kg/m <sup>3</sup>
Absorción	=	1,316 %
Humedad	=	0 %
<b>AGREGADO FINO</b>		
Módulo de finura de la arena	=	3,53
Densidad real DSSS	=	2632 kg/m <sup>3</sup>
Densidad suelta	=	1723 kg/m <sup>3</sup>
Absorción	=	1,44 %
Humedad	=	0 %
<b>PROCESO DE DISEÑO</b>		
Resistencia promedio requerida	=	210 kg/cm <sup>2</sup>
Contenido de aire	=	1,5 %
Asentamiento	=	7 cm
Contenido de agua	=	178,0 lt/m <sup>3</sup>
Relación agua cemento a/c	=	0,68
Agregado grueso seco compactado	=	65% m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Peso del hormigón	=	2379,0 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE CEMENTO</b>		
Cemento	=	261,76 kg/m <sup>3</sup>
Volumen Cemento	=	0,0831 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE AGUA</b>		
Agua	=	178,0 lt/m <sup>3</sup>
Agua	=	0,178 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Agua	=	178 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE GRAVA</b>		
Grava	=	0,431305 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Grava	=	1123,98 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE AIRE</b>		
Aire	=	0,015 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE ARENA</b>		
Arena	=	0,293 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Arena	=	815,29 kg/m <sup>3</sup>

<b>PORCENTAJE DE DOSIFICACIÓN</b>					
	<b>CEMENTO</b>	<b>GRAVA</b>	<b>ARENA</b>	<b>AGUA</b>	<b>AIRE</b>
PESO	11,00%	47,25%	34,27%	7,48%	0,00%
VOLUMEN	8,31%	43,13%	29,26%	17,80%	1,50%

**DOSIFICACIÓN DE HORMIGÓN B**

<b>RESISTENCIA DE DISEÑO</b>		
Resistencia Específica f'c	=	210 kg/cm <sup>2</sup>
<b>PROPIEDADES DE LOS MATERIALES</b>		
<b>CEMENTO</b>		
Cemento Portland tipo IP, marca comercial "SELVALEGRE"		
Peso de (1) saco	=	50 kg
Peso específico	=	3150 kg/m <sup>3</sup>
<b>AGREGADO GRUESO</b>		
Tamaño nominal	=	1 in
Densidad real DSSS	=	2606 kg/m <sup>3</sup>
Densidad suelta	=	1572 kg/m <sup>3</sup>
Absorción	=	1,316 %
Humedad	=	0 %
<b>AGREGADO FINO</b>		
Módulo de finura de la arena	=	3,53
Densidad real DSSS	=	2632 kg/m <sup>3</sup>
Densidad suelta	=	1723 kg/m <sup>3</sup>
Absorción	=	1,44 %
Humedad	=	0 %
<b>PROCESO DE DISEÑO</b>		
Resistencia promedio requerida	=	210 kg/cm <sup>2</sup>
Contenido de aire	=	1,5 %
Asentamiento	=	7 cm
Contenido de agua	=	192,8 lt/m <sup>3</sup>
Relación agua cemento a/c	=	0,68
Agregado grueso seco compactado	=	65% m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Peso del hormigón	=	2379,0 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE CEMENTO</b>		
Cemento	=	283,55 kg/m <sup>3</sup>
Volumen Cemento	=	0,090016 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE AGUA</b>		
Agua	=	192,8 lt/m <sup>3</sup>
Agua	=	0,192815 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Agua	=	192,8147 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE GRAVA</b>		
Grava	=	0,431305 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Grava	=	1123,98 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE AIRE</b>		
Aire	=	0,015 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE ARENA</b>		
Arena	=	0,271 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Arena	=	778,69 kg/m <sup>3</sup>

<b>PORCENTAJE DE DOSIFICACIÓN</b>					
	<b>CEMENTO</b>	<b>GRAVA</b>	<b>ARENA</b>	<b>AGUA</b>	<b>AIRE</b>
PESO	11,92%	47,25%	32,73%	8,10%	0,00%
VOLUMEN	9,00%	43,13%	27,09%	19,28%	1,50%

