

01190
17 A

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ingeniería / Instituto de Ingeniería
Programa de Posgrado en Ingeniería

**Modelo Discreto de Partículas para Simular Física
de Rocas: Fracturamiento y Fenómenos de
Propagación de Onda**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

DOCTOR EN INGENIERIA

Presenta

RAUL DEL VALLE GARCIA

Asesor: Dr. Francisco José Sánchez Sesma

Noviembre de 2003



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Dedicación

A mi amadísima familia:

*María de la Luz,
Rebeca y Ximena.*

Con amor a mis padres.

Agradecimientos

Al jurado, los doctores Fernando Samaniego Verduzco, José Óscar Campos Enriquez, Daniel García Gavito, Raúl Cabrera Garzón, Andrés Tejero Andrade; así como a la doctora Ursula Iturrarán Viveros, por sus invaluable consejos, gentiles recomendaciones e interesantes comentarios sobre mis experimentos y escritos de tesis doctoral.

A mi asesor, el doctor Francisco José Sánchez Sesma por su tenaz y justa dirección, por lo que mi trabajo de tesis goza de suficientes meritos académicos y prácticos. Así lo creo y así lo sé hasta haberle podido conmovier e impresionar.

Al Instituto Mexicano del Petróleo, por haberme otorgado una beca que me permitió por algún tiempo dedicarme a los experimentos de esta tesis. Espero pagarles con creces. Que así sea.

A todos los compañeros de trabajo y amigos que me han apoyado y que han creído en mí a lo largo de estos años juntos.

A mis padres. A ti padre, mi mejor amigo, que aún en el Cielo siempre estas conmigo. A mi madre que sin entender que hago me proporciona muestras de apoyo.

A mis hermosas gemelas, doña Rebeca y doña Ximena "Infantas del Valle". Que me colman de esperanza y vitalidad y que me llenan de globos de colores todos los días de mi vida. Espero poder recrearnos más tiempo juntos.

A mi compañera, María de la Luz. Que con su amor, fortaleza y vehemencia es posible lograr cualquier sueño y llegar a lo más alto de la montaña del Bien.

Contenido

Agradecimientos	I
Contenido	II
Lista de Figuras	V
Lista de Tablas	VI
Resumen	VII
Abstract	VIII
Capítulo 0 Introducción	1
0.0 Problemática	1
0.1 Historia	2
0.2 Objetivo	4
0.3 Sinopsis	4
Capítulo 1 Fundamentos Teóricos	6
1.0 Dominio microscópico y el macroscópico	6
1.1 Elementos de mecánica de fracturas	7
1.1.0 Relaciones de esfuerzo-deformación	9
1.1.1 Elasticidad lineal	10
1.1.2 Aproximación plana	12
1.1.3 Ecuaciones de onda	13
1.1.4 Energía elástica	16
1.1.5 Teoría de Griffith	16
1.1.6 Fracturas en equilibrio	20
1.1.7 Factor de intensidad de esfuerzo	21
1.2 Dinámica de fracturas	23
1.3 Factor de intensidad de esfuerzo dinámico	25
Capítulo 2 Teoría de Percolación	28
2.0 Medios desordenados	28
2.1 Modelos de percolación	32
2.2 Percolación de invasión	36
2.3 Modelado de percolación de invasión	39

	2.3.0	Modelo numérico y analítico	39
	2.3.1	Viscosidad digital	39
2.4		Modelos de percolación elástica	42
	2.4.0	Descripción general	42
	2.4.1	Percolación de rigidez: vector de transporte no-local	43
	2.4.2	Modelos de percolación elástica con fuerzas de doblamiento	46
	2.4.3	Materiales con relación de Poisson negativo	47
	2.4.4	Modelo de viga	48
	2.4.5	Modelo granular	49
	2.4.6	Vibraciones y densidad de estados de materiales heterogéneos	50
	2.4.7	Procesos de transporte en medios heterogéneos	52
Capítulo 3		Modelos de Retícula	53
	3.0	Modelo Simple	53
	3.1	Escalamiento	55
	3.2	Retícula aleatoria	56
	3.3	Procedimiento general	57
Capítulo 4		Aplicaciones	63
	4.0	Fracturas	63
	4.1	Nociones básicas de elasticidad en rocas fracturadas	63
	4.1.0	Descripción fenomenológica	63
	4.1.1	Ecuaciones elásticas de movimiento	64
	4.2	Modelado de fracturamiento en una retícula	66
	4.3	Ecuaciones y sus condiciones de frontera	68
	4.4	Regla de rompimiento	70
	4.5	Discretización y normalización de modelos	71
	4.6	Fracturamiento dinámico y respuesta sísmica	74
	4.7	Integración de las ecuaciones de movimiento	77
	4.8	Comparación con soluciones clásicas	81
	4.9	Simulación en medios desordenados	82
Conclusiones			85
Bibliografía			86
Apéndice A		Derivando las Ecuaciones de Onda a Partir de Partículas y Resortes	95
Apéndice B		Modelo Discreto de las Ecuaciones Elásticas	98

Apéndice C Medios Micropolares	104
Apéndice D Modelo General Micro-Mecánico	109
Apéndice E Productividad Científica	115

Lista de Figuras

Figura 1.1	Escalas de una fractura	8
Figura 1.2	Modelo atómico de los cristales	16
Figura 1.3	Resultados de Griffith (1920)	18
Figura 1.4	Modelo atómico de la resistencia al fracturamiento	18
Figura 1.5	Modelo de Inglis (1913)	19
Figura 1.6	Modos de carga de un sólido	22
Figura 2.1	Red de conductancia	29
Figura 2.2	Diagrama de cálculo de la conductancia	30
Figura 2.3	Camino más corto de un racimo de percolación	33
Figura 2.4	Racimo grande de percolación	33
Figura 2.5	Conductividad de un sistema de percolación	34
Figura 2.6	Percolación continua	35
Figura 2.7	Modelo simple de percolación de invasión	37
Figura 2.8	Percolación de invasión por el autor	38
Figura 2.9	Percolación de invasión en retícula $2L \times L$	38
Figura 2.10	Patrones de viscosidad digital	40
Figura 2.11	Simulación del agregado limitado de difusión	41
Figura 2.12	Diagrama de fase de simulación de invasión	42
Figura 2.13	Significado físico-geométrico del modelo granular	50
Figura 3.1	Esquema para obtener la constante de fuerza	54
Figura 3.2	Retícula regular e irregular tipo <i>Tesselar</i>	56
Figura 3.3	Potencial de tres cuerpos de doblamiento	60
Figura 3.4	Potencial de dos cuerpos y de tres cuerpos	62
Figura 4.1	Modelo de resortes de fuerza central	68
Figura 4.2	Representación del modelo de viga	69
Figura 4.3	Condiciones de frontera	70
Figura 4.4	Ley constitutiva para cada enlace	71
Figura 4.5	Fuerza aplicada en una cara del volumen	73
Figura 4.6	Patrones de fracturamiento	74
Figura 4.7	Fracturamiento con esfuerzo radial	74
Figura 4.8	Modelo de 2000×2000 nodos simulando hidrofracturamiento	75
Figura 4.9	Simulación de fracturamiento por esfuerzo cortante	75
Figura 4.10	Emisión acústica de una simulación de fracturamiento	76
Figura 4.11	Emisión acústica (traza sísmica) proveniente de micro grietas	76
Figura 4.12	Efecto Doppler observado en los experimentos	77
Figura 4.13	Estabilidad numérica. Método de Verlet y Runge Kutta	79
Figura 4.14	Evolución temporal de un experimento de hidrofracturamiento de 360×360 partículas	79
Figura 4.15	Secuencia en tiempo de una simulación de hidrofracturamiento con esfuerzo uniforme	80
Figura 4.16	Secuencia en tiempo de una simulación de hidrofracturamiento con anisotropía inducida por esfuerzo	80

Figura 4.17	Energía inyectada al sistema para cada tiempo	82
Figura 4.18	Instantáneas del campo de desplazamiento	82
Figura 4.19	Difracción de ondas elásticas con diferente porosidad	84
Figura 4.20	Difracción múltiple de ondas elásticas en medio altamente desordenado	84

Lista de Tablas

Tabla 1.1	Relaciones entre constantes isotrópicas elásticas	12
Tabla 1.2	Valores representativos de densidad, constante del material y velocidades de propagación	14
Tabla 2.1	Umbral de percolación en 2D y 3D	34
Tabla 4.1	Parámetros del modelo	81

Resumen

Se presenta un modelo discreto de partículas bidimensional, con heterogeneidad microscópica, que permite simular fenómenos estáticos y dinámicos en materiales sólidos elásticos (rocas) con diferente conjunto de poros, fracturas e inclusiones. El modelo consiste de una red elástica triangular o cuadrada ("modelo de Kirkwood") con elementos de fuerza central y de doblamiento. La aproximación es una versión discreta del campo dinámico de desplazamientos continuo, sustentada en modelos micro-mecánicos provenientes de ciencia de materiales, de la teoría de percolación de física estadística y de los modelos de red de física del estado sólido. Las ecuaciones de movimiento y consecuentemente la energía elástica del sistema se calculan a través de un algoritmo de dinámica molecular, el cual tiene varias ventajas sobre algoritmos que resuelven modelos continuos, por ejemplo, las condiciones de frontera son fácilmente implantadas para incluir poros y fracturas, así como esfuerzos de confinamiento del espécimen.

Se realizaron varios experimentos estocásticos y deterministas para simular, estática y dinámicamente, fenómenos físicos en materiales geológicos. En particular y muy brevemente, se muestra la simulación de algunos aspectos generales de flujo de fluidos en medios porosos por medio de la percolación de invasión. Aún más trascendental fue modelar varios aspectos de la dinámica de fracturas y propagación de ondas en medios desordenados (rocas heterogéneas) por medio del modelo de percolación elástica. Se muestran algunos ejemplos que incluyen: la simulación de ondas de Rayleigh; el estudio de los rangos de velocidad y de atenuación de la propagación de ondas contra porosidad; la simulación de experimentos de hidro-fracturamiento y su asociada emisión acústica; así como una discusión breve de la atenuación de ondas debido a difracción múltiple en medios altamente aleatorios. Los resultados obtenidos fueron comparados con datos de laboratorio y con teorías del medio efectivo con diferentes regímenes de esfuerzo aplicado. Los resultados fueron satisfactorios, por lo que el modelo discreto de partículas estudiado promete ser una herramienta adecuada para crear metodologías que permitan la interpretación cuantitativa de datos sísmicos reales, provenientes de yacimientos geológicos heterogéneos con poros y fracturas.

Abstract

A two-dimensional discrete particle model is presented, with microscopic heterogeneity, which enables simulating static and dynamic phenomena of elastic solid materials (rocks) with different ensembles of pores, cracks and multiphase inclusions. The model consists of a square or triangular elastic lattice ("Kirkwood model") with central and bond-bending forces. The approximation is a discrete version of the continuous dynamical displacement field, used in micro mechanical modeling of material sciences, in the percolation theory of statistical physics and in the lattice models of solid-state physics. The equations of motion and consequently the elastic energy of the system are calculated by a molecular dynamics algorithm, which has several advantages over the continuum approximations; namely, it provides an easy framework for the internal boundary conditions of the voids (pores and cracks), as well as for the confining pressure in the model.

Several stochastic and deterministic experiments were achieved in order to simulate, statically and dynamically, physical phenomena in geological materials. In particular and to some extent, some general aspects of the simulation of fluid flow in porous media are shown by using an invasion percolation model. More important was to simulate some aspects of wave propagation and fracture dynamics in disordered media (heterogeneous rocks) by the elastic percolation model. Some examples are shown that includes: the simulation of Rayleigh waves; the study of the attenuation and the velocity-porosity relationship; the hydro-fracturing experiments and their associated acoustic emission; as well as a brief discussion of the wave attenuation due to highly random media. The results were compared with those obtained from laboratory experiments and effective media theories with different applied stress regimes. These results were satisfactory, which implies that the discrete particle model promises to be an adequate tool for creating methodologies that allow quantitative interpretation of real seismic data from geological heterogeneous reservoirs with pores and cracks.

Capítulo 0

Introducción

0.0 Problemática

Uno de los principales objetivos de la ciencia y de la ingeniería es la comprensión de los fenómenos que ocurren en la materia, así como determinar los constituyentes y propiedades de los materiales naturales (*e.g.*[†] las rocas) y artificiales (*e.g.* los concretos). En el siglo pasado se alcanzaron monumentales avances en los conocimientos sobre la naturaleza de la materia. Se descubrió que los átomos están compuestos de núcleo rodeados de electrones y a partir del desarrollo de la mecánica cuántica, se obtuvieron avances importantes en el conocimiento de la física del estado sólido. Visualizando a los electrones como ondas cuánticas, hizo posible calcular analíticamente las propiedades eléctricas y ópticas de muchos elementos puros. Estos descubrimientos a su vez permitieron el desarrollo de materiales y artefactos que son la base de la tecnología de los semiconductores.

Mientras que la física ha ayudado a entender, en el ámbito fundamental, las propiedades eléctricas y ópticas de la materia, no se puede decir lo mismo sobre las propiedades mecánicas. Se ha observado, por ejemplo, que las estimaciones de la resistencia teórica de un cristal son inexactas hasta por dos órdenes de magnitud a las producidas por mediciones en laboratorio (Gordon, 1976; Marder y Fineberg, 1996). La razón de esta discrepancia no es conocida totalmente, pero existen indicios de que la resistencia mecánica es consecuencia del tamaño del defecto más grande que existe en el material, y no de las fuerzas de cohesión entre átomos. Muchas de las propiedades mecánicas de los materiales son dominadas por la presencia de defectos, más que por la interacción atómica. Además, existen otras causas. Los mecanismos de fractura y deformación plástica, que sufre un material debido a la aplicación de esfuerzos, son procesos irreversibles que generan cierto grado de desequilibrio (lejos de su estado de reposo), dificultando el desarrollo de soluciones analíticas plausibles. Sólo en años recientes, la combinación de experimentos con el uso de las supercomputadoras, el uso de fundamentos de la física estadística, la simulación molecular y los métodos de retícula, han propiciado renovado interés de la comunidad científica y tecnológica en el tema de las propiedades mecánicas y dinámicas de los materiales, tanto artificiales como naturales (rocas).

La dinámica de fracturas se refiere al estudio de la propagación de fracturas (fisuras)[‡]. Esto involucra la generación y movimiento de fracturas, la emisión acústica asociada, así como

[†] La abreviatura *e.g.* significa en latín "exempli gratia" que de aquí en adelante utilizaremos por conveniencia en vez de utilizar la frase "por ejemplo".

[‡] Aquí, el término 'fractura' es genérico ya que no hay acuerdo en la diferencia fundamental entre fractura y fisura. Generalmente, fisura se refiere a una micro-fractura o a una fractura aislada. También existe el término grieta.

PAGINACIÓN DISCONTINUA

otros tipos de disipación de energía (calor, deformación plástica, etc.). Las fracturas se generan a partir de fuerzas externas aplicadas al sistema (modelo). La dinámica de fracturas estudia generalmente aquellos procesos que toman lugar después de que una fractura empieza a propagarse. No obstante, se realizan también los análisis correspondientes de los procesos que ocurren antes de la propagación de fracturas, y que involucran el fenómeno conocido como *transición de fase*. Este fenómeno está íntimamente ligado a eventos naturales, como son las avalanchas de nieve o los terremotos. El conocimiento preciso de este fenómeno podría, en un futuro, ayudar a predecir dichos sucesos!

La mecánica de fracturas, en contra parte, ha tenido éxito para describir las características estáticas de fracturas. Pero ha fallado en realizar predicciones acertadas de la dinámica de fracturas. Una de las características más importantes en dinámica de fracturas es la energía necesaria para crear una nueva superficie (de fractura), así como los procesos responsables de la disipación de esa energía. Estos procesos determinan, por ejemplo, que tan rápido puede una fractura propagarse en un material y por lo tanto, determinar la relación entre la energía de fractura y su velocidad de propagación. En esta disertación se presenta el análisis correspondiente a procesos de disipación de energía de dinámica de fracturas.

Las fracturas generan concentración de energía en sus puntas o extremidades, bajo estados de esfuerzo externos aplicados a escala mayor. En este proceso, una fractura transporta energía de una cierta escala a otras escalas más pequeñas ocasionando la separación de los enlaces atómicos, y creando nueva superficie de fractura. Esta característica implica la naturaleza discontinua de los procesos de fracturamiento y por lo tanto es un proceso no lineal y no local. Por esa razón, el trabajo se sustenta en modelos de retícula y en la simulación local de fracturas, en vez de sustentarse en las teorías de fracturamiento continuas tradicionales. Esto ayudará a establecer conexiones cuantitativas entre las predicciones microscópicas y la dinámica de fracturas macroscópica. En un capítulo posterior, se describirán experimentos de dinámica de fractura en modelos frágiles y estadísticamente homogéneos, con posible anisotropía inducida por esfuerzos externos. También se presenta el estudio de propagación de ondas en medios desordenados con porosidad tipo fisura y sus consecuentes fenómenos observables, los cuales son útiles para el desarrollo de herramientas de evaluación no destructiva, así como para un mejor entendimiento de la sismología moderna de dichos medios.

0.1 Historia

En sus famosos *diálogos sobre dos nuevas ciencias*, Galileo (1635) se pregunta que es lo que mantiene sujeto a un sólido y que lo desbarata (lo fractura o lo fragmenta). Con esto, de cierta manera Galileo se convierte en el primer científico que estudia la física del material condensado y la ingeniería de materiales. No obstante que ambas disciplinas son casi independientes entre sí, hay algunos aspectos en cada una de ellas que se mantienen relacionados. En particular los conceptos de micro-mecánica, por el lado de ingeniería de materiales, y la teoría de percolación, por el lado de la física teórica, están relacionados en gran medida. Por ejemplo, ambas disciplinas concluyen en lo particular que las propiedades mecánicas de un material están determinadas por el comportamiento colectivo de los

defectos internos en dicho material (poros, grietas, dislocaciones) y no por las fuerzas de enlace de las moléculas que lo constituyen. Por lo que el comportamiento de un solo defecto es irrelevante. Aún con una cantidad colosal de estudios de laboratorio y de trabajos teóricos, no se tiene una visión clara de cómo predecir fenómenos de fracturamiento. La razón puede ser evidente, si se toma en cuenta que las fracturas y la deformación plástica en un material tienen comportamiento no lineal y no local. Más aún, estos fenómenos son irreversibles y fuera de equilibrio, por lo que no pueden ser tratados por medio de conceptos clásicos de física del estado sólido. Una alternativa es utilizar conceptos a partir de modelos discretos, atomísticos o mesoscópicos.

Las aproximaciones discretas para modelar física de rocas se derivan de conceptos de física del estado sólido (Hoover *et al.* 1974), para modelos de cristales microscópicos. En estos modelos se configura una red de partículas que interactúan entre sí por fuerzas newtonianas y su dinámica se rige a partir de un potencial de interacción, del tipo *Lennard-Jones*, o de algún otro tipo de potencial decaído. En física del material condensado se utilizan varios potenciales de interacción de acuerdo a cuestiones físicas específicas (Raffi-Tabar, 2000). Por ejemplo, para metales, el modelo de *átomo embebido* ("embedded-atom method"), para estudiar fuerzas de enlace entre metales para fracturas frágiles (Daw & Baskes, 1983); o el potencial de Finnis & Sinclair (1984), son muy utilizados.

Una de las primeras aproximaciones discretas para modelar mecánica de fracturas es el método de Cundall & Strack (1979). Dicho modelo consiste de *elementos discretos* que interactúan con fuerzas radiales y transversales y que representan pedazos de roca unida. Este modelo se ha utilizado, por ejemplo, para estudiar procesos tectónicos (Saltzer & Pollard, 1992). Otro modelo equivalente es el modelo de *retícula sólida* ("lattice solid model") propuesto por Mora & Place (1993), el cual ha sido primordialmente utilizado para modelado de dinámica de terremotos. Muy recientemente se encuentran trabajos como el de Toomey & Bean (2000) que simulan ondas sísmicas utilizando un esquema discreto de partículas. Otros modelos algo distintos son el propuesto por Ruffino & Del Santo (2000), el cual es más elaborado en su contexto matemático y el modelo de Ursenbach (2001), que estudió efectos estáticos y dinámicos de sólidos con porosidad. Cabe mencionar que todos estos métodos están limitados a un valor fijo de la relación de Poisson microscópica.

Otro modelo muy utilizado para estudiar fenómenos de fracturas es el modelo de *percolación elástica*. Estos modelos han sido extensamente utilizados para estudiar procesos de deformación y fracturamiento en materiales desordenados, así como para analizar fenómenos de física estadística (Herrmann & Roux, 1990; Sahimi, 1995; Chakrabarti & Benguigui, 1997). Existen varias aproximaciones a este modelo. El modelo elástico con *doblamiento del enlace* (Kantor & Webman, 1984; Bergman, 1985) es en particular útil y suficientemente preciso para representar variaciones locales de las constantes elásticas.

Una versión simplificada del modelo de percolación elástica es el modelo de Born (1956). Dicho modelo, el cual es una forma discreta de la ecuación de Navier, ha sido ampliamente utilizado para modelado dinámico de fracturas (Martín *et al.* 2000). Este modelo fue aplicado recientemente por Del Valle-García & Sánchez-Sesma (2002) para simular el efecto de la porosidad en la propagación de onda, tanto en velocidad como en atenuación

extrínseca de la señal debido a la difracción de energía (véase apéndice E). El modelo arquetípico de percolación elástica, que incluye doblamiento de enlaces, es especialmente poderoso para simular fracturamiento y propagación de onda en materiales con desorden microscópico. Se pueden simular rocas con heterogeneidad y anisotropía locales, tanto en sus constantes elásticas, como en su relación de Poisson. Esto ha permitido simular la propagación de ondas de Rayleigh con buena precisión (Del Valle-García & Sánchez-Sesma, 2003), así como procesos de hidrofracturamiento, incluyendo su emisión acústica.

0.2 Objetivo

El objetivo fundamental de este trabajo es establecer y proporcionar los elementos necesarios, tanto teóricos como prácticos, para la simulación numérica de algunos fenómenos de física de rocas, tanto estática como dinámicamente. Para lograr esto, se utilizan modelos discretos de partícula, bajo la premisa de que un medio discontinuo es mejor representado por un modelo discreto, ya que se toman en cuenta naturalmente las discontinuidades del sistema. Esto implica que existe mayor facilidad para representar medios con aspectos no lineales y no locales, como es el caso de una roca con presencia de poros y fracturas. En principio, se pueden simular fenómenos de dinámica de fracturas y propagación de ondas en medios desordenados con buena precisión.

Los fenómenos de fractura y propagación de ondas en rocas son muy complejos debido a la presencia de defectos a varias escalas. El desorden en las rocas implica, reiterando que los procesos de fractura sean no locales y no lineales. Más aún, los materiales desordenados exhiben generalmente grandes fluctuaciones estadísticas por lo que es inapropiado representar dichos procesos por medio de sus propiedades efectivas. Por lo que soluciones teóricas continuas de homogenización o del medio efectivo no resultan del todo correctas. Por lo tanto, se emplearán modelos discretos que no tienen estas limitaciones.

0.3 Sinopsis

El capítulo 1 es un epítome de los fundamentos teóricos de la mecánica y dinámica de fracturas, su historia, su estado del arte y sus limitaciones, que sirven de comparación y motivación de este trabajo. En el capítulo 2 se discute en detalle la teoría de percolación que respalda ampliamente el desarrollo de este trabajo. Aquí se establece la filosofía y los aspectos físico-matemáticos de los modelos de percolación utilizados para representar medios desordenados. Se presentan algunos ejemplos de la percolación de invasión para la simulación de flujo de fluidos en medios porosos. Se establecen los modelos discretos de partículas en el capítulo 3, junto con el procedimiento general. Algunos detalles matemáticos de los modelos de retícula se presentan en los apéndices (A, B, C y D), que determinan la relación entre los modelos micro-mecánicos, los modelos de percolación elástica y la elasticidad micropolar. En el capítulo 4, se presentan algunas aplicaciones de propagación de ondas y dinámica de fracturas en medios desordenados. En particular, se presentan simulaciones de hidrofracturamiento en roca, atenuación de onda y ondas de

Rayleigh. Finalmente, se presentan, en el apéndice (E), los resultados en congresos y artículos científicos publicados como resultado parcial del trabajo de esta tesis.

Capítulo 1

Fundamentos Teóricos

1.0 El dominio microscópico y el macroscópico

Una característica que hace que las fracturas sean un caso de estudio muy interesante, es que las fracturas se extienden a varias escalas de longitud. Las fuerzas aplicadas, a escala macroscópica, se concentran en los extremos (puntas) de las fracturas preexistentes, y si dichas fuerzas sobrepasan cierto valor crítico, la fractura crecerá. Cuando la fractura se propaga (crece), ciertos enlaces atómicos individuales son destruidos y se crea nueva superficie, generando lo que se conoce como *energía de superficie*, es decir, se libera cierta cantidad de energía elástica. De esta manera, se puede entender la relación íntima entre los procesos macroscópicos (esfuerzos externos aplicados) y los microscópicos (destrucción de enlaces atómicos). En consecuencia, una fractura es el puente que une los procesos energéticos entre los eventos macroscópicos y los microscópicos.

La dinámica de fractura es afectada, de una manera u otra, por todas las escalas. Por lo que cualquier teoría surgente deberá forzosamente incluir todos los efectos observables para poder ser considerada completa. Algo que pareciese imposible con las herramientas teóricas y conocimientos actuales sobre el tema. Por lo que para hacer más tratable el problema, se requiere reducirlo y separarlo en dos grandes vertientes, una microscópica y otra macroscópica.

La vertiente macroscópica es una consecuencia de la teoría elástica lineal, conocida como la *mecánica de fracturas lineal*. La teoría elástica lineal considera a todos los materiales como cuerpos elásticos homogéneos carentes de micro-estructura, es decir, continuos. Esta teoría utiliza solamente propiedades volumétricas para calcular las deformaciones cuando se aplican esfuerzos al material, que son fácilmente observables y medibles. Tal es el caso del módulo de Young y la relación de Poisson. Para aplicar la teoría lineal elástica a las fracturas, se utiliza una nueva propiedad del material que se conoce como la *resistencia de fractura o rigidez de fracturamiento* ("fracture toughness"), la cual es obtenida al medir qué tanta fuerza se requiere para fracturar un material. Esta es la única medición necesaria para asegurar la estabilidad mecánica de un material y tener estructuras sólidas en ingeniería. ¡Pero no dice nada sobre la dinámica de fracturas!

En la vertiente microscópica de fractura, se toma en cuenta la escala más pequeña y la fractura se considera una alteración de la red atómica que forma el material. Aproximaciones analíticas a este problema se conocen como *teorías de red* ("lattice theory"). A esta escala, las fuerzas entre los átomos son importantes y generalmente se utilizan potenciales de interacción para calcular las fuerzas resultantes. Es una tarea titánica resolver analíticamente el movimiento y desplazamiento de partículas. Por lo que se recurre

a técnicas computacionales a través de simulaciones de dinámica molecular. Estas simulaciones, a menudo, utilizan potenciales de interacción muy idealizados para ayudar en la eficiencia de los cálculos, pero existen también otros tipos de simulaciones basadas en métodos híbridos. La simulación molecular ha sido muy exitosa en reproducir muchas características cualitativas y cuantitativas de dinámica de fracturas, observadas en laboratorio.

Desde el punto de vista experimental, es importante tomar en cuenta la microestructura de la fractura (véase Fig. 1.1). Aunque la figura representa la microestructura de un metal (material dúctil), puede ser fácilmente modificado para que represente otros tipos de material. Esto se realiza cambiando la microestructura en su parte intermedia, entre la escala de singularidad elástica y la escala atómica. Los materiales amorfos exhiben microestructura en las escalas intermedias. Mientras que en los cristales, como el caso de una cristal de silicón, no existen escalas intermedias, por lo que estamos hablando de materiales frágiles, donde en la práctica, sólo la estructura cristalina y las interacciones microscópicas atómicas contribuyen a la dinámica de fractura. La flecha de la Fig. 1.1 establece el acoplamiento directo entre la singularidad elástica y la escala microscópica. Las rocas, por ejemplo, son en general consideradas materiales frágiles heterogéneos.

1.1 Elementos de mecánica de fracturas

Existe una cantidad monumental de la Literatura que trata el problema de fractura mecánica en sistemas sólidos, desde las aproximaciones tradicionales hasta las estadísticas (véanse Ewals & Wanhill, 1986; Herrmann & Roux, 1990; Lawn & Wilshaw, 1975; Lawn, 1993; Sahimi, 1995; Bardhan *et al.*, 1994; Chakrabarti & Benguigui, 1997; Kitagawa *et al.*, 1998). Las aproximaciones tradicionales continuas de mecánica de fracturas han dado, sin lugar a duda, la base para analizar una gran variedad de problemas, todos estos sin tomar en cuenta los efectos de desorden del material (heterogeneidad a varias escalas). La base de estas teorías parte del importante criterio desarrollado por Griffith (1920) quien propuso que una grieta se vuelve inestable al esfuerzo de tensión cuando la energía elástica es mayor o igual a la energía de superficie necesaria para crear una extensión de fractura Δl . No obstante, este criterio de *energía de superficie* es probablemente válido sólo para medios homogéneos y no toma en cuenta el desorden típico observado en materiales naturales y aún en los artificiales. La extensión de esta teoría para materiales heterogéneos no es evidente, como en el caso de modelar las cerámicas policristalinas, que contienen varias orientaciones y varias energías de frontera de grano.

Se revisarán los conceptos básicos de la teoría elástica y de la mecánica de fracturas lineal. Entre los conceptos más importantes que se discutirán está el importante concepto de energía de fractura. Se indicarán los puntos débiles de la mecánica de fracturas, lo cual refuerza las motivaciones de este trabajo.

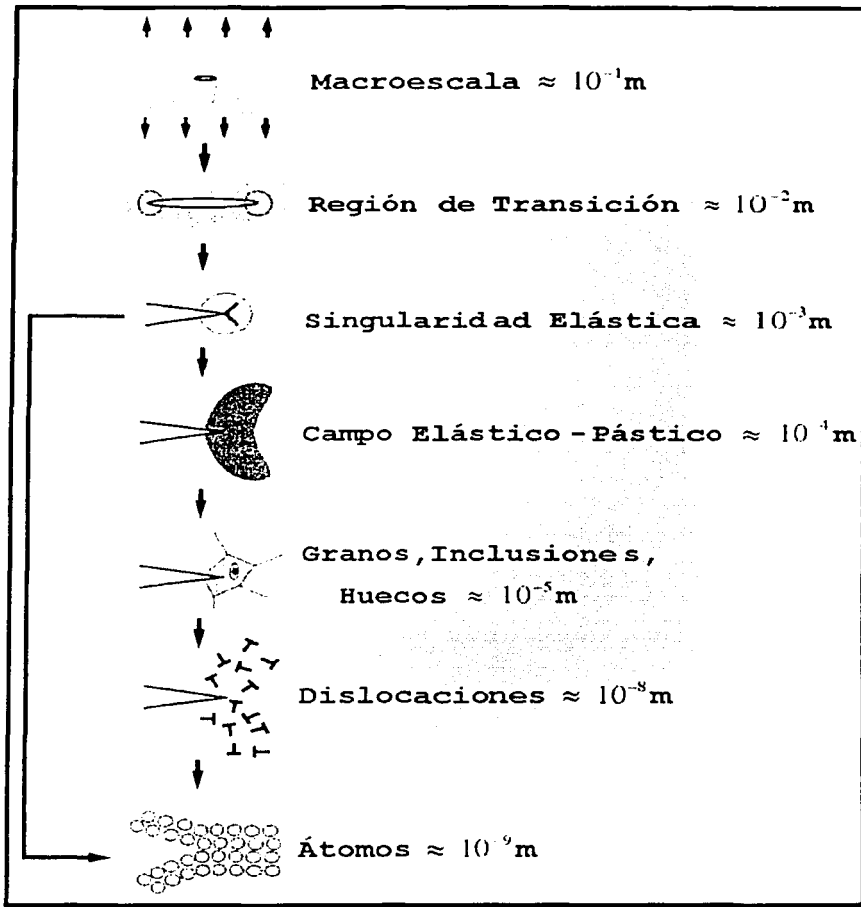


Figura 1.1 Las escalas de una fractura. Adaptada del modelo de microestructura de McClintock y Argon (1966) y Hauch (1998). En materiales muy frágiles, no existen las escalas intermedias (los granos y las inclusiones son típicos de metales) entre la singularidad elástica y los átomos.

TESIS CON
FALLA DE CALIFICACIÓN

1.1.0 Relaciones de esfuerzo-deformación

La noción de esfuerzo y deformación de la mecánica continua es equivalente a la fuerza y extensión en la mecánica newtoniana. La principal meta de la mecánica continua es describir las deformaciones de un objeto sujeto a fuerzas externas. Esto se logra por medio de la descripción de las fuerzas y desplazamientos en un paralelepípedo infinitesimal dentro del objeto en el entorno (x, y, z) . Las fuerzas que actúan en cada cara pueden ser diferentes y en general, dependen de la posición dentro del cuerpo. El esfuerzo es un campo tensorial de segundo rango, el cual se representa convencionalmente como el *tensor de esfuerzo* $\sigma_{ij}(x, y, z)$. Donde la posición del paralelepípedo infinitesimal es (x, y, z) , antes de que se efectúe alguna deformación. El tensor de esfuerzo es simétrico ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$). La fuerza por unidad de área en un plano con normal n_j , la cual se conoce como *tracción* τ_i , se obtiene mediante la contracción con el tensor de esfuerzo local:

$$\tau_i = \sigma_{ij} n_j . \quad (1.1)$$

Si el cuerpo está en equilibrio estático (sin movimientos ni rotaciones), la divergencia del tensor de esfuerzo (fuerza) implica que (Landau y Lifshitz, 1986):

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0 , \quad (1.2)$$

donde f_i es la fuerza de masa, generalmente, $f_i = \rho g_i$, es la fuerza de gravedad actuando en el paralelepípedo infinitesimal de densidad ρ . Estas ecuaciones se conocen como las *ecuaciones de equilibrio*. En un estado de compresión hidrostática, el tensor de deformación es $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$, donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y p la presión. De manera más general, existen tres direcciones ortogonales para las cuales el tensor de esfuerzo tiene la forma de un tensor diagonal cuyas componentes diagonales se conocen como *esfuerzos principales*.

El desplazamiento del paralelepípedo infinitesimal es la distancia que existe a partir de la posición en equilibrio. Este es un campo vector variable espacialmente $u_i(x, y, z)$. En este caso, la posición (x, y, z) se refiere al estado en equilibrio y la posición $(x + u_1, y + u_2, z + u_3)$ se refiere al estado en deformación.

La deformación ε_{ij} es también un campo tensorial de segundo rango:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) . \quad (1.3)$$

Estas ecuaciones se conocen como las *relaciones cinemáticas*. Conociendo completamente el campo de deformación del cuerpo, se pueden determinar todos los desplazamientos u_i . La condición necesaria para garantizar unicidad, es que las deformaciones cumplan las ecuaciones de compatibilidad:

$$\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_k \partial x_l} + \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial \varepsilon_{ik}}{\partial x_j \partial x_l} + \frac{\partial \varepsilon_{jl}}{\partial x_i \partial x_k} . \quad (1.4)$$

De aquí en adelante, se utilizarán los términos esfuerzo y deformación refiriéndose a los tensores recién definidos.

1.1.1 Elasticidad lineal

El esfuerzo y la deformación se relacionan en elasticidad lineal a través de:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} . \quad (1.5)$$

Aquí, el tensor de cuarto rango C_{ijkl} es una propiedad del material que puede tener hasta 81 componentes independientes. Al imponer simetría en los tensores σ_{ij} y ε_{ij} , el número de componentes independientes se reduce a 36. Así mismo, la existencia de una función de energía de deformación, reduce aún más el número de componentes independientes. Sokolnikoff (1956) demuestra la existencia de esta función de energía que da lugar a sólo 21 componentes independientes, así mismo, comprueba la unicidad de las soluciones de problemas de valor de frontera. La utilización de la notación indexa estándar, implica que se suman los índices repetidos en la parte derecha de la ecuación. Esta ecuación es la forma más general, anisótropa, de las relaciones esfuerzo-deformación. Para materiales isotropos, el tensor C_{ijkl} tiene sólo dos elementos independientes, conocidos como las *constantes de Lamé*, λ y μ . Para este caso, la relación esfuerzo-deformación se simplifica:

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} + \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} . \quad (1.6)$$

La expresión anterior es la ley de Hooke en forma originalmente propuesta por Lamé.⁴ Entre las relaciones más utilizadas en elasticidad lineal, se encuentran el *módulo de Young* E y la *relación de Poisson* ν . Estas relaciones se obtienen, a partir de las constantes de Lamé:

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} ; \quad E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} . \quad (1.7)$$

⁴ Robert Hooke estableció la ley lineal de elasticidad en 1678 en latín: “*Ut tensio sic vis*” (a tal tensión, tal deformación).