**DOSIFICACIÓN DE HORMIGÓN C**

<b>RESISTENCIA DE DISEÑO</b>		
Resistencia Específica $f'c$	=	210 kg/cm <sup>2</sup>
<b>PROPIEDADES DE LOS MATERIALES</b>		
<b>CEMENTO</b>		
Cemento Portland tipo IP, marca comercial "SELVALEGRE"		
Peso de (1) saco	=	50 kg
Peso específico	=	3150 kg/m <sup>3</sup>
<b>AGREGADO GRUESO</b>		
Tamaño nominal	=	3/4 in
Densidad real DSSS	=	2606 kg/m <sup>3</sup>
Densidad suelta	=	1572 kg/m <sup>3</sup>
Absorción	=	1,316 %
Humedad	=	0 %
<b>AGREGADO FINO</b>		
Módulo de finura de la arena	=	3,53
Densidad real DSSS	=	2632 kg/m <sup>3</sup>
Densidad suelta	=	1723 kg/m <sup>3</sup>
Absorción	=	1,44 %
Humedad	=	0 %
<b>PROCESO DE DISEÑO</b>		
Resistencia promedio requerida	=	210 kg/cm <sup>2</sup>
Contenido de aire	=	1,5 %
Asentamiento	=	7 cm
Contenido de agua	=	201,7 lt/m <sup>3</sup>
Relación agua cemento a/c	=	0,68
Agregado grueso seco compactado	=	65% m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Peso del hormigón	=	2349,4 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE CEMENTO</b>		
Cemento	=	296,62 kg/m <sup>3</sup>
Volumen Cemento	=	0,094164 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE AGUA</b>		
Agua	=	201,7 lt/m <sup>3</sup>
Agua	=	0,2017 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Agua	=	201,7 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE GRAVA</b>		
Grava	=	0,431305 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Grava	=	1123,98 kg/m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE AIRE</b>		
Aire	=	0,015 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
<b>CANTIDAD DE ARENA</b>		
Arena	=	0,258 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup>
Arena	=	727,08 kg/m <sup>3</sup>

<b>PORCENTAJE DE DOSIFICACIÓN</b>					
	<b>CEMENTO</b>	<b>GRAVA</b>	<b>ARENA</b>	<b>AGUA</b>	<b>AIRE</b>
PESO	12,63%	47,84%	30,95%	8,59%	0,00%
VOLUMEN	9,42%	43,13%	25,78%	20,17%	1,50%

**ANEXO N° 3**  
**DETALLE DE SCRIPT CARACTERÍSTICO EN LIGGGHTS**



## SCRIPT CARACTERÍSTICO PARA GENERACIÓN DE INPUT DATA

### Inicialización y comentarios de encabezado

```
# Script de llenado para generar INPUT DATA
# Autor: Mario De La Torre
# e-mail: zumack_mc@yahoo.com
```

### Definición de tipo de partícula y geometría determinada para el cálculo en LIGGGHTS

```
atom_style          granular
```

### Tipo de arreglo de posiciones de partículas

```
atom_modify        map array
```

### Definición de tipo de condiciones de frontera del espacio ocupado por las partículas, m=flexible de acuerdo al desplazamiento, f=ajustado a un límite definido, p=periódico.

```
boundary           m m m
```

### Consideración de la tercera ley de Newton en los contactos entre partículas. On=si, off=no.

```
newton             off
```

### Definición de si las partículas son suaves o duras, si $E > 1e10$ Pa la partícula es dura.

```
hard_particles     yes
```

### Definición de los datos que serán compartidos entre procesadores del ordenador durante el cálculo de contactos entre partículas

```
communicate        single vel yes
```

### Definición del sistema métrico de unidades (SI: Sistema internacional)

```
units              si
```

### Definición de límites del espacio de simulación, block=caja cúbica, el orden de los límites se define por coordenadas de puntos inicial y final de arista como: x1 x2 y1 y2 z1 z2

```
region             reg block 0.0 0.15 0.0 0.15 0. 0.28 units box
create_box         2 reg
```

### Definición del método de localización de contactos entre partículas, bin= algoritmo binning. 0.002=longitud de piel entre partículas.

```
neighbor           0.002 bin
```