El módulo de Young E se define como la razón entre el esfuerzo extensional y la deformación en extensión de un material sujeto a un estado de esfuerzo *uniaxial* ($\sigma_{xx} = E \epsilon_{xx}$). La relación de Poisson ν es la razón negativa entre la deformación lateral y la deformación axial en un estado de esfuerzo uniaxial ($\nu = -\epsilon_{yy}/\epsilon_{xx}$). Donde el estado de esfuerzo uniaxial implica:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0.$$

Usando esta convención, la relación constitutiva es:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{E} \left[(1 + \nu) \sigma_{ij} - \nu \delta_{ij} \sigma_{kk} \right]. \quad (1.8)$$

Otras relaciones importantes son el *módulo volumétrico* K , que se define como la razón entre el esfuerzo hidrostático y la deformación volumétrica ($\sigma_0 = 1/3 \sigma_{kk} = K \epsilon_{kk}$), y la constante de Lamé μ que es conocida como el *módulo de rigidez, de corte o cizalle*. Este módulo es la razón entre el esfuerzo de corte y la deformación de corte ($\sigma_{ij} = 2\mu \epsilon_{ij}$, $i \neq j$). Para materiales isótropos, por consideraciones teóricas de energía (Sokolnikoff, 1956), se requiere que: $\lambda + 2\mu/3 \geq 0$; $\mu \geq 0$ ó $-1 < \nu \leq 1/2$; $E \geq 0$. Algunas relaciones útiles (véase Achenbach, 1987) entre estas constantes isótropas elásticas, son resumidas en la tabla 1.1.

Las ecuaciones de equilibrio (1.2), las relaciones cinemáticas (1.3), las condiciones de compatibilidad (1.4), y las leyes constitutivas (1.6) – (1.8) constituyen la estructura necesaria para determinar los esfuerzos y deformaciones de un cuerpo elástico, a partir de las condiciones de frontera establecidas. No es fácil, en la mayoría de los casos, obtener soluciones analíticas. Por ejemplo, utilizando la ecuación (1.8) y suponiendo un esfuerzo aplicado uniaxial $\sigma_{xx} = \sigma$, se tiene:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \frac{\sigma}{E} \\ \epsilon_{yy} &= \epsilon_{zz} = -\nu \sigma, \\ \epsilon_{xy} &= \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0 \end{aligned} \quad (1.9)$$

de donde se observa claramente que a partir de un estado de esfuerzo unidimensional, surge un ¡estado de deformación tridimensional!

Para obtener las ecuaciones de movimiento, se utilizan las ecuaciones de equilibrio (1.2) y el término inercial:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \quad (1.10)$$

El desplazamiento $u_i(x, y, z, t)$ depende del espacio y del tiempo t , por lo que se deben establecer, las condiciones de frontera y las condiciones iniciales, para la solución de problemas particulares.

TABLA 1.1
Relaciones entre las constantes isotrópicas elásticas

	E, ν	E, μ	λ, μ
λ	$\frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$	$\frac{\mu(E-2\mu)}{3\mu-E}$	λ
μ	$\frac{E}{2(1+\nu)}$	μ	μ
E	E	E	$\frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu}$
K	$\frac{E}{3(1-2\nu)}$	$\frac{\mu E}{3(3\mu-E)}$	$\lambda + \frac{2}{3}\mu$
ν	ν	$\frac{E-2\mu}{2\mu}$	$\frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}$

1.1.2 Aproximación plana

Bajo ciertas condiciones, se puede sustituir un problema de elasticidad tridimensional por uno bidimensional. Esto puede simplificar la solución considerablemente, dado que dicha solución se puede expresar en términos de la *función de esfuerzo de Airy* (Timoshenko y Goodier, 1970). La función de Airy Φ satisface la *ecuación biarmónica* (Gould, 1994):

$$\nabla^4 \Phi = \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \Phi}{\partial y^4} = 0 \quad (1.11)$$

Una vez calculada esta función, los esfuerzos dentro del material se calculan, en ausencia de fuerzas de cuerpo, de las ecuaciones:

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}; \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}; \quad \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \quad (1.12)$$

Esta es la conocida *aproximación de esfuerzo plano*. Aquí, las otras componentes del tensor de esfuerzo son cero, es decir:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0 . \quad (1.13)$$

La interpretación de la aproximación de esfuerzo plano es que el campo de esfuerzo es bidimensional mientras que el campo de deformación es tridimensional. Esta aproximación puede ser visualizada suponiendo que el material tiene una dimensión mucho más pequeña que las otras dos, cuyos esfuerzos sólo son aplicados a las dos dimensiones mayores. Esto es típico, por ejemplo, en películas delgadas de material.

La *aproximación de deformación plana* se define como el estado de deformación donde todas las componentes z del campo de deformación son cero:

$$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0 . \quad (1.14)$$

En este caso, el campo de deformación es bidimensional, mientras que el tensor de esfuerzo tiene componentes z diferentes de cero. Aquí se supone que una dimensión es mucho mayor a las otras dos, donde se suceden las cargas.

La formulación bidimensional de elasticidad (esfuerzo plano o deformación plana) es ampliamente utilizada en estudios de fractura. Debe de tomarse en cuenta que se trata sólo de una aproximación y que los efectos tridimensionales siempre están presentes, aún para sólidos delgados (Nakamura y Parks, 1988).

1.1.3 Ecuaciones de onda

Un sólido isótropo, perfectamente elástico es representado perfectamente por las constantes de Lamé y la densidad. Para materiales isótropos existen dos modos independientes de propagación de onda: longitudinal c_L y transversal c_T . Las relaciones son (Achenbach, 1987):

$$c_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} = \sqrt{\frac{E(1-\nu)}{\rho(1+\nu)(1-2\nu)}} , \quad (1.15)$$

$$c_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} = \sqrt{\frac{E}{2\rho(1+\nu)}} . \quad (1.16)$$

El movimiento de la propagación longitudinal es paralelo a la dirección de propagación. Este tipo de modo de propagación también se conoce como onda primaria, de presión, volumétrica o simplemente onda-P*. Mientras que el modo transversal viaja normal a la dirección de propagación. Esta onda también es conocida como onda secundaria,

* La onda P en latín es "*onda prima*"

rotacional, de cizalle o simplemente onda-S*. De las ecuaciones anteriores, (1.15) y (1.16), se establece:

$$\kappa \equiv \frac{c_L}{c_T} = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\mu}} = \sqrt{\frac{2(1-\nu)}{1-2\nu}} \quad (1.17)$$

Aquí, κ se define como una constante adimensional del material (sólo para materiales sólidos). La tabla 1.2 presenta los valores representativos de varios materiales comunes (tomada de Achenbach, 1987).

TABLA 1.2
Valores representativos de densidad, constante del material y velocidades de propagación.

Material	ρ (kg/m ³)	c_L (m/seg)	c_T (m/seg)	κ
Aire	1.2	340		
Agua	1000	1480		
Acero	7800	5900	3200	1.845
Cobre	8900	4600	2300	2
Aluminio	2700	6300	3100	2.03
Vidrio	2500	5800	3400	1.707
Caucho	930	1040	27	38.5

Un tercer modo de propagación es la onda de Rayleigh, que viaja en la superficie libre del material. La velocidad de la onda de Rayleigh c_R , depende tanto de la velocidad longitudinal como de la transversal, y se obtiene de la raíz real de la ecuación:

$$\left(\frac{1}{c_T^2} - \frac{2}{c_R^2}\right)^2 - \frac{4}{c_R^2} \sqrt{\frac{1}{c_R^2} - \frac{1}{c_T^2}} \sqrt{\frac{1}{c_R^2} - \frac{1}{c_L^2}} = 0 \quad (1.18)$$

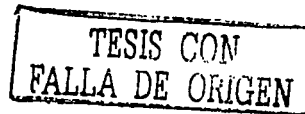
6

$$\left(2 - \frac{c_R^2}{c_T^2}\right)^2 - 4 \sqrt{1 - \frac{c_R^2}{c_L^2}} \sqrt{1 - \frac{c_R^2}{c_T^2}} = 0 \quad (1.19)$$

Esta es la velocidad a la cual la energía se transporta en un sólido. La velocidad de Rayleigh servirá de comparativo cuando analicemos la velocidad de propagación de fracturas.

Para obtener las ecuaciones de movimiento para el vector desplazamiento \mathbf{u} , de un cuerpo homogéneo, isótropo, linealmente elástico, se utilizan las ecuaciones de equilibrio (1.2), las

* La onda S en latín es "unda secunda"



relaciones cinemáticas (1.3), la ley de Hooke (1.6) y el término inercial (véase Ziegler, 1991). Esto da como resultado la célebre ecuación dinámica de Navier:[†]

$$(\lambda + \mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} . \quad (1.20)$$

Nótese que esta ecuación es semejante a la ecuación (1.10), pero se ha eliminado convenientemente el tensor de esfuerzo, dejando sólo el vector desplazamiento. Esto no implica que se ha eliminado la naturaleza tensorial del problema. Si consideramos la descomposición de Helmholtz del vector desplazamiento (Ewing *et al.*, 1957):

$$\mathbf{u} = \nabla \Phi + \nabla \times \Psi \equiv \text{grad} \Phi + \text{curl} \Psi , \quad (1.21)$$

y sustituyendo esta ecuación en la ecuación (1.20), se obtiene una ecuación de onda escalar para el potencial irrotacional Φ y una ecuación de onda para el potencial vectorial Ψ :

$$c_l^2 \nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} ; \nabla \times (\nabla \Phi) \equiv \text{curl grad} \Phi \quad (1.22)$$

y

$$c_t^2 \nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} ; (\nabla \cdot \Psi) \equiv \text{div} \Psi = 0 . \quad (1.23)$$

La ecuación escalar (1.22) es la ecuación de onda longitudinal con velocidad de propagación c_l , y la ecuación vectorial (1.23) es la ecuación de onda transversal con velocidad de propagación c_t (véanse las ecuaciones 1.15 y 1.16). Bajo condiciones adiabáticas,[‡] los potenciales Φ y Ψ son sistemas de propagación de onda en un sólido, propagándose independientemente entre sí. No obstante, estos sistemas se acoplan cuando se encuentra una interfase o una superficie libre. Se puede demostrar también, utilizando la descomposición de Helmholtz, la existencia de una onda superficial no dispersiva que viaja a lo largo de la superficie libre (libre de tracción). Esta es la anteriormente mencionada onda de Rayleigh con velocidad c_R expresada por la ecuación (1.19).

Otra forma útil de la ecuación (1.20), se obtiene de las relaciones mostradas en la tabla 1.1 para la relación de Poisson ν , y considerando a las fuerzas externas implícitas en las condiciones de frontera:

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + (1 - 2\nu)\nabla^2 \mathbf{u} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} . \quad (1.24)$$

[†] Esta ecuación también se conoce como la ecuación de Lamé, que aparentemente obtuvo de forma independiente a Navier.

[‡] Se dice que un sistema es adiabático si no tiene interacción térmica con otros sistemas (aislamiento térmico).

1.1.4 Energía elástica

Un campo de esfuerzo almacena energía. Si el sistema tiene un solo valor de relación esfuerzo-deformación, entonces se puede definir una densidad de energía potencial como:

$$W = \int \sigma_{ij} e_{ij} . \quad (1.25)$$

Para materiales perfectamente elásticos la densidad de energía se simplifica:

$$W = \frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij} . \quad (1.26)$$

Para materiales plásticos se requiere utilizar la ecuación (1.25). La energía potencial del sistema es pues obtenida al integrar la densidad sobre el volumen:

$$E_p = \int W dV . \quad (1.27)$$

Se puede utilizar la derivada del campo de desplazamientos ($u_i = du_i(x, y, z)/dt$) para obtener la velocidad local. De aquí se calcula la energía cinética:

$$E_c = \frac{1}{2} \int \rho \dot{u}_i \dot{u}_i dV . \quad (1.28)$$

1.1.5 Teoría de Griffith

La contribución fundamental de Griffith (1920), utilizando la teoría lineal de elasticidad en materiales fracturados, fue resolver el problema del esfuerzo infinito que aparece en los extremos (puntas) de una fractura. Irónicamente, el trabajo original de Griffith estaba motivado realmente por otras consideraciones (Gordon, 1976). Él buscaba estimar la resistencia de los cristales sólidos (véase Fig. 1.2) por medio de las propiedades de sus arreglos geométricos (redes atómicas).

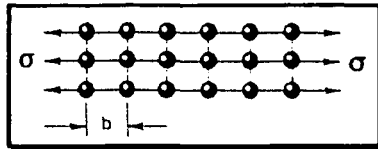


Figura 1.2 Modelo atómico para calcular la resistencia teórica de los cristales.

La ley de separación de fuerzas interatómicas puede ser aproximada por una función que exhibe tres propiedades:

- 1) Una pendiente inicial que corresponde al módulo elástico E .
- 2) Un trabajo total de separación (área bajo la curva) que corresponde a la energía de superficie γ .
- 3) Un valor máximo que represente la fuerza cohesiva interatómica.

Para esto, es conveniente utilizar una función del tipo sinusoidal:

$$\sigma(u) = \left(\frac{E\gamma}{b}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left[\left(\frac{Eb}{\gamma}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{u}{b}\right)\right], \quad (1.29)$$

donde b representa la distancia interatómica de equilibrio y u es el desplazamiento en x . De aquí se obtiene la resistencia teórica como el valor máximo de la relación anterior:

$$\sigma_{teórica} = \left(\frac{E\gamma}{b}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.30)$$

Para la mayoría de los materiales en laboratorio $\gamma \approx Eb/40$, lo que resultaría en $\sigma_{teórica} = E/6$. No obstante, el valor obtenido de la predicción de la ecuación anterior, está muy lejos de los valores de resistencia observados en el laboratorio. Esto motivó a Griffith a tratar de explicar la discrepancia basándose en el desarrollo matemático de Inglis (1913), dando como resultado la existencia de un tipo de evento de fractura. La Fig. 1.3 muestra los resultados obtenidos por Griffith para una serie de experimentos en fibra de vidrio con diferentes espesores. Se observa que cuando una fibra disminuye de espesor (adelgaza), el esfuerzo de ruptura (carga por unidad de área) aumenta. Lo más notable de este experimento fue que para un espesor extremadamente delgado (al límite del espesor), la resistencia es idéntica a la resistencia teórica. Griffith dedujo que este *efecto de tamaño*, es equivalente al causado por un defecto (fisura o fractura) en el material.

La idea básica de la teoría de fractura de Griffith es la existencia de una fuerza de acción para la extensión de fractura (como resultado de la liberación de energía potencial en el cuerpo), junto con una resistencia inherente del material de oponerse al fracturamiento. La Fig. 1.4 ilustra el modelo atómico utilizado. La resistencia al crecimiento de fractura en un material frágil está asociada con la necesidad de proveer *energía de superficie* a la nueva superficie de fractura. Griffith formuló un procedimiento de balance de energía, para este problema, utilizando el desarrollo de Inglis (1913). Esto condujo a la relación entre el cambio de energía potencial, debido al incremento de superficie de fractura y la resistencia a dicho incremento. Para un material frágil elástico se tiene:

$$\frac{dW}{dA} - \frac{dU}{dA} = \gamma, \tag{1.31}$$

donde W y U son, respectivamente, el trabajo externo realizado en el cuerpo y la energía interna de deformación. La energía de superficie del material es γ y $A = 4Ba$ es el área de la fractura en un cuerpo de espesor B y radio de fractura a .

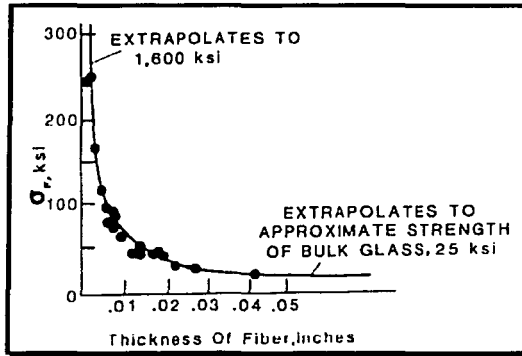


Figura 1.3 Resultados originales de Griffith (1920) en fibra de vidrio.

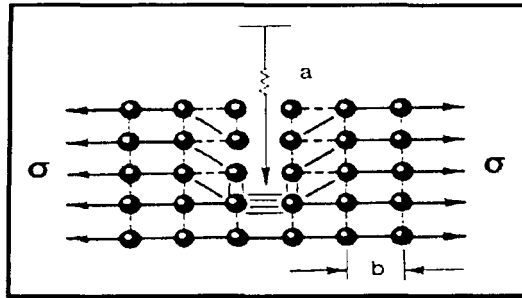


Figura 1.4 Modelo atómico con defectos para cálculo de la resistencia al fracturamiento.

Griffith entonces consideró el problema de una fractura en un cuerpo infinito sujeto a una carga de tensión perpendicular a dicha fractura, previamente investigado por Inglis (véase Fig. 1.5), por lo que sólo se necesita calcular el cambio neto de energía de deformación elástica. Un hecho interesante fue que a partir de este desarrollo, Bueckner (1958) observó que la energía de deformación debida a una fractura finita es igual a la mitad del trabajo realizado por los esfuerzos actuando en las caras de dicha fractura. La apertura de la cara de

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

la fractura, para el problema de Griffith, se obtiene de la solución de Westergaard (1939) para la aproximación de esfuerzo plano:

$$v = \frac{2\sigma}{E} (a^2 - u^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.32)$$

donde σ es el esfuerzo aplicado. Las coordenadas se toman al centro de la fractura de radio a . Consecuentemente, para una fractura interna, el trabajo se realiza en cuatro diferentes segmentos de superficie. Esto da como resultado (véase apéndice de Maugin, 1992), partiendo de la expresión anterior:

$$W - U = 4B \int_0^a \frac{1}{2} \sigma v(x) dx = \frac{\pi a^2 \sigma^2 B}{E}. \quad (1.33)$$

Tomando la ecuación (1.31) se tiene

$$\sigma_f = \left(\frac{2}{\pi} \frac{E\gamma}{a} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.34)$$

donde σ_f es el esfuerzo necesario para fracturar el material.* La ecuación anterior se derivó con base en condiciones de esfuerzo constante. No obstante, el mismo resultado se obtiene para condiciones de desplazamiento constante (Kanninen & Popelar, 1985).

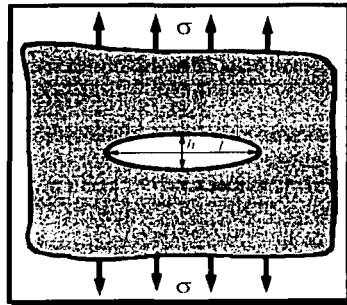


Figura 1.5 Modelo estudiado por Inglis (1913), la longitud de la elipse es l , el ancho es h y el esfuerzo aplicado es σ .

Para condiciones de deformación plana, el factor E que aparece en la ecuación anterior se debe reemplazar por $E/(1 - \nu^2)$. De aquí se puede observar la influencia de la geometría de

* Esta expresión nos da idea del valor necesario que se debe utilizar en los experimentos numéricos de fracturamiento propuestos.

la fractura en el campo de esfuerzos. Por ejemplo, Sneddon (1946) obtuvo la expresión del esfuerzo de fractura σ_f para el caso simétrico axial de una fractura con forma de centavo ("penny-shaped crack") de radio a :

$$\sigma_f = \left(\frac{\pi E \gamma}{2(1-\nu^2)a} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.35)$$

que difiere de la ecuación (1.34), para la versión de aproximación plana, solamente por el factor $(2/\pi)^2$. Por lo tanto, se deduce que la forma de la ecuación sólo cambia por un factor constante para diferentes condiciones geométricas de fractura. Irwin (1960) utilizó esta deducción para generalizar el problema de dinámica de fracturas.[▲]

La resistencia teórica de la ecuación (1.30) se combina con la ecuación (1.34) del esfuerzo de fractura σ_f para obtener la relación:

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{teórica}} \approx \left(\frac{b}{a} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.36)$$

Para una fractura en un medio infinito perfectamente elástico, la expresión anterior es la relación entre el esfuerzo de fractura y la resistencia de fracturamiento. Esta relación *geométrica* indica claramente que la fractura es la fuente fundamental de disturbio de esfuerzos en un material, y se puede establecer que una o más fracturas en el material reducen considerablemente el módulo elástico E .[▲]

1.1.6 Fracturas en equilibrio

Las fracturas estacionarias en equilibrio fueron primero estudiadas por Inglis (1913), para el campo elástico alrededor de la punta de una fractura. Él resolvió el caso estático de una placa infinita con una cavidad elíptica, sujeta a esfuerzo uniforme σ como se observa en la Fig. 1.5. El encontró que el esfuerzo se concentraba en los extremos agudos (puntas) de la elipse. Para un esfuerzo aplicado σ_A el esfuerzo máximo σ_M en la punta de la elipse es:

$$\frac{\sigma_M}{\sigma_A} = 1 + 2\sqrt{\frac{l}{h}}, \quad (1.37)$$

donde l es la longitud y h es el ancho de la elipse. Si $h \rightarrow 0$, la elipse se adelgaza al límite hasta convertirse en una grieta de longitud l . La ecuación anterior es entonces sustituida por:

[▲] Recomendando el excelente tratado sobre las teorías de fractura de Irwin y de Griffith por Sih & Liebowitz (1968).

[▲] Este es un importante concepto relacionado a *percolación elástica*, que se tratará en detalle en un capítulo posterior.

$$\frac{\sigma_M}{\sigma_A} = 2\sqrt{\frac{l}{r}}, \quad (1.38)$$

aquí r es el radio de curvatura en la punta de la grieta. Teóricamente, para $r \rightarrow 0$, el campo de esfuerzo en la punta de la fractura diverge. Es decir, existe una singularidad de esfuerzo. Utilizando el tensor de esfuerzo, se tiene, de acuerdo a Muskhelishvili (1953), que la longitud de la grieta l reduce la energía potencial almacenada en el campo de esfuerzo por:

$$\Delta E_p = -\frac{\pi\sigma^2 l^2}{4E}. \quad (1.39)$$

Es importante mencionar, que aunque la teoría lineal elástica nos permite calcular el esfuerzo alrededor de la punta de la fractura, no se puede especificar cómo la grieta se forma, ni cómo cambia su longitud. También es cierto, que la teoría predice una singularidad de esfuerzo en la punta de la fractura, pero observación de laboratorio en materiales indica que dicho esfuerzo es finito (véanse, *e.g.*, Ewals & Wanhill, 1986; Marder & Fineberg, 1996). En general, se considera una *zona de cesación* ("yield zone") que representa la energía real alrededor de la fractura y que modifica las propiedades del sólido. Este es un proceso no lineal y varios otros modelos teóricos muestran dicho proceso, como los modelos viscoelásticos o plásticos, en dicha zona de cesación. Esto significa que un sólido frágil, realmente se comporta algo plástico alrededor de la grieta, por lo que los materiales con fracturas son en principio sólidos casi-frágiles. En otras palabras, un sólido sujeto a esfuerzos externos manifiesta deformación plástica alrededor de las fracturas.

Debido a las anteriores complicaciones, el criterio de Griffith es útil en entender la distribución de energía alrededor de una grieta. Dicho criterio se puede expresar como la minimización de la energía potencial del sistema, considerando que dicha energía consiste de energía almacenada en el campo elástico y de energía requerida para crear nueva superficie de fractura. La condición de minimización es:

$$\frac{\partial}{\partial l} (E_p + E_{\text{superficie}}) = 0 \quad \text{ó} \quad \frac{\partial}{\partial l} (E_{\text{superficie}} - E_{\text{fractura}}), \quad (1.40)$$

donde E_{fractura} es el decremento de energía potencial debido a la presencia de la fractura.*

1.1.7 Factor de intensidad de esfuerzo

El factor de intensidad de esfuerzo es un concepto presentado por Irwin (1960), que demuestra que la forma del campo de esfuerzo alrededor de la fractura es diferente dependiendo del modo de carga externa. Por lo que la magnitud de dicho factor es todo lo que se requiere para caracterizar completamente el campo local de esfuerzo. Recordemos

* Recomiendo el libro de Freund (1990) donde presenta soluciones a estos problemas.

que existen tres tipos de carga en un sólido: 1) tensión en plano (modo I), 2) cizalle en plano (modo II) y 3) cizalle fuera de plano (modo III). Estos modos de carga se ilustran en la Fig. 1.6.

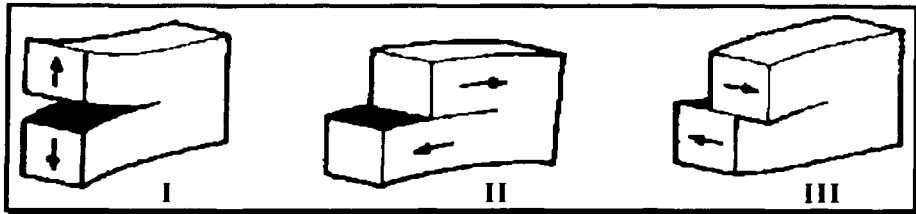


Figura 1.6 Los tres modos de carga en un sólido.

El factor de intensidad de esfuerzo F_{σ} se define como la constante asociada a la singularidad de esfuerzo en la punta de la grieta:

$$\sigma_{i,j} \rightarrow \frac{F_{\sigma}}{\sqrt{2\pi r}} G_{i,j}(\theta) + O(1) . \quad (1.41)$$

Las funciones $G_{i,j}$ son genéricas y no dependen de la geometría o tipo de material, y sólo dependen del ángulo polar θ debido a que la fractura tiene un radio de curvatura r finito (Irwin, 1960). En otras palabras, el esfuerzo varía a lo largo del radio r por lo que es función de θ . Para $\theta = 0$, uno estaría enfrente de la punta de la fractura, mientras que para $\theta = \pi/2$ uno se encuentra perpendicular a la dirección de avance de la fractura. Tanto $G_{i,j}$ como F_{σ} son diferentes para cada tipo de modo de carga externa, más aún, $G_{i,j}$ se define de tal suerte que $G_{i,j}(0) = 1$.

Por ejemplo, el factor de intensidad de esfuerzo para modo I, F_{σ}^I es:

$$F_{\sigma}^I = \frac{\sigma_{yy}(x,0)}{\sqrt{2\pi x}} \text{ para } x \rightarrow 0 . \quad (1.42)$$

Por lo que la magnitud del factor de intensidad de esfuerzo depende del esfuerzo aplicado, de la longitud de la grieta l y de la geometría particular del sólido. Suponiendo un semiplano infinito con tensión en modo I se tiene:

$$F_{\sigma}^I(l) = \sigma \sqrt{1.1\pi l} , \quad (1.43)$$

donde σ es el esfuerzo aplicado al infinito (como en Fig. 1.5).

Debido a que la forma del campo de esfuerzo alrededor de la fractura es genérico, excepto por su magnitud total, el valor de F_0 es suficiente para caracterizar completamente dicho campo. Cuando el esfuerzo en la punta de la grieta sobrepasa cierto valor, dicha grieta avanzará. Es por eso que el valor máximo de la intensidad de esfuerzo F_0^{\max} , que un material puede soportar antes de seguir fracturándose, es la anteriormente mencionada resistencia de fractura (véase la sección 1.2).

Se sabe que las grietas no son infinitamente agudas para sólidos reales, por lo que siempre se tiene un radio de curvatura finito R_0 . Por lo tanto, el esfuerzo máximo en la punta de una fractura común es $F_0 G_{I,II}(0)/\sqrt{2\pi r}$. Parece ser, que la principal razón de tener realmente esfuerzos finitos en los extremos de las fracturas es que a muy pequeñas escalas, existe un proceso no lineal de deformación plástica en el material, en contraposición a las predicciones de Griffith. Este proceso se conoce como *cesación a escalas pequeñas* (Rice, 1968). Se sabe también que entre mayor es la zona de cesación, mayor será el radio de curvatura por lo que se requeriría de esfuerzos aplicados más grandes para hacer crecer las fracturas existentes. Esto implica también que a mayor zona de cesación, mas 'resistente' es el material.

Griffith (1920) supuso que la energía de superficie era el resultado solamente de las fuerzas de cohesión entre partículas. Es decir, una tensión superficial. Supuso además que dicha tensión superficial era una constante del material independiente de la carga externa. No tomó en cuenta el efecto del proceso plástico que se mencionó arriba. Irwin (1948) y Orowan (1950) entonces generalizaron una energía de superficie efectiva. Ellos reemplazaron la tensión superficial de Griffith por una energía compuesta de la tensión superficial y de trabajo adicional necesario para crear una zona de deformación plástica alrededor de la fractura. Conceptualmente, la energía de superficie o *energía de fractura* es $E_{fractura} = 2l(E_{entaces} + E_{plástica})$. Estudios de laboratorio (véanse, e.g., Gordon, 1976; Marder & Fineberg, 1996) demuestran que en algunos casos la energía por deformación plástica $E_{plástica}$ es varios ordenes de magnitud mayor a la energía por tensión superficial $E_{entaces}$.

1.2 Dinámica de fracturas

La mecánica de fracturas en equilibrio (estático) combina la teoría de elasticidad lineal con diferentes modelos para la creación de nueva superficie de fractura. La dinámica de fracturas no es diferente a la teoría estática, sino que sólo incluye un termino adicional en las ecuaciones, el cual es el efecto inercial. Por lo que el propósito de la dinámica de fracturas es predecir eventos dinámicos tales como la velocidad de fracturamiento y otros efectos de disipación de energía (calor, propagación de onda, etc.) asociados a partir de parámetros del material y esfuerzos aplicados. Por lo que se utiliza la ecuación de balance de energía de Griffith (1920), pero incluyendo efectos inerciales así propuesta por Mott (1948) y modificada por Dulaney & Brace (1960).

Supóngase una grieta de longitud l como se ilustra en la Fig. 1.5. Dicha grieta, en principio disminuye la energía potencial del sistema. Suponiendo además que hay una área de influencia alrededor de la fisura para la acción de relajación de energía, de forma circular con radio $l/2$ y partiendo de la ecuación (1.39), se deduce que la energía potencial se reduce por un factor proporcional a $l^2/4$, esto da (Gross, 1995):

$$E_p = -C_p l^2 + 2\gamma l, \quad (1.44)$$

donde C_p es una constante de proporcionalidad y la energía de superficie del material es γ . Para introducir los efectos inerciales, considérese que la grieta se mueve a una velocidad v . Esto implica que el área de influencia también se mueve a esta velocidad para relajar esa porción del sistema consistentemente. La energía cinética de un elemento de masa es $mv^2/2$, por lo que la energía cinética asociada al movimiento de fractura es:

$$E_c = C_c v^2 l^2. \quad (1.45)$$

Aquí, C_c es también una constante de proporcionalidad. La energía total es claramente:

$$E_{total} = 2\gamma l + C_c v^2 l^2 - C_p l^2 = 2\gamma l + l^2 (C_c v^2 - C_p). \quad (1.46)$$

Esta expresión es válida para velocidades relativamente pequeñas a la velocidad del sonido en el material. Para calcular la expresión que predice la velocidad de fracturamiento, considere la ecuación (1.44) que nos indica que al iniciarse el movimiento de fractura cierta cantidad de energía potencial se convierte en energía cinética. Al inicio de la grieta, $v=0$, por lo que $E_{total} = E_p$, es constante. Esto implica $\partial E_{total} / \partial l = 0$, lo cual nos da para una longitud de fractura inicial l_0 :

$$\gamma = l_0 C_p. \quad (1.47)$$

Esta expresión nos da a γ , la energía de superficie, en función de l_0 , y es claro que $E_{total} = C_p l_0^2$, por lo que la ecuación (1.46) se puede escribir como:

$$C_p l_0^2 = 2C_p l_0 l + C_c v^2 l^2 - C_p l^2 = 2C_p l_0 l + l^2 (C_c v^2 - C_p). \quad (1.48)$$

Resolviendo para v se tiene:

$$v = \left(1 - \frac{l_0}{l}\right) \sqrt{\frac{C_p}{C_c}}. \quad (1.49)$$

Este es el resultado de Dulancy & Brace (1960), donde $\sqrt{C_p/C_c}$ es la máxima velocidad de fractura $V_{f\max}$. Stroh (1960) argumenta que $V_{f\max}$ es idéntica a la velocidad de Rayleigh del material c_R , dándonos:

$$V_{fractura} = c_R \left(1 - \frac{l_0}{l} \right). \quad (1.50)$$

El argumento anterior se puede interpretar como que la energía de liberación aumenta proporcional a l^2 , mientras que la energía de superficie libre es proporcional a l . Paulatinamente al movimiento de fractura, la cantidad de energía consumida es insignificante en comparación a la cantidad de energía de superficie. Esto es como si la fractura viajara en una superficie libre, tal como es el caso de las ondas de superficie de Rayleigh. Por lo tanto, se argumenta que la velocidad terminal de fractura $V_{f\max}$ es igual a c_R . La velocidad de Rayleigh es bastante menor a la velocidad del sonido en el sólido, por lo que la ecuación (1.46) es válida.

1.3 Factor de intensidad de esfuerzo dinámico

Bajo el modo de carga I, el factor de intensidad de esfuerzo dinámico para una grieta con movimiento arbitrario es calculado (Freund, 1990) en función del tiempo $t(t)$ y velocidad de fracturamiento V como:

$$F_{\sigma}^I(l, V) = k(V) F_{\sigma}^I(l, 0), \quad (1.51)$$

donde $F_{\sigma}^I(l, 0)$ es el factor inicial en equilibrio de una grieta estacionaria en modo I y longitud l (véase ecuación (1.42)), y $k(V)$ es una función de la velocidad de fractura instantánea. La expresión (1.51) implica que el movimiento instantáneo de la fractura es sólo función de la velocidad y la longitud.

Se puede demostrar en el caso para fracturas frágiles en dos dimensiones (Freund, 1990), que la descripción de la intensidad de esfuerzo local es igual a la energía liberada. En condición de esfuerzo plano, se tiene:

$$G = -\frac{\partial E_p}{\partial l} = \frac{F_{\sigma}^2}{E}, \quad (1.52)$$

para grietas en equilibrio. G es llamada la *razón de energía liberada*. F_{σ} especifica adecuadamente el esfuerzo alrededor de la punta de la grieta, por lo que el flujo de energía en la grieta se puede determinar a partir de sólo el factor de intensidad de esfuerzo. Esta expresión es conocida como la relación de Irwin (1948). Las descripciones global y local de energía están pues relacionadas en general a partir de calcular el factor de intensidad de

esfuerzo. Freund (1990) obtiene la descripción dinámica o generalizada de G , la cual toma la forma para modo I y velocidad de fractura V :

$$G = A_I(V) \frac{1-v^2}{E} (F_\sigma^I)^2, \quad (1.53)$$

donde $A_I(V)$ es una función de la velocidad de fractura instantánea. Esta expresión es entonces llamada la generalización de la relación de Irwin.

El criterio de Griffith para balance de energía para una fractura en crecimiento implica que la energía liberada es utilizada para hacer más superficie de fractura, la cual se puede expresar como $G = 2\gamma$. Recuérdese que γ es la energía de superficie de fractura del material (véase ecuación (1.31)). Si se combina esto con la relación generalizada de Irwin se obtiene una ecuación de movimiento para la punta de la grieta (Freund, 1990; Gross, 1995):

$$\frac{2E\gamma}{(1-v^2)(F_\sigma^I(l,0))^2} = 1 - \frac{V}{c_R}. \quad (1.54)$$

Resolviendo para la energía de superficie de fractura γ , se obtiene la expresión:

$$\gamma(V) = \frac{(1-v^2)(F_\sigma^I(l,0))^2}{2E} \left(1 - \frac{V}{c_R}\right). \quad (1.55)$$

Esta ecuación es muy útil en el laboratorio porque permite calcular la disipación de energía a partir de la medición de la velocidad y la longitud de fractura a diferentes tiempos del experimento. $\gamma(V)$ es pues la disipación de energía en forma de deformación plástica y en otros tipos de disipación de energía (calor, propagación de ondas elásticas y ¿efectos electromagnéticos?).

Utilizando el factor de intensidad de esfuerzo de la expresión (1.43), la ecuación (1.54) y resolviendo para la velocidad de fractura V , se tiene:

$$V = c_R \left(1 - \frac{\zeta}{I}\right), \quad (1.56)$$

donde

$$\zeta \equiv \frac{2E\gamma}{1.1\sigma^2\pi(1-v^2)}. \quad (1.57)$$

Analizando velocidades de fractura, Yoffe (1951) encontró que existe una velocidad crítica de fractura con un valor cercano a $0.6c_R$, en la cual la dirección de máximo esfuerzo no

está directamente en la punta de la grieta sino que existen dos lóbulos de concentración de energía simétricos, bifurcándose en cierto ángulo (alrededor de 30°) en la dirección del avance de la fractura. Estos lóbulos de concentración de energía que generan deformación plástica, formarán dos fracturas eventuales o en su caso, la fractura original se desviará a una de las direcciones de bifurcación. Ciertamente, para un medio desordenado este fenómeno crea un sistema de fracturas múltiples observándose bellas configuraciones fractales (Louis *et al.*, 1986; Louis & Guinea, 1987). No es claro el porque de las bifurcaciones, pero esta *transición de fase* es observada fielmente en muchos eventos de fractura en materiales. Entender exactamente los mecanismos que generan este fenómeno de disipación de energía es uno de los grandes retos de la ciencia y de la tecnología contemporáneas.