### Definición de la frecuencia con la que se construyen las listas de partículas vecinas a ser tomadas en cuenta en los cálculos

```
neigh_modify       delay 0
```

### Ingreso de propiedades de los materiales; de grava y de arena. Módulo de elasticidad, coeficiente de Poisson, coeficiente de restitución, coeficiente de fricción, velocidad característica inicial.

```
#Material properties required for new pair styles
```

```
fix               m1 all property/global youngsModulus peratomtype 7e10 7e10
fix               m2 all property/global poissonsRatio peratomtype 0.2 0.3
fix               m3 all property/global coefficientRestitution peratomtypepair
2 0.77 0.74 0.74 0.7
```

```
fix          m4 all property/global coefficientFriction peratomtypepair 2
0.893 0.796 0.796 0.7
fix          m5 all property/global characteristicVelocity scalar -0.02
```

Ingreso de tipo de contacto entre partículas a considerar; modelo de contacto de Hertz, fuerza normal y tangencial que ingresan en la ecuación de movimiento, history; que define que se guarde la fuerza tangencial del time step anterior hasta que se alcance el máximo esfuerzo cortante.

```
pair_style gran model hertz tangential history
pair_coeff * *
```

Ingreso de time step calculado con la ecuación de Rayleigh

```
timestep 0.000001
```

Definición de gravedad

```
fix          gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0
```

Definir variables de distancia límite en X e Y, para la caja de llenado

```
variable sizeX equal 0.151 # DimensiÃ³n en X para entre paredes
variable sizeY equal 0.151 # DimensiÃ³n en Y para entre paredes
```

Definición de las posiciones de las paredes límite de la caja de llenado; que son planos en x,y,z.

```
fix wall_bottom all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 zplane 0.0
fix wall_up all wall/gran model hertz tangential history primitive type 1
zplane 0.25
fix wall_left all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane 0.0
fix wall_rigth all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane ${sizeX}
fix wall_front all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane 0.0
fix wall_back all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane ${sizeY}
```

Definición de las regiones de inserción de partículas, block: región tipo cubo con dimensiones x1 y1 z1 z2 z3,

Group; define a la región como un grupo aislado de partículas a ser tomadas en cuenta en el cálculo.

```
#region for insertion
```

```
region          bc block 0.0 0.15 0.0 0.15 0.181 0.21 units box # 2.9cm
de alto
group           nve_group region reg
```

```
region          bq block 0.0 0.15 0.0 0.15 0.155 0.18 units box # 2,5cm
de alto
group           nve_group2 region reg
```

```
region          bp block 0.0 0.15 0.0 0.15 0.211 0.248 units box # 3.7cm
de alto
group           nve_group3 region reg
```

Distribución de la inserción; comando tipo fix: arreglo.

Se define la densidad, radio de la partícula y el tipo de partícula; tipo 1: grava, tipo 2: arena.

```
fix          pts1 all particletemplate/sphere 15485863 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.0125 # 2,5cm grava
```

```

fix          pts2 all particletemplate/sphere 67867967 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.01 # 2cm grava
fix          pts3 all particletemplate/sphere 32452843 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.0075 # 1.5cm grava
fix          pts4 all particletemplate/sphere 15485867 atom_type 1
density constant 2606 radius constant 0.005 # 1cm grava

fix          pts5 all particletemplate/sphere 67867967 atom_type 2
density constant 2632 radius constant 0.0025 # 5mm arena
fix          pts6 all particletemplate/sphere 32452843 atom_type 2
density constant 2632 radius constant 0.0015 # 3mm otra arena
fix          pts7 all particletemplate/sphere 15485867 atom_type 2
density constant 2632 radius constant 0.00125 # 2.5mm otra arena

```

Definición de la dosificación de partículas en la mezcla. La dosificación se establece por % en masa. Ejemplo: 10% pst2 (grava d=2cm), 45% pst3 (grava d=1.5cm), 45% (grava d=1cm).

Se definen dosificaciones para cada una de las regiones de inserción; 3 en total.

```

fix          pdd1 all particledistribution/discrete 32452867 3 pts2
0.1 pts3 0.45 pts4 0.45 # Parte del ripio

fix          pdd2 all particledistribution/discrete 86028157 3 pts5
0.27 pts6 0.26 pts7 0.47 #Arena

fix          pdd3 all particledistribution/discrete 86028157 1 pts1 1
# Corresponde al ripio mas grueso

```

### Inserción de partículas

Insert/pack: insertar en grupos de partículas

Seed: número primo para cálculo de probabilidad de inserción de una partícula.

Distributiontemplate: define la dosificación de partículas a insertar (pdd1, pdd2 o pdd3)

Maxattempt: número máximo de partículas que pueden ser insertadas

Insert\_every: insertar cada número determinado de time steps.

Región: define la región en la cual se insertan los grupos de partículas.

```

fix          ins nve_group insert/pack seed 49979687 distributiontemplate
pdd1 &
          maxattempt 1000 insert_every 1500000 overlapcheck yes
all_in yes vel constant 0.0 0.0 -0.0 &
          region bc particles_in_region 300 ntry_mc 1000

fix          ins2 nve_group2 insert/pack seed 86028121 distributiontemplate
pdd2 &
          maxattempt 10000 insert_every 150000 overlapcheck yes
all_in yes vel constant 0.0 0.0 -0.0 &
          region bq particles_in_region 2000 ntry_mc 1000

fix          ins3 nve_group3 insert/pack seed 15485867 distributiontemplate
pdd3 &
          maxattempt 100 insert_every 2000000 overlapcheck yes
all_in yes vel constant 0.0 0.0 -0.0 &
          region bp particles_in_region 2 ntry_mc 1000

```

Aplicación de la integración NVE a todos los grupos de partículas creados.

Integración del movimiento de acuerdo a sección 2.2.11 del marco teórico, tomando en cuenta el volumen y energía de las partículas.

```

fix          integr nve_group nve/sphere
fix          integr2 nve_group2 nve/sphere
fix          integr3 nve_group3 nve/sphere

```

Cálculo de la energía rotacional de las partículas

```
compute                rke all erotate/sphere
```

Cálculo de parámetros termodinámicos en base al cálculo de la energía rotacional de la partícula

```
thermo_style          custom step atoms ke c_rke vol
thermo                1000
thermo_modify         lost ignore norm no
```

Corrida del primer time step para verificación de definiciones ingresadas

```
run                    1
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post2.

custom/vtk: son resultados de propiedades de las partículas; id, tipo de partícula, posición en x,y,z inercia rotacional en x,y,z, fuerzas netas en x,y,z, velocidad rotacional en x,y,z.

```
dump                  dmp all custom/vtk 10000 post2/noCohesion_*.vtk id type type
x y z ix iy iz vx vy vz fx fy fz omegax omegay omegaz radius
```

Escritura de archivo input data en formato.txt

```
write_data data2/data*.
```

Corrida de time steps restantes para completar la simulación, escribir archivo input data al finalizar cada fase de la simulación.

```
run                    2100000
```

```
write_data data2/data*.
```

Retiro de arreglo ins3; dejar de insertar partículas de grava d=2,5cm

```
unfix ins3
```

```
run                    4000000
```

```
write_data data2/data*.
```

Retiro de arreglo ins; dejar de insertar partículas de grava

```
unfix ins
```

```
run 1650000
```

```
write_data data2/data*.
```

Retiro de arreglo ins; dejar de insertar partículas de arena

```
unfix ins2
```

Corrida de time steps remanentes para estabilización de movimiento de partículas insertadas.

```
run 500000
```

```
write_data data2/data*.
```

## SCRIPT CARACTERÍSTICO DE COMPRESIÓN UNIAXIAL

### Inicialización y comentarios de encabezado

```
# Modelo de fisura del hormigon
# Autor: Mario De La Torre
# e-mail: zumack_mc@yahoo.com
#
```

### Definición de tipo de partícula y geometría determinada para el cálculo en LIGGGHTS

```
atom_style granular
```

### Definición de tipo de arreglo de posiciones de partículas

```
atom_modify map array
```

### Definición de tipo de condiciones de frontera del espacio ocupado por las partículas, m=flexible de acuerdo al desplazamiento, f=ajustado a un límite definido, p=periódico.