Capítulo 2

Teoría de Percolación

2.0 Medios desordenados

Los materiales de la naturaleza son raramente perfectos en su estructura. No sólo es difícil hacer materiales perfectos en el laboratorio, sino a menudo es deseable que los materiales contengan un cierto grado de desorden. Un ejemplo de esto es el concreto. El concepto de desorden es muy amplio. El desorden puede ser mesoscópico, es decir, a escala mucho mayor que la atómica o microscópica; pero pequeña en comparación a la escala de una muestra de material. Los métodos para analizar teóricamente los efectos del desorden en las propiedades del material son, por supuesto, dependientes del tipo de desorden. No obstante, es posible obtener ciertas generalidades a partir de métodos de *homogenización*. Un material desordenado es por definición heterogéneo (probablemente a varias escalas).

Supongamos representar un volumen elemental de un material, el cual es pequeño comparado con la escala del objeto. Si el material es estadísticamente homogéneo, esto significa que las propiedades locales son constantes al tomar el promedio sobre dicho volumen elemental. Es entonces posible reemplazar el total del material desordenado por un volumen elemental homogéneo. A este proceso se le conoce como homogenización. Este proceso de homogenización es conocido en física como la aproximación del campo medio (véase, por ejemplo, Starzak, 1989).

Una vez realizada la homogenización, el modelo homogéneo es utilizado para calcular cualquier propiedad macroscópica de interés. Visto desde nuestra perspectiva, se requiere definir volúmenes elementales con propiedades locales, que sean utilizados para modelar materiales desordenados (rocas), tanto teórica como numéricamente. Se debe notar que diferentes propiedades del material tienen diferentes sensibilidades al desorden real. Por ejemplo, propiedades de transporte, como es el caso de la conducción eléctrica, no es nada sensible si se compara con la propiedad de la resistencia mecánica del material, el cual puede ser gobernada por crecimiento catastrófico (fracturamiento) y/o fisuras inestables.

Se discutirá aquí un ejemplo del procedimiento de homogenización el cual es central en todas las ideas del tratamiento de materiales desordenados. El ejemplo es basado en el trabajo de Kirkpatrick (1973), para conductancia eléctrica Σ de una red de *enlaces conductores* con una distribución de conductancias. Este proceso es análogo al problema de percolación, que se verá más adelante. Supongamos una retícula cuadrada como se muestra en la Fig. 2.1. Los extremos (barras) alto y bajo son conectados para mantener una diferencia de voltaje V . La red se inclina un ángulo $\pi/4$ en comparación a los extremos conectados. Con este arreglo, todos los enlaces llevarían la misma cantidad de corriente si

las conductancias fueran las mismas, es decir, una retícula homogénea. Dicha red consiste de enlaces con una conductancia σ_m . El voltaje a través de cada enlace es $v_m = V/L$ donde L es el tamaño lincal de la red. La corriente que fluye en cada enlace es i_m . La relación entre la corriente y la diferencia de voltaje v_m , a través de cada enlace, es calculada de la conductancia de un sólo enlace de la red. Suponga que la red es muy grande y que está en tierra en sus esquinas, es decir, el voltaje es cero.

A partir de la suposición del voltaje cero, conectemos ahora un alambre entre la tierra y uno de los nodos que forman un enlace en la red, sea este el nodo A (ver Fig. 2.2). Por lo tanto, una diferencia de potencial entre la tierra y este nodo existe, y una corriente i fluye en la red por medio de este nodo. La simetría que existe, demanda que una corriente $i/4$ fluya en cada uno de los enlaces que ligan al nodo A si L es muy grande y si A está suficientemente alejado de los extremos de la red. Movamos ahora el alambre a otro nodo conectado al mismo enlace, el cual llamaremos B . También, permita que se revierta la diferencia de potencial entre dicho nodo y la tierra, de tal forma que la corriente i fluya de la red al alambre.

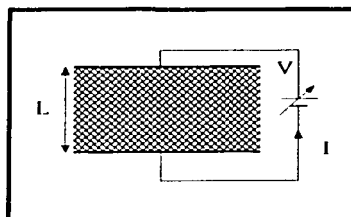


Figura 2.1. Red de conductancia. La conductancia σ varía de enlace a enlace.

Por supuesto, la corriente, a través de los cuatro enlaces conectados a este nodo, es también $i/4$ para L grande y B lejos de los extremos o esquinas de la red. Las ecuaciones que gobiernan el flujo de corriente en la red son, obviamente, las ecuaciones de Kirchhoff, las cuales son lineales. Esto hace suponer que la corriente que fluye entre el nodo A y B , a través de su enlace, es $i/4 + i/4 = i/2$. La conductancia del enlace es σ_m , por lo que la diferencia de voltaje quedará como $i\sigma_m/2$, teniendo:

$$\sigma'_{AB} = 2\sigma_m. \quad (2.1)$$

Es decir, la conductancia entre los dos nodos es la corriente i que fluye en la red dividida por la diferencia de voltaje entre nodos.

Supongamos ahora una red desordenada. Suponga un enlace de la red con conductancia σ , y una diferencia de voltaje externo V impuesto en los extremos de la red para que el enlace

tenga una diferencia de voltaje de $v_m + v$ donde v es la desviación del valor medio de v_m . La aproximación del campo medio consiste en reemplazar el resto de la red por una red homogénea, pero manteniendo este enlace particular sin modificación, es decir, ignorando la correlación entre las fluctuaciones de voltaje v y las fluctuaciones de las conductancias. La conductancia σ_{AB} entre dos nodos conectados por este enlace, se establece al poner el enlace de conductancia σ en paralelo con el resto de la red. Utilizando la ecuación (2.1), tenemos:

$$\sigma_{AB} = \sigma'_{AB} - \sigma_m + \sigma = \sigma_m + \sigma. \quad (2.2)$$

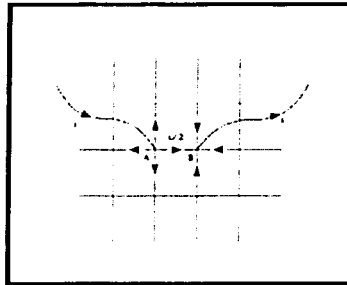


Figura 2.2. Diagrama que muestra como se calcula la conductancia entre el nodo A y el B.

Por lo que la relación corriente-voltaje en este enlace es

$$(v_m + v)(\sigma_m + \sigma) = i, \quad (2.3)$$

o para el voltaje fluctuante

$$v = \frac{i}{\sigma_m + \sigma} - v_m. \quad (2.4)$$

El promedio de la parte del voltaje fluctuante sobre la red debe ser cero: $\langle v \rangle = \langle i / (\sigma_m + \sigma) \rangle - v_m$. Aquí se ha ignorado la correlación entre las conductancias fluctuantes y los voltajes

$$\left\langle \frac{i}{\sigma_m + \sigma} \right\rangle = \langle i \rangle \left\langle \frac{1}{\sigma_m + \sigma} \right\rangle = 2\sigma_m v_m \left\langle \frac{1}{\sigma_m + \sigma} \right\rangle, \quad (2.5)$$

por lo que:

$$\left\langle \frac{\sigma_m - \sigma}{\sigma_m + \sigma} \right\rangle = 0. \quad (2.6)$$

Supongamos entonces que la distribución de conductancias tienen la densidad de probabilidad $\rho(\sigma) = p \delta(\sigma - \sigma_0) + q \delta(\sigma)$, donde $\delta(x)$ es la función delta de Dirac⁴. El significado de esta densidad de probabilidad es que una proporción p están presentes en la red, mientras que una cantidad $q = 1 - p$ están ausentes, es decir, con conductancia cero. De la ecuación (2.6) se tiene:

$$\int [p(\sigma)(\sigma_m - \sigma)/(\sigma_m + \sigma)] d\sigma = p(\sigma_m - \sigma_0)/(\sigma_m + \sigma_0) + q = 0. \quad (2.7)$$

Finalmente, para σ_m , se tiene

$$\sigma_m = \sigma_0(1 - 2q) = 2\sigma_0(p - 1/2), \quad (2.8)$$

lo cual es el valor promedio del valor local de la conductancia requerida para el proceso de homogenización. Es entonces fácil encontrar la conductancia entre los extremos de la retícula:

$$\Sigma = \sigma_m = 2\sigma_0(p - 1/2). \quad (2.9)$$

Nótese que esta ecuación predice que la conductancia en la red es cero para $p = 1/2$, y cambia signo para $p < 1/2$, lo cual no es realizable físicamente, por lo que Σ debe de ser cero. La razón de esto puede ser comprendida si se considera que una proporción p de enlaces está presente y una proporción q de enlaces no lo está, con lo que se pueden definir racimos de enlaces ("clusters") de nodos conectados con cero conductancia. Esto se puede expresar como: Tome dos enlaces con conductancia cero; si es posible, dibuje un camino en la red entre dos enlaces pasando solamente a través de enlaces con conductancia cero, entonces, sólo los dos enlaces están conectados. Un racimo es un grupo de enlaces mutuamente conectados. Es posible, por supuesto, considerar a la red como un compuesto donde, cuando la red es conductora, los enlaces conductores forman una matriz y los racimos de enlaces no conductores forman las partículas. La suposición fundamental necesaria para el procedimiento de homogenización es que el elemento volumen representativo pueda formarse. No obstante, cuando p disminuye, el tamaño de la distribución de los racimos de enlaces no conductores se hace más y más extenso. Cuando $p \approx 1/2$, la distribución es tan extensa que no se puede construir un elemento volumen representativo. La extensión del tamaño de la distribución de los racimos n_s , la cual es el número de racimos de tamaño s por sitio o lugar, es el punto de partida de la teoría de percolación. Por lo que entiéndase a la teoría de percolación como una extensión de los modelos estadísticos de homogenización, pero sin las restricciones analíticas de éstos.

⁴ La densidad de probabilidad utilizada es ubica en los procesos de redes estocásticas y de modelos de percolación utilizados para modelar fracturamiento en rocas.

2.1 Modelos de percolación

Percolación representa el modelo más simple de un sistema desordenado. Considere una red cuadrada, donde cada sitio (o nodo) es ocupado aleatoriamente con probabilidad p o vacío (no ocupado) con probabilidad $1-p$. Sitios ocupados y no ocupados pueden representar diferentes propiedades físicas. Por simplicidad, suponga que los sitios ocupados son conductores eléctricos, los sitios no ocupados representan los aisladores eléctricos, y la corriente eléctrica, por ende, sólo puede fluir entre sitios conductores cercanos.

A baja concentración p , los sitios conductores están aislados o forman pequeños racimos de sitios cercanos ó vecinos. Dos sitios conductores pertenecen al mismo racimo si están conectados por un camino de sitios conductores vecinos y si la corriente puede fluir entre ellos. Nótese que a un valor pequeño de p , el sistema es un aislador, dado que el camino conductor no atraviesa toda la red. A valores grandes de p , pueden existir muchos caminos conductores que hagan al sistema conductor.

A cierta concentración, existe un umbral de probabilidad de concentración p_c donde la corriente eléctrica puede "percolar" (*i.e.*, fluir, transportar) de un lado de la retícula al otro. Debajo de p_c no hay conducción (sistema aislante), arriba de p_c , tenemos un sistema conductor. El umbral mencionado se conoce como *umbral de percolación* o *concentración crítica*, ya que separa dos diferentes fases de comportamiento físico (*e.g.*, Helba *et al.*, 1992).

Entre otros ejemplos, si los sitios ocupados son superconductores y los sitios no ocupados son conductores, abajo de p_c se separa la fase conductora normal y arriba de p_c se tiene la fase superconductora. Otro ejemplo sería un sistema de magnetos y paramagnetos donde, dependiendo de p_c , tendríamos una mezcla paramagnética o magnética.

De física estadística, hay que hacer notar que la percolación es una *transición de fase geométrica* y no una transición física, como es en el caso de transiciones de fase térmica, donde otro tipo de fenómenos ocurre. La transición de fase geométrica es caracterizada por racimos grandes en la proximidad de p_c . A valores pequeños de p , solo existen pequeños racimos de sitios. Cuando la concentración p es aumentada, el término promedio de los racimos aumenta. En la concentración crítica p_c , aparece un racimo grande el cual conecta lados opuestos de la retícula. Llamamos a este racimo el racimo infinito, dado que su término diverge cuando el término de la red aumenta al infinito. El tamaño promedio de los racimos finitos, los cuales no pertenecen al racimo infinito, disminuye. Para $p=1$, obviamente todos los sitios pertenecen al racimo infinito. Esto es *percolación de sitio*. Cuando se habla de que los enlaces entre sitios son aleatoriamente ocupados, hablamos de *percolación de enlace*. Dos enlaces ocupados pertenecen al mismo racimo si están conectados por un camino de enlaces ocupados. La concentración crítica de enlaces separa una fase de racimos finitos de una fase con un racimo infinito. La Fig. 2.3 muestra un

ejemplo del camino más corto entre los sitios A y B de un racimo de percolación. La Fig. 2.4 muestra un racimo infinito (Furuberg *et al.*, 1988).

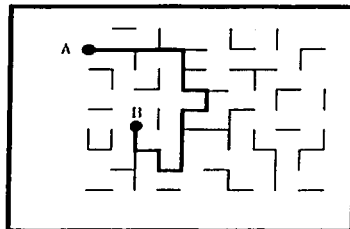


Figura 2.3. Camino más corto de un racimo de percolación entre el sitio A y B.

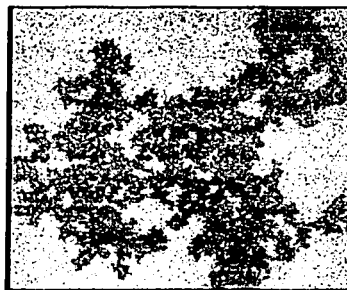


Figura 2.4. Racimo grande de percolación representando la concentración crítica.

Quizás el ejemplo más común de percolación de enlace en física es la red aleatoria de resistores, donde alambres metálicos en una red regular son cortados aleatoriamente con probabilidad $q = 1 - p$. Aquí, p_c separa a una fase conductiva, para q pequeña, de una fase aislante, para q grande.

Las aplicaciones de percolación de enlace en otras disciplinas son, por ejemplo, el proceso de polimeración en Química. En el proceso de polimeración, pequeños racimos de moléculas pueden formar moléculas más grandes*. Un proceso de "gelación" es el hervir un huevo. El huevo a temperatura ambiente es líquido mientras que hervido se convierte en un gel tipo sólido. Un ejemplo en biología es la expansión de una epidemia. La enfermedad empieza en un individuo, el cual puede infectar a vecinos cercanos con probabilidad p en un tiempo determinado. Los vecinos a su vez infectan a otros y así sucesivamente. Aquí, p_c separa una fase de p pequeña donde la epidemia es controlada y

* Este proceso se conoce como "transición sol-gel" (una sola gel).

una p grande donde la epidemia es catastrófica como en el caso del SIDA)*. Lo mismo pasa para fuegos en los bosques. Un árbol incendiado puede propagar el fuego a árboles cercanos y mantener este proceso a gran escala. Muchos otros ejemplos en física de percolación incluyen simulación de materiales amorfos y porosos, conductores iónicos desordenados, fragmentación y por supuesto procesos de fracturamiento.

Las definiciones de percolación de sitio y de enlace de una retícula cuadrada bien se pueden extrapolar a una red d -dimensional. Por ejemplo, una red cuadrada tiene para cada enlace, seis enlaces vecinos, mientras que un sitio tiene cuatro sitios vecinos. La tabla 2.1 presenta algunas retículas conocidas y su umbral de concentración o umbral de percolación (Jerard *et al.*, 1984). No obstante, los umbrales tienen diferentes universalidades dependiendo del fenómeno en cuestión. La Fig. 2.5 presenta la conductividad de un sistema de percolación en dos dimensiones.

TABLA 2.1

Umbral de percolación para varias configuraciones de retículas en dos y tres dimensiones.

Retícula	Percolación de	
	Sitio	Enlace
Triangular	1/2	$2 \sin(\pi/18)$
Cuadrada	0.5927460	1/2
Enjambre	0.6962	$1 - 2 \sin(\pi/18)$
Cúbico de Cara Centrada	0.198	0.119
Cúbico de Cuerpo Centrado	0.245	0.1803
Cúbico Simple de 1 ^{er} Orden	0.31161	0.2488
Cúbico Simple de 2 ^{do} Orden	0.137	-
Cúbico Simple de 3 ^{er} Orden	0.097	-
Arbol de Cayley	$1/(z - 1)$	$1/(z - 1)$

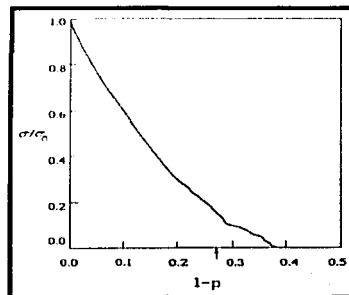


Figura 2.5. La conductividad de un sistema de percolación en 2D en función de $(1 - p)$.

* Se reporta que tan sólo en el continente africano habrá 30 millones de infectados de SIDA para fin del año 2003.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La figura anterior ilustra la disminución de conductividad al remover enlaces en el modelo. Esto es análogo a quitar material en una roca, es decir, aumentar la porosidad. Esta misma tendencia es observada también para el módulo de Young y consecuentemente en las velocidades de propagación en un material. La porosidad máxima posible antes de que un material pierda su calidad elástica, se le llama porosidad crítica[†].

Otro tipo de percolación es la percolación de sitio-enlace donde sitios están ocupados con probabilidad p y enlaces con probabilidad q . Dos sitios ocupados pertenecen al mismo racimo si están conectados por un camino de sitios vecinos ocupados con enlaces. Para $q=1$, la percolación de sitio-enlace se reduce a la percolación de sitio; para $p=1$, se reduce a la percolación de enlace. En el caso de percolación de sitio-enlace, una línea crítica $p-q$ separa las dos fases posibles. Percolación de sitio-enlace puede ser relevante para gelación y para procesos epidémicos en medios diluidos.

El ejemplo más natural de percolación es la "percolación continua", donde las posiciones de dos componentes de una mezcla aleatoria están restringidas a ciertos lugares (sitios) discretas de una red regular. En forma de ejemplo, se presenta una placa de material conductor con agujeros circulares generados aleatoriamente como se presenta en la Fig. 2.6. Este modelo es conocido como el "queso suizo". La cantidad relevante es la parte p que permanece de material conductor. Comparado con percolación de sitio y de enlace, la concentración crítica es menor, $p_c \approx 0.312 \pm 0.005$ para dos dimensiones con círculos de diámetro igual. Para tres dimensiones, es decir, esferas en un cubo, $p_c \approx 0.034 \pm 0.007$. Para diámetros diferentes de círculos o esferas tendríamos un modelo natural representante de materiales geológicos porosos. El experimento de la Fig. 2.6 se realizó con un código que corre en Windows-PC por medio del compilador Fortran PowerStation 4.0 y subrutinas OpenGL.^{*}

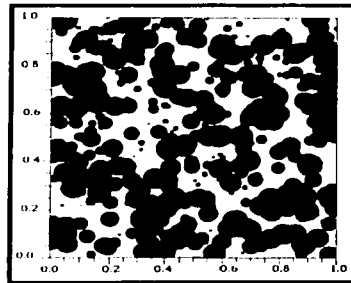


Figura 2.6. Percolación continua para la simulación de una roca porosa en dos dimensiones.

[†] La porosidad crítica para la mayoría de las rocas es aproximadamente de 40%.

^{*} Todos los programas de computo desarrollados en esta tesis corren en ambiente Windows-PC con Fortran PowerStation 4.0.

2.2 Percolación de invasión

El modelo de percolación de invasión fue motivado para el estudio del desplazamiento de un fluido por otro en un medio poroso. La dinámica de frentes de desplazamiento es esencial para entender el proceso de movimiento de fluidos en producción petrolera, y la percolación de invasión es el modelo más simple que acarrea toda la posible física y estructura del fenómeno.

El agua y el aceite son dos fluidos inmiscibles e incompresibles y por lo tanto, el agua, al invadir la roca, desplaza al aceite. El medio poroso puede ser considerado como una red de poros los cuales están conectados por pasajes angostos tortuosos. Al mantener la velocidad de flujo constante y con un valor pequeño se puede asumir que las fuerzas viscosas son despreciables comparadas con las fuerzas capilares, es decir, cuando el agua es inyectada muy lentamente en un medio poroso saturado de aceite, las fuerzas capilares dominan a las fuerzas viscosas, y la dinámica se determina por un radio de poro local r . Las fuerzas capilares, obviamente, son más grandes en conductos estrechos. Siguiendo el modelo de Wilkinson & Willemsen (1983), los sitios y los enlaces representan poros y conductos, asignándoseles radios aleatorios. Por conveniencia, se supondrá que los conductos con más facilidad a ser invadidos son instantáneamente saturados. Se asignan números aleatorios para r en el rango $[0,1]$, representando el tamaño del poro en los sitios. La Fig. 2.7 presenta uno de mis experimentos de invasión de fluido en un medio poroso. La línea roja representa aquel conducto que "percoló" de un lado de la retícula a la otra, por ende, el medio es permeable.

En el modelo, se considera una retícula regular de tamaño $L \times L$, en el cual se representa al aceite, como *el defensor* y al agua, como *el invasor*. El agua es colocada inicialmente en uno de los lados de la retícula. Para describir las resistencias hidráulicas de los pasajes por la invasión del agua, se asigna a cada sitio de la red un número aleatorio r entre 0 y 1. El agua invade el sistema siguiendo el paso de menor resistencia. A cada paso de tiempo, el sitio con menor número aleatorio es ocupado por el agua y el aceite es desplazado. Sitios de crecimiento se identifican como sitios que pertenecen al fluido defensor y son vecinos del fluido invasor. A cada paso de tiempo, el fluido invasor avanza a un sitio de crecimiento el cual tenga un número aleatorio r más pequeño. El fluido invasor puede atrapar regiones de fluido defensor, rodeando estas regiones completamente. Esto forma racimos aislados de regiones con fluido defensor (aceite). Dado que el aceite y el agua son fluidos inmiscibles e incompresibles, el aceite rodeado completamente por agua no puede ser expulsado y el aceite entonces queda atrapado en algunas regiones del medio poroso. Si el fluido defensor es comprensible, entonces el invasor podría moverse en estas regiones atrapadas. En un momento crítico, el racimo invasor es equivalente al racimo de expansión infinito que se observa en percolación regular. Prácticamente todos los sitios con $r < p_c$ no son modificados. Dado que el aceite es incompresible, se aplica la regla de que el agua no puede invadir regiones atrapadas por aceite.

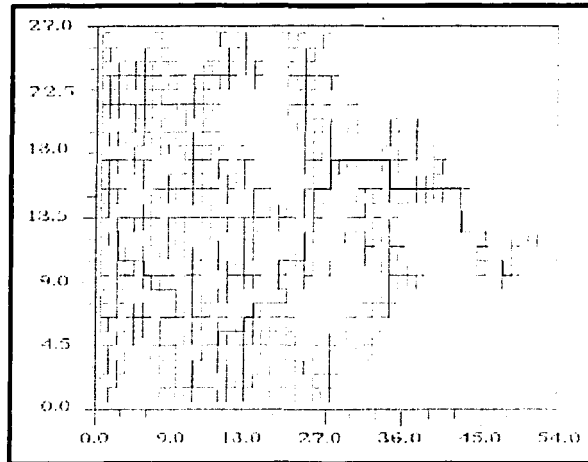


Figura 2.7. Modelo simple de percolación de invasión, la retícula es de 60 X 30 nodos. La línea roja es el conducto permeable.

Es bien sabido que la percolación de invasión es una clase universal diferente a la percolación regular ó estática (sitio, enlace y sitio-enlace). Por otro lado, si el defensor es compresible, otro tipo de invasión es posible y se aproxima a la percolación regular. La Fig. 2.8 ilustra una de mis simulaciones donde el agua invade a una roca saturada de aceite en una retícula de 100×200 nodos. La Fig. 2.9 muestra el resultado de simular el proceso de invasión en una retícula cuadrada diez veces mayor, de 1000×2000 nodos (Aharony, 1996). El número de sitios, $M(L)$, que pertenecen a la parte central $L \times L$ de una red $L \times 2L$, escala como $M(L) = AL^{d'}$, donde A es una constante y $d' \approx 1.82$, la cual es la dimensión fractal del frente de invasión en el medio poroso (Wilkinson & Willemsen, 1983; Furuberg *et al.*, 1988). En esta figura, claramente se observan los frentes en movimiento. Una vez que un sitio es invadido, el frente tiende a permanecer en esa vecindad. El procedimiento es: El frente de invasión exhausta primero todos los poros fáciles de invadir, entonces forzando al invasor a través de un conducto difícil, una nueva región de fácil acceso es encontrada.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

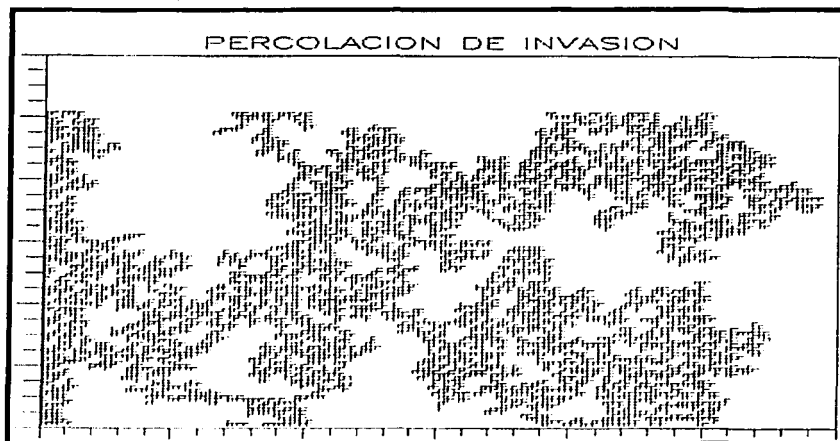


Figura 2.8. Percolación de invasión (experimentos del autor).

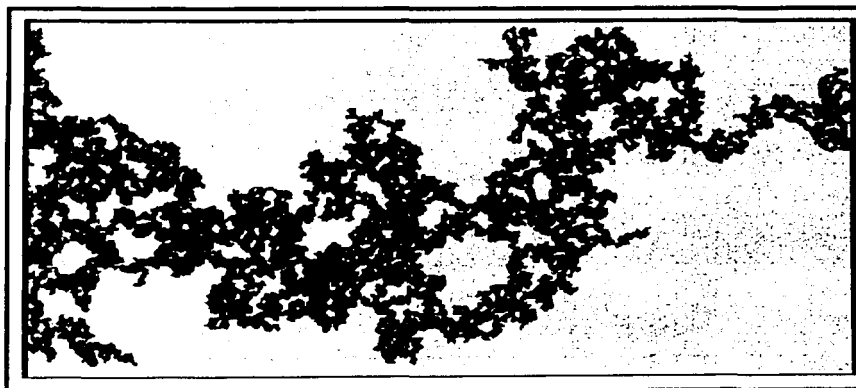


Figura 2.9. Percolación de invasión con una retícula de $2L \times L$.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

2.3 Modelado de percolación de invasión

2.3.0 Modelado numérico y analítico

Varias aproximaciones numéricas existen para generar la simulación de percolación:

❖ Método de Hosken-Kopelman (1976)

Todos los sitios en el sistema de percolación son etiquetados de tal manera que los sitios con la misma etiqueta pertenecen al mismo racimo. Si la misma etiqueta existe en ambos extremos del sistema, entonces un racimo infinito existe. Contando el número de racimos con S sitios, se obtiene la función de distribución del racimo. El algoritmo Hosken-Kopelman es utilizado para investigar la distribución de tamaños de racimos así como la topología del racimo más grande en un sistema desordenado.

❖ Método de Leath (1976)

En este método, racimos de percolación son generados. En el primer paso, el origen de la retícula vacía es ocupada. Los sitios vecinos cercanos son ocupados con probabilidad p ó bloqueados con probabilidad $1-p$. En el segundo paso, los sitios vecinos son ocupados o bloqueados, con probabilidad p y $1-p$ respectivamente, y así para los siguientes pasos. A cada paso, se considera el racimo formado por sitios ocupados asignándoles un número por paso. Los racimos de percolación son por lo tanto, generados con una distribución del tamaño del racimo de $Sn_c(p)$. El factor S es una medida de que tan probable un sitio pueda ser el origen de un nuevo racimo, por lo que hay S maneras de aumentar el racimo.

❖ Método de Ziff

Es un método directo para generar perímetros externos de un racimo de percolación en dos dimensiones. Fue sugerido por Ziff *et al.* (1984). Dicho método es importante porque es el algoritmo más eficiente para determinar a p_c .

Existen varias aproximaciones analíticas para estudiar percolación como son: Los modelos fractales deterministas (junta de Sierpinski, fractal de Mandelbrot y modelo jerárquico), expansión de series, renormalización, teoría del campo medio. En mis estudios sólo consideré teoría del campo medio y el método de Leath.

2.3.1 Viscosidad digital

En un medio poroso la velocidad de un fluido viscoso v está relacionada con el gradiente de presión P por la ley de Darcy:

$$v = -k\nabla P, \quad (2.10)$$

donde aquí k es la permeabilidad y ∇P es el gradiente de presión (Chen, 1985). Esta ley también se aplica a la celda "Hele-Shaw", cuando el fluido se desplaza entre dos placas paralelas. Cuando un fluido menos viscoso es empujado por uno más viscoso, la interfase es inestable, resultando en lo que se conoce como *viscosidad digital* ("viscous fingering"). La forma de los dedos es determinada por el número de capilaridad $N_{ca} = U\mu/\tau$ donde U es la velocidad en la punta del dedo, μ es la viscosidad del fluido desplazado y τ es la tensión interfacial.

La interfase entre fluidos inmiscibles puede tener una geometría muy compleja. Experimentos en una celda Hele-Shaw de patrones de viscosidad digital se observan en la Fig. 2.10, mostrando en a) agua invadiendo glicerina, no existe tensión superficial entre los dos fluidos; b) mismos fluidos pero donde la celda tiene muescas creando anisotropía geométrica; c) igual que (a) pero con aceite invadiendo glicerina; d) igual que (b) pero con aceite invadiendo glicerina.

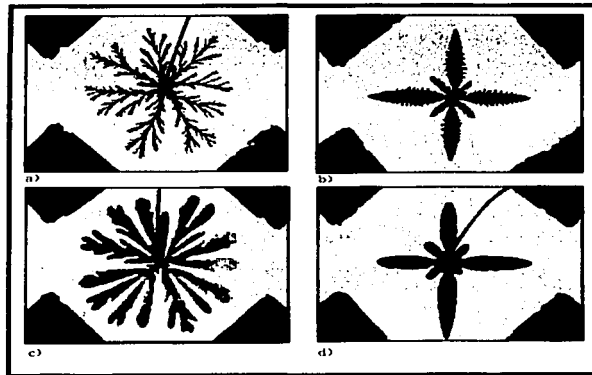


Figura 2.10. Patrones de viscosidad digital.

La viscosidad digital tiene similitud a otros procesos (Soll *et al.*, 1988). Los parámetros de control de una celda Hele-Shaw son principalmente la tensión superficial, la relación de inyección y la anisotropía geométrica.

El campo de presión, P gobierna el crecimiento. La variación de presión es muy pequeña en el fluido invasor de baja viscosidad, es decir, el fluido actúa como un medio isobárico, en términos matemáticos se tiene

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x \partial y} = \frac{\kappa \mu}{f} \mathbf{v} \cdot \nabla P, \quad (2.11)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

donde κ es la compresibilidad, μ es la viscosidad del fluido defensor, v es el vector velocidad de flujo y f es un factor geométrico.

La Fig. 2.11 presenta varias simulaciones de crecimiento dendrítico con el método de *agregado limitado de difusión* ("diffusion limited aggregation, DLA") el cual es una alternativa para simular procesos de desplazamiento fluido-fluido (Oda, 1986).

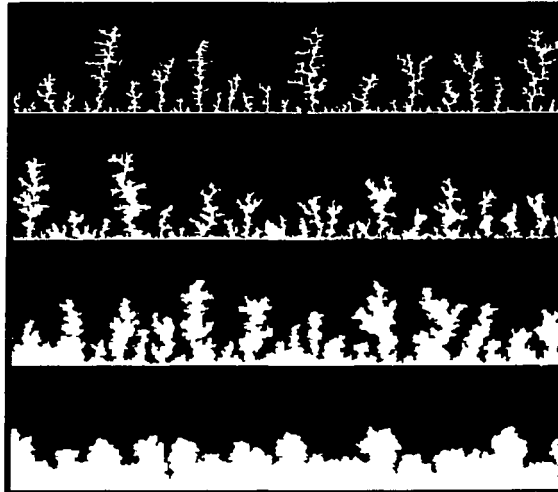


Figura 2.11. Simulación con el método de agregado limitado de difusión.

Por último, en lo que se refiere al tema de flujo de fluidos, la Fig. 2.12 presenta un *diagrama de fase* en escala log-log. Donde $M = \mu_2/\mu_1$ es la relación entre viscosidades μ_1 y μ_2 ; C es la fuerza capilar. Claramente, la figura muestra la región de utilidad de diferentes métodos para simular procesos de invasión hidráulica.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

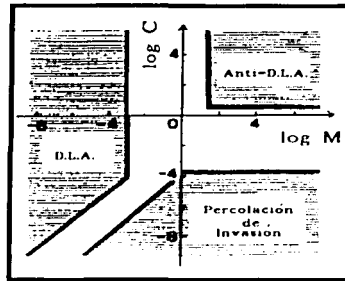


FIG. 2.12. Diagrama de fase para diferentes métodos de simulación de invasión.

2.4 Modelos de percolación elástica

2.4.0 Descripción general

El modelo de retícula de percolación elástica (RPE), es, en general, un proceso lineal vectorial, pero con propiedades de transporte no locales. Considérese una red de percolación en la cual cada enlace representa un elemento elástico, *e.g.*, un resorte con constante elástica e que toma valores de una función de densidad de probabilidad $\psi(e)$. En el caso más simple y general, e está distribuida de acuerdo a una distribución binaria:

$$\psi(e) = p\delta(e-a) + (1-p)\delta(e-b) . \quad (2.12)$$

Por lo que si $b = 0$ y a es finita, se tiene la red clásica de percolación elástica. Para el caso de que $a = \infty$ y b sea finita, *i.e.*, una fracción de p de resortes son totalmente *rígidos* y el resto son *suaves*. A esta se le conoce como la red de percolación "súper-elástica" (RPSE). El valor del umbral de percolación p_u no es necesariamente igual al umbral de percolación escalar o aleatorio. Dado $p \rightarrow p_u^+$, todos los módulos elásticos E del sistema desaparecen. Cerca de p_u , el módulo elástico obedece la ley de potencia o ley de escala:

$$E \approx (p - p_u)^f . \quad (2.13)$$

Mientras que todos los módulos elásticos para RPSE divergen de acuerdo a $p \rightarrow p_u^-$ como

$$E \approx (p_u - p)^{-T} , \quad (2.14)$$

el umbral de percolación elástico y el exponente crítico f y T , que pueden depender de las fuerzas microscópicas entre partículas de la red.

TESIS CON
FALLA DE CUBIEN

Es importante notar el número de módulos elásticos para describir una red 2D o 3D, dado que la mayoría de las retículas (redes) utilizadas para simulación numérica no son isótropas desde el punto de vista cristalográfico. Para materiales isótropos, el número de módulos independientes elásticos es 2. Uno puede medir el módulo de Young E , de corte μ o el volumétrico K . Cualquier combinación de dos de estos tres módulos es suficiente para caracterizar una red isótropa. La red triangular, que ha sido ampliamente utilizada para simulaciones de percolación vectorial es una retícula isótropa. En 3D, todas las retículas regulares son anisótropas. Para la familia de retículas cúbicas, es decir, para las redes cuadrada, cúbica simple o de cuerpo centrado (BCC), que se utilizan para simulación de percolación vectorial, se necesitan 3 módulos elásticos independientes para caracterizar la red. Por ejemplo, las retículas cúbicas son anisótropas para E y μ (Turley y Sines, 1971), es decir, estos módulos se refieren a la dirección principal de la red. Mientras que K es isótropo.

Para calcular las propiedades elásticas de un modelo, se minimiza la energía elástica H con respecto al vector desplazamiento \mathbf{u} , en el nodo o partícula i , $\partial H / \partial \mathbf{u}_i = 0$. Escribiendo las ecuaciones para cada nodo interior de la retícula, resulta en $N \times d$ ecuaciones simultáneas para el desplazamiento \mathbf{u}_i . Donde N es el número de nodos internos de una retícula d -dimensional. Las condiciones de frontera dependen del módulo que se desea calcular. Por ejemplo, para calcular la constante elástica c_{11} (un experimento con fuerzas externas en tensión) se estiran las caras opuestas de la retícula por medio de una deformación S . En las otras direcciones se aplican condiciones periódicas. El conjunto de ecuaciones lineales se resuelve, por ejemplo, por técnicas de eliminación de Gauss o por el método de gradiente conjugado. El criterio de convergencia típico para la iteración k , es $|\mathbf{u}_i^{(k)} - \mathbf{u}_i^{(k-1)}| / |\mathbf{u}_i^{(k-1)}| < \varepsilon$, donde ε es un número muy pequeño (del orden de 10^{-3} a 10^{-5}). De la solución del conjunto de ecuaciones para los desplazamientos, se calcula H y en consecuencia de puede obtener el módulo elástico $c_{11} = 2H/S^2$.