```
boundary m m m
```

### Consideración de la tercera ley de Newton en los contactos entre partículas. On=si, off=no.

```
newton off
```

### Definición si las partículas son suaves o duras, si $E > 1e10$ Pa la partícula es dura.

```
hard_particles yes # E grande
```

### Definición de los datos que serán compartidos entre procesadores del ordenador durante el cálculo de contactos entre partículas

```
communicate single vel yes
```

### Definición del número de procesadores que realizan los cálculos para cada dirección de la simulación: x,y,z. Si la simulación es 1D se usarían todos los procesadores en una dirección, si es en 2D se usarían todos los procesadores en 2 direcciones, optimizando el cálculo. En este caso es una simulación en 3D, y se define \* \* \* para que sea el cluster el que defina la distribución de procesadores en cada dirección. Al ser 128 procesadores los habilitados no se puede definir de manera predeterminada.

```
processors * * *
```

### Definición del sistema métrico de unidades (SI: Sistema internacional)

```
units si
```

### Lectura del archivo input data de LIGGGHTS (data.data) del directorio data/ generado anteriormente con el anterior script

```
read_data data/data.data # Datos del llenado con granulometria
```

```
*****
```

### Definición del método de localización de contactos entre partículas, bin= algoritmo binning. 0.002=longitud de piel entre partículas.

```
neighbor 0.0001 bin
```

### Definición de la frecuencia con la que se construyen las listas de partículas vecinas a ser tomadas en cuenta en los cálculos

```
neigh_modify delay 0
```

Ingreso de propiedades de los materiales; acero de pistón de compresión, grava y arena. Módulo de elasticidad, coeficiente de Poisson, coeficiente de restitución, coeficiente de fricción, velocidad característica inicial.

```
fix      m1 all property/global youngsModulus peratomtype 7e10 7e10
2.07e11
fix      m2 all property/global poissonsRatio peratomtype 0.2 0.3 0.3
fix      m3 all property/global coefficientRestitution peratomtypepair
3 0.77 0.74 0.74 0.74 0.7 0.7 0.74 0.7 0.7
fix      m4 all property/global coefficientFriction peratomtypepair 3
0.893 0.796 0.65 0.796 0.7 0.55 0.65 0.55 0.4
fix      m5 all property/global characteristicVelocity scalar -0.0
```

Ingreso de densidad de energía de cohesión de LIGGGHTS corregido, calculado en sección 3.11 de la metodología. Se ingresa en forma de matriz simétrica de 3x3 para los materiales; grava, arena y pistón de compresión.

```
fix      m6 all property/global cohesionEnergyDensity peratomtypepair
3 1.92e9 2.06e9 0.0 2.06e9 2.2e9 0.0 0.0 0.0 0.0
```

```
*****
*****
```

Tipo de contacto entre partículas a considerar; modelo de contacto de Hertz, fuerza normal y tangencial que ingresan en la ecuación de movimiento, history; que define que se guarde la fuerza tangencial del time step anterior hasta que se alcance el máximo esfuerzo cortante.

```
pair_style gran model hertz tangential history cohesion sjkr
pair_coeff * *
```

Ingreso de time step calculado con la ecuación de Rayleigh (Sección 3.13.2 de la metodología). Definido como variable dt.

```
variable dt equal 0.0000005 # Obtenido con transferencia de energia de
Rayleigh
timestep ${dt}
```

**Definición de gravedad**

```
fix      gravi all gravity 9.81 vector 0.0 0.0 -1.0
```

**Definición de paredes rígidas como límites de simulación (De acuerdo a sección 3.12.1 de la metodología).**

**Definición de límites en x e y como variables**

```
variable sizeX equal 0.451 # DimensiÃ³n en X para entre paredes
variable sizeY equal 0.451 # DimensiÃ³n en Y para entre paredes
```

```
fix wall_bottom all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 zplane 0.0
fix wall_left all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane -0.3
fix wall_rigth all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 xplane ${sizeX}
fix wall_front all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane -0.3
fix wall_back all wall/gran model hertz tangential history primitive
type 1 yplane ${sizeY}
```

```
*****
*****
```

**Definición de movimiento de pistón de compresión (De acuerdo a sección 3.12.2 de la metodología)**

**Definición de posición inicial del pistón de compresión, mediante variable.**

```
variable startZ equal 0.1518 # Posicion inicial del piston de compresión
```

Definición de posición final del pistón de compresión, mediante variable.

```
variable endZ equal 0.145 # 5mm de desplazamiento. Son 0,5mm de
deformacion hasta que se alcance la maxima resistencia, lo demas es para
el proceso de desgaste
```

Definición de número de time steps que necesita el pistón de compresión para llegar de la posición inicial a la posición final, mediante variable.

```
variable ts_move equal 100000000 # La aplicacion es de 0,1mm por segundo.
Tiempo de simulacion de 50 seg. Calculado con valor de time step
```

Definición de variable diferencia entre posición inicial y final del pistón de compresión

```
variable dz equal ${endZ}-${startZ}
```

Definición variable velocidad de traslación del pistón de compresión

```
variable cvel equal ${dz}/(${ts_move}*${dt})
```

Definición variable velocidad de traslación del pistón de compresión con dirección

```
variable rvel equal -1*${cvel}
```

Mostrar en el terminal de LIGGGHTS la velocidad del pistón de compresión

```
print "Velocity of piston: ${rvel}"
```

Importación de archivo .stl en forma de malla a la simulación de LIGGGHTS

Mesh/Surface/stress: tipo de malla que tiene capacidad de registrar esfuerzos

File: nombre del archivo .stl; para este caso: piston\_homigón.stl

Type: tipo de partícula de la que se compone la malla; en este caso tipo 3 (Acero)

Move: define movimiento de la malla ingresada

```
fix piston_m all mesh/surface/stress &
file meshes/piston_hormigon.stl &
type 3 &
move 0. 0. ${startZ}
```

Definición de la malla ingresada como pared rígida; con modelo de contacto de Hertz y fuerza tangencial que se guarda

```
fix piston all wall/gran model hertz tangential history mesh n_meshes
1 meshes piston_m
```

Guardado de fuerzas registradas en el pistón de compresión en un archivo piston\_force\_hormigon.txt ubicado en el directorio /post

```
fix piston_force all ave/time 1 200 200 f_piston_m[1] f_piston_m[2]
f_piston_m[3] f_piston_m[4] f_piston_m[5] f_piston_m[6] f_piston_m[7]
f_piston_m[8] f_piston_m[9] file post/piston_force_hormigon.txt
```

```
#apply nve integration to all particles
```

```
fix integr all nve/sphere
```

```
*****
```

Cálculo de la energía rotacional de las partículas

```
compute 1 all erotate/sphere
```

Cálculo de parámetros termodinámicos en base al cálculo de la energía rotacional de la partícula

```
thermo_style custom step atoms ke c_1 vol
thermo 1000
```

```
compute_modify thermo_temp dynamic yes
```

#### Cálculo de cadenas de fuerzas por par de partículas

```
compute fc all pair/gran/local id pos force
force_normal force_tangential contactArea delta
```

#### Cálculo de desplazamientos por partícula

```
compute dsp all displace/atom
```

#### Cálculo de número de contactos por partícula

```
compute contact all contact/atom
```

#### Cálculo de esfuerzos por partícula

```
compute st all stress/atom
```

#### Cálculo de energía cinética por partícula

```
compute katom_energy all ke/atom #Energia cinetica por atomo
```

#### Cálculo de energía cinética global del conglomerado

```
compute kinetic_energy all ke #Energia cinetica global
```

```
*****
*****
```

```
#insert the first particles so that dump is not empty
```

```
fix piston_move all move/mesh mesh piston_m linear 0. 0. ${cvel}
```

#### Corrida del primer time step para verificación de definiciones ingresadas

```
run 1
```

#### Escritura del archivo data en formato .txt

```
write_data data2/data*.
```

```
*****
*****
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post2.

custom/vtk: son resultados de propiedades de las partículas; id, tipo de partícula, posición en x,y,z inercia rotacional en x,y,z, fuerzas netas en x,y,z, velocidad rotacional en x,y,z.

```
dump custom1 all custom/vtk 20000 post_custom/hormigon_contact*.vtk
id type type x y z ix iy iz vx vy vz fx fy fz omegax omegay omegaz radius
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post\_mesh.

mesh/vtk: son resultados de esfuerzos registrados en el pistón de compresion

```
dump stress1 all mesh/vtk 20000 post_mesh/hormigon_mesh*.vtk id
stress stresscomponents vel
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post\_forcechain.