2.4.1 Percolación de rigidez: vector de transporte no-local

Aquí se define la red de percolación con fuerzas centrales, partiendo de la ecuación elástica continua. Las ecuaciones lineales que gobiernan el equilibrio elástico estático de un continuo de acuerdo a Malvern (1969) son:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{T} &= 0 \\ \mathbf{T} &= \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \end{aligned} \quad (2.15)$$

donde \mathbf{T} es el tensor de esfuerzo, \mathbf{I} es el tensor identidad, λ y μ son las constantes de Lamé y \mathbf{u} es el desplazamiento. Utilizando una aproximación de elemento finito del tipo Galerkin (Strang y Fix, 1973), la ecuación anterior se puede transformar en un sistema de ecuaciones lineales. Considerando una función de ensaño ('ansatz') ϕ , se tiene la ecuación:

$$\int_V \phi(\nabla \cdot \mathbf{T}) dV = 0, \quad (2.16)$$

donde V es volumen de integración. Utilizando el teorema de divergencia, se obtiene

$$\int_S (\mathbf{n} \cdot \phi \mathbf{T}) dS - \int_V (\nabla \phi \cdot \mathbf{T}) dV = 0, \quad (2.17)$$

donde S es la superficie del sistema con el vector normal \mathbf{n} apuntando hacia fuera. Se puede eliminar la integral de superficie, tomando el esfuerzo igual a cero en la superficie, o en su caso, fijando el desplazamiento \mathbf{u} en la superficie. En el método de Galerkin, \mathbf{u} se representa por $\mathbf{u} = \sum_i \mathbf{u}_i \phi_i$, donde $\{\phi_i\}$ es un conjunto de funciones base. Esto permite construir el tensor de esfuerzo como:

$$\mathbf{T} = \lambda \left(\sum_i \mathbf{u}_i \nabla \phi_i \right) \mathbf{I} + \mu \left(\sum_i \mathbf{u}_i \nabla \phi_i + \sum_i \nabla \phi_i \mathbf{u}_i \right). \quad (2.18)$$

Por lo que la ecuación (2.15) se convierte en

$$\int_V \left\{ \lambda \sum_i (\mathbf{u}_i \nabla \phi_i) \nabla \phi_j + \mu \left[\sum_i (\mathbf{u}_i \cdot \nabla \phi_j) \nabla \phi_i + \sum_i (\nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j) \mathbf{u}_i \right] \right\} dV. \quad (2.19)$$

Las bases $\{\phi_i\}$ se seleccionan de tal suerte que sólo una pequeña parte de ellas son diferentes de cero en una región particular del sistema. Si las bases se normalizan, se tiene $\sum_i \phi_i = 1$. Tomando el gradiente nos da:

$$\nabla \phi_k = - \sum_{i \neq k} \nabla \phi_i. \quad (2.20)$$

Utilizando (2.20) en (2.19) se obtiene una forma alterna:

$$\int_V \sum_{i \neq j} \left\{ \lambda \nabla \phi_j \nabla \phi_i + \mu \left[\nabla \phi_i \nabla \phi_j + (\nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j) \mathbf{I} \right] \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \right\} dV = 0. \quad (2.21)$$

La forma compacta de esta expresión se puede escribir como:

$$\sum_j \mathbf{w}_{i,j} \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) = 0, \quad (2.22)$$

donde la suma es sobre todos los vecinos cercanos j de i . Las funciones base de vecinos cercanos generalmente consisten en uno ó dos elementos. Dadas las integrales de superficie igual a cero, se tiene la simetría:

$$\int_V \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \, dV = \int_V \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \, dV . \quad (2.23)$$

Con ayuda de esta ecuación se obtiene

$$\mathbf{W}_{ij} = \int_V [(\lambda + \mu) \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j + \mu (\nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j) \mathbf{I}] \, dV . \quad (2.24)$$

Se observa que $\mathbf{W}_{ij} = \mathbf{W}_{ji}^T = \mathbf{W}_{ji}$, por lo que la ecuación (2.22) se puede derivar, minimizando la energía elástica H definida como:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{W}_{ij} \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) = \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathbf{W}_{ij} \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)^2 . \quad (2.25)$$

Es decir, tomando $\partial H / \partial \mathbf{u}_i = 0$, se obtiene ecuación (2.22). Dado que la suma es sobre todos los pares vecinos cercanos (ij), \mathbf{W}_{ij} forma un enlace entre i y j . Para un modelo de retícula triangular, las funciones base más simples son: $\phi_1 = 1/2 + x - y/\sqrt{3}$, $\phi_2 = 2y/\sqrt{3}$ y $\phi_3 = 1/2 - x - y/\sqrt{3}$; las cuales definen un triángulo equilátero $\{(1/2, 0), (-1/2, 0) \text{ y } (0, \sqrt{3}/2)\}$. Con estas bases se obtiene:

$$\mathbf{W}_{ij} = \frac{\mu [4(1 + \nu) \mathbf{r}_{ij} \mathbf{r}_{ij} + (1 - 3\nu) \mathbf{I}]}{4(1 - \nu)} . \quad (2.26)$$

Aquí, ν es la relación de Poisson, μ es el módulo de corte y \mathbf{r}_{ij} es el vector unitario entre i y j . De aquí se obtiene la energía elástica en una retícula triangular:

$$H = \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \sum_{ij} \mu [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}]^2 + \frac{1 - 3\nu}{4(1 - \nu)} \sum_{ij} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)^2 . \quad (2.27)$$

Es importante notar que el proceso de diferencias finitas estándar en una red triangular lleva a la misma ecuación. El primer término de esta ecuación es la energía de una red de resortes de fuerza central. Es decir, fuerzas que se transmiten sólo en la dirección \mathbf{r}_{ij} , pero no transmite fuerzas de corte. La segunda parte de la ecuación es un término escalar. Esta ecuación es conocida popularmente como el modelo de Born. El modelo de Born puede ser considerado un análogo de un cuerpo tridimensional en esfuerzo plano con agujeros normales al plano x - y , o como un análogo a un cuerpo bidimensional con relación de Poisson definido como la razón negativa de la deformación en la dirección y con respecto a la dirección x , aplicando esfuerzo únicamente en esta misma dirección. Por supuesto, para modelar modelos en deformación plana, solamente es necesaria la transformación $\nu' = \nu/(1 + \nu)$. Por otro lado, el modelo de Born adolece de un problema, en el sentido de que no es invariante con respecto a rotaciones rígidas, excepto en el límite cuando $\nu = 1/3$,

que en tal caso el modelo reduce al modelo de fuerzas centrales clásico. Para mostrar que el sistema no es invariante en rotación, se sustituye el vector desplazamiento \mathbf{u} por una rotación infinitesimal $\omega \times \mathbf{r}_i$, donde \mathbf{r}_i es el vector posición de i .

Una rotación arbitraria no debería contribuir a la energía, pero la ecuación (2.27) indica que mientras la parte de la fuerza central es cero, la parte escalar no lo es, y por lo tanto el Hamiltoniano no es invariante en rotación (no es conservativo).

Considérese ahora el caso cuando $\nu = 1/3$, es decir el modelo de fuerzas centrales. Tomando μ como $\mu = e_{ij}\alpha/4$, la ecuación (2.27) reduce a

$$H = \frac{\alpha}{2} \sum_{ij} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}]^2 e_{ij}, \quad (2.28)$$

donde α es la constante de fuerza central. Percolación en este tipo de modelos, es llamada *percolación rígida*, la cual tiene aplicaciones directas en ingeniería. En estructuras compuestas de vigas conectadas a nodos, llamadas de celosía, adquieren su rigidez principalmente de la dureza compresiva y extensiva de las vigas. Estas son contribuciones de fuerza central.

2.4.2 Modelos de percolación elástica con fuerzas de doblamiento

En comparación con el modelo de percolación de fuerzas centrales, este modelo reproduce correctamente la física de un sólido. Consiste de un término de fuerzas centrales y otro asociado a fuerzas de doblamiento o de cambio de ángulo. Esto lo hace invariante en translación y en rotación. La energía elástica del modelo con fuerzas de doblamiento general se expresa como:

$$H = \frac{\alpha}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}]^2 e_{ij} + \frac{\beta}{2} \sum_{\langle jik \rangle} (\delta\theta_{jik})^2 e_{ij} e_{ik}, \quad (2.29)$$

donde α y β son las constantes de fuerza central y de doblamiento respectivamente. El símbolo $\langle jik \rangle$ indica que la suma es sobre todos los triples en donde los enlaces $j-i$ e $i-k$ forman un ángulo cuyo vértice está en i . Indudablemente, el segundo término de la ecuación (2.29) es la contribución de fuerzas de doblamiento. La forma precisa de $\delta\theta_{jik}$ depende de que tanto detalle se quiera incluir en el modelo. Si no se permite que los enlaces se doblen paralelos entre sí (enlaces co-lineales), entonces se tiene que $\delta\theta_{jik}$ es:

$$\delta\theta_{jik} = (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ik} + (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{r}_{ij}, \quad (2.30)$$

Este modelo es conocido como el modelo general de Kirkwood-Keating (KK). Kirkwood (1939) lo utilizó para estudiar vibraciones de moléculas, mientras que Keating (1966a,b)

estudia las propiedades elásticas del diamante. Estos modelos son fundamentales en la física del estado sólido. Cabe mencionar que estos autores no estudiaron las propiedades de percolación que aquí se discuten brevemente. Otro modelo interesante es el de Gazis *et al.* (1960), que considera segundos vecinos cercanos para construir su sistema elástico.

Todos los términos de las ecuaciones de movimiento, es decir de $\partial H / \partial \mathbf{u}_i = 0$, en la ecuación (2.29), pueden ser expresados por operadores de diferencias. Por lo que al utilizar la expansión en series de Taylor, esos operadores se pueden expresar en términos de derivadas parciales de la función continua $\mathbf{u}_i(x, y, z)$. Esto nos permite, suponiendo que las longitudes de onda de las deformaciones son mucho más grandes que la longitud del elemento típico de la retícula (constante de retícula), que todas las derivadas, excepto las de segundo orden en \mathbf{u}_i , sean descartadas. En el límite continuo (Sahimi, 1998) se obtiene la ecuación siguiente:

$$(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \sum_j \frac{\partial^2 \mathbf{u}_j}{\partial x_j^2} \mathbf{r}_j + c_{44} [2\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})] + c_{12} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0, \quad (2.31)$$

donde $u_j = u_x, u_y, u_z$, $x_j = x, y, z$ y \mathbf{r}_j son vectores unitarios en las tres correspondientes direcciones. Aquí, las constantes elásticas del tensor son $c_{11} = \alpha/l$, $c_{12} = 0$ y $c_{44} = 4\beta/l$. La constante de la retícula es l , α y β son las constantes de fuerza central y de doblamiento respectivamente. La ecuación anterior es invariante en rotación.

Si se permite doblamiento de enlaces colineales, (Wang, 1989; Arbabi & Sahimi, 1990), se tiene

$$\delta \mathbf{0}_{j,k} = \left\{ \begin{array}{ll} (\mathbf{u}_{i,j} \times \mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{u}_{i,k} \times \mathbf{r}_{i,k}) \cdot (\mathbf{r}_{i,j} \times \mathbf{r}_{i,k}) / |\mathbf{r}_{i,j} \times \mathbf{r}_{i,k}|, & \mathbf{r}_{i,j} \text{ no paralelo a } \mathbf{r}_{i,k} \\ |(\mathbf{u}_{i,j} + \mathbf{u}_{i,k}) \times \mathbf{r}_{i,j}|, & \mathbf{r}_{i,j} \text{ paralelo a } \mathbf{r}_{i,k} \end{array} \right\}, \quad (2.32)$$

donde $\mathbf{u}_{i,j} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$. La ecuación anterior, para todos los sistemas bidimensionales, reduce a la simple expresión:

$$\delta \mathbf{0}_{j,k} = (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \times \mathbf{r}_{i,j} - (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k) \times \mathbf{r}_{i,k}. \quad (2.33)$$

Este es el modelo de *doblamiento de enlace* ("bond-bending model"). Similar al modelo de Kirkwood-Keating, este modelo tiene su contraparte expresión continua.

2.4.3 Materiales con relación de Poisson negativo

Una de las más importantes características de un material elástico es su relación de Poisson ν . Entendiéndose que la relación de Poisson es la medida de la deformación en la dirección

transversal resultante del esfuerzo aplicado longitudinalmente. Para un sólido isótropo bidimensional, ν está dado por

$$\nu = 1 - 2\mu/c_{11} , \quad (2.34)$$

donde μ y c_{11} son respectivamente el módulo de corte y el módulo de tensión o de tracción. Para un sólido isótropo tridimensional se tiene la expresión:

$$\nu = \frac{3(K/\mu) - 2}{2 + 6(K/\mu)} , \quad (2.35)$$

donde K es módulo volumétrico del material. En la vasta mayoría de materiales, la relación de Poisson obtenida de experimentos es positiva. Desde el punto de vista teórico (Landau & Lifshitz, 1986), el rango de la relación de Poisson para materiales isótropos es $-1 \leq \nu \leq 1/2$. Para sólidos anisótropos, se tiene los límites $|\nu| \leq \sqrt{E_M/E_m}$, donde E_M y E_m son los módulos de Young ortotrópicos mayor y menor. A pesar de estos límites teóricos rigurosos, se pensó por mucho tiempo que no existen materiales isótropos con valor negativo de la relación de Poisson. No obstante, se han observado valores de ν negativos en estudios de modelos de membranas y polímeros. Por ejemplo, Evans & Caddock (1989) construyeron modelos con una combinación de partículas isótropas y anisótropas, resortes en tensión y cierta clase de barras. Mas adelante, Boal *et al.* (1993) utiliza un modelo de retícula triangular de resortes Hookeanos en tensión mostrando que este sistema también exhibe valores de ν negativos. Mas aún, ciertas rocas anisótropas exhiben relaciones de Poisson ligeramente negativos. Entre estos, algunos granitos con valores de $\nu = -0.04$ a $\nu = -0.10$, ciertos esquistos con valores de $\nu = -0.02$ y filitas con $\nu = -0.03$ (para más detalles, véase Sahimi, 1998).

2.4.4 El modelo de viga

El modelo de viga está relacionado a los anteriores modelos mencionados. En este modelo cada enlace de la retícula es una viga y no un resorte. El comportamiento elástico de cada viga está gobernado por tres constantes del material, $a_1 = l/(E S)$, $a_2 = l/(\mu S)$ y $a_3 = l^3/(E I)$, donde E es el módulo de Young, μ es el módulo de corte, S es la sección transversal de la viga e I es el momento de inercia para flexión. Cada sitio de la retícula se caracteriza por un vector desplazamiento u_i y un ángulo de rotación ϕ_i . Si un nodo es rotado, la viga se dobla proporcionalmente, por lo que hay que tener en cuenta a los momentos del sistema. Considérese, por ejemplo, una retícula cuadrada. Para una viga horizontal que conecta el sitio i con el j , la fuerza longitudinal F_{ij} actuando en j es:

$$F_{ij} = \alpha_i (u_{ix} - u_{jx}) , \quad (2.36)$$

la fuerza de corte F_{c_j} actuando en j es:

$$F_{c_j} = \alpha_2(u_{i,y} - u_{j,y}) + \frac{l\alpha_2}{2}(\varphi_i + \varphi_j), \quad (2.37)$$

y un momento o fuerza de torsión τ_j :

$$\tau_j = \frac{l\alpha_2}{2}(u_{i,y} - u_{j,y} + l\varphi_j) + l^2\alpha_3(\varphi_i - \varphi_j), \quad (2.38)$$

donde $\alpha_1 = 1/a_1$, $\alpha_2 = 1/(a_2 + a_3/12)$ y $\alpha_3 = \alpha_2(a_2/a_3 + 1/3)$. Análogamente, se pueden escribir las expresiones para la dirección vertical. Para que exista equilibrio mecánico, la suma de todas las fuerzas y momentos actuando en un nodo debe ser cero. En el límite continuo de estas expresiones, se obtienen las ecuaciones clásicas de los hermanos Cosserat (1909).

Este tipo de modelo ha sido estudiado extensamente (e.g., Roux & Guyon, 1985). El umbral de percolación es idéntico al modelo escalar y sus propiedades escalares son iguales a las del modelo de doblamiento.

2.4.5 El modelo granular

Otro modelo de percolación elástica es el modelo granular o de disco. Este modelo fue elaborado por primera vez por Schwartz *et al.* (1984) para estudiar propiedades de vibración en rocas del tipo granular, como es el caso de las areniscas. La energía elástica de este sistema está dada por:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{(i,j)} e_{ij} \left\{ \alpha [\mathbf{u}_{i,j} \cdot \mathbf{r}_{i,j}]^2 + \beta \{ \mathbf{r}_{i,j} \times [\mathbf{r}_{i,j} \times \mathbf{u}_{i,j}] + R(\varphi_i + \varphi_j) \mathbf{z} \times \mathbf{r}_{i,j} \}^2 + \gamma (\varphi_i + \varphi_j)^2 \right\}, \quad (2.39)$$

donde $\mathbf{u}_{i,j} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$, R es el radio del disco, γ es la constante de fuerza asociada a la torsión necesaria cuando dos discos rotan entre sí, \mathbf{z} es un vector unitario normal al plano de los discos. La Fig. 2.13 esquematiza el significado físico de las constantes α , β y γ .

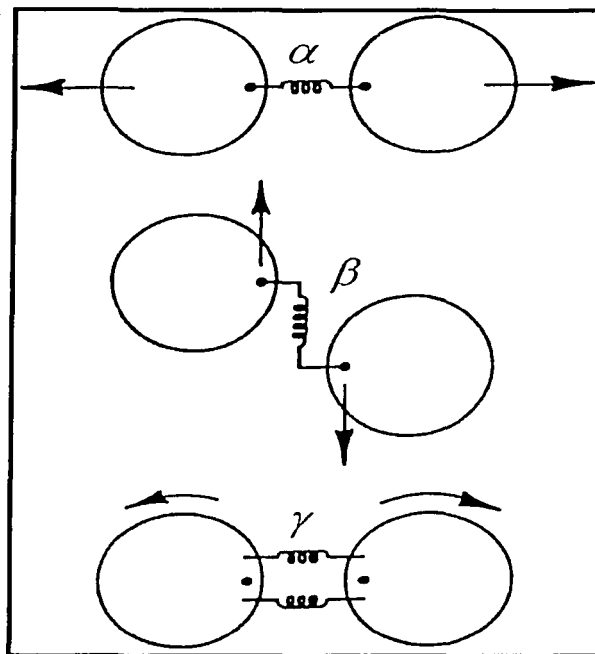


Figura 2.13. El significado físico-geométrico de las tres constantes elásticas del modelo granular.

2.4.6 Vibraciones y densidad de estados de materiales heterogéneos

La densidad de estados de vibración $N(\omega)$ es una característica importante de todo material sólido. $N(\omega)d\omega$ es el número de modos de vibración entre la frecuencia ω y $\omega + d\omega$. Este valor se utiliza para obtener el calor específico y la conductividad térmica del material. Una forma simple de calcular $N(\omega)$ es considerando una red de tamaño $L \times L \times L$ con una partícula en cada sitio de masa m , conectadas entre sí por resortes (Sahimi, 1998). Suponiendo que \mathbf{u}_i es el desplazamiento de la partícula i , donde la ecuación de movimiento para un tiempo τ está dada por la ley de Newton $m\partial^2\mathbf{u}_i/\partial\tau^2 = \sum \mathbf{F}$, donde \mathbf{F} es la fuerza actuando en la partícula. Si el resorte de conexión de partículas es armónico, el cual tolera sólo fuerzas de estiramiento, entonces $\sum \mathbf{F}$ está dada por la ley de Hooke y la ecuación de movimiento será:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$m \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial \tau^2} = \sum_{\langle i,j \rangle} e_{ij} [(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{r}_{ij}] . \quad (2.40)$$

Supóngase $m=1$. Tomando la transformada de Fourier de la ecuación anterior se tiene:

$$-\omega^2 \bar{\mathbf{u}}_i = \sum_{\langle i,j \rangle} e_{ij} [(\bar{\mathbf{u}}_j - \bar{\mathbf{u}}_i) \cdot \mathbf{r}_{ij}] . \quad (2.41)$$

Si se utiliza la componente en x de la expresión anterior se obtiene:

$$-\omega^2 \bar{u}_{ix} = \sum_{\langle i,j \rangle} e_{ij} (\bar{u}_{jx} - \bar{u}_{ix}) . \quad (2.42)$$

Considérese ahora el proceso de difusión térmica en la retícula la cual es gobernada por la ecuación maestra:

$$\frac{\partial P_i}{\partial \tau} = \sum_{\langle i,j \rangle} W_{ij} [P_j(\tau) - P_i(\tau)] , \quad (2.43)$$

donde $P_i(\tau)$ es la probabilidad de encontrar una partícula difusiva en el sitio i al tiempo τ , y W_{ij} es la razón de transición, es decir, la probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula brinque del sitio i al sitio j . Tomando la transformada de Laplace de (2.43) sin condiciones iniciales se tiene:

$$\nu P_i(\nu) = \sum_{\langle i,j \rangle} W_{ij} (P_j - P_i) , \quad (2.44)$$

donde ν es la transformada de Laplace del conjugado de τ . Comparando las ecuaciones (2.42) y (2.44), podemos aseverar que \bar{u}_{ix} juega el papel de P_i y $-\omega^2$ por ν . Por lo que se puede interpretar que ω es la frecuencia de difusión. Para un medio microscópicamente homogéneo en d dimensiones, la probabilidad promedio está dada por:

$$\langle P_0(\tau) \rangle \approx \tau^{-d/2} . \quad (2.45)$$

Se puede demostrar (Sahimi, 1998) que $N(\omega)$ y $\langle P_0(\tau) \rangle$ están relacionadas por la ecuación:

$$N(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \langle P_0(-\omega^2) \rangle , \quad (2.46)$$

donde Im es la parte imaginaria. Tomando la transformada de Laplace de (2.45) y sustituyendo en (2.46), se obtiene:

$$N(\omega) \approx \omega^{d-1} . \quad (2.47)$$

Esta ecuación es válida para bajas frecuencias (longitudes de onda grandes) donde el sistema es estadísticamente homogéneo. Esta ecuación, que representa los estados de vibración de un material homogéneo, nos indican los 'fonones' del sistema. Es por eso que Mora (1990), al simular la propagación de ondas elásticas en un sólido, llama a su método discreto el modelo de retícula fonónica. No obstante que su aproximación es algo oscura y difícil de interpretar, es al parecer la primera aproximación de retícula reportada en la literatura que trata el problema de propagación de ondas.

2.4.7 Procesos de transporte en medios heterogéneos

Los procesos de fracturamiento son procesos de transporte no-lineales y son de los fenómenos más complejos conocidos en ciencia y tecnología. Además, son procesos no-locales, es decir, son sistemas con área (volumen) de influencia. Por lo cual son fenómenos de transporte vectorial, en donde la no-linealidad y la no-localidad del sistema dan como resultado fenómenos complejos y fascinantes (e.g., geometrías fractales). Estos procesos van desde la aplicación de esfuerzos externos, generando grietas, hasta la propagación progresiva de éstas. Estos procesos de avería o rotura del sólido pueden ser de fracturamiento frágil hasta procesos dúctiles con cesación y flujo, pasando por altas concentraciones de energía potencial alrededor de las fracturas incipientes (*nucleación*).

Los terremotos son generados por la acción de grandes deformaciones y esfuerzos naturales, por lo que son procesos no lineales y no locales típicos de la naturaleza. En materiales artificiales y naturales como las rocas, los fenómenos de fractura son muy complejos debido a la presencias de defectos e inclusiones de varios tamaños, formas y orientaciones. Este desorden en las rocas (materiales) hace que los procesos de fractura sean extremadamente no-lineales jugando un papel diferente a diferente etapa del proceso de fracturamiento. Por ejemplo, el efecto debido al más pequeño desorden inicial puede amplificar colosalmente el efecto final. Es por lo que el proceso de fracturamiento es un fenómeno colectivo donde el desorden en el sólido juega un papel fundamental. Los materiales frágiles desordenados generalmente exhiben grandes fluctuaciones estadísticas de su intensidad de laboratorio, aún cuando aparentemente dos muestras idénticas son examinadas en el laboratorio bajo estrictas condiciones de experimentación, dando resultados muy diferentes.

Debido a las fluctuaciones estadísticas en los procesos de fracturamiento es inapropiado y definitivamente inconveniente representar dichos procesos en medios desordenados por sus propiedades promedio. Es decir, por medio de aproximaciones de campo medio, de medio efectivo u homogenización.

Capítulo 3

Modelos de Retícula

3.0 Modelo simple

Originalmente, el modelo discreto de partículas fue postulado a partir de conceptos de dinámica molecular con interacciones de alcance corto, consistentes de partículas. Tal es el caso del potencial de interacciones de Lennard-Jones, el cual puede ser especializado a sólidos elásticos. Las partículas representan secciones de material o granos de roca con interacciones elásticas entre ellas. Se pueden, por ejemplo, construir las ecuaciones de onda elásticas (véase apéndice A), lo cual muestra las relaciones fundamentales entre un medio continuo y un medio discreto representado por partículas y enlaces (resortes). Este procedimiento general permite simular, con relativa facilidad, el comportamiento no lineal de sólidos discontinuos como es el caso de materiales naturales como las rocas. Las partículas son ligadas por medio de enlaces que tienen cierto comportamiento específico. En el apéndice B se deriva un modelo discreto de las ecuaciones elásticas, donde se demuestra que la ecuación de Navier dinámica (ecuación 1.20 y B1) se puede representar discretamente por una ecuación particular de la expresión generalizada de percolación elástica (véanse las ecuaciones 2.29, B20 y B25). Si los enlaces tienen comportamiento elástico lineal, (fracturamiento frágil), implicaría que cada par de partículas tiene un umbral de longitud l_{ij} que al rebasarse, el enlace se rompería. La fuerza normal en una partícula i debido a una partícula j esta dado por

$$\mathbf{F}_{ij} = k_{ij}(l_{ij} - l_{ij}^0) \mathbf{r}_{ij} \quad (3.1)$$

donde l_{ij} es la longitud o separación entre partículas, l_{ij}^0 es la separación de las partículas en equilibrio, \mathbf{r}_{ij} es el vector unitario apuntando de la partícula i a la partícula j , y k_{ij} es la constante de fuerza del enlace entre dichas partículas. Para partículas con diferente diámetro, la separación en equilibrio es

$$l_{ij}^0 = (d_i + d_j)/2 \quad (3.2)$$

En la ecuación (3.1), la constante de fuerza del enlace k_{ij} se calcula de la elasticidad de las partículas, k_i y k_j , de la siguiente manera.

La fuerza normal $\mathbf{F}_{ij}^{(i)}$ ejercida al centro de la partícula i debida a la compresión o dilatación de la misma partícula i es

$$\mathbf{F}_y^{(i)} = 2k_i \left(l_y^{(i)} - \frac{d_i}{2} \right) \mathbf{r}_y . \quad (3.3)$$

De la misma manera, la fuerza normal en $\mathbf{F}_y^{(j)}$ para la partícula j es

$$\mathbf{F}_y^{(j)} = 2k_j \left(l_y^{(j)} - \frac{d_j}{2} \right) \mathbf{r}_y . \quad (3.4)$$

Es claro que las expresiones entre paréntesis son los desplazamientos (compresión o dilatación) de las partículas. Por lo que $l_y = l_y^{(i)} + l_y^{(j)}$. Nótese que las constantes de fuerza en las ecuaciones (3.3) y (3.4) se multiplican por 2, porque las fuerzas se calculan en el centro de la partícula debido a la deformación de la mitad de ésta (véase la Fig. 3.1). Por lo que es evidente que $\mathbf{F}_y = \mathbf{F}_y^{(i)} + \mathbf{F}_y^{(j)}$. De las expresiones (3.1), (3.3) y (3.4), se tiene

$$\frac{\mathbf{F}_y}{k_y} = \frac{\mathbf{F}_y^{(i)}}{2k_i} + \frac{\mathbf{F}_y^{(j)}}{2k_j} . \quad (3.5)$$

Resolviendo para k_y tenemos la relación siguiente

$$k_y = \frac{2k_i k_j}{k_i + k_j} . \quad (3.6)$$

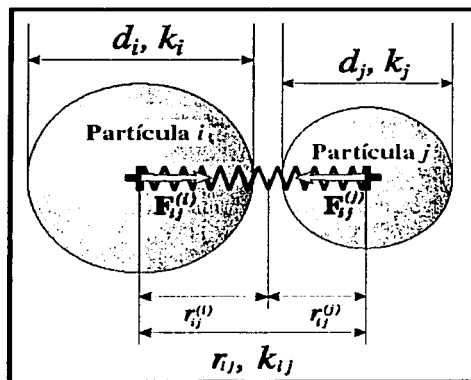


Figura 3.1. Esquema que representa cómo se obtiene la constante de fuerza k_y a partir de las elasticidades de las partículas k_i y k_j , con diámetro d_i y d_j , respectivamente.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Reiterando, un enlace entre dos partículas se rompe si excede su umbral de separación. Esto es, $F_{ij} = 0$ para $l_{ij} > l_R$, o lo que es lo mismo, $k_{ij} = 0$.

Adicionalmente, se puede introducir un término viscoso para atenuar las ondas reflejadas en las fronteras del modelo. Las fuerzas viscosas son proporcionales a las velocidades de partícula y se escribe:

$$F_i^v = \nu v_i, \quad (3.7)$$

donde ν es un coeficiente de viscosidad y v_i es la velocidad de la partícula i . Aquí, la viscosidad es independiente de la frecuencia y por lo mismo no altera la dinámica del sistema (Mora y Place, 1994).

3.1 Escalamiento

En el código numérico desarrollado, se requieren inicializar los valores de los parámetros del modelo, así como realizar el escalamiento pertinente que a continuación se detalla.

Los parámetros requeridos son: una longitud de escala interna L_0 , diámetro de partícula, máximo y mínimo permitidos (d_{\max} y d_{\min}), densidad ρ y una constante de fuerza k . Para una redcula triangular, una partícula i de diámetro d_i ($d_{\min} < d_i < d_{\max}$) tiene una masa:

$$M_i = \rho \frac{\sqrt{3}}{2} d_i^2 \text{ kg} . \quad (3.8)$$

Sólo por comparación, para un cubo con caras centradas, la masa es:

$$M_i = \rho \frac{\sqrt{2}}{2} d_i^3 \text{ kg} . \quad (3.9)$$

Supóngase los siguientes valores $d_{\max} = L_0 = 20 \text{ m}$, $\rho = 3000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ y velocidad de propagación volumétrica de $V_p = 3000\sqrt{3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, entonces la constante k para dos dimensiones es

$$k = \frac{4\rho V_p^2}{3\sqrt{3}} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1} . \quad (3.10)$$

Para obtener estabilidad numérica en el esquema de integración explícito, el incremento temporal Δt es

$$\Delta t = \varepsilon \frac{L_0}{V_{\max}} s, \quad (3.11)$$

donde $\varepsilon = 0.2$ es un valor empírico (Mora & Place, 1993). Nótese que la velocidad máxima es la velocidad volumétrica, $V_{\max} = V_p$, para una retícula regular. No obstante, si se utilizan varios tamaños (diámetros) de partículas (retícula irregular), la velocidad máxima es para la partícula con diámetro más pequeño. Por lo que se deberá utilizar $\varepsilon = 0.2(d_{\min}/d_{\max})$ para garantizar integración numérica estable.

3.2 Retícula aleatoria

Las rocas son materiales heterogéneos, consistentes de granos de diferentes diámetros y formas. Las porosidades típicas de las rocas oscilan entre 0% y 40%. Estas características no pueden ser modeladas eficientemente al utilizar un solo diámetro de partículas. De acuerdo a ciertos autores (e.g., Place & Mora, 2000), para una retícula regular, la porosidad es de 9.3%, mientras que es de 20% para una retícula irregular. En su caso, se pueden utilizar diferentes propiedades locales, como la densidad de partícula y su rigidez de enlaces. Por lo que es recomendable utilizar una retícula aleatoria en cuanto al diámetro de las partículas, en la distancia entre partículas o en propiedades de enlaces. Véase la Fig. 3.2 que muestra un retícula regular triangular y una irregular tipo *tesselar*. Esto permite tener un rango más amplio de porosidades y poder simular micro-estructuras más realistas. El modelo es pues generado con un número aleatorio de partículas con diferente diámetro (irregularidad geométrica), o con diferentes propiedades locales de enlace (irregularidad física). En esta tesis, se ha considerado sólo irregularidad física utilizando retículas regulares. Esto garantiza también que no exista anisotropía por la geometría de la retícula en la solución numérica.

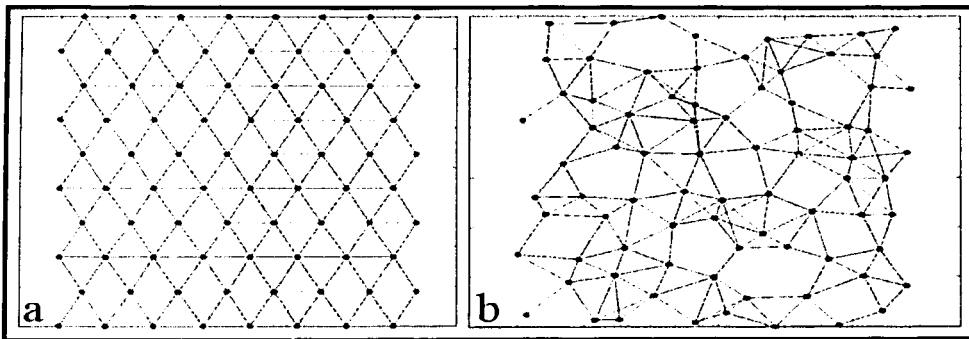


Figura 3.2. Retícula regular (a) y retícula irregular tipo *tesselar* (b).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

3.3 Procedimiento general

El procedimiento computacional general consiste de varias etapas relativamente independientes. La primera etapa radica en *construir* la redícula, donde se configuran la posición de cada partícula y su asociación con otras a través de los enlaces o resortes correspondientes. Esto a su vez, se puede llevar al cabo para 2 ó 3 dimensiones, y para diferentes topologías regulares (*e.g.*, triangular o cuadrada en 2D; cubo de cara centrada FCC o de frontera centrada BCC en 3D) o topologías irregulares (*voronoi, tesselar*). Esta etapa es muy parecida a la generación de malla utilizada en los métodos de elemento finito. Aquí también se asignan propiedades a cada partícula y a cada enlace. Las propiedades de partícula son en general el diámetro y la densidad, y las propiedades de los enlaces son la longitud y las constantes elásticas (de fuerza central y de doblamiento en 2D y adicionalmente, de torsión en 3D, según el potencial de interacción utilizado). La asignación de valores de las constantes elásticas es el vínculo para construir modelos con desorden, es decir modelos con heterogeneidad y anisotropía local (microscópica). Esto se explica en el apéndice D, donde se derivan las expresiones micro-mecánicas del modelo de Kirkwood (1939). La segunda etapa consiste en *equilibrar* la configuración inicial, calculando las fuerzas y desplazamientos de cada partícula a través de la solución de las ecuaciones de movimiento, que se establecen de un potencial elástico y donde se utiliza generalmente un algoritmo de dinámica molecular o algún otro esquema de integración como puede ser, por ejemplo, el método de Runge-Kutta. Esta etapa se repite por varios intervalos de tiempo hasta relajar el sistema completamente.

Las siguientes etapas pueden variar, de acuerdo al experimento que se desee realizar. Por ejemplo, si aplicamos esfuerzos en las fronteras del modelo, éste se deformará elásticamente hasta equilibrarse nuevamente. Si se utiliza un algoritmo de dinámica molecular clásico, se genera una redícula con N partículas, donde inicialmente se utiliza una distribución Maxwell-Boltzmann de velocidades de partículas a cierta temperatura T (Fineberg & Marder, 1999), y donde se utiliza generalmente un potencial Lennard-Jones para obtener una configuración de desorden. Una vez el sistema en equilibrio, se pueden entonces obtener configuraciones espaciales de experimentos. Es decir, se puede obtener la posición, velocidad y aceleración de cada partícula y por ende su energía cinética y potencial a cada momento del experimento en cuestión.

Los materiales frágiles, cómo la mayoría de las rocas, soportan sólo pequeñas deformaciones antes de romperse en algún lado. Por lo que se utiliza un criterio lineal de fractura o rompimiento para cada enlace en el modelo. Si un enlace se estira o se comprime demasiado al valor de umbral predefinido, el enlace es entonces removido irremoviblemente, generando una micro grieta. Lo mismo es posible si un enlace se tuerce o dobla más del umbral establecido. Al removerse un enlace, esto por supuesto genera un esfuerzo local que deberá redistribuirse en todo el sistema nuevamente para lograr el equilibrio. Para fracturar el material o para generar propagación de ondas elásticas, se aplican fuerzas externas en el lugar deseado que permita iniciar un fenómeno.

Si tomamos el modelo discreto de partículas general, es decir el modelo en tres dimensiones, la energía clásica $U_{El.}$ se representa generalmente por tres potenciales. Un potencial de fuerza central de dos cuerpos (FC), un potencial de doblamiento de tres cuerpos (D) y un potencial de torsión de cuatro cuerpos (T). Por lo que:

$$U_{El.} = U_{FC} + U_D + U_T \quad (3.12)$$

Es claro entonces que se deben incluir tres criterios de rompimiento de enlaces, uno para cada potencial. Es decir, uno para fuerzas centrales (estiramiento o compresión), otro para doblamiento del enlace, y un tercero para torsión del enlace. Para modelos bidimensionales, la ecuación anterior es sólo:

$$U_{El.} = U_{FC} + U_D \quad (3.13)$$

La acción de torsión es considerada aquí fuera del plano bidimensional, por lo que sólo fuerzas centrales y fuerzas de doblamiento son requeridas.

Cada enlace puede tener diferentes valores de umbral por lo que es posible generar desorden (heterogeneidad) en el modelo en forma de relaciones de rigidez en los enlaces. Es claro pues que existe una relación de rigidez de fuerza central y otra de doblamiento. Escribamos los umbrales cómo: Δ_{FC} y Δ_D para fuerza central y doblamiento respectivamente. Reiterando, estos umbrales no necesariamente son iguales para cada enlace, sino pueden ser distribuidos a partir de una distribución de probabilidad o a partir de una plantilla física de distribución, por ejemplo, si se desea una distribución anisótropa o heterogeneidades irregulares en el modelo. Estos umbrales, para simular materiales frágiles, son de alrededor del 1% alejados de los valores de enlace en equilibrio.

El potencial de fuerza central U_{FC} para un incremento $n+1$ es un potencial hookeano:

$$\begin{aligned} U_{FC}(n+1) &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \alpha_{ij} \left[|\mathbf{r}_{ij}(n+1)| - |\mathbf{r}_{ij}(0)| \right]^2 \\ &\approx \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \alpha_{ij} \left[\Delta u_{ij}(n+1) \cdot \mathbf{r}_{ij}(n) + \left(|\mathbf{r}_{ij}(n)| - |\mathbf{r}_{ij}(0)| \right) \right]^2, \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde la suma es sobre todos los pares $\langle ij \rangle$ de vecinos conectados. El vector $\mathbf{r}_{ij}(n)$ del enlace del nodo i al nodo j , en el incremento n , se define, a partir de vectores posición $\mathbf{r}_i(n)$, como $\mathbf{r}_{ij}(n) \equiv \mathbf{r}_j(n) - \mathbf{r}_i(n)$. El incremento de desplazamiento $\Delta u_{ij}(n)$ en n está dado por $\Delta u_j(n) - \Delta u_i(n)$, con $\Delta u_i(n) \equiv \mathbf{u}_i(n+1) - \mathbf{u}_i(n)$, que a su vez es el incremento de desplazamiento en el nodo i , y $u_i(n) \equiv \mathbf{r}_i(n) - \mathbf{r}_i(0)$. La constante de fuerza central α_{ij} es en general

$$\alpha_{ij} = \frac{A_{ij} E_{ij}}{|r_{ij}(0)|}, \quad (3.15)$$

donde A_{ij} la sección transversal del enlace ij (en este trabajo se tomará igual a la unidad) y E_{ij} es su modulo de Young.

En el potencial de doblamiento se toman triplas de partículas vecinas i, j y k . El valor relevante es $\theta_{ijk}(n)$, el cual es el cambio total de ángulo entre los enlaces ij y ik en un incremento n , relativo al ángulo inicial $\theta_{ijk}(0)$. El incremento de ángulo $\Delta\theta_{ijk}(n+1) \equiv \theta_{ijk}(n+1) - \theta_{ijk}(n)$ se puede separar como:

$$\Delta\theta_{ijk}(n+1) \equiv \Delta\theta_{ijk}^y(n+1) + \Delta\theta_{ijk}^k(n+1), \quad (3.16)$$

donde $\Delta\theta_{ijk}^y(n+1)$ es el cambio de ángulo debido solamente a $\Delta\mathbf{u}_{ij}(n+1)$, fijando a \mathbf{r}_{ik} , y $\Delta\theta_{ijk}^k(n+1)$ es el cambio de ángulo debido solamente a $\Delta\mathbf{u}_{ik}(n+1)$, fijando a \mathbf{r}_{ij} . El potencial de doblamiento es:

$$U_n(n+1) = \frac{1}{2} \sum_{\langle ijk \rangle} \beta_{ijk} \theta_{ijk}^2(n+1) = \frac{1}{2} \sum_{\langle ijk \rangle} \beta_{ijk} \left[\Delta\theta_{ijk}^y(n+1) + \Delta\theta_{ijk}^k(n+1) + \theta_{ijk}(n) \right]^2, \quad (3.17)$$

donde la suma es sobre todas las triplas $\langle ijk \rangle$ como en Fig. 3.3. β_{ijk} es la constante de fuerza (de doblamiento) de tres cuerpos en los nodos i, j y k . Para cambios pequeños de ángulo de $\Delta\theta_{ijk}(n+1)$, hay una relación con las componentes de desplazamiento $\Delta\mathbf{u}_{ij}(n+1)$ y $\Delta\mathbf{u}_{ik}(n+1)$ en el plano definido por las partículas i, j y k , en la dirección ortogonal a $\mathbf{r}_{ij}(n)$ y $\mathbf{r}_{ik}(n)$, respectivamente. De aquí, las componentes de desplazamiento $\Delta u_{ij}^{yk}(n+1)$ y $\Delta u_{ik}^{jk}(n+1)$ en el plano ijk son:

$$\Delta u_{ij}^{yk}(n+1) \equiv \Delta\mathbf{u}_{ij}(n+1) \cdot \left(\frac{[\mathbf{r}_{ik}(n) \times \mathbf{r}_{ij}(n)] \times \mathbf{r}_{ij}(n)}{[\mathbf{r}_{ik}(n) \times \mathbf{r}_{ij}(n)] \times \mathbf{r}_{ij}(n)} \right) \quad (3.18)$$

y

$$\Delta u_{ik}^{jk}(n+1) \equiv \Delta\mathbf{u}_{ik}(n+1) \cdot \left(\frac{[\mathbf{r}_{ij}(n) \times \mathbf{r}_{ik}(n)] \times \mathbf{r}_{ik}(n)}{[\mathbf{r}_{ij}(n) \times \mathbf{r}_{ik}(n)] \times \mathbf{r}_{ik}(n)} \right). \quad (3.19)$$

Para deformaciones pequeñas, la siguiente aproximación también se aplica:

$$\Delta\theta_{jk}^{ik}(n+1) \approx \tan[\Delta\theta_{jk}^{ij}(n+1)] + \tan[\Delta\theta_{jk}^{ik}(n+1)] = \frac{\Delta u_{jk}^{ij}(n+1)}{|\mathbf{r}_{ij}(n)|} + \frac{\Delta u_{jk}^{ik}(n+1)}{|\mathbf{r}_{ik}(n)|}, \quad (3.20)$$

de tal manera que $\Delta\theta_{jk}^{ij}(n+1)$ y $\Delta\theta_{jk}^{ik}(n+1)$ se pueden escribir como:

$$\Delta\theta_{jk}^{ij}(n+1) = \Delta u_{ij}(n+1) \cdot \mathbf{D}_j \quad (3.21)$$

y

$$\Delta\theta_{jk}^{ik}(n+1) = \Delta u_{ik}(n+1) \cdot \mathbf{D}_k, \quad (3.22)$$

donde

$$\mathbf{D}_j \equiv \left(\frac{[\hat{\mathbf{r}}_{ik}(n) \times \hat{\mathbf{r}}_{ij}(n)] \hat{\mathbf{r}}_{ij}(n) - \hat{\mathbf{r}}_{ik}(n)}{|\mathbf{r}_{ij}(n)| \sqrt{1 - [\hat{\mathbf{r}}_{ij}(n) \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ik}(n)]^2}} \right) \quad (3.23)$$

y

$$\mathbf{D}_k \equiv \left(\frac{[\hat{\mathbf{r}}_{ij}(n) \times \hat{\mathbf{r}}_{ik}(n)] \hat{\mathbf{r}}_{ik}(n) - \hat{\mathbf{r}}_{ij}(n)}{|\mathbf{r}_{ik}(n)| \sqrt{1 - [\hat{\mathbf{r}}_{ij}(n) \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ik}(n)]^2}} \right). \quad (3.24)$$

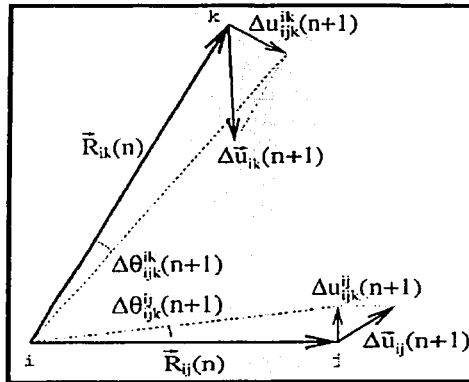


Figura 3.3. Potencial de tres cuerpos de doblamiento.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

De la teoría de elasticidad clásica (e.g. Timoshenko, 1982), la constante de fuerza de una viga o barra prismática ij está dada por:

$$\beta_{ijk} = \left(\frac{|\mathbf{r}_{ij}(n)|}{3E_{ij}I_{ij}} + \frac{|\mathbf{r}_{ik}(n)|}{3E_{ik}I_{ik}} \right)^{-1}, \quad (3.25)$$

donde I_{ij} es el momento inercial de la barra. Nótese que las constantes de fuerza central α_{ij} y de doblamiento β_{ijk} son las misma que en la ecuación (2.29), pero son distintas para cada enlace, por lo que el modelo de percolación elástica con fuerzas de doblamiento es el procedimiento general:

$$H = U_{el.} = U_{FC} + U_D, \quad (3.26)$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \alpha_{ij} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}]^2 e_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{\langle ijk \rangle} \beta_{ijk} (\delta\theta_{ijk})^2 e_{ij} e_{ik}. \quad (3.27)$$

La figura 3.4 esquematiza el modelo discreto estándar de partículas en una redícula regular triangular con fuerzas centrales y de doblamiento. Esto es lo mínimo que deberá contener un modelo bidimensional de redícula para representar correctamente un material elástico.

Existe una generalidad analítica del modelo discreto de partículas que es conocida como la *elasticidad micropolar* (véase Eringen, 1968; Nowacki, 1970), la cual es definida para el modelo de resorte en el apéndice C. Los modelos micropolares tienen su origen de la física del estado sólido. El modelo general micro-mecánico, que se puede obtener de la teoría micropolar, se presenta en el apéndice D. Ahí se deriva el modelo de Kirkwood (1939) que permite, a partir de las fuerzas centrales y de doblamiento, modelar materiales con diferente valor local de la relación de Poisson, así como anisotropía. De la misma manera se puede construir el modelo de Keating (1966a) para permitir relación de Poisson variable.

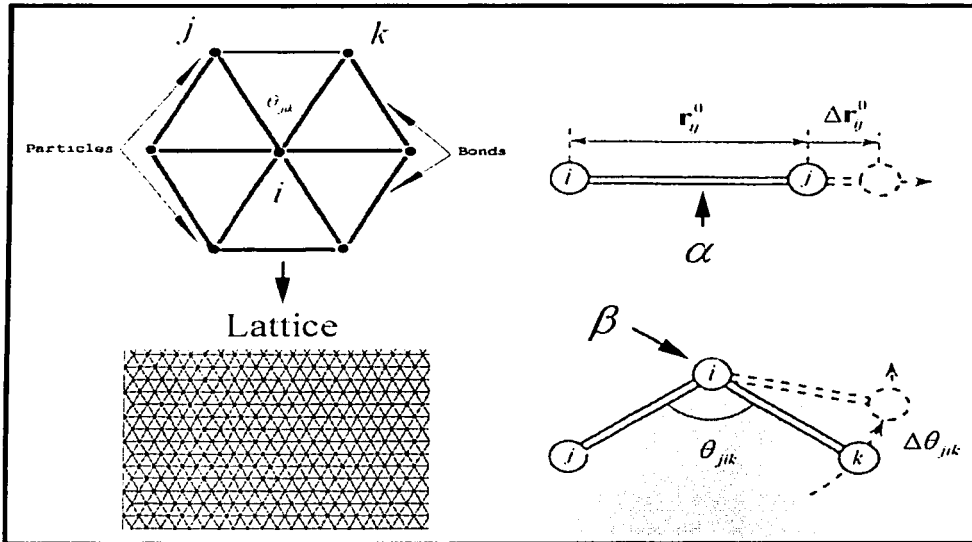


Figura 3.4. Potencial de dos cuerpos (fuerza central) y de tres cuerpos (fuerza de doblamiento).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 4

Aplicaciones

4.0 Fracturas

La falla de un sólido causado por una carga externa es evidentemente un problema tecnológico importante. En escalas muy pequeñas ($\leq 10^{-6} m$), las fracturas son un tema importante en la ciencia de materiales, manufactura, geología, etc. A niveles microscópicos, es decir, desde escalas atómicas hasta escalas de fronteras de grano y dislocaciones, los mecanismos de fractura son altamente dependientes del material (Duxbury y Li, 1989).

A escalas intermedias, el comportamiento de los sólidos puede ser descrita por métodos de mecánica aplicada y por ecuaciones continuas de movimiento (Takayasu, 1985). Existen varios tipos importantes de comportamiento sólido, como son los elásticos, viscoelásticos y los plásticos o dúctiles. Cada uno de estos con sus correspondientes ecuaciones constitutivas (Meakin, 1987).

Se estudió el comportamiento de fracturas a escalas intermedias (mesoscópicas), por medio de la física estadística. Se realizó un amplio desarrollo del fracturamiento frágil, primordialmente válido a escalas intermedias.

4.1 Nociones básicas de elasticidad en rocas fracturadas

4.1.0 Descripción fenomenológica

Para describir una fractura, se necesita saber primero, cómo una fractura ocurre en respuesta a una fuerza aplicada externa. Considérese el experimento de Young, en un bloque homogéneo de tamaño $e \times \omega^2$ sujeto a una fuerza uniaxial F . Para fuerzas pequeñas, la respuesta lineal es:

$$\sigma = \frac{F}{\omega^2} = E \frac{\Delta \ell}{\ell} = -\frac{E \Delta \omega}{\nu \omega} \quad , \quad (4.1)$$

donde E es el módulo de Young, ν es la relación de Poisson y σ es el esfuerzo. Usualmente, pequeñas fuerzas aplicadas no son suficientes para crear una fractura. El comportamiento de una fuerza arbitraria esta dado por su ley constitutiva.

El régimen lineal es llamado régimen elástico, el cual es válido hasta una fuerza F_e . Arriba de esta fuerza, se observan desviaciones no lineales. Mientras la fuerza sea menor a la fuerza llamada de punto de cesación ("yield point") F_y , el comportamiento es reversible, es decir, la forma del cuerpo regresa a su estado original, si se le quita la fuerza aplicada. Después de F_y , el comportamiento es plástico, por lo que el sistema se deforma permanentemente y tendrá una elongación finita d llamada "dilatación", formando una histéresis en materiales idealmente plásticos.

En la literatura, tres familias de materiales han sido estudiadas casi independientemente: los metales, los polímeros y las rocas. Las rocas, nuestro interés principal, abarcan las cerámicas, los concretos, las placas tectónicas, el vidrio, arcillas, etc. Las rocas, a temperaturas y presiones superficiales, experimentan, en general, fracturamiento frágil; en contraste con metales y polímeros que fracturan generalmente en el régimen dúctil (plástico). No obstante, por ejemplo, un mármol, a presión y temperatura ambiente, experimenta fracturamiento frágil, mientras que a gran presión y temperatura, propias de un yacimiento profundo, el mármol, muy probablemente experimente fracturamiento dúctil. Siendo entonces evidente que las tramas o patrones de fracturamiento en una roca sean muy distintos dependiendo de su constitución física-química (estructura porosa y fluidos en las rocas) y de su dependencia ambiental (presión y temperatura). Transiciones entre dúctil-frágil son todavía más difíciles de caracterizar. Existen a su vez varios tipos de "inductores de fracturas", es decir, no solo por cargas externas en el material, sino también por otros agentes como son, por ejemplo, por corrosión u otros fenómenos químicos y termodinámicos.

Las fracturas dependen fuertemente de la geometría del material (estructura) y de la dirección de las cargas aplicadas externas. En algunos casos, es importante la dependencia temporal, es decir, la respuesta del sistema ante una carga puede ser retardada:

$$\sigma(t) = \frac{1}{\ell} \int_0^t C(\tau) \Delta \ell(t-\tau) d\tau, \quad (4.2)$$

dicha respuesta es llamada viscoelasticidad, donde $C(\tau)$ es una función dependiente del material. Este comportamiento, el cual es disipativo, introduce una escala en tiempo. Otro tipo de escalas en tiempo, reproducidas en un sistema real, es debido a la velocidad finita de las ondas elásticas (las ondas en la superficie de una fractura son ondas Rayleigh) que transportan energía elástica generada del proceso de fracturamiento (Nihei *et al.*, 1991).

4.1.1 Ecuaciones elásticas de movimiento

La formación y crecimiento de fracturas en una roca dependen crucialmente del campo de esfuerzos locales. Por lo que se describirá el medio en función del campo de desplazamiento u , el cual da la posición de cada volumen elemental con respecto a una referencia; usualmente, la posición de equilibrio, si no se tienen fuerzas externas aplicadas. La teoría implica invarianza traslacional del sistema, por lo que el tensor se puede separar en una parte simétrica, llamada el tensor de deformación $\varepsilon_{\alpha\beta}$ y una asimétrica, la cual

describe las rotaciones locales de un volumen elemental. Para un medio homogéneo, la parte asimétrica no existe, ya que un volumen elemental no puede ser girado con respecto al resto del volumen. Para medios no homogéneos, como en el caso de medios porosos, la parte asimétrica es importante, y por lo tanto, es necesario considerar la teoría elástica de Cosserat, pero como estamos considerando sólo modelos bidimensionales, esto no afecta. Empezando con un medio homogéneo, utilizando la teoría simétrica, se describe la deformación elástica lineal como:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) . \quad (4.3)$$

Para que la teoría sea invariante sobre transformación de coordenadas, se requiere que el sistema dependa sólo de las expresiones $\sum_\alpha \varepsilon_{\alpha\alpha}$, $\sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta\alpha}$ y $\sum_{\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta\gamma} \varepsilon_{\gamma\alpha}$, si se asume también un medio isótropo. Asimismo, la energía debe ser cuadrática sobre deformación, por lo que se escribe

$$E = \frac{1}{2} (2\mu \sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta\alpha} + \lambda (\sum_\alpha \varepsilon_{\alpha\alpha})^2) , \quad (4.4)$$

donde λ y μ son las constantes de Lamé adimensionales. Recordemos que los valores posibles de la relación de Poisson son: $-1 \leq \nu \leq \frac{1}{2}$. La variable conjugada de $\varepsilon_{\alpha\beta}$ es el tensor de esfuerzo, por lo que se obtiene

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} = 2\mu \varepsilon_{\alpha\beta} + \lambda \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \varepsilon_{\gamma\gamma} . \quad (4.5)$$

Esta relación es la ley de Hooke. Físicamente, $\sigma_{\alpha\beta}$ es la componente β de la fuerza que es aplicada en la superficie en la dirección α de un volumen elemental.

Para obtener la ecuación de movimiento, se debe igualar el término inercial con todas las fuerzas aplicadas en un volumen elemental que apunten a una dirección β dada:

$$\rho \ddot{u}_\beta = \sum_\alpha \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta} + f_\beta , \quad (4.6)$$

donde f_β son las fuerzas externas locales aplicadas. Al no considerar dependencia temporal en el término inercial, es decir, en la ausencia de fuerzas f_β se tiene la ecuación vectorial

$$\nabla \cdot \sigma = \sum_\alpha \sigma_{\alpha\beta} = 0 . \quad (4.7)$$

De las ecuaciones anteriores, la ecuación de movimiento, para el campo desplazamiento es:

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + (1 - 2\nu)\nabla^2 \mathbf{u} = 0, \quad (4.8)$$

la cual es, una vez más, la ecuación de Lamé o de Navier. Esta ecuación es una consecuencia de la invarianza sobre translación y transformación de coordenadas, imponiendo linealidad, homogeneidad e isotropía en el medio. Si se quieren considerar rotaciones locales en el medio, se debe utilizar la elasticidad asimétrica (elasticidad de Cosserat), en la cual cada volumen elemental tiene una variable angular φ . La deformación es entonces definida como

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \partial_\alpha u_\beta - \sum_\gamma e_{\alpha\beta\gamma} \varphi_\gamma, \quad (4.9)$$

donde $e_{\alpha\beta\gamma}$ es el tensor total asimétrico. Se tiene además un tensor de torsión

$$\kappa_{\alpha\beta} = \partial_\alpha \varphi_\beta. \quad (4.10)$$

Análogamente a la elasticidad simétrica, se puede construir una energía a partir de invariantes y de variables de esfuerzo conjugadas $\sigma_{\alpha\beta}$ y momentos $\mu_{\alpha\beta} = \partial E / \partial \kappa_{\alpha\beta}$. Esto completa las relaciones lineales

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= (\mu + \alpha)\varepsilon_{\alpha\beta} + (\mu - \alpha)\varepsilon_{\beta\alpha} + \lambda \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \varepsilon_{\gamma\gamma} \\ \mu_{\alpha\beta} &= (\gamma + \delta)\kappa_{\alpha\beta} + (\gamma - \delta)\kappa_{\beta\alpha} + \eta \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma \kappa_{\gamma\gamma} \end{aligned} \quad (4.11)$$

con seis constantes del material, donde α y δ describen la asimetría. Las ecuaciones de movimiento, en este caso, son las ecuaciones de Cosserat, dadas por

$$\begin{aligned} (\mu + \alpha)\nabla^2 \mathbf{u} + (\lambda + \mu - \alpha)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2\alpha\nabla \times \varphi &= 0 \\ (\gamma + \delta)\nabla^2 \varphi + (\beta + \gamma - \delta)\nabla(\nabla \cdot \varphi) + 2\alpha\nabla \times \mathbf{u} - 4\alpha\varphi &= 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

Nótese que para $\alpha = 0$, las ecuaciones se convierten en la ecuación de Navier. Para dos dimensiones, tenemos que $\mathbf{u} = (u_1, u_2, 0)$ y $\varphi = (0, 0, \varphi)$, por lo que hay tres variables independientes por nodo o sitio que se pueden determinar a partir de tres ecuaciones de movimiento.

4.2 Modelado de fracturamiento en una retícula

Un desarrollo numérico tratable del modelado de fracturamiento es discretizar las ecuaciones continuas antes descritas (Louis *et al.*, 1986; Louis y Guinea, 1987; Meakin *et al.*, 1989). En este caso, el medio se representa como un grupo de puntos en una malla.

Sólo leyes locales, como son los momentos y los balances de fuerzas, son consideradas y en su implantación se utilizan sólo los puntos vecinos. Matemáticamente, la solución de la ecuación del campo desplazamiento (vectorial) se realiza de un grupo de ecuaciones lineales acopladas.

Evidentemente, estos métodos no pretenden describir a la naturaleza desde el punto de vista atómico, como sería el caso de técnicas de dinámica molecular, sino a mayores escalas, donde el medio es descrito por campos vectoriales continuos. El comportamiento del sólido se reproducirá bien, si las constantes del material (fenomenológicas), tales como el módulo elástico, umbral o punto de cesación ("yield point"), y operador de relajación, son propiamente consideradas en las ecuaciones de movimiento. El rompimiento de resortes en la retícula, no es una consecuencia natural, sino tiene que ser establecida una "regla" en el modelo de rompimiento.

En ingeniería, los modelos más comunes se realizan por medio de los métodos de elemento finito (Lemieux *et al.*, 1985). En física, se utilizan modelos más simples como los desarrollados aquí, muy semejantes a los métodos de diferencias finitas (Shmueli & Alterman, 1973; Stockl y Aver, 1976). Cabe mencionar, que se ha comprobado que los modelos de retícula son equivalentes algebraicamente a los modelos básicos de elemento finito (Ashurst & Hoover, 1976; Hoover, 1991; Ostoja-Starzewski *et al.*, 1996). En cada sitio, se tiene un número z de sitios vecinos. Las variables que caracterizan el medio, en este caso el vector desplazamiento, son colocadas en los sitios de la retícula. Las ecuaciones que describen el medio (modelos elásticos de Lamé o Cosserat) son discretizadas de tal manera que en cada sitio de la retícula se tenga una ecuación por variable. Por ejemplo, la discretización de la ecuación de Laplace para un potencial eléctrico se convierte en la ecuación de Kirchhoff. Las ecuaciones continuas del medio son, por lo tanto, transformadas en un grupo de $m \times N$ ecuaciones acopladas, donde m es el número de variables por sitio y N es el número de sitios de la retícula. Dado que sólo vecinos cercanos son utilizados en el cálculo de cada sitio, la solución será por medio de una matriz dispersa. Las condiciones de frontera son implantadas implícitamente. Las condiciones de frontera en la superficie de una fractura son automáticamente tomadas en cuenta por la respuesta de los enlaces que constituyen dicha fractura (Paterson, 1989). Nótese que al imponer condiciones de frontera, la solución de las ecuaciones es única.

Numéricamente, existen varios métodos para encontrar la solución. Por ejemplo, si mucha precisión es requerida, como en el caso de obtener la distribución de deformación local, el método de gradiente conjugado puede ser una buena alternativa, ayudado por aceleración de Fourier; si se quiere estudiar los efectos dinámicos, tales como viscoelasticidad, el método de Jacobi sería más conveniente y daría sentido físico a cada paso de la relajación (Yan *et al.*, 1989).

Como se mencionó anteriormente, la simulación de los procesos de ruptura ó fracturamiento debe de realizarse en forma iterativa: a cada paso, las ecuaciones se resuelven y se determinan que enlaces deben de ser rotos. Una vez que un enlace es roto, las condiciones de frontera internas, y por lo tanto la solución de las ecuaciones, cambia. Consecuentemente, las ecuaciones deben de ser resueltas otra vez si se quiere saber cuales

enlaces se romperán en un paso futuro, y así, iterativamente, se puede observar la dinámica del fracturamiento.

El algoritmo para cada iteración se puede resumir en cinco pasos:

1. Establecer las ecuaciones a resolver
2. Establecer que enlaces son elegibles a romperse
3. Calcular el efecto de diferenciales de fuerza debido al rompimiento de enlaces. Esto se lleva al cabo de la solución de las ecuaciones. Cada enlace tendrá un cierto valor p .
4. Se escoge que enlace se rompe, basado en el valor p , descrito en el punto 3.
5. El enlace es roto, es decir, su módulo elástico cambia en las ecuaciones.

Se pueden tomar muchas opciones de análisis como son: a) la descripción de la naturaleza del medio y esfuerzos aplicados externos, b) la conectividad de la fractura, c) las reglas de rompimiento y desorden, y d) los esfuerzos residuales incorporados.

4.3 Ecuaciones y sus condiciones de frontera

El problema de una red eléctrica es muy similar al de una red elástica de fracturamiento con la salvedad de que el campo de desplazamiento u es vectorial. Como se mencionó antes, existen dos alternativas de descripción, las ecuaciones de Lamé y las de Cosserat. Por otro lado, existen varios tipos de discretización posibles, estos son: a) el modelo de fuerza central, b) el modelo de enlace-doblado y c) el modelo de viga.

En el modelo de fuerza central, cada enlace se comporta como un resorte elástico, el cual puede rotar libremente al rededor del sitio al cual pertenece (ver Fig. 4.1).

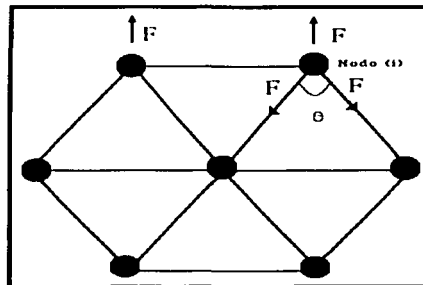


Figura 4.1. Modelo de resortes de fuerza central.

El modelo de enlace-doblado es similar al de fuerza central pero utiliza un resorte entre enlaces para reforzar los ángulos entre dos enlaces. Ambos modelos pueden describir el

modelo de elasticidad de Cosserat a grandes escalas, no obstante, estos modelos se utilizan generalmente para modelos elásticos de Lamé. El modelo de viga es una discretización de las ecuaciones de Cosserat. En dos dimensiones, se tienen tres grados continuos de libertad en cada sitio i : las coordenadas x_i, y_i y $z_i = l \varphi_i$, donde $\varphi \in [-\pi, \pi]$ es el ángulo de rotación y l es el espaciamiento de la retícula, el cual usualmente es la unidad. Sitios cercanos vecinos son conectados por una "viga" de tal manera que enlace un sitio i formando un ángulo φ_i con respecto a la retícula no deformada. La Fig. 4.2 muestra el modelo de viga así como una representación del ángulo de rotación.

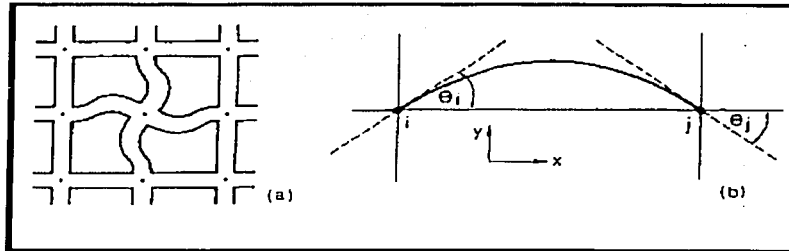


Figura 4.2. Representación del modelo de viga. (a) La rotación de un sitio en el centro de la retícula; (b) Una viga es doblada debido a rotaciones en sus esquinas.

A cada viga se le asigna una sección transversal finita A , de tal manera que, aparte de una fuerza de tracción f a lo largo de su eje, exista un esfuerzo transversal s y momentos m_i y m_j . En dos dimensiones, esto se puede calcular como:

$$\begin{aligned}
 f &= a (x_i - x_j) , \\
 s &= b (y_i - y_j + \frac{1}{2}(z_i + z_j)) , \\
 m_i &= cb (z_i - z_j) + \frac{b}{2} (y_i - y_j + \frac{z_i}{3} + \frac{z_j}{3}) ,
 \end{aligned}
 \tag{4.13}$$

donde $a = EA$, $b = ((GA)^{-1} + (l^2/12)(EI)^{-1})^{-1}$ y $c = EI/l^2GA$. G es el módulo de corte y I es el momento de inercia.

Para obtener tres ecuaciones discretizadas para cada sitio, se impugna que la suma de las componentes horizontal y vertical de las fuerzas, y la suma de los momentos sean cero en cada sitio.

Los modelos elásticos permiten una gran variedad de condiciones de frontera, es decir, de condiciones de esfuerzos externos aplicados. Para fracturamiento, se han considerado condiciones de frontera de corte (ver Fig. 4.3a), de tensión uniaxial (Fig. 4.3b), de dilatación radial (Fig. 4.3c), etc.

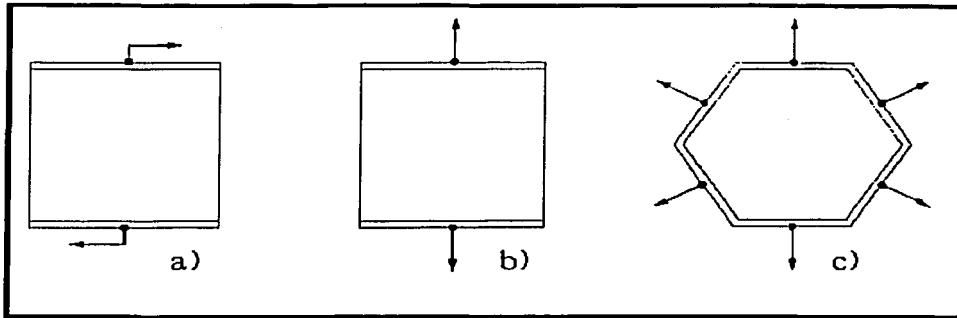


Figura 4.3. Condiciones de frontera. (a) de corte, (b) de tensión uniaxial y (c) de dilatación radial.

Dilatación radial es equivalente a una membrana estirada como en un tambor, mientras que dilatación uniforme se puede pensar como el proceso de secado de la pintura. Lo que se ha descrito aquí, es sólo para geometrías en dos dimensiones, porque son escasos los trabajos de tres dimensiones, debido, principalmente, a limitaciones numéricas.

4.4 Regla de rompimiento

El punto fino de física microscópica de ruptura es la regla de rompimiento. Dicha regla es colocada en el modelo con un criterio estadístico. El efecto de desorden en el proceso de rompimiento es muy importante. Los materiales reales pueden exhibir diversos tipos de desorden, desde pequeñas desviaciones de su estructura cristalina, hasta grandes heterogeneidades. El desorden puede ser también dinámico: pueden migrar dislocaciones, pueden formarse micro-grietas o "sanar", pueden esparcirse intersticios, etc.

A escalas mesoscópicas se puede describir a los modelos por su dependencia espacial local de densidad, módulos elásticos o intensidad, por lo que se escoge una distribución de probabilidad. Dicha distribución debe contener información acerca del grado de desorden del modelo, de tal suerte que al tener diversas distribuciones se puedan cuantificar sus efectos.

En el contexto de modelos de retícula, cada enlace se caracteriza por una ley constitutiva, la cual, en el más simple de los casos, es lineal hasta un umbral de rompimiento como se representa en la Fig. 4.4.

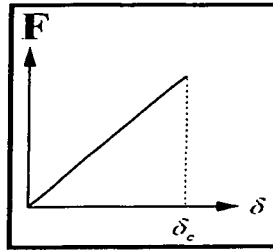


Figura 4.4. La ley constitutiva para cada enlace del modelo de retícula (fuerza F - desplazamiento δ). El umbral de rompimiento es δ_c .

La intensidad o rigidez del enlace esta dado por el valor del umbral δ_c y el módulo elástico por la pendiente. Por ende, la presencia de desorden es implantada en el modelo si se permite que los enlaces en la retícula tengan diferentes leyes constitutivas. Las fluctuaciones de rigidez pueden ser representadas tomando aleatoriamente un valor de umbral para cada enlace, y las variaciones espaciales de los módulos elásticos pueden ser descritas al tomar diferentes pendientes (Takayasu, 1985).

El ejemplo típico de fluctuaciones espaciales es el de un medio poroso, donde a cada punto en el espacio se tiene material o no se tiene (vacío). Dicha situación se puede modelar aleatoriamente, removiendo enlaces de la retícula con una probabilidad $q = 1 - p$ antes de que el proceso de rompimiento se lleve al cabo, por supuesto, se debe resolver primero el problema estático.

Una vez que un enlace se rompe, su remoción debe de ser implantada, lo cual se realiza simplemente al remover dicho enlace de las ecuaciones que describen el medio, y se recalcula el sistema.

4.5 Discretización y normalización de modelos

A continuación se describe la discretización de la ecuación de Navier para un sitio o nodo i . La ecuación (4.8) se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
 (\lambda + \mu)\partial_i(\sum_j \partial_j u_j) + \mu(\sum_j \partial_j^2)u_i &= \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \\
 \text{ó} & \\
 (\lambda + \mu)u_{j,j} + \mu u_{i,ii} &= \rho \ddot{u}_i
 \end{aligned}
 \tag{4.14}$$

Utilizando los vectores base unitarios $\hat{a}_1 = a(1,0)$ y $\hat{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$, se desarrolla la discretización de la ecuación anterior

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$4u(l, m) - u(l+1, m) - u(l-1, m) - u(l+1, m+1) - u(l-1, m-1) + 2v(l, m) - v(l+1, m+1) - v(l-1, m-1) = \rho \frac{\partial^2 u(l, m)}{\partial t^2} \quad (4.15)$$

A su vez, la doble derivada parcial de la parte derecha de la ecuación se discretiza como:

$$\rho \frac{\partial^2 u(l, m, t)}{\partial t^2} \rightarrow \rho \frac{[u(t-1) + u(t-2) + 2u(t)]}{(\Delta t)^2} \quad (4.16)$$

Para fuerzas centrales, en el caso de utilizar la ecuación: $F = m a = -k \Delta x$, es decir, la fuerza es igual a una constante elástica por la deformación (ley de Hooke), una posible discretización para una redícula triangular (para fuerzas centrales solamente) sería:

$$F = \alpha \frac{\partial u(l, m)}{\partial t} + \rho \frac{\partial^2 u(l, m)}{\partial t^2} = -k_{l,m} u(l, m) - k_{l-1, m-1} u(l-1, m-1) - k_{l-1, m} u(l-1, m) - k_{l, m-1} u(l, m-1) - k_{l, m+1} u(l, m+1) - k_{l+1, m-1} u(l+1, m-1) - k_{l+1, m} u(l+1, m) \quad (4.17)$$

Para obtener un valor de k a partir de un promedio de velocidad compresional se necesita por ejemplo asumir:

- La relación de Poisson, por ejemplo, $\nu = 0.25$.
- La densidad, por ejemplo, $\rho = 3.0 \text{ g/cm}^3$.
- El modulo de Young, por ejemplo, $E = 7 \times 10^{11} \text{ dinas/cm}^2$.

Suponga la masa de 10^6 partículas que forman un cubo de 1 cm^3 , por lo que tenemos un intervalo $\Delta x = 100\mu = 10^{-2} \text{ cm}$; cada partícula tiene una masa efectiva de $3 \times 10^{-6} \text{ g}$. Con estos valores se tiene las velocidades compresional V_p y la transversal V_s ,

$$V_p = \sqrt{\frac{E}{\rho} \frac{1-\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)}} = 5.29 \text{ Km/s} \quad (4.18)$$

$$V_s = V_p \sqrt{\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}} = V_p \times 0.578 = 3.05 \text{ Km/s} \quad (4.19)$$

Para calcular la constante de elasticidad k , obsérvese la Fig. 4.1. La fuerza aplicada F en el nodo i se obtiene de:

$$F = 2k(l-l_0) \cos \theta \quad (4.20)$$

HECHO CON
FALLA DE ORIGEN

donde θ es el ángulo entre resortes, l y l_0 son la longitud variable y la longitud inicial respectivamente de los resortes. Nótese que $\theta \approx 60^\circ$, por lo tanto, $F \approx k(l-l_0)\sqrt{3}$. Por lo que resolviendo para k

$$k \approx \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{F}{l-l_0} \quad (4.21)$$

Nótese que el modulo de Young es $E = 7 \times 10^{11} \frac{\text{dinas}}{\text{cm}^2} = \frac{\text{esfuerzo}}{\text{deformación}}$ (ver Fig. 4.5), por lo que para una cara determinada se tiene una fuerza aplicada de $F = 7 \times 10^7$ dinas, con 10^4 partículas, cada una con 7×10^3 dinas de fuerza. Aquí se suponen deformaciones pequeñas del orden de $\approx 10^{-4}$ cm. Por lo tanto, se tiene una deformación de:

$$\text{deformación} = (l-l_0) = \frac{\sqrt{3}}{2} \times 10^{-4} \times 10^{-2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \times 10^{-6} \text{ cm} \quad (4.22)$$

Finalmente, de aquí, se puede calcular el valor de k :

$$k = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \times 10^6 \cdot 7 \times 10^3 = 4.67 \times 10^9 \text{ dinas/cm} \quad (4.23)$$

El valor obtenido de k de la ecuación (4.23) es normalizado de tal manera que en el modelo la onda compresional viaja una distancia l por unidad de tiempo. Este mismo razonamiento nos ayuda a determinar cuanta fuerza se debe aplicar a cada partícula en la frontera del modelo para aplicar esfuerzo confinado en el material.

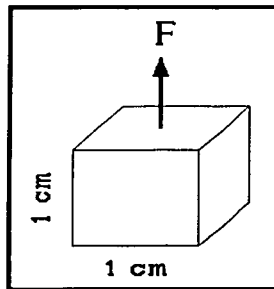


Figura 4.5. La fuerza aplicada en una cara del volumen.

4.6 Fracturamiento dinámico y respuesta sísmica

Como se mencionó anteriormente, los procesos de fracturamiento tienen diferentes patrones, sean estos procesos mecánicos (fuerzas aplicadas) u otros procesos fisico-químicos (ver Fig. 4.6). En particular, nos interesan los procesos de fracturamiento mecánico en rocas. La Fig. 4.7 presenta un experimento en una retícula muy pequeña de 62×62 nodos, donde se le aplicó esfuerzo radial al centro del modelo. Las condiciones de frontera, en este caso, fueron esfuerzo normal. Nótese que los "brazos" o fracturas se generan en dos direcciones preferenciales. Esto se debe a que se utilizó una retícula triangular, garantizando una relación de Poisson de $\nu = 1/4$, valor típico de las rocas. La Fig. 4.8 muestra un ejemplo similar pero con una retícula de 2000×2000 nodos, el cual presenta un experimento de hidrofracturamiento inducido en el centro del modelo, donde se tiene un pozo inyector de fluido o propante.

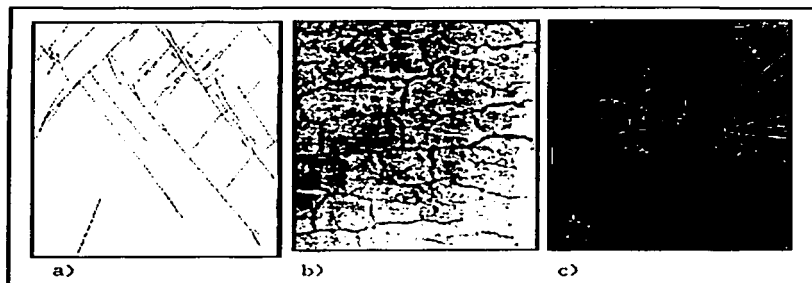


Figura 4.6. Patrones de fracturamiento. a) Arcilla sujeta a esfuerzos transversales, b) concreto sujeta a evaporación de agua, c) vidrio sujeta a un agente ácido.

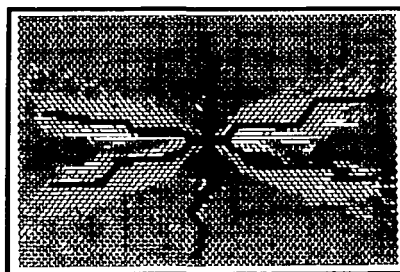


Figura 4.7. Fracturamiento debido a esfuerzo radial inducido en el centro de la retícula de 62×62 .

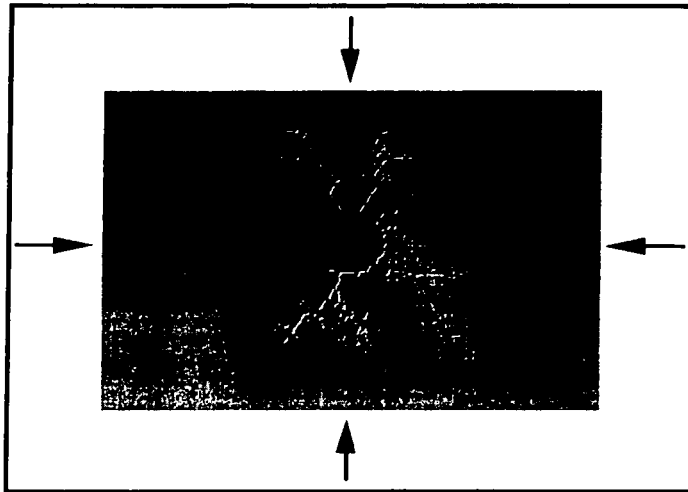


Figura 4.8. Un modelo de 2000 x 2000 nodos simulando hidrofracturamiento. El estado de esfuerzo es idéntico en ambas direcciones, horizontal y vertical.

Otro ejemplo es la Fig. 4.9, donde se muestra una retícula de 2000 x 2000 nodos donde se le aplicó esfuerzo cortante en los lados del modelo (condiciones de frontera). Nótese la dirección preferencial de las fracturas, que es debido a la configuración de los esfuerzos transversales aplicados. Este modelo representa una roca fracturada con anisotropía inducida por esfuerzo.

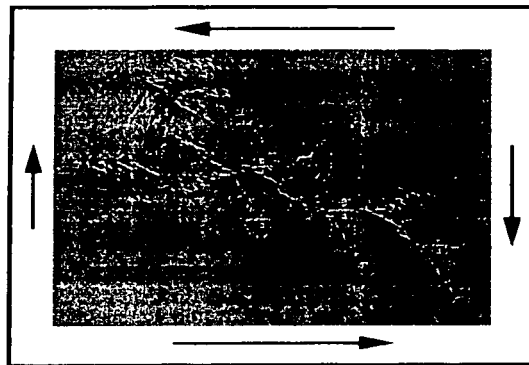


Figura 4.9. Simulación de un modelo Fracturado por medio de un esfuerzo cortante.

Si en algún lado del modelo se colocasen geófonos, se pueden obtener datos sísmicos sintéticos como en las Fig. 4.10. Nótese el área de influencia plástica (que rompe o deforma algunos enlaces) alrededor de la fractura principal.

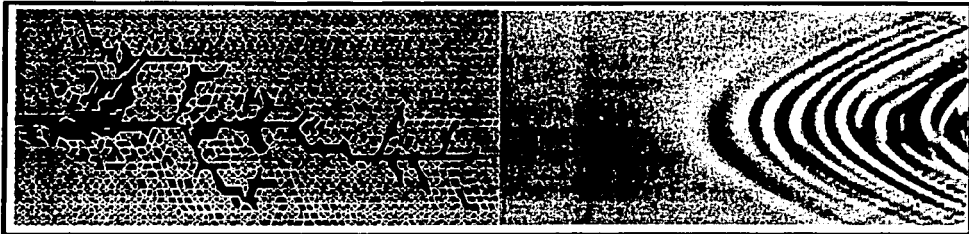


Figura 4.10. Emisión acústica (micro sísmica) proveniente de una simulación de fracturamiento de roca.

El análisis de los datos sintéticos obtenidos (respuesta sísmica) fue sólo preliminar. Se trató de determinar aquellos eventos importantes en los datos (ver Fig. 4.11) y su correlación con las fracturas generadas en el modelo.

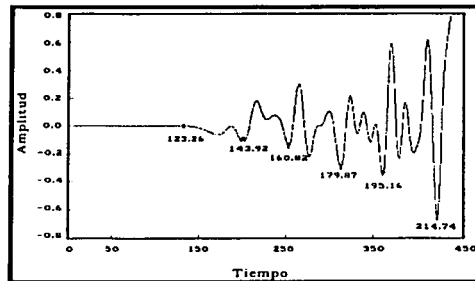


Figura 4.11 Ejemplo de la emisión acústica (traza sísmica) mostrando los tiempos de eventos provenientes de incipientes micro grietas.

También se analizaron en el contenido de frecuencias y la forma de onda de los datos. Por ejemplo, véase que en la Fig. 4.12 se observa la densidad espectral de trazas sísmicas de geófonos colocados en diferentes puntos del modelo. Para hidrofracturamiento, se observó que un geófono colocado enfrente de la propagación de la fractura tenía más altas frecuencias que un geófono colocado a un lado. Este es el célebre efecto de Doppler. Situación similar sucede si una onda mecánica atraviesa una zona fracturada. La velocidad y el contenido frecuencial se reducen si la propagación de onda es transversal al sistema de fracturas, mientras que se mantiene si la propagación es aproximadamente paralela a las fracturas. Este es un efecto de anisotropía del medio y promete ser clave para desarrollar

una metodología de análisis para la detección de fracturas y para la determinación de esfuerzos en las rocas y, por ende, una idea indirecta del tensor de permeabilidad en los yacimientos geológicos.

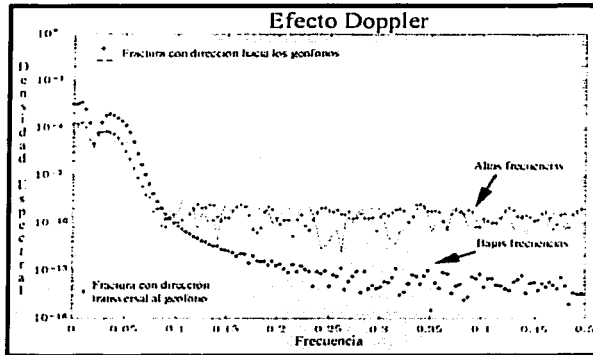


Figura 4.12 El efecto Doppler característico observado en los experimentos.

4.7 Integración de las ecuaciones de movimiento

Se realizaron nuevos experimentos de hidrofracturamiento, donde se utilizaron retículas con enlaces con fuerza central y doblamiento. A cada intervalo de tiempo se calculan las fuerzas resultantes a cada partícula o nodo, consecuentemente la aceleración, velocidad y posición de partícula, se obtienen por la integración de las ecuaciones de movimiento.

A cada instante de tiempo t , para una retícula triangular, con enlaces con diferente rigidez, las fuerzas en la partícula i se calcula a partir del Hamiltoniano de la ecuación 3.27. La fuerza total \mathbf{F}^T es la suma de las fuerzas centrales \mathbf{F}^{FC} y fuerzas de doblamiento \mathbf{F}^D :

$$\mathbf{F}_i^T(t) = \mathbf{F}_i^{FC} + \mathbf{F}_i^D = \sum_{\langle i, j \rangle} \alpha_{ij} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}] \mathbf{e}_{ij} + \sum_{\langle i, j, k \rangle} \beta_{ijk} (\delta \theta_{ijk}) \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{ik} \quad (4.24)$$

La aceleración de la partícula i se obtiene simplemente del vector de fuerza total:

$$\mathbf{a}_i(t) = \frac{\mathbf{F}_i^T(t)}{m_i} \quad (4.25)$$

donde la masa de la partícula es $m_i = \rho_i \sqrt{3} l_0^2 / 2$, con densidad ρ_i y l_0 la longitud de la retícula en equilibrio.

Para obtener las velocidades y posiciones de partícula, se utiliza el esquema de integración numérica de "velocidad de Verlet" (Verlet, 1967; Allen & Tildesley, 1987; Gould & Tobochnik, 1988; Haile, 1992; Rapaport, 1995; Schlick, 2002). Esta aproximación de diferencias finitas es de segundo orden en velocidad y tercer orden en posición. Con un intervalo en tiempo de Δt , primero se calcula la velocidad de partícula a medio intervalo:

$$\mathbf{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{a}(t) . \quad (4.26)$$

Subsecuentemente, se obtiene la velocidad al siguiente intervalo:

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t + \frac{1}{2}\Delta t) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{a}(t + \Delta t) , \quad (4.27)$$

y la posición:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{a}(t) . \quad (4.28)$$

A cada intervalo en tiempo, se calcula la energía total del sistema para observar la estabilidad de la solución numérica. La energía total U_T se obtiene de la energía cinética U_C y potencial U_p :

$$U_T(t) = U_C + U_p = \frac{1}{2N} \left(\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i(t)^2 + \alpha_i \mathbf{r}(t)^2 \right) , \quad (4.29)$$

donde N es en numero de partículas del sistema.

Matemáticamente, existen métodos para sistemas conservativos Hamiltonianos llamados *simplécticos* que poseen propiedades numéricas favorables (en teoría y en práctica), sobre métodos no simplécticos como es el caso de los métodos de integración de Runge-Kutta (Sanz-Serna & Calvo, 1994). En particular, los sistemas simplécticos preservan volumen en el espacio de fase (el Jacobiano de transformación preserva el volumen de un conjunto de coordenadas y momentos a otro), lo cual implica ciertos invariantes del sistema deseables. La Fig. 4.13 ilustra un experimento por Schlick (2002) donde se observa que la energía total U_T decae a mayor tiempo, para el método de Runge-Kutta el cual no es simpléctico y por lo tanto, inestable. En comparación, el método de velocidad de Verlet es razonablemente estable (pequeñas oscilaciones son observadas).

En la Fig. 4.14 se muestra un experimento de hidrofracturamiento, utilizando una retícula con enlaces que tienen descripción central y de doblamiento. El modelo es esforzado por medio de un desplazamiento dos veces mayor en la dirección horizontal que en la vertical. El material es aleatoriamente desordenado por un $\pm 5\%$ del valor del modulo de Young macroscópico $E = 70$ (GPa), el esfuerzo de rompimiento fue aproximadamente de

59 (MPa). Obsérvese además varias bifurcaciones en la evolución de las fracturas. Esto se debe a que la fractura alcanzó su máxima velocidad de propagación (aproximadamente 0.6 la velocidad de Rayleigh del material), por lo que se vuelve inestable y genera ramificaciones para reiniciar estabilidad dinámica.

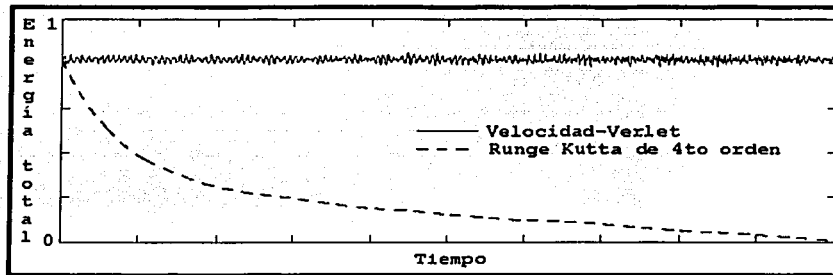


Figura 4.13 Estabilidad numérica. Comparación entre el método de velocidad de Verlet y el algoritmo de Runge Kutta de 4º Orden (de Schlick, 2002).



Figura 4.14. Evolución temporal de un experimento de hidrofracturamiento. Cerca de 130,000 partículas fueron utilizadas (360 x 360).

Las fracturas se propagan en la dirección preferentemente perpendicular al eje principal de mínimo esfuerzo. En este contexto, las fracturas están íntimamente relacionadas a la anisotropía inducida por esfuerzo. La Fig. 4.15 presenta un ejemplo de hidrofracturamiento donde los esfuerzos aplicados son iguales en todas las caras del modelo. Por lo que los patrones de fracturamiento son relativamente uniformes en todas direcciones. En cambio, la Fig. 4.16 presenta un ejemplo donde se aplicó mayor esfuerzo en la dirección horizontal que en la vertical (anisotropía inducida). Los patrones de fracturamiento tienen una dirección preferencial muy bien definida. La tabla 4.1 presenta valores típicos utilizados en las simulaciones de hidrofracturamiento.

ESTA TESIS
DE LA P. 11

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

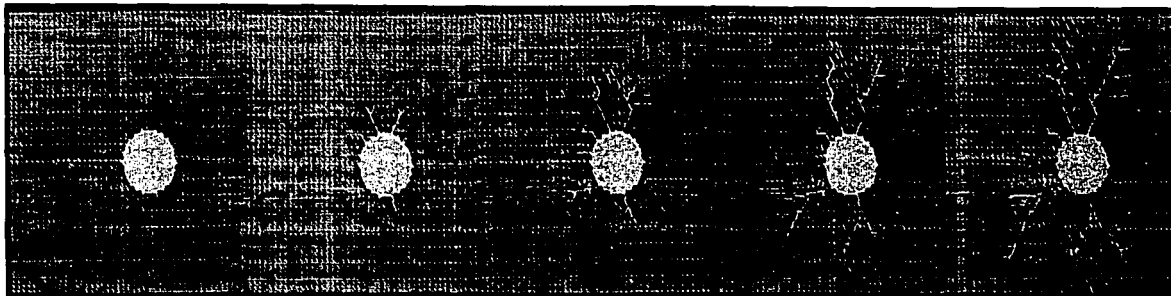


Figura 4.15. Secuencia en tiempo (película) de una simulación de hidrofracturamiento. El estado de esfuerzo es idéntico en ambas direcciones, horizontal y vertical. No hay indicios de anisotropía inducida.



Figura 4.16. Secuencia en tiempo (película) de una simulación de hidrofracturamiento. El estado de esfuerzo es dos veces mayor en la dirección horizontal que en la vertical. Aquí, la anisotropía inducida por esfuerzo es evidente.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Tabla 4.1
Parámetros del modelo

Modulo de Young, E	7×10^{11} dinas/cm ² = 70 GPa
Densidad, ρ	3 g/cm ³
Relación de Poisson, ν	0.25
Velocidad compresional, V_p	5.3 km/s
Velocidad transversal, V_s	3.1 km/s
Presión Hidráulica, P_H	3.8×10^8 dinas/cm ² = 38 MPa
Longitud del enlace l	10^{-4} cm
Umbral en extensión del enlace	0.5% $> l$
Umbral del ángulo	5% $\pm 0_n$
Umbral en compresión del enlace	5% $< l$
Módulo Volumétrico K	4.67×10^{11} dinas/cm ² = 46.7 GPa
Módulo de Corte μ	2.8×10^{11} dinas/cm ² = 28 GPa
Intervalo de tiempo Δt	5×10^{-10} s

4.8 Comparación con soluciones clásicas

Para verificar, entre otras cosas, la exactitud de los modelos de retícula para reproducir fenómenos de física de roca, se realizó una comparación con la solución analítica propuesta por Garvin (1956), de una fuente lineal para producir ondas de Rayleigh en la superficie libre de un semi-espacio perfectamente homogéneo e isotrópico. Sin más pormenores, refiérase al trabajo de Del Valle-García & Sánchez-Sesma (2003) en el apéndice E, que demuestra que el modelo de retícula es suficientemente preciso para modelar propagación de ondas en medios elásticos. Como complemento a dicho trabajo, véase la Fig. 4.17a que muestra la energía inyectada al sistema y que es el cuadrático de la fuente de Ricker utilizada para excitar el sistema, mientras que la Fig. 4.17b demuestra la estabilidad numérica de la solución. La Fig. 4.18 ilustra el campo de desplazamiento vertical y horizontal para un modelo homogéneo utilizando una retícula de 500,000 de partículas con espaciamiento de 10 m, con una velocidad compresional de 6000 m/s y relación de Poisson de 0.25. La fuente utilizada tiene una frecuencia central de 15 Hz. Nuestros resultados son idénticos a los producidos por Toomey & Bean (2000), que a su vez compararon con soluciones clásicas de diferencias finitas.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

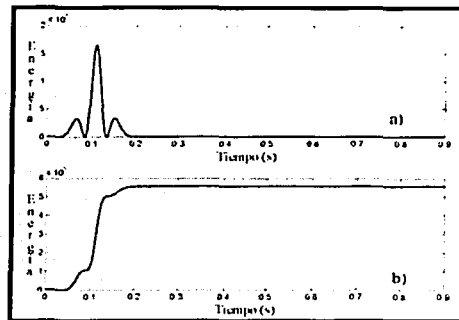


Figura 4.17. a) Energía inyectada al sistema para cada intervalo de tiempo. b) Energía total U_T , mostrando estabilidad numérica durante la simulación.

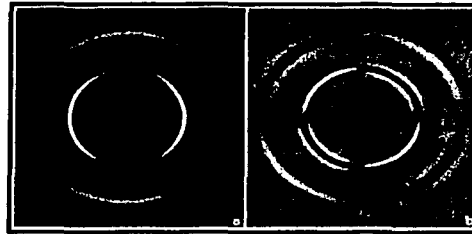


Figura 4.18. a) Instantáneas de la componente vertical (a) y de la horizontal (b) del campo de desplazamiento para un modelo homogéneo.

4.9 Simulación en medios desordenados

Utilizando el modelo de percolación elástica, se exploraron los efectos de difracción de onda, modificando la cantidad de porosidad en el modelo. Esto se presenta en el trabajo de Del Valle-García & Sánchez-Sesma (2002), que se incluye en el apéndice E. En este trabajo, no se circunscribieron algunos detalles de cómo se calculó la atenuación sísmica, por lo que a continuación se proveen algunos detalles. Esta misma técnica se utilizó en Del Valle-García & Ramírez-Cruz (2002), en apéndice E.

Para calcular la atenuación de onda, primero se obtiene la representación tiempo-frecuencia de la señal $s(t)$, por medio de la transformada de Wigner:

$$W(t, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} s(t + \frac{\tau}{2}) s^*(t - \frac{\tau}{2}) e^{-i\omega\tau} d\tau, \quad (4.30)$$

donde t es el tiempo, $\omega = 2\pi f$ es la frecuencia angular y $*$ denota el conjugado complejo. Nótese que la transformada de Wigner es una transformada bidimensional de Fourier reescalada, que usa la señal en tiempo reverso, como ventana. La función $W(t, \omega)$ es un espectro de potencia instantáneo, la cual localiza insuperablemente las características de tiempo y frecuencia (e.g., Claasen & Mecklenbrauker, 1980; Boudreaux-Bartels, 1984; Baraniuk & Jones, 1993). De acuerdo a Barnes (1993), se puede obtener, por ejemplo, la frecuencia instantánea $f_i(t)$ de la señal:

$$f_i(t) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \omega W(t, \omega) d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} W(t, \omega) d\omega}, \quad (4.31)$$

la cual es utilizada coloquialmente como atributo sísmico.

El factor de calidad Q , recíproco de la atenuación de onda, se obtiene de la distribución de Wigner, para el intervalo en tiempo (t_1, t_2) como:

$$Q^{-1} = \frac{MC \{ \ln [W(t_2, \omega)] \} / MC \{ \ln [W(t_1, \omega)] \}}{-2\pi \omega (t_2 - t_1)}, \quad (4.32)$$

donde MC es el ajuste por mínimos cuadrados, que se utiliza para garantizar resultados estables de la estimación. Para más detalles véase Ramírez-Cruz *et al.* (2003), los cuales construyen un atributo de atenuación sísmico, cuantitativo extremadamente resolutivo.

Otros experimentos fueron recientemente realizados y que no han sido publicados. Por ejemplo, la Fig. 4.19 muestra la propagación de ondas elásticas en un medio con diferente cantidad de porosidad que incluye una superficie libre. Se observa que una de las claras e importantes ventajas de los modelos de retícula es la facilidad con que se pueden incorporar automáticamente, porosidad, o cualquier tipo de inclusiones en los modelos. Finalmente, la Fig. 4.20 muestra una señal obtenida de la simulación de propagación de ondas en un medio fuertemente desordenado y por lo tanto, con intensa difracción múltiple. La coda tiene un carácter difusivo, como algunas teorías lo predicen (e.g. Anderson, 1958; Chandrasekhar, 1960; Ishimaru, 1978; Sheng, 1995; Fehler & Sato, 1998; Van Rossum & Nieuwenhuizen, 1999).

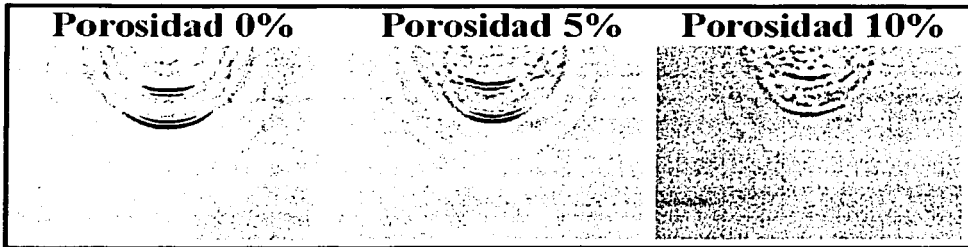


Figura 4.19. Difracción de ondas elásticas en un medio conteniendo diferente porcentaje de porosidad. Es clara que la pérdida de energía (atenuación) es mayor a mayor porosidad.

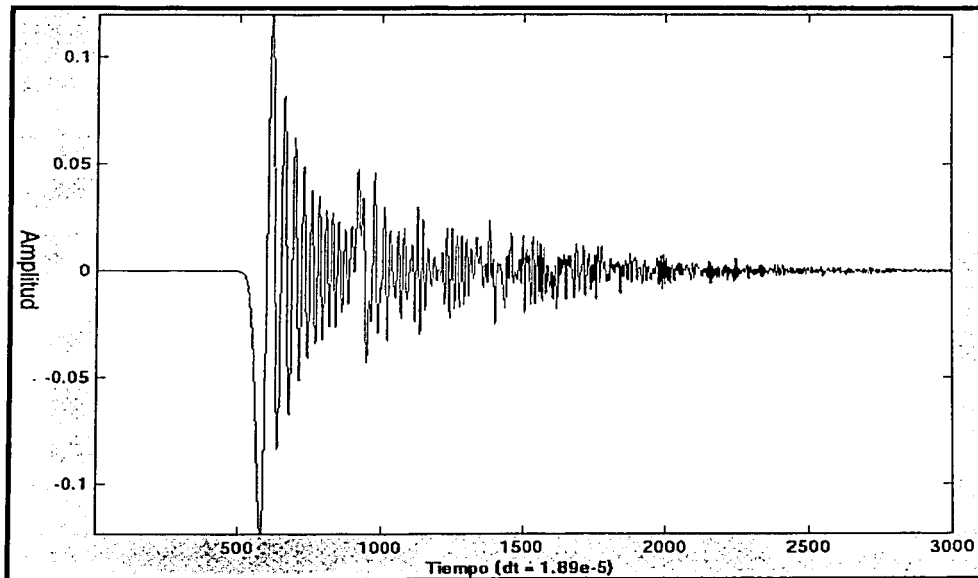


Figura 4.20. Fuerte difracción múltiple de ondas elásticas en un medio altamente desordenado.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Conclusiones

En esta disertación he propuesto un modelo genérico para simular fenómenos de física de rocas y demás materiales sólidos desordenados clásicos. Esto, eventualmente, para contar con un laboratorio "virtual" que permita fácilmente realizar experimentos de diferente índole físico-teórico, que a su vez permitan verificar hipótesis específicas o que permita ampliar nuestro conocimiento fundamental, a través de la observación, interpretación e intuición física de los resultados, fruto de dichos experimentos.

En este contexto, el modelo discreto de partículas permite asignar propiedades locales elásticas, y otro tipo de reologías distintas, por lo que se pueden proponer y por ende experimentar en modelos desordenados, incluyendo medios anisótropos. Adicionalmente, se pueden asignar esfuerzos externos en el modelo por medio de condiciones "físicas" de frontera, lo cual permite modelar sistemas con anisotropía inducida por esfuerzos. También se puede tener una superficie libre natural en el modelo y observar la aparición de las ondas de Rayleigh, cuando el modelo ha sido excitado con una fuente externa.

Los ejemplos presentados demuestran buena precisión y correcta reproducción de la naturaleza, ya que, tanto en datos experimentales de laboratorio, como en resultados teóricos obtenidos de soluciones analíticas y aproximaciones de medio efectivo, se tienen ajustes adecuados al utilizar el modelo discreto propuesto.

La habilidad de realizar comparaciones cuantitativas entre experimentos de laboratorio y experimentos numéricos con nuestro modelo de partículas, es un paso trascendental para entender en lo fundamental, los procesos y fenómenos de dinámica de fracturas y de propagación de ondas en medios desordenados, discontinuos y con probables fluctuaciones estadísticas que los métodos tradicionales de análisis no podrían realizar.

Creo fervientemente que en esta dirección de razonamiento, acabaremos por entender correctamente los mecanismos de disipación de energía en los procesos de fracturamiento, antes y en el mismo momento que se suceden los eventos dinámicos de fractura en un material. Esto a su vez nos ayudará a entender y posiblemente a predecir fenómenos a gran escala como son los terremotos.

Existe un área de investigación que creo deberá seguirse con mucho interés por medio del modelo de partículas. Esta es la propagación de ondas en medios aleatorios con fuerte desorden, que permitan simular fenómenos de localización de energía (entrampamiento) que es ubicuo en sismología y que está asociado al filtrado estratigráfico, observado en exploración sísmica, y al teorema de equipartición, observado en sismología teórica que se representa por una función de transferencia de difusión.

Bibliografía

- Achenbach, J. D. *Wave Propagation in Elastic Solids*. North-Holland, Amsterdam, 1987.
- Aharony, A. *Fractal Growth*, en *Fractals and Disordered Systems*. A. Bunde & S. Havlin (Eds.), 177-199, Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- Allen, M. P. & D. J. Tildesley. *Computer Simulations of Liquids*, Oxford University Press, New York, 1987.
- Anderson, P. W. *Absence of diffusion in certain random lattices*. *Phys. Rev.* **109**, 1492-1505 (1958).
- Arbabi S. & M. Sahimi. *On three-dimensional elastic percolation network with bonding forces*. *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 2211-2216 (1990).
- Ashurst, W. T. & W. G. Hoover. *Microscopic fracture in the two-dimensional triangular lattice*. *Phys. Rev. B* **14**, 1465-1473 (1976).
- Baraniuk, R. G. & D. L. Jones. *A signal-dependent time-frequency representation: Optimal kernel design*, *IEEE Trans. Signal Processing*, **41**, 1589-1602 (1993).
- Bardhan, K. K., Chakrabarti, B. K. & Hansen, A (Eds.). *Nonlinearity and Breakdown in Soft Condensed Matter*. Lecture Notes in Physics **437**, Springer, Heidelberg, 1994.
- Barnes, A. E. *Instantaneous bandwidth and dominant frequency with applications to seismic reflection data*, *Geophys.* **58**, 419-428 (1993).
- Berglund, K. *Structural models of micropolar media*, en *Mechanics of Micropolar Media*, O. Brulin & R. Hsieh (Eds.), 35-86, World Scientific, Singapore, 1982.
- Bergman D. J. *Elastic moduli near percolation: Universal ratio and critical exponent*. *Phys. Rev. B* **31**, 1696-1698 (1985).
- Boal, D., U. Seifert & J. Shillcock. *Negative Poisson ratio in two-dimensional networks under tension*. *Phys. Rev. E* **48**, 4274-4283 (1993).
- Born, M., & K. Huang. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Clarendon Press, Oxford, England, 1956.
- Boudreaux-Bartels, G. *Time-frequency signal processing algorithms: Analysis and synthesis using Wigner distributions*. PhD thesis, Rice University, 1984.

- Brulin, O. *Linear micropolar media*, en *Mechanics of Micropolar Media*, O. Brulin & R. Hsieh (Eds.), 87-145, World Scientific, Singapore, 1982.
- Bueckner, H. F. *The propagation of cracks and the energy of elastic deformation*. *J. Appl. Mech.* **80**, 1225-1230 (1958).
- Chakrabarti, B. K., & L. G. Benguigui. *Statistical Physics of Fracture and Breakdown in Disordered Systems*. Clarendon Press, Oxford, England, 1997.
- Chandrasekhar, S. *Radiative Transfer*. Dover, New York, 1960.
- Chen J. D. *Pseudo-scale viscous fingering in porous media*. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1892-1895 (1985).
- Classen, T. A. & W. F. Mecklenbraüker. *The Wigner distribution: A tool for time-frequency signal analysis*, *Phillips J. Res.* **35**, 217-250, 276-300, 372-389, 1067-1072 (1980).
- Cosserat, E. & F. Cosserat. *Théorie des Corps Déformables*. Hermann, Paris, 1909.
- Cundall, A. & O. Strack. *A discrete numerical model for granular assemblies*, *Geotechnique* **29**, 47-65 (1979).
- Daw, M. S. & M. I. Baskes. *Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in Metals*. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1285-1288 (1983).
- Del Valle-García, R. & F. Sánchez-Sesma. *Wave scattering effects in elastic percolation models*, *Mol. Phys.* **100**, 3167- 3172 (2002).
- Del Valle-García, R. & F. Sánchez-Sesma. *Rayleigh waves modeling using an elastic lattice model*, *Geophys. Res. Lett.* **30**, 1866-1869 (2003).
- Del Valle-García, R. & L. Ramírez-Cruz. *Spectral attributes for attenuation analysis in a fractured carbonate reservoir*, *The Leading Edge*, October, 1038-1041 (2002).
- Dulancy, E. N. & W. F. Brace. *Velocity behavior of a growing crack*. *J. Appl. Phys.* **31**, 2233-2266, (1960).
- Duxbury P. M. & Y. S. Li. *Scaling theory and fluctuations of the strength of composites*, en *Random Media and Composites*, R. V. Kohn & G. W. Milton (Eds.), 115-148, SIAM, Philadelphia (1989).
- Eringen, A. C. *Theory of micropolar elasticity*, en *Fracture: An Advanced Treatise 2: Mathematical Fundamentals*, H. Liebowitz (Ed.), 621-729, Academic Press, New York, 1968.
- Eringen, A. C. *Microcontinuum Field Theories: Foundations and Solids*. Springer-Verlag, New York, 1999.

- Eringen, A. C. & G. W. Hanson. *Nonlocal Continuum Field Theories*. Springer-Verlag, New York, 2002.
- Evans, K. E. & B. D. Caddock. *Microporous materials with negative Poisson's ratios. II. Mechanisms and interpretation*. J. Phys. D: Appl. Phys. **22**, 1883-1887 (1989).
- Ewals, H. L. & R.J. Wanhill, *Fracture Mechanics*, Edward Arnold, London, 1986.
- Ewing W.M., Jardetzky W.S. & F. Press. *Elastic Waves in Layered Media*, McGraw-Hill, New York, 1957.
- Fehler, M. & H. Sato. *Seismic Wave Propagation and Scattering in the Heterogeneous Earth*, AIP Press, New York, 1998.
- Fineberg, J. & M. Marder. *Instability in dynamic fracture*. Phys. Rep. **313**, 1-108 (1999).
- Finnis, M. W. & J. E. Sinclair. *A simple empirical N-body potential for transition metals*. Phil. Mag. A **50**, 45-55 (1984).
- Furuberg, L., J. Feder, A. Aharony & T. Jøssang. *Dynamics of invasion percolation*. Phys. Rev. Lett. **61**, 2117-2120 (1988).
- Freund, L. B. *Dynamic Fracture Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- Galileo, G. *Discorsi e Dimostrazione Matematiche*. Leyden, Netherlands, 1635.
- Garvin, W. W. *Exact transient solution of the buried line source problem*. Proc. R. Soc. London. **A234**, 528-541 (1956).
- Gazis, D. C., R. Herman & R. F. Wallis. *Surface elastic waves in cubic crystals*. Phys. Rev. **119**, 533-544 (1960).
- Gordon, J. E. *The New Science of Strong Materials or Why You Don't Fall Through the Floor*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1976.
- Gould, P. L. *Introduction to Linear Elasticity*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- Gould, H. & J. Tobochnik. *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems, Part 1*, Addison-Wesley, Reading, 1988.
- Griffith, A. A. *The phenomena of rupture and flow in solids*; Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A, **221**, 163-198. (1920).
- Gross, S. P. *Dynamics of Fast Fracture*. PhD thesis, University of Texas, Austin, 1995.

- Hailo, J. M. *Molecular Dynamics Simulations: Elementary Methods*, John Wiley & Sons, New York, 1992.
- Hauch J. A. *Dynamic Fracture in Brittle Materials*. PhD thesis, University of Texas, Austin, 1998.
- Helba A., M. Sahimi, L. Scriven & H. Davis. *Percolation theory of two-phase relative permeability*. SPERE, 123-132 (1992).
- Herrmann, H. J., & S. Roux (Eds.). *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media*. North-Holland, Amsterdam, Netherlands, 1990.
- Hoover, W. G. *Computational Statistical Mechanics*. Elsevier Science, Amsterdam, Netherlands, 1991.
- Hoover, W. G., W. T. Ashurst & R. J. Young. *Two-dimensional computer studies of crystal stability and fluid viscosity*, J. Chem. Phys. **60**, 4043-4047 (1974).
- Hosken, J. & R. Kopelman. *Percolation and cluster distribution I: Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*. Phys. Rev. B **14**, 3438-3445 (1976).
- Inglis, C.E. *Stresses in a plate due to the presence of cracks and sharp corners*, *Transactions of the Royal Institute of Naval Architectes*, **55**, 219-241 (1913).
- Irwin, G. R. *Fracture dynamics*. Fracturing in Metals, ASM Cleveland, 146-166 (1948).
- Irwin, G. R. *Fracture mechanics*. En *Structural Mechanics: Proceedings of the First Symposium on Naval Structural Mechanics*, Goodier, J. N. & J. N. Hoff (Eds), Pergamon Press, New York, 1960.
- Ishimaru, A. *Wave Propagation and Scattering in Random Media, Vol. I,II*. Academic Press, New York, 1978.
- Jerauld G., J. Hatfield, L. Scriven & H. T. Davis. *Percolation and conduction on voronoi and triangular networks: A case study in topological disorder*. J. Phys. C: Solid State Phys. **17**, 1519-1529 (1984).
- Kanninen, M. F. & C. H. Popelar. *Advanced Fracture Mechanics*. Oxford University Press, New York, 1985.
- Kantor Y. & I. Webman. *Elastic properties of random percolating systems*. Phys. Rev. Lett. **52**, 1891-1894 (1984).
- Keating, P.N. *Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the diamond structure*. Phys. Rev. **145**, 637-645 (1966a).

- Keating, P. N. *Relationship between the macroscopic and microscopic theory of crystal elasticity I: Primitive crystals*. Phys. Rev. **152**, 774-779 (1966b).
- Kirkpatrick, S. *Percolation and conduction*. Rev. Mod. Phys. **45**, 574-588 (1973).
- Kirkwood, J. G. *Skeletal modes of vibration of long chain molecules*. J. Chem. Phys. **7**, 506-512 (1939).
- Kitagawa, H., T., Aijara & Y. Kawazoe (Eds.). *Mesoscopic Dynamics of Fracture: Computational Materials Design*. Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- Landau, L. D. & E. M. Lifshitz. *Theory of Elasticity*. Course of Theoretical Physics 7. Pergamon Press. Oxford, 1986.
- Lawn, B. *Fracture in Brittle Solids*. Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- Lawn, B. R. & T. R. Wilshaw. *Fracture of Brittle Solids*, Cambridge University Press, Cambridge, 1975.
- Lemieux, M. A., P. Breton & A. S. Tremblay. *Unified approach to numerical transfer matrix method for disordered systems: Applications to mixed crystals and to elasticity percolation*. J. Physique Lett. **46**, L1-L7 (1985).
- Leath, P. L. *Cluster size and boundary distribution near percolation threshold*. Phys. Rev. B **14**, 5046-5055 (1976).
- Louis E., F. Guinea & F. Flores. *The Fractal Nature of Fracture*, en Fractals in Physics. L. Pietronero & E. Tosatti (Eds.), 177-180, Elsevier, Amsterdam, 1986.
- Louis, E. & F. Guinea. *The Fractal Nature of Fracture*. Europhys. Lett. **3**, 871-877 (1987).
- Malvern, L. E. *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Prentice-Hall, New Jersey, 1969.
- Marder, M. & J. Fineberg. *How things break*. Physics Today, 24-29 (1996).
- Martín, T., P. Español., M. Rubio & I. Zúñiga. *Dynamic fracture in a discrete model of a brittle elastic solid*, Phys. Rev. E **61**, 6120-6131 (2000).
- Maugin, G. A. *The Thermomechanics of Plasticity and Fracture*, Cambridge Text in Applied Mathematics 6, Cambridge University Press, New York, 1992.
- McClintock, F. A. & A. S. Argon. *Mechanical Behavior of Materials*. Addison-Wesley, New York, 1966.
- Meakin, P. *A simple model for elastic fracture in thin films*. Thin Solid Films **151**, 165-190 (1987).

- Meakin P., G. Li, L. M. Sander, E. Louis & F. Guinea. *A simple two-dimensional model for crack propagation*, J. Phys. A: Math. Gen. **22**, 1393-1403 (1989).
- Mora, P. *Seismic modeling using the phononic lattice solid method*. 60th Ann. Internat. Mtg., Soc. Expl. Geophys., Expanded Abstracts., 23-27 (1990).
- Mora, P., & D. Place. *A lattice solid model for the nonlinear dynamics of earthquakes*, Int. J. Mod. Phys. C **4**, 1059-1074 (1993).
- Mott, N. F. *Brittle fracture in mild steel plates*, Eng. **165**, 16-23 (1948).
- Muskhelishvili, N. I. *Some Basic Problems of the Mathematical Theory of Elasticity*. Groningen, Netherlands, 1953.
- Nakamura, T., & D. M. Parks. *Three-dimensional stress field near the crack front of a thin elastic plate*. J. Appl. Mech. **55**, 805-813. (1988).
- Nihei, K., N. Cook & L. Johnson. *Modeling elastic waves in fractured rock with the Kirchhoff method*. Proceeding of the 32nd U.S. Symposium on Rock Mechanics, en Rock Mechanics as a Multidisciplinary Science. J. Roegiers (Ed.), 407-413, Balkema, Rotterdam (1991).
- Nowacki, W. *Theory of Micropolar Elasticity*. Springer-Verlag, New York, 1970.
- Oda, M. *A theory for coupled stress and fluid flow analysis in jointed rock masses*, en Large Deformations of Solids, Physical Basis and Mathematical Modelling. J. Gittus et al. (Eds.), 349-373, Elsevier, London (1986).
- Orowan, E. O. *Fundamentals of brittle behavior of metals*, en Fatigue and Fracture of Metals, W. M. Murray (Ed.), 139-158, Wiley, New York (1950).
- Ostoja-Starzewski, M., Y. Sheng & K. Alzebdeh. *Spring network models in elasticity and fracture of composites and polycrystals*, Comput. Mater. Sci. **7**, 82-93 (1996).
- Paterson, L. *Serrated fracture growth with branching*. Proceeding of the 29th U.S. on Rock Mechanics, en Key Questions in Rock Mechanics. P. Cundall (Ed.), 351-358, Balkema, Rotterdam (1989).
- Place, D. & P. Mora. *Numerical simulation of localization phenomena in a fault zone*, Pure Appl. Geophys. **157**, 1821-1845 (2000).
- Rafii-Tabar, H. *Modelling the nanoscale phenomena in condensed matter physics via computer-based numerical simulations*, Phys. Rep. **325**, 239-310 (2000).

Ramírez-Cruz, L., R. Del Valle-García, J. Urrutia-Fucugauchi & F. Sánchez-Sesma. *Estimating the seismic attenuation in a fractured oil reservoir in northeastern Mexico via time-frequency analysis*, sometido a J. Appl. Geophys. (2003).

Rapaport, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

Rice, J. R. *Mathematical analysis in the mechanics of fracture*, en Fracture: An Advanced Treatise 2, H. Liebowitz (Ed.), 191-311, Academic Press, New York, 1968.

Roux, S. & E. Guyon. *Mechanical percolation a small beam lattice study*. J. Physique Lett. **46**, L999-L1004 (1985).

Ruffino, E., & P. P. Delsanto. *Scattering of ultrasonic waves by void inclusions*, J. Acoust. Soc. Am. **108**(4), 1941-1945 (2000).

Sahimi, M. *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*. VCH, Weinheim, 1995.

Sahimi, M. *Non-linear and non-local transport process in heterogeneous media: form long-range correlated percolation to fracture and materials breakdown*. Phys. Rep. **306**, 213-395 (1998).

Saltzer, S. D. & D. D. Pollard. *Distinct element modeling of structures formed in sedimentary overburden by extensional reactivation of basement normal faults*, Tectonics **11**, 165-174 (1992).

Sanz-Serna, J. M. & M. P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman & Hall, London, 1994.

Schlick, T. *Molecular Modeling and Simulation: An interdisciplinary Guide*, Springer, New York, 2002.

Schwartz, L., D. Johnson & S. Feng. *Vibrational modes in granular materials*. Phys. Rev. Lett. **52**, 831-834 (1984).

Sih, G. C. & H. Liebowitz. *Mathematical theories of brittle fracture*, en Fracture: An Advanced Treatise 2, H. Liebowitz (Ed.), 67-190, Academic Press, New York, 1968.

Sheng, P. *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena*, Academic Press, New York, 1995.

Shmuely, M. & Z. S. Alterman. *Crack propagation analysis by finite differences*, Trans. ASME, 902-908 (1973).

Sneddon, I. N. *The distribution of stress in the neighborhood of a crack in an elastic solid*. Proc. Royal Soc. London **187**, 229-260 (1946).

- Sokolnikoff, S. *Mathematical Theory of Elasticity*, McGraw-Hill, New York, 1956.
- Soll, W., L. Ferrand & M. Celia. *An enhanced percolation model for the capillary pressure-saturation relation*, en *Computational Methods in Water Resources I: Modeling Surface and Sub-surface Flows*. M. Celia et al. (Ed.), 165-170, Elsevier, Amsterdam (1988).
- Starzak, M. E. *Mathematical Methods in Chemistry and Physics*. Plenum Press, New York, 1989.
- Stockl, H. & F. Aver. *Dynamic behavior of a tensile crack: Finite difference simulation of fracture experiments*. *Int. J. Fracture* **12**, 345-358 (1976).
- Strang, G. & G. Fix. *An Analysis of the Finite element Method*. Prentice-Hall, New Jersey, 1973.
- Stroh, A. N. *A simple model of a propagating crack*, *J. Mech. Phys. Solids* **8**, 119-123 (1960).
- Takayasu H. *A deterministic model of fracture*, *Prog. Theor. Phys.* **74**, 1343-1345 (1985).
- Timoshenko, S. P. & J. N. Goodier, *Theory of Elasticity*, McGraw-Hill, New York, 1970.
- Toomey, A. & C. J. Bean. *Numerical simulation of seismic waves using a discrete particle scheme*, *Gcophys. J. Int.* **141**, 595-604 (2000).
- Turley, J. & G. Sincs. *Anisotropic behaviour of the compliance and stiffness coefficients for cubic materials*. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **4** 1731-1736 (1971).
- Ursenbach, C. P. *Simulation of elastic moduli of porous media*, 71st Ann. Internat. Mtg., Soc. Expl. Geophys., Expanded Abstracts., 1704-1707 (2001).
- Van Rossum, M. & T. Nieuwenhuizen. *Multiple scattering of classical waves: from microscopy to mesoscopy and diffusion*. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 313-371 (1999).
- Verlet, L. *Computer experiments on classical fluids: I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules*. *Phys. Rev.* **159**, 98-103 (1967).
- Wang, J. *The bond-bending model in three dimensions*. *J. Phys. A: Math. Gen.* **22**, L291-L295 (1989).
- Westergaard, H. M. *Bearing pressures and cracks*. *J. Appl. Mech.* **6**, 49-53 (1939).
- Wilkinson, D. & J. F. Willemsen. *Invasion percolation*. *J. Phys. A* **16**, 3365-3373 (1983).

Yan, H., G. Li & L. M. Sander. *Fracture growth in 2D elastic networks with Born model*. Europhys. Lett. **10**, 7-13 (1989).

Yoffe, E. H. *The moving Griffith crack*. Phil. Mag. **42**, 739-750 (1951).

Ziegler, F. *Mechanics of Solids and Fluids*. Springer-Verlag, New York, 1991.

Ziff, R. M., P. T. Cummings, & G. Stell. *A New approach to invasion percolation*. J. Phys. A **17**, 3009-3016 (1984).

Apéndice A

Derivando las Ecuaciones de Onda a Partir de Partículas y Resortes

Considere una línea con masas idénticas conectadas por resortes como se ilustra en la Fig. A1.

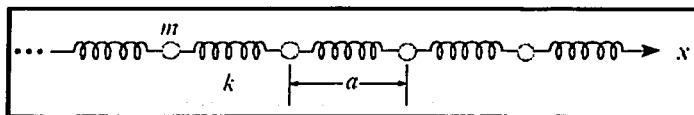


Figura. A1

Todas las partículas tienen una masa m , los resortes tienen una constante elástica k y distancia de equilibrio a . Sólo se permite movimiento en la dirección horizontal. Es decir movimiento longitudinal. Numerando las masas $1, 2, 3, \dots, p, \dots, N$, las posiciones de equilibrio son $x = a, 2a, 3a, \dots, pa, \dots, Na$. Para una partícula p en posición x_p , tenemos los desplazamientos:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= x_1 - a \\ &\vdots \\ \psi_p &= x_p - pa \end{aligned} \quad (A1)$$

La fuerza en la partícula p es: El resorte a la izquierda es estirado por $\psi_p - \psi_{p-1}$, por lo que ejerce una fuerza en p de $-k(\psi_p - \psi_{p-1})$. De la misma manera (véase Fig. A2) el resorte de la derecha ejerce en p la fuerza $+k(\psi_{p+1} - \psi_p)$. La ecuación de movimiento para la partícula p es por lo tanto $F = m \frac{d^2 x_p}{dt^2} = m \frac{d^2 \psi_p}{dt^2}$. Es decir,

$$m \frac{d^2 \psi_p}{dt^2} = -k(\psi_p - \psi_{p-1}) + k(\psi_{p+1} - \psi_p) = k\psi_{p-1} + k\psi_{p+1} - 2\psi_p \quad (A2)$$

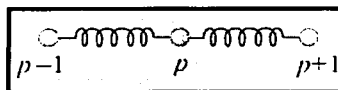


Figura A2

Es claro ver que hay N ecuaciones acopladas, una para cada partícula. Lo mismo se puede hacer para movimientos transversales. Considere partículas con una tensión constante T , como se observa en la Fig. A3.

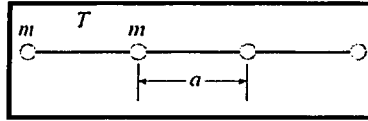


Figura A3

Cuando el resorte es jalado verticalmente (como en una guitarra), la partícula p se deforma como lo muestra la siguiente Fig. A4:

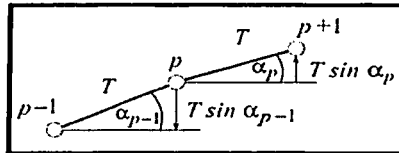


Figura A4

La fuerza hacia abajo en p es $-T \sin \alpha_{p-1}$ y la fuerza hacia arriba es $+T \sin \alpha_p$. Observe que $\sin \alpha_{p-1} = \frac{\varphi_p - \varphi_{p-1}}{a}$, donde φ_p son los desplazamientos verticales. La ecuación de movimiento en este caso es:

$$m \frac{d^2 \varphi_p}{dt^2} = -\frac{T}{a} (\varphi_p - \varphi_{p-1}) + \frac{T}{a} (\varphi_{p+1} - \varphi_p) \quad (A3)$$

Esta ecuación es similar a (A2) pero k es ahora T/a .

Ahora bien, para movimientos transversales o longitudinales, se puede escribir el límite continuo. Dado el espaciamiento entre partículas $a = \Delta x$, permita $\varphi_p - \varphi_{p-1} = \Delta \varphi_p$. Entonces la ecuación de movimiento anterior es:

$$m \frac{d^2 \varphi_p}{dt^2} = -\frac{T}{\Delta x} \Delta \varphi_p + \frac{T}{\Delta x} \Delta \varphi_{p+1}, \quad (A4)$$

6

$$m \frac{d^2 \varphi_p}{dt^2} = T \left[\frac{\Delta \varphi_{p+1}}{\Delta x} - \frac{\Delta \varphi_p}{\Delta x} \right] \quad (A5)$$

Hasta ahora, φ_p ha sido función solamente del tiempo t , con un valor distinto para cada p . Permita ahora el límite $\Delta x \rightarrow 0$. Por lo que $\varphi_p(t)$ se sustituye por $\varphi_p(t, x)$. Entonces tenemos:

$$\left[\frac{\Delta \varphi_{p+\Delta x}}{\Delta x} - \frac{\Delta \varphi_p}{\Delta x} \right] \rightarrow \Delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_p, \quad (\text{A6})$$

es decir, $(\partial \varphi / \partial x)$ evaluada en la posición p , atendiendo al límite $d^2 \varphi_p / dt^2 \rightarrow (\partial^2 \varphi / \partial t^2)_p$. Dividendo la parte izquierda de la ecuación (A5) por a y la parte derecha por Δx (recordando que $\Delta x = a$), además permita que $\mu = m/a$, es decir μ es la masa por unidad de longitud, entonces tenemos:

$$\mu \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right)_p = T \frac{\Delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_p}{\Delta x}. \quad (\text{A7})$$

Permita que $\Delta x \rightarrow 0$, por lo que p es una posición arbitraria en la línea continua y se obtiene:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \frac{T}{\mu} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}. \quad (\text{A8})$$

Estos son movimientos transversales, es decir $\varphi(t, x)$ son los desplazamientos verticales en la posición x . Para movimientos longitudinales, el análisis análogo nos da:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{ka^2}{m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (\text{A9})$$

Las ecuaciones (A8) y (A9) son las ecuaciones de onda transversal y longitudinal respectivamente. Las velocidades transversal y longitudinal, respectivamente v_{\perp} , v_{\parallel} son:

$$v_{\perp} = \pm \sqrt{\frac{T}{\mu}} \quad \text{y} \quad v_{\parallel} = \pm a \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (\text{A10})$$

Apéndice B

Modelo Discreto de las Ecuaciones Elásticas

La ecuación de Navier (1.20), se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = c_t \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + (c_l^2 - c_t^2) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u})(\mathbf{r}, t), \quad (\text{B1})$$

donde, como antes, c_l es la velocidad longitudinal y c_t es la velocidad transversal del material relacionadas al modulo de Young E y a la relación de Poisson ν por medio de:

$$c_l = \sqrt{\frac{E(1-\nu)}{\rho(1+\nu)(1-2\nu)}}, \quad (\text{B2})$$

$$c_t = \sqrt{\frac{E}{2\rho(1+\nu)}}. \quad (\text{B3})$$

La ecuación (B1) puede convertirse en un sistema discreto por medio de un procedimiento general que permite discretizar ecuaciones diferenciales parciales para retículas arbitrarias. Martín *et al.* (2000) proponen un método de optimización para dicho procedimiento y deducen que el modelo de Born (1954) es la versión discreta de la ecuación (B1). Este procedimiento se reproduce a continuación.

Permita que $f(\mathbf{r})$ sea un campo escalar y considere una muestra de M puntos distribuidos arbitrariamente en la vecindad del punto \mathbf{r}_0 con posiciones \mathbf{r}_j . El valor del campo escalar en cada uno de estos puntos se denota por $f_j = f(\mathbf{r}_j)$. Para un problema de optimización, se espera que a partir del conocimiento de f_j y \mathbf{r}_j , cual es la mejor estimación de las derivadas de f en el punto \mathbf{r}_0 . La solución se obtiene encontrando el mejor paraboloides que ajuste todos los puntos y que contenga a \mathbf{r}_0 . La ecuación del paraboloides es

$$P(\mathbf{r}) = f_0 + \mathbf{A} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \frac{1}{2} \mathbf{B} : (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (\text{B4})$$

La expansión en series de Taylor de f alrededor de \mathbf{r}_0 muestra que \mathbf{A} es una aproximación precisamente del gradiente de f en \mathbf{r}_0 , y que \mathbf{B} es una aproximación de la matriz de segundas derivadas. La función de optimización es:

$$\phi(\mathbf{A}, \mathbf{B}) \equiv \sum_{j=1}^M [P(\mathbf{r}_j) - f_j]^2$$

$$= \sum_{j=1}^M \left(f_0 - f_j + \mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0) + \frac{1}{2} \mathbf{B} : (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0) \right)^2 \quad (\text{B5})$$

Minimizando ϕ con respecto a \mathbf{B} y \mathbf{A} se obtiene el paraboloide que mejor ajusta los puntos f_j y \mathbf{r}_j :

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{A}} = 2 \left[-\mathbf{F}_1 + \mathbf{R}_2 \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{2} \mathbf{R}_3 : \mathbf{B} \right] = 0$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{B}} = \left[-\mathbf{F}_2 + \mathbf{R}_3 \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{2} \mathbf{R}_4 : \mathbf{B} \right] = 0 \quad (\text{B6})$$

donde se han definido

$$\mathbf{F}_1 \equiv \sum_{j=1}^M (f_j - f_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)$$

$$\mathbf{F}_2 \equiv \sum_{j=1}^M (f_j - f_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0) \quad (\text{B7})$$

que contienen información de la función en la vecindad de \mathbf{r}_0 , y

$$\mathbf{R}_2 \equiv \sum_{j=1}^M (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)$$

$$\mathbf{R}_3 \equiv \sum_{j=1}^M (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0) \quad (\text{B8})$$

$$\mathbf{R}_4 \equiv \sum_{j=1}^M (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)$$

que contienen información topológica. Los subíndices en las \mathbf{F} 's y en las \mathbf{R} 's son el orden de la cantidad tensorial en cuestión. La condición mínima significa que:

$$\mathbf{R}_2 \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{2} \mathbf{R}_3 : \mathbf{B} = \mathbf{F}_1$$

$$\mathbf{R}_3 \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{2} \mathbf{R}_4 : \mathbf{B} = \mathbf{F}_2 \quad (\text{B9})$$

Este es un sistema de ecuaciones lineales para los desconocidos **A** y **B**. Para un sistema bidimensional, $D = 2$, en \mathbf{R}^D , se tienen $D + D(D+1)/2$ incógnitas.

Para una retícula triangular, utilizando la relación únicamente de vecinos cercanos, y con un espaciamiento entre nodos a , se construyen las derivadas discretas. Considere los vectores:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= a(0,1) = -\mathbf{r}_4 \\ \mathbf{r}_2 &= a\left(\sqrt{\frac{3}{2}}, \frac{1}{2}\right) = -\mathbf{r}_5 \\ \mathbf{r}_3 &= a\left(\sqrt{\frac{3}{2}}, -\frac{1}{2}\right) = -\mathbf{r}_6 \end{aligned} \quad (\text{B10})$$

de tal suerte que

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_2 &= \sum_{i=1}^6 \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i = 2 \sum_{i=1}^3 \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i = 3a^2 \mathbf{1} \\ \mathbf{R}_3 &= \sum_{i=1}^6 \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i = \sum_{i=1}^3 \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i + \sum_{i=4}^6 \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i = 0 \\ \mathbf{R}_4 &= \sum_{i=1}^6 \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i = 2 \sum_{i=1}^3 \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i \end{aligned} \quad (\text{B11})$$

El tensor de cuarto orden es simétrico para todos sus índices por lo que se consideran sólo $R^{1111}, R^{1112}, R^{1222}, R^{2222}$. El resultado se puede expresar como:

$$\mathbf{R}^{\mu\nu\sigma\gamma} = \frac{3}{4} a^4 \left[\delta^{\mu\nu} \delta^{\sigma\gamma} + \delta^{\mu\sigma} \delta^{\nu\gamma} + \delta^{\mu\gamma} \delta^{\nu\sigma} \right] \quad (\text{B12})$$

Insertando (B11) y (B12) en (B9) se obtiene:

$$\begin{aligned} 3a^2 \mathbf{A} &= \mathbf{F}_1 \\ \frac{3}{8} a^4 [\mathbf{1} \text{tr} \mathbf{B} + 2\mathbf{B}] &= \mathbf{F}_2 \end{aligned} \quad (\text{B13})$$

donde

$$\text{tr} \mathbf{B} = \frac{2}{3a^4} \text{tr} \mathbf{F}_2 \quad (\text{B14})$$

por lo que

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{1}{3a^2} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{B} &= \frac{4}{3a^4} \left[\mathbf{F}_2 - \frac{1}{4} (\text{tr } \mathbf{F}_2) \mathbf{I} \right] \end{aligned} \quad (\text{B15})$$

Expandiendo estas expresiones:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{1}{3} \sum_{j=1}^6 \frac{f_j - f_0}{a} \hat{\mathbf{r}}_j^0 \\ \mathbf{B} &= \frac{4}{3} \sum_{j=1}^6 \frac{f_j - f_0}{a^2} \hat{\mathbf{r}}_j^0 \hat{\mathbf{r}}_j^0 - \frac{1}{3} \sum_{j=1}^6 \frac{f_j - f_0}{a^2} \mathbf{I} \end{aligned} \quad (\text{B16})$$

donde $\hat{\mathbf{r}}_j^0 = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0)/a$. El Laplaciano es la traza de \mathbf{B} , por lo que (B14) es:

$$\text{tr } \mathbf{B} = \frac{2}{3} \sum_{j=1}^6 \frac{f_j - f_0}{a^2} \quad (\text{B17})$$

Las expresiones anteriores representan las derivadas en forma tensorial. El gradiente de una función es un vector con los valores de esa función y los vectores posición de los puntos vecinos de la retícula. La matriz de las segundas derivadas es un tensor de segundo grado. De aquí se pueden formular las diferencias finitas de una retícula. Por ejemplo, para una retícula triangular, los vectores en (B10) nos permiten construir los gradientes:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_x^i &= (\partial_x f)_i = \frac{1}{6} \left(4 \frac{f_1 - f_4}{2a} + \frac{f_2 - f_3}{2a} + \frac{f_6 - f_5}{2a} \right) \\ \mathbf{A}_y^i &= (\partial_y f)_i = \frac{1}{2} \left(\frac{f_2 - f_6}{\sqrt{3}a} + \frac{f_3 - f_5}{\sqrt{3}a} \right) \end{aligned} \quad (\text{B18})$$

que son promedios pesados de las diferencias en las direcciones posibles de la retícula.

La ecuación (B1) para una retícula triangular de un nodo particular i es:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_i}{\partial t^2} = \left[\frac{c_T^2 - c_L^2/3}{a^2} \right] \sum_{j=1}^6 (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) + \left[\frac{4(c_L^2 - c_T^2)}{3a^2} \right] \sum_{j=1}^6 (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ji}^0 \hat{\mathbf{r}}_{ji}^0 \quad (\text{B19})$$

Esta es la ecuación discreta de una retícula triangular uniforme compuesta de partículas.

El modelo de Born (1954) que es utilizado para representar procesos de fracturamiento en sólidos, tiene una energía elástica (Hamiltoniano) representada por:

$$H = \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \sum_{ij} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ji}^0]^2 + \frac{1}{2} \beta \sum_{ij} [\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j]^2, \quad (\text{B20})$$

donde α y β son constantes del modelo. La fuerza en la partícula i se obtiene de la energía potencial anterior:

$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_i} = (\alpha - \beta) \sum_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \mathbf{r}_{ji}^0 \mathbf{r}_{ji}^0 + \frac{1}{2} \beta \sum_{ij} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i), \quad (\text{B21})$$

Por lo tanto, de la ecuación (B19), se obtienen los valores de α y β , a partir de las velocidades de propagación elásticas macroscópicas del sistema:

$$(\alpha - \beta) = \left[\frac{4(c_i^2 - c_r^2)}{3a^2} \right], \quad (\text{B22})$$

$$\beta = \left[\frac{c_r^2 - c_i^2/3}{a^2} \right]. \quad (\text{B23})$$

De (B22) y (B23) se tiene:

$$\alpha = \left[\frac{c_i^2 - c_r^2/3}{a^2} \right]. \quad (\text{B24})$$

A su vez, c_i y c_r se pueden obtener de los módulos elásticos, así descados, con (B2) y (B3). Nótese además que α y β pueden ser diferentes para cada enlace entre partículas. Por lo que se pueden representar modelos con heterogeneidad local y por lo tanto, también representar medios anisótropos y desordenados. La ecuación (B20) es una ecuación particular de la expresión generalizada de percolación elástica (Chakrabarti & Benguigui, 1997):

$$H = \frac{\alpha}{2} \sum_{ij} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}]^2 p_{ij} + \frac{\beta}{2} \sum_{ijk} (\delta\theta_{ijk})^2 p_{ij} p_{jk}, \quad (\text{B25})$$

donde θ_{ijk} es el ángulo en el sitio j formado entre los enlaces ij y jk , y p_{ij} se define como:

$$p_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & \text{cuando hay enlace} \\ 0 & \text{cuando no hay enlace} \end{cases}$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Para $p_{ij} = 0$, el enlace no existe y por lo tanto un micro-poro o fisura se crearía en el sistema. Para retículas bidimensionales (Sahimi, 1998), θ_{ijk} toma la forma:

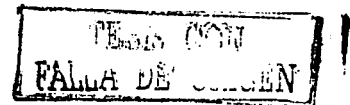
$$\delta\theta_{ijk} = (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \times \mathbf{r}_{ij} - (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k) \times \mathbf{r}_{ik} . \quad (\text{B26})$$

Por lo que la fuerza simplificada para el nodo i es:

$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_i} = \alpha \sum_j (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij} p_{ij} + \beta \sum_{ij} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) p_{ij} . \quad (\text{B27})$$

Finalmente, cabe mencionar que el Hamiltoniano de percolación elástica, aquí descrito, es utilizado para simular propagación de onda en medios porosos, así como efectos de difracción múltiple en el trabajo por Del Valle-García & Sánchez-Sesma (2002).

Mas detalles de la Física y de las aplicaciones de este modelo, refiérase a Herrmann & Roux (1990) y a Chakrabarti & Benguigui (1997).



Apéndice C

Medios Micropolares

Modelo de resorte

Existe una considerable cantidad de literatura sobre los medios micropolares (Eringen, 1968, 1999; Nowacki, 1970; Berglund, 1982; Brulin, 1982; Eringen & Hanson, 2002). El modelo de resorte micropolar también consiste de masas (partículas) sujetas a resortes (enlaces). Las partículas se consideran rígidas y esféricas con radio a y masa m , arregladas en una retícula tridimensional (cúbica en este caso) con una distancia d entre centro de masas. Se considerarán los tres tipos generales de resortes. Los resortes tipo 1 y 3 son resortes que conectan partículas cercanas vecinas. El tipo 2 conecta las segundas vecinas cercanas. La longitud natural y la constante del resorte del tipo β ($\beta = 1, 2, 3$) son h_β y k_β , respectivamente. El sistema es Cartesiano con componentes x_i ($i = 1, 2, 3$), por lo que cada masa está numerada por tres valores (k, l, m) . En equilibrio y en ausencia de fuerzas externas, las coordenadas de la partícula son $x_i^{(k,l,m)}$.

Las fuerzas de acción

Para obtener las ecuaciones diferenciales para el desplazamiento $u_i^{(k,l,m)}$ y rotación $\varphi_i^{(k,l,m)}$ del modelo discreto, se calculan la fuerza y el momento que actúan en la masa (k, l, m) por influencia de las partículas adyacentes. Primero se calcula la fuerza debida al resorte del tipo 1. Por lo que se consideran las masas (k, l, m) y $(k+1, l, m)$. La longitud del resorte en deformación cambia de $(d - 2a)$ a (l_1) donde (véase Fig. C1):

$$l_1 \approx \left\{ \left(d - 2a + u_1^{(k+1,l,m)} - u_1^{(k,l,m)} \right)^2 + \left(u_2^{(k+1,l,m)} - u_2^{(k,l,m)} - a(\varphi_3^{(k+1,l,m)} + \varphi_3^{(k,l,m)}) \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} + \left(u_3^{(k+1,l,m)} - u_3^{(k,l,m)} + a(\varphi_2^{(k+1,l,m)} + \varphi_2^{(k,l,m)}) \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (C.1)$$

Los cambios de longitud por términos del tipo $a(1 - \cos\varphi)$ son descartados dado que se suponen rotaciones pequeñas. La fuerza de acción es entonces calculada por:

$$F_i^{(1)(k+1,l,m)} = \frac{k_1(l_1 - h_1)}{l_1} \cdot c_i \quad (C.2)$$

donde

$$c_i = d - 2a + u_1^{(k+1,l,m)} - u_1^{(k,l,m)} \quad (C.3)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

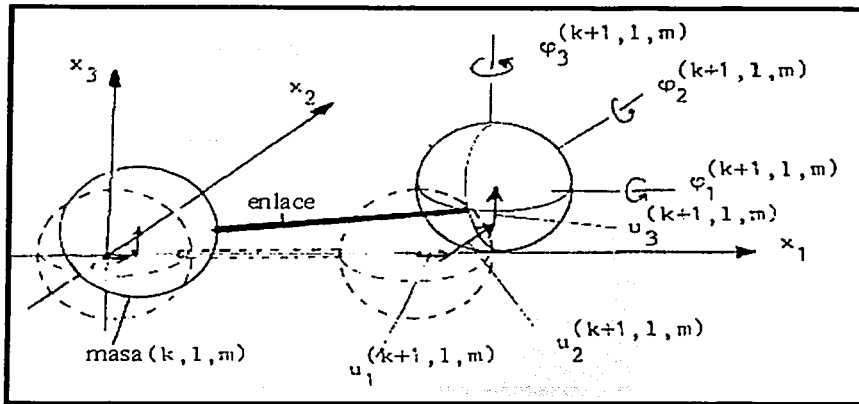


Figura C1. Cambio de dirección y longitud del resorte (enlace) del tipo 1 entre las masas (k, l, m) y (k+1, l, m).

$$c_2 = u_2^{(k+1, l, m)} - u_2^{(k, l, m)} - a(\varphi_3^{(k+1, l, m)} + \varphi_3^{(k, l, m)}) \quad (C.4)$$

$$c_3 = u_3^{(k+1, l, m)} - u_3^{(k, l, m)} + a(\varphi_2^{(k+1, l, m)} + \varphi_2^{(k, l, m)}) \quad (C.5)$$

Se puede expandir el término I_1^{-1} , dado que $\varphi_i^{(k, l, m)}$ y $u_i^{(k+1, l, m)} - u_i^{(k, l, m)}/(d-2a)$ son cantidades muy menores a la unidad,

$$I_1^{-1} = \frac{1}{c_1} \left[1 - \frac{1}{2} \left(u_2^{(k+1, l, m)} - u_2^{(k, l, m)} - a(\varphi_3^{(k+1, l, m)} + \varphi_3^{(k, l, m)}) \right)^2 + \frac{1}{c_1^2} \left(u_3^{(k+1, l, m)} - a(\varphi_2^{(k+1, l, m)} + \varphi_2^{(k, l, m)}) \right)^2 + \dots \right] \quad (C.6)$$

Sustituyendo las ecuaciones (C.3) y (C.6) en (C.2), ignorando órdenes cuadráticos y mayores, se obtiene:

$$F_1^{(1)(k+1, l, m)} = k_1 (d - 2a - h_1 + u_1^{(k+1, l, m)} - u_1^{(k, l, m)}) \quad (C.7)$$

Análogamente, con (C.4) y (C.6) en (C.2), se obtienen las fuerzas:

$$F_2^{(1)(k+1, l, m)} = k_1 \left(1 - \frac{h_1}{d-2a} \right) \left(u_2^{(k+1, l, m)} - u_2^{(k, l, m)} - a(\varphi_3^{(k+1, l, m)} + \varphi_3^{(k, l, m)}) \right) \quad (C.8)$$

similarmente,

$$\Gamma_3^{(1)(k+1,l,m)} = k_1 \left(1 - \frac{h_1}{d-2a} \right) \left(u_3^{(k+1,l,m)} - u_3^{(k,l,m)} + a(\varphi_2^{(k+1,l,m)} + \varphi_2^{(k,l,m)}) \right) \quad (C.9)$$

Por lo tanto, tomando en cuenta todos los vecinos cercanos para los resorte del tipo 1, la fuerza total en la dirección x_1 es:

$$\Gamma_1^{(k,l,m)} = k_1 \{ [u_1^{(k+1,l,m)} - 2u_1^{(k,l,m)} + u_1^{(k-1,l,m)}] + (1 - h_1/d) [u_1^{(k,l+1,m)} + u_1^{(k,l-1,m)} + u_1^{(k,l,m+1)} + u_1^{(k,l,m-1)} - 4u_1^{(k,l,m)}] + a(\varphi_3^{(k,l+1,m)} - \varphi_3^{(k,l-1,m)} - \varphi_2^{(k,l,m+1)} + \varphi_2^{(k,l,m-1)}) \} \quad (C.10)$$

Se puede obtener la fuerza debida a los resortes del tipo 2 análogamente al desarrollo anterior. Sólo para términos lineales se tiene:

$$\Gamma_1^{(2)(k+1,l+1,m)} = k_2 \left\{ \left(1 - \frac{h_2}{\sqrt{2}d-2a} \right) [d - \sqrt{2}a + u_1^{(k+1,l+1,m)} - u_1^{(k,l,m)}] + \frac{a}{\sqrt{2}} (\varphi_3^{(k+1,l+1,m)} + \varphi_3^{(k,l,m)}) \right\} + \frac{h_2}{2(\sqrt{2}d-2a)} (u_1^{(k+1,l+1,m)} - u_1^{(k,l,m)} - u_2^{(k+1,l+1,m)} - u_2^{(k,l,m)}) \quad (C.11)$$

$$\Gamma_2^{(2)(k+1,l+1,m)} = k_2 \left\{ \left(1 - \frac{h_2}{\sqrt{2}d-2a} \right) [d - \sqrt{2}a + u_2^{(k+1,l+1,m)} - u_2^{(k,l,m)}] - \frac{a}{\sqrt{2}} (\varphi_3^{(k+1,l+1,m)} + \varphi_3^{(k,l,m)}) \right\} + \frac{h_2}{2(\sqrt{2}d-2a)} (u_2^{(k+1,l+1,m)} - u_2^{(k,l,m)} + u_1^{(k+1,l+1,m)} - u_1^{(k,l,m)}) \quad (C.12)$$

$$\Gamma_3^{(2)(k+1,l+1,m)} = k_2 \left\{ \left(1 - \frac{h_2}{\sqrt{2}d-2a} \right) [u_3^{(k+1,l+1,m)} - u_3^{(k,l,m)}] + \frac{a}{\sqrt{2}} (\varphi_2^{(k+1,l+1,m)} + \varphi_2^{(k,l,m)} - \varphi_1^{(k+1,l+1,m)} - \varphi_1^{(k,l,m)}) \right\} \quad (C.13)$$

Las expresiones de la fuerza total para las masas (k, l, m) y $(k+1, l+1, m)$ se obtienen de las ecuaciones anteriores, tomando en cuenta los cambios de índices para las masas segundas vecinas cercanas: ...

La longitud de cada resorte del tipo 3, en estado sin deformación es

$$l_0 = \sqrt{d^2 - 4r^2} \quad (C.14)$$

La fuerza $F^{(3)(k+1,l,m)}$ se calcula de la misma manera que $F^{(1)(k+1,l,m)}$ y $F^{(2)(k+1,l,m)}$. Se obtienen las componentes de fuerza para el tercer tipo:

$$F_1^{(3)(k+1,l,m)} = 4k_3 \left[\frac{l_0}{d} (l_0 - h_3) + 1 - \frac{4a^2 h_3}{l_0 d^2} \right] (u_1^{(k+1,l,m)} - u_1^{(k,l,m)}) \quad (C.15)$$

$$F_2^{(3)(k+1,l,m)} = 2k_3 \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{4a^3}{d^2} + \frac{l_0}{d^2} (l_0 - h_3) + 1 - \frac{h_3}{l_0} \right] (u_2^{(k+1,l,m)} - u_2^{(k,l,m)}) \\ & - \left[\frac{2a^2}{d^2} + \frac{r l_0}{d} \left(1 - \frac{h_3}{l_0} \right) \right] (\varphi_3^{(k+1,l,m)} + \varphi_3^{(k,l,m)}) \end{aligned} \right\} \quad (C.16)$$

$$F_3^{(3)(k+1,l,m)} = 2k_3 \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{4a^3}{d^2} + \frac{l_0}{d^2} (l_0 - h_3) + 1 - \frac{h_3}{l_0} \right] (u_3^{(k+1,l,m)} - u_3^{(k,l,m)}) \\ & - \left[\frac{2a^2}{d^2} + \frac{r l_0}{d} \left(1 - \frac{h_3}{l_0} \right) \right] (\varphi_2^{(k+1,l,m)} + \varphi_2^{(k,l,m)}) \end{aligned} \right\} \quad (C.17)$$

La fuerza total es fácilmente deducida de las expresiones anteriores. A partir de las fuerzas totales, de los tres diferentes tipos de resortes, se construyen las ecuaciones diferenciales finitas que constituyen las deformaciones continuas del sistema:

$$m \frac{d^2 x_i^{(k,l,m)}}{dt^2} = m x_i^{(k,l,m)} = F_i^{(1)(k,l,m)} + F_i^{(2)(k,l,m)} + F_i^{(3)(k,l,m)} = F_i^{(k,l,m)} \quad (C.18)$$

Los momentos de masa (k, l, m)

Una vez conocidas las fuerzas totales de los tres resortes para un sistema en deformación, es natural pensar que esto causará la acción de momentos de masa (k, l, m). Para calcular los momentos sólo es necesario determinar las palancas de fuerza. Considerando el resorte tipo 1 entre las masas (k, l, m) y (k+1, l, m), el momento se calcula de:

$$M^{(1)(k+1,l,m)} = \mathbf{e} \times \mathbf{F}^{(1)(k+1,l,m)} \quad (C.19)$$

donde \mathbf{e} es un vector posición que va del centro de masa al punto del resorte. Por lo que la componente en x_3 es:

$$M_3^{(1)(k+1,l,m)} = \mathbf{e}_1 F_2^{(1)(k+1,l,m)} - \mathbf{e}_2 F_1^{(1)(k+1,l,m)} \quad (C.20)$$

Lo cual resulta en

$$M_3^{(1)(k+1, l, m)} = k_l a \left(1 - \frac{h_l}{d - 2a}\right) [u_2^{(k+1, l, m)} - u_2^{(k, l, m)} - a \varphi_3^{(k+1, l, m)} - (d-a) \varphi_3^{(k, l, m)}] \quad (C.21)$$

Similarmenete, para la componente x_3 del momento en (k, l, m) se tiene:

$$M_3^{(1)(k, l, m)} = k_l a \left(1 - \frac{h_l}{d - 2a}\right) [u_2^{(k+1, l, m)} - u_2^{(k-1, l, m)} - u_1^{(k, l+1, m)} + u_1^{(k, l-1, m)} - a(\varphi_3^{(k+1, l, m)} + \varphi_3^{(k-1, l, m)} + \varphi_3^{(k, l+1, m)} + \varphi_3^{(k, l-1, m)}) - 4(d-a) \varphi_3^{(k, l, m)}] \quad (C.22)$$

Las otras dos componentes, $M_1^{(1)(k, l, m)}$ y $M_2^{(1)(k, l, m)}$, se obtienen fácilmente de la permutación cíclica de los índices. El momento causado por el resorte tipo 2 es esencialmente igual a (C.22).

El momento para el tipo 3 se obtiene de:

$$M_3^{(3)(k+1, l, m)} = 2k_3 \left[\frac{2a^2}{d} + \frac{al_0}{d} \left(1 - \frac{h_3}{l_0}\right) \right] \{u_2^{(k+1, l, m)} - u_2^{(k, l, m)} - [a^2 + \frac{a^2 l_0}{d} \left(1 - \frac{h_3}{l_0}\right)] \varphi_3^{(k+1, l, m)} - [a^2 + \frac{al_0}{d} (d-a) \left(1 - \frac{h_3}{l_0}\right)] \varphi_3^{(k, l, m)}\} \quad (C.23)$$

Obsérvese de las ecuaciones (C.23) y (C.21) que los momentos dependen principalmente de las constantes de resorte y de la longitud natural.

Las ecuaciones diferenciales finitas que constituyen los momentos del sistema son:

$$J \frac{d^2 \varphi_i^{(k, l, m)}}{dt^2} = J \varphi_i^{(k, l, m)} = M_i^{(1)(k, l, m)} + M_i^{(2)(k, l, m)} + M_i^{(3)(k, l, m)} = M_i^{(k, l, m)} \quad (C.24)$$

donde J es el momento de inercia para la masa (k, l, m) .

Apéndice D

Modelo General Micro-Mecánico

El modelo micro-mecánico general que a continuación se presenta es basado y es una particularidad de la teoría micropolar que se presenta en apéndice C. Para representar dicho modelo elástico que permite anisotropía, se utiliza una retícula que contiene enlaces con elementos de fuerza central y doblamiento (véase Fig. 3.4). La retícula se construye a partir de celdas hexagonales, de tal manera que cada nodo tiene seis enlaces. Las fuerzas centrales son asignadas como α^n , mientras que las fuerzas de doblamiento son β^n , donde n es el índice para cada enlace, $n = 1, 2, \dots, 6$ (Fig. D1). Los vectores unitarios l^n y ángulos θ^n de los enlaces centrales α^n para $n = 1, 2, 3$ son:

$$\begin{array}{l}
 \theta^1 = 0 \quad l_1^1 = 1 \quad l_2^1 = 0 \\
 \theta^2 = 60 \quad l_1^2 = \frac{1}{2} \quad l_2^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \\
 \theta^3 = 120 \quad l_1^3 = -\frac{1}{2} \quad l_2^3 = \frac{\sqrt{3}}{2}
 \end{array} \quad (D1)$$

Para los otros resortes ($n = 4, 5, 6$), de acuerdo a los requerimientos de simetría, tienen las mismas propiedades respectivamente que para $n = 1, 2, 3$. Todos los enlaces tienen una longitud a , por lo que el área del hexágono es $A = 2\sqrt{3}a^2$. Cada enlace β actúa entre dos enlaces contiguos α para el mismo nodo. También, debido a los requerimientos de simetría, sólo tres de los enlaces β son independientes.

Se puede entonces pensar en tres tipos de modelo posibles por definir: (1) un modelo α ; (2) un modelo β ; y (3) un modelo $\alpha\beta$. A continuación se derivan los tres modelos y se confirma que el modelo general reduce al modelo elástico de retícula isótropo.

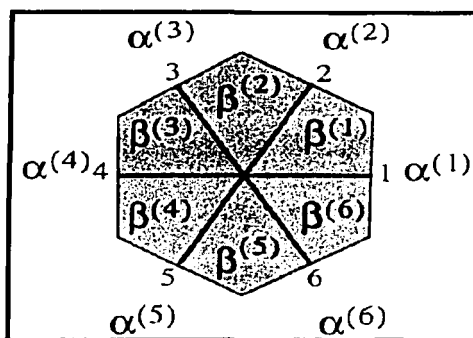


Figura D1. Celda unitaria de una red triangular: Las constantes normales del resorte son: $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6$ y $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5, \beta_6$ son las constantes angulares.

Interacciones de fuerza central: El modelo α

Se derivará la relación de las propiedades elásticas entre el modelo continuo y el discreto, a partir de la equivalencia de ambos modelos. Para el modelo continuo la energía elástica (deformación) E_c del hexágono es

$$E_c = \frac{A}{2} C_{ijkl}^{\alpha} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \quad (D2)$$

donde $C_{ij\mu}^{\alpha}$ es el tensor de rigidez de cuarto orden, debido al enlace α . El tensor lineal de deformación ε_{ij} es uniforme dentro de una celda unitaria.

Ahora permita que N sea la normal al enlace y T su tangencial, por lo que se tienen los desplazamientos normal y tangencial respectivamente, u_N^n y u_T^n . La fuerza P en enlace está relacionada a u_N^n por:

$$P^n = \alpha^n u_N^n \quad \text{donde} \quad u_N^n = l_j^n u_j^n \quad (D3)$$

por lo que la energía de deformación en el resorte es

$$E_c^n = \frac{1}{2} P_i^n u_i^n = \frac{a^2}{2} \alpha^n l_i^n l_j^n l_k^n l_l^n \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \quad (D4)$$

y la energía total para los seis enlaces α es:

TRABAJO CON
FALTA DE CALIDAD

$$E_e = \sum_{n=1}^6 E_e^n = \frac{a^2}{2} \sum_{n=1}^6 \alpha^n l_i^n l_j^n l_k^n l_l^n \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \quad (D5)$$

Comparando con la ecuación (D1), el tensor de rigidez (módulos elásticos) para el modelo α es:

$$C_{ijkl}^\alpha = \frac{1}{2\sqrt{3}} \sum_{n=1}^6 \alpha^n l_i^n l_j^n l_k^n l_l^n \quad (D6)$$

Interacciones angulares: El modelo β

Ahora consideramos una celda unitaria con seis enlaces β y se observa de la Fig. D2 que $\Delta\theta$ es el cambio en ángulo cuando un punto L se mueve a L' , es decir, entre l y l' . Esto es

$$l \times u = l \times l' = l \Delta\theta \quad (D7)$$

lo que permite obtener:

$$\Delta\theta = \frac{1}{a} \cdot l \times u = \frac{1}{a} \varepsilon_{kij} l_i u_j = \frac{1}{a} \varepsilon_{kij} \varepsilon_{jrp} l_r l_p \quad (D8)$$

donde ε_{kij} es el tensor de permutación y $i, j, p = 1, 2$.

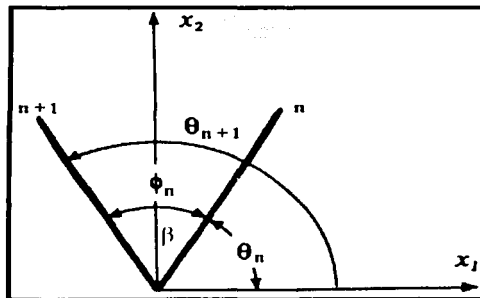


Figura D2. Los ángulos del modelo β .

El cambio de ángulo entre dos enlaces α contiguos se mide por $\Delta\phi = \Delta\theta^{n+1} - \Delta\theta^n$. Sustituyendo la ecuación (D7) en (D8), se obtiene la energía en β^n

$$E_e = \frac{1}{2} \beta^n \left\{ \epsilon_{kl} \epsilon_{jp} \left(l_i^{n+1} l_p^{n+1} - l_i^n l_p^n \right) \right\}^2, \quad (D9)$$

por lo que la energía total es

$$E_e = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^6 \beta^n \left\{ \begin{array}{l} \delta_{ik} l_p^n l_j^n l_r^n l_i^n - l_i^n l_j^n l_k^n l_r^n + \\ \delta_{ik} l_p^{n+1} l_j^{n+1} l_r^{n+1} l_i^{n+1} - l_i^{n+1} l_j^{n+1} l_k^{n+1} l_r^{n+1} - \\ 2\delta_{ik} l_p^n l_j^{n+1} l_r^{n+1} l_i^n + 2l_i^n l_j^{n+1} l_k^{n+1} l_r^n \end{array} \right\} \epsilon_{ik} \epsilon_{kl}. \quad (D10)$$

Para obtener los módulos elásticos, se tienen que satisfacer las simetrías existentes de los diferentes índices i y j , k y l , así com de ij y kl . Por lo que a partir de permutaciones se obtiene:

$$E_e = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^6 \left\{ \begin{array}{l} (\beta^n + \beta^{n-1}) \delta_{ik} l_p^n l_j^n l_r^n l_i^n - (\beta^n + \beta^{n-1}) l_i^n l_j^n l_k^n l_r^n - \\ \beta^n \delta_{ik} l_p^n l_j^{n+1} l_r^{n+1} l_i^n + \beta^n l_i^n l_j^{n+1} l_k^{n+1} l_r^n - \\ \beta^n \delta_{ik} l_p^n l_j^n l_r^{n+1} l_i^{n+1} + \beta^n l_i^{n+1} l_j^n l_k^n l_r^{n+1} \end{array} \right\} \epsilon_{ik} \epsilon_{kl}. \quad (D11)$$

Comparando esta expresión con la energía de una celda unitaria

$$E_e = \frac{A}{2} C_{ijkl}^{\beta} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}, \quad (D12)$$

las constantes elásticas del modelo son:

$$C_{ijkl}^{\beta} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \begin{array}{l} (\beta^n + \beta^{n-1}) \delta_{ik} l_p^n l_j^n l_r^n l_i^n - (\beta^n + \beta^{n-1}) l_i^n l_j^n l_k^n l_r^n - \\ \beta^n \delta_{ik} l_p^n l_j^{n+1} l_r^{n+1} l_i^n + \beta^n l_i^n l_j^{n+1} l_k^{n+1} l_r^n - \\ \beta^n \delta_{ik} l_p^n l_j^n l_r^{n+1} l_i^{n+1} + \beta^n l_i^{n+1} l_j^n l_k^n l_r^{n+1} \end{array} \right\}. \quad (D13)$$

El modelo general $\alpha - \beta$

Utilizando, por superposición las ecuaciones (D6) y (D13), nos permite construir el modelo general anisótropo $\alpha - \beta$, resultando en:

$$C_{ijkl} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \sum_{n=1}^6 \alpha^n l_i^n l_j^n l_k^n l_r^n \times \frac{1}{2\sqrt{3}a^2} \sum_{n=1}^6 \left\{ \begin{array}{l} (\beta^n + \beta^{n-1}) \delta_{ik} l_p^n l_j^n l_r^n l_i^n - (\beta^n + \beta^{n-1}) l_i^n l_j^n l_k^n l_r^n - \\ \beta^n \delta_{ik} l_p^n l_j^{n+1} l_r^{n+1} l_i^n + \beta^n l_i^n l_j^{n+1} l_k^{n+1} l_r^n - \\ \beta^n \delta_{ik} l_p^n l_j^n l_r^{n+1} l_i^{n+1} + \beta^n l_i^{n+1} l_j^n l_k^n l_r^{n+1} \end{array} \right\}$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

(D14)

Esta ecuación es la base de la representación de una red para materiales elásticos anisótropos y es la generalización del modelo de Kirkwood (1939) para un sólido isótropo.

El modelo isótropo de Kirkwood

Este modelo se obtiene haciendo todos los α^n y β^n idénticos, por lo que la ecuación anterior se simplifica a:

$$C_{ijkl} = \frac{\alpha}{2\sqrt{3}} \sum_{n=1}^6 I_i^n I_j^n I_k^n I_l^n \times \frac{\beta}{2\sqrt{3}a^2} \sum_{n=1}^6 \left\{ \begin{array}{l} 2\delta_{ik} I_p^n I_j^n I_l^n - 2I_i^n I_j^n I_k^n I_l^n - \\ \delta_{ik} I_p^n I_j^{n+1} I_l^{n+1} + I_i^n I_j^{n+1} I_k^{n+1} I_l^n - \\ \delta_{ik} I_p^n I_j^n I_l^{n+1} + I_i^{n+1} I_j^n I_k^n I_l^{n+1} \end{array} \right\}, \quad (D15)$$

donde fácilmente se obtiene

$$\begin{aligned} C_{1111} &= C_{2222} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{9}{4} \alpha + \frac{9}{4a^2} \beta \right) \\ C_{1122} &= C_{2211} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{3}{4} \alpha - \frac{9}{4a^2} \beta \right) \\ C_{1212} &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{3}{4} \alpha + \frac{3}{4a^2} \beta \right) \end{aligned} \quad (D16)$$

Con la siguiente condición

$$C_{1212} = \frac{1}{2} (C_{1111} - C_{1122}) \quad (D17)$$

Las constantes α y β están relacionadas a los módulos de compresibilidad y de corte por medio de:

$$\kappa = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{3}{2} \alpha \right) \quad \mu = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{3}{4} \alpha + \frac{9}{4a^2} \beta \right) \quad (D18)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Se observa que la constante β , la fuerza de doblamiento, no tiene influencia en κ . Es decir, el módulo volumétrico es meramente influenciado por esfuerzos hidrostáticos. La relación de Poisson es:

$$\nu = \frac{\kappa - \mu}{\kappa + \mu} \quad (D19)$$

En vista de (C18), la relación de Poisson es

$$\nu = \frac{\alpha a^2 - 3\beta}{3\alpha a^2 + 3\beta} \quad (D20)$$

De esta ecuación, es claro ver el rango permisible que puede tomar la relación de Poisson:

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{1}{3} \quad \text{si } \frac{\beta}{\alpha} \rightarrow 0 \quad \text{modelo } \alpha \\ \nu &= -1 \quad \text{si } \frac{\beta}{\alpha} \rightarrow \infty \quad \text{modelo } \beta \end{aligned} \quad (D21)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Apéndice E

Productividad Científica

Se presentaron varios trabajos en congresos nacionales e internacionales. Así como los siguientes publicaciones internacionales.

Rayleigh waves modeling using an elastic lattice model

Raúl del Valle-García

Instituto Mexicano del Petróleo, Mexico

Francisco J. Sánchez-Sesma

Instituto de Ingeniería, UNAM, Mexico

Received 23 April 2003; revised 24 June 2003; accepted 24 July 2003; published 29 August 2003.

[1] The elastic lattice (percolation) model, used in statistical physics studies, has been quite successful in simulating dynamic fracture phenomena, including their associated acoustic emission. This discrete model is suitable for representing disordered media such as rocks. Thus, motivated by its advantages to deal with discontinuous realistic media, in comparison to the continuum theory, we performed simulations of elastic wave propagation by using a vector percolating network that includes central and bonding force constants allowing local microscopic variation of the Poisson's ratio. The validity of the proposed approach is tested by comparing our numerical results with those from Garvin's exact analytical solution for a buried dilatational line source in a half space. In the free-surface response the Rayleigh waves play a prominent role. **INDEX TERMS:**

3230 Mathematical Geophysics: Numerical solutions; 5112 Physical Properties of Rocks: Microstructure; 5102 Physical Properties of Rocks: Acoustic properties; 7203 Seismology: Body wave propagation; 7255 Seismology: Surface waves and free oscillations. **Citation:** del Valle-García, R., and F. J. Sánchez-Sesma, Rayleigh waves modeling using an elastic lattice model, *Geophys. Res. Lett.*, 30(16), 1866, doi:10.1029/2003GL017600, 2003.

1. Introduction

[2] Natural rock materials are usually heterogeneous at various scales and have a large number of flaws with various sizes, shapes and orientations. These complicated objects may be either solid or fluid inclusions, smooth voids or cracks. As a result, the elastic lattice approach has been proposed, which basically attempts to generate fracturing and deformation processes within a disordered medium when sufficient external stress is applied [Herrmann and Roux, 1990; Sahimi, 1995; Chakrabarti and Benguigui, 1997]. This approach has been used to construct locally heterogeneous materials and is appropriate for representing mesoscopic media, i.e. solids which are microscopically heterogeneous but macroscopically homogeneous. Moreover, they can be used to represent rocks with a high degree of disorder and to construct synthetic percolating structures as well as to simulate locally inhomogeneous materials with defects (pores, cracks and inclusions).

[3] Our aim is to show that the elastic lattice (percolation) model allows to simulate elastic wave propagation in complex rocks. This approach offers an accurate and unconditionally stable way to compute seismic waves in

highly disordered media. The effects of microscopic characteristics such as cracks and pores can be directly modeled as well. Furthermore, the elastic percolation network has been recently used with success to account for velocity variations and body wave scattering effects from voids or inclusions by changing the porosity in the model [Del Valle-García and Sánchez-Sesma, 2002]. These results correspond to the complete range of porous solids, from zero up to the critical porosity or percolation threshold, and complement previous work [Ruffino and Delcanto, 2000; Ursenbach, 2001]. Thus, our endeavor here is to explore to which extent the elastic percolation network reproduces classical elastic solutions, in order to use it, with confidence, in the study of wave phenomena in porous and cracked rocks. We believe our computations close the gap between two apparently distant approaches. In the following, a relatively simple network model is described [Kantor and Webman, 1984], which is usually used for the dynamic fracturing of disordered solids. This generic model is employed here for simulating wave propagation phenomena in elastic solids with a free surface, in order to allow for Rayleigh waves to emerge. The solid is assembled by a network in which each bond represents a small portion of the material. From classical mechanics, this network requires particles and springs (bonds), which follow the laws of linear elasticity. Commonly, heterogeneities may be introduced in the values of the particle densities, in the length (or diameter) of each particle, or in the strength of the bonds. As a result, one of the great advantages of this approach is that any kind of disorder may be incorporated and its effects on dynamical processes, such as wave and fracture propagation may be evaluated. In order to validate the results, we have compared the simulation outcomes with those from the very well known Garvin's [1956] exact solution by employing a recent algorithm developed by Iruarán-Viveros and Sánchez-Sesma [2003].

2. The Elastic Percolation Model

[4] The elastic (vector) percolation model can be considered as a discrete micromechanical system. Similar discrete approaches to modeling mechanical and geophysical phenomena have been used in the past. Most prominent approaches are based on closely packed lattice of particles with Hooke's law interactions [Hoover, 1991; Toomey and Bean, 2000]. Other appealing approaches are the "distinct element method" based on the construction of elastic granular assemblies [Cundall and Strack, 1979] and the "lattice solid model" [Mora and Place, 1993] for the simulation of nonlinear dynamics of earthquakes.

[5] The elastic percolation approach was designed to model deformation and brittle fracture, in which rather than discretizing the equations of elasticity, the elastic continuum is discretized to a multi-dimensional array of lattice points connected by bonds [e.g., *Curtin and Scher, 1990*]. In this system, the bonds can be stretched, bent or broken by applying external stresses. So, both central and bond-bending forces contribute to the elastic energy of the network. This opens a good possibility to study some rock physics phenomena and even the minute effects are yet to be explored.

[6] Consider a two-dimensional triangular network (a hexagonal cell) whose linear size is controlled by L , where L is the number of sites (particle positions) in a given direction. Every site i of the lattice is characterized by the displacement vector $\mathbf{u}_i = (u_{ix}, u_{iy})$, which is computed by minimizing the elastic energy of the system. In general, the elastic energy of a bond-bending model, for each particle, is well characterized by [e.g., *Kantor and Webman, 1984; Chakrabarti and Benguigui, 1997*]

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \alpha_{ij} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}]^2 p_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{\langle jik \rangle} \beta_{jk} (\delta\theta_{jk})^2 p_{jk} p_{ik} \quad (1)$$

where \mathbf{r}_{ij} is the lattice vector between sites i and j . Here α_{ij} is the central force constant of the spring attached to the i and j sites, which is proportional to the squared length change; β_{jk} is the bond-bending force constant associated to $\delta\theta_{jk}$, which is proportional to the square angular change at site i between the bonds $j-i$ and $i-k$. Figure 1 shows the configuration. Each particle has 6 associated particles attached to it by bonds. Thus, the first term of the right hand side is the spring energy (as in Hooke's law), which contributes to the central force field, while the second term is the bending energy from the angular difference of two connected particles from their equilibrium positions. Here $\langle i, j \rangle$ means the sum is over the six neighbor particles to site i , and $\langle jik \rangle$ indicates that the sum is over all triplets in which the bonds $j-i$ and $i-k$ form an angle whose vertex is at i . In this work, p_{ij} is always equal to 1 because we forbid bond breaking. In fact, for $p_{ij} = 0$, it would mean that the spring is broken and a micro-crack is developed. Notice that the central force assures translational invariance, while the bond-bending force (non-central potential term) guarantees rotational invariance. Translational invariance implies that the energy depends only on the lattice displacement distance, which is related to the Hooke's spring. On the other hand, it is well known that the lack of rotational invariance would lead to unphysical elastic constants. This is transcendental for brittle fracture experiments, since the presence of the bond-bending coupling constant improves the degree of isotropy of the tensile failure surface [*Monette and Anderson, 1994*]. Both the spring constants and the breaking energy (which are related to stiffness and surface formation energy, respectively) can differ for bulk and boundary springs.

[7] Microstructural features may be incorporated locally into the model by associating different properties with each spring. Notice that in order to have microscopic disorder in the system, we could locally vary the values of the force constants (α_{ij} and β_{jk}), as well as the mass of the particles (m_i). *Keating* [1966] provided a rotationally invariant

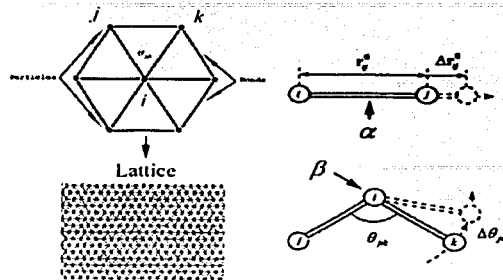


Figure 1. Schematic configuration of the elastic lattice composed by bonds and particles. α is the central (stretching) force between each pair of particles; β is the bond-bending (rotation) force as seen in the lower-right.

formulation for the strain energy of an atomic crystal. This can be considered the archetypical elastic percolation model. Following *Monette and Anderson* [1994], a simplified form of equation (1), to second order accuracy can be written as

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \alpha_{ij} (|\mathbf{r}_{ij}| - |\mathbf{r}_{ij}^0|)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\langle jik \rangle} \beta_{jk} (\cos \theta_{jk} - \cos \theta_0)^2 \quad (2)$$

where \mathbf{r}_{ij}^0 is the difference in equilibrium position vector of the nodes, so $|\mathbf{r}_{ij}^0| = l_0$ is the equilibrium lattice spacing. Thus $\Delta \mathbf{r}_{ij}^0 = \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_{ij}^0$ (see Figure 1). θ_0 is the equilibrium angle between bonds, so $\cos \theta_0 = \cos \pi/3 = 1/2$. The density for each particle is $\rho_i = 2m/\sqrt{3}l_0^2$, taken from an elementary hexagonal. With these elements, the expression for the elastic energy density of the lattice can be obtained. Comparing the above equation with the elastic energy of the two-dimensional isotropic elastic continuum [*Landau and Lifshitz, 1986*], the expressions for the Lamé constants, λ and μ , can be obtained as [*Monette and Anderson, 1994*]:

$$\lambda = \frac{\sqrt{3}\alpha}{4} - \frac{9\sqrt{3}\beta}{8l_0^2} \quad (3)$$

$$\mu = \frac{\sqrt{3}\alpha}{4} + \frac{9\sqrt{3}\beta}{8l_0^2} \quad (4)$$

[8] From these relations, and for the triangular lattice, the Poisson's ratio ν is:

$$\nu = \frac{\alpha - 9\beta/2l_0^2}{3\alpha + 9\beta/2l_0^2} \quad (5)$$

[9] Clearly, within the realm of this model, admissible values of the Poisson's ratio are $-1 \leq \nu \leq 1/3$. In fact, since for each particle, the force constants can be locally varied at will (α_{ij} and β_{jk}), that opens the possibility of having distinct microscopic Poisson's ratio. For $\beta = 0$, ν is fixed and the results would be equivalent to the classical molecular dynamics studies of elasticity using only central force field [*Hoover, 1991; Toomey and Bean, 2000*]. On the other side,

3 can be advantageously used for assigning anisotropy in the material. Additionally, it is important to mention that because in principle we could apply external forces on the boundaries of the model, it is possible to create stress induced anisotropy.

3. The Velocity Verlet Algorithm

[10] In order to calculate the equations of motion, the velocity Verlet integrator is used [Allen and Tildesley, 1987]. The velocity Verlet algorithm is time reversible and symplectic, which implies small errors in the energy conservation (good stability) and accuracy (fourth order accurate in position and second order accurate in velocity). Using a time step Δt , the algorithm, for particle position \mathbf{r} , velocity \mathbf{v} and acceleration \mathbf{a} , has the form

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t^2. \quad (6)$$

[11] To upgrade, the mid-step particle velocities are first calculated by

$$\mathbf{v}\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t. \quad (7)$$

[12] Once the total force \mathbf{F}_i for each particle is computed, the particle accelerations are calculated ($\mathbf{a}_i(t + \Delta t) = \mathbf{F}_i/m_i$), and the particle velocity is finally computed at time $t + \Delta t$,

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t + \Delta t)\Delta t. \quad (8)$$

[13] For each time step Δt and for N number of particles, the total kinetic energy U_K is calculated to test for numerical stability (energy conservation).

$$U_K(t) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N m_i v_i(t)^2. \quad (9)$$

4. Results and Discussion

[14] Figure 2, displays snapshots for a homogeneous model with a free surface on top. The model has a lattice spacing of 10 m, a compressional wave velocity of 6000 m/s, a Poisson's ratio of 0.3 and it comprises about 500,000 particles ($L_x = 707$) with equal two-dimensional density (1000 kg/m²). The force source was applied to only a single buried particle in the system at a shallow depth of 26 m. The time function of the applied force is given by a Ricker's wavelet with central frequency f_0 of 15 Hz. This well known signal has the form $f(t) = (a^2 - 0.5) \exp(-a^2)$, where $a = \pi(t - t_0)/t_S$, t_0 is the offset and $t_S = 1/f_0$ is the "characteristic" period. The free surface boundary condition is numerically enforced leaving the boundary particles free to move. In other words, the free surface is introduced just by letting the particles free on the boundary. This is a truly free surface in all senses. This simple way to proceed is somewhat equivalent to using the "vacuum" formalism [e.g., Moezo et al., 1997] in finite differences, in which the physical properties at the edge of the model are simply made null. However, in finite differences this is generally achieved by using extra points outside the domain of interest (an artificial layer of nodes) and the vacuum formalism is employed. In our

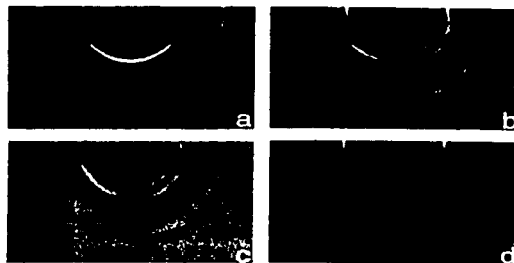


Figure 2. Snapshots with a free surface on top; a) is the snapshot of the horizontal displacement, b) is the snapshot of the vertical displacement, for both cases, the force is horizontal; c) is the horizontal displacement and d) is the vertical displacement, both with a vertical force.

computations we could fix the other boundaries, or we could apply a certain amount of force to each particle in those boundaries in order to squeeze or stretch the model. We believe that introducing stress field directly in the wave equation and solving by finite difference or finite element methods is more involved. Similar to the Courant condition for finite difference, the stability condition in our model is given by $V_p \Delta t / \Delta x \leq \sqrt{3}/2$. Where V_p is the compressional velocity and Δx is the lattice spacing. So Δt , the time interval, is about 15 to 20% smaller than the value for a typical finite difference scheme. Our lattice model is somewhat more demanding than a finite difference approach, but the capabilities to model special effects are much larger and it is worth the effort. Two buried sources are alternatively used in both the horizontal and vertical directions, respectively. Figures 2a and 2b depict the snapshots of the horizontal and vertical displacements, respectively, for a horizontal force. The case of a vertical force is displayed in Figures 2c and 2d. The figures show adequate propagation of body waves and, as is also well known for shallow sources, in which most of the energy is propagated as Rayleigh waves (for surface forces on a half-space, the fraction is about 70 per cent), the significant appearance of these surface waves is clear.

[15] To further validate the discrete model we compared our numerical results to the *Garvin's* [1956] analytical solution of a buried dilatational line source in a half space (same model as above). Strictly speaking, an exact comparison is not possible, because we are using an hexagonal cell for the source, which is thus equivalent to a cylindrical cavity of radius l_0 , subject to a uniform pressure source in an infinite elastic solid in plane strain [Miklowitz, 1984]. However, in the far-source field, the two results should be very similar as it is observed in Figure 3. In this figure the horizontal surface displacement seismograms are displayed for a series of equally spaced receivers (separated 100 m), starting at 10 m apart from the center to the vertical of the source. The analytical solution is depicted in solid lines while for our approach we used dotted lines. For near offsets, there are some substantial differences, clearly due to the fact that a cavity source and a line source (a cavity of

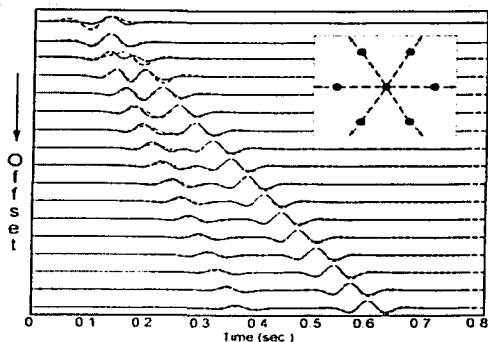


Figure 3. Comparison of the analytical Garvin's solution (continuous lines) and the numerical approach (dotted lines). The source configuration is depicted schematically at the upper right.

infinitesimal radius) are distinct. For far field, the match is satisfactorily good. The system is conservative, since there are no damping elements in the model and therefore the amplitudes of Rayleigh waves are constant. Our approach shows good agreement, not only in the kinematics (travel times), but also in the dynamics (amplitudes) of the different waves (correct energy distribution among the propagating modes).

[16] This approach has been used for some time, mostly for the investigation of fracture phenomena. However, there is almost a lack of research concerning wave propagation phenomena in disordered media. Some works have appeared just recently, but all used only central force inter-atomic potentials. That means that the Poisson's ratio is fixed to a single value. Our approach is a generalization, in which is capable of modeling a large range of possible values for the Poisson's ratio. This method is what is known as a *bottom-to-top approach*, while a method that uses the wave equation and solves for the partial differential equations by using, let's say, finite differences, is known as a *top-to-bottom approach*. That is why an efficiency comparison against finite difference or finite element methods is difficult or probably unfair. We have shown that the discrete lattice model is consistent and can be used to reproduce the results of classical elasticity. It is also clear that the elastic lattice approach is a useful tool for modeling wave propagation phenomena that allows to directly introducing local heterogeneities in terms of basic elastic properties (wave velocities, densities and variable Poisson's ratio). Discontinuities simulating pores and cracks are also possible