Local/gran/vtk: son resultados de las cadenas de fuerzas en formato .vtk

```
dump forcechain all local/gran/vtk 20000 post_forcechain/fc*.vtk
fc
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post\_forcechain\_txt

Local/gran/vtk: son resultados de las cadenas de fuerzas en formato .txt; como matriz

```
dump fc2 all local 10000 post_forcechain_txt/fc*.txt c_fc[1] c_fc[2]
c_fc[3] c_fc[4] c_fc[5] c_fc[6] c_fc[7] c_fc[8] c_fc[9] c_fc[10] c_fc[11]
c_fc[12] c_fc[13] c_fc[14] c_fc[15] c_fc[16] c_fc[17] c_fc[18] c_fc[19]
```



```
c_fc[20] # x1 y1 z1 x2 y2 z2 id1 id2 periodic fx fy fz area # delta
force_tangential force_normal
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post\_desplazamiento

custom/vtk: son resultados de los cálculos de desplazamientos por partícula en formato .vtk

```
dump          dsp1 all custom/vtk 20000 post_desplazamiento/dsp*.vtk id
type c_dsp[1] c_dsp[2] c_dsp[3] c_dsp[4]
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post\_contact

custom/vtk: son resultados de los cálculos de número de contactos por partícula en formato .vtk

```
dump          contact all custom/vtk 20000 post_contact/contact*.vtk id
c_contact
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post\_stress\_atom

custom/vtk: son resultados de los cálculos de desplazamientos por partícula en formato .vtk

```
dump          stratom1 all custom/vtk 20000
post_stress_atom/stress_atom*.vtk id type c_st[1] c_st[2] c_st[3] c_st[4]
c_st[5] c_st[6]
```

dump: guardar resultados de cálculo en la carpeta post\_keatom

custom/vtk: son resultados de la energía por partícula en formato .vtk

```
dump          k_atom_energy all custom/vtk 20000 post_keatom/keatom*.vtk id
c_katom_energy
```

```
*****
*****
```

```
#run more timesteps to insert large particles
```

Corrida de time steps restantes para completar la simulación, escribir archivo input data al finalizar cada fase de la simulación.

```
run          ${ts_move} upto
unfix piston_move
```

Escritura del archivo data en formato .txt

```
write_data data2/data*.
```

## SCRIPT CARACTERÍSTICO SLURM PARA CLUSTER

### Inicializacion

```
#!/bin/bash
```

### Nombre del trabajo

```
#SBATCH -J liggghts_simulation
```

### Número de procesadores a utilizar en la simulación

```
#SBATCH -n 128
```

### Nombre de la partición del cluster a utilizar en la simulación

```
#SBATCH -p quinde-G8-4650
```

### Política de prioridad de uso del cluster; el usuario solicita mediante el manual de procedimientos

```
#SBATCH --qos=extended
```

### Salida del módulo que actualmente se encuentra ejecutando

```
module purge
```

### Cargar módulo OPEN MPI

```
module load openmpi/2.1.1-intel
```

### Cargar módulo Singularity

```
module load singularity/2.4.5-intel
```

### Cargar imagen de Singularity (Entorno de trabajo)

```
#SBATCH --singularity
image=/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts.img
```

### Comentario informativo

```
####Directorio donde se encuentra el archivo a ser usado
####con liggghts
```

### Escribir directorio dentro del cluster; donde se encuentra el script de LIGGGHTS

```
cd /home/mdelatorre/Hormigon_alto
```

### Ejecutar LIGGGHTS a través de OpenMPI y Singularity con 128 procesadores

#### Nombre del script de LIGGGHTS: in.hormigon2

```
mpirun -np 128 singularity exec --writable --overlay
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts_overlay.img
/scratch/images/ubuntu_mpi_lights/ubuntu_17.10_mpi-liggghts.img
./liggghts < in.hormigon2
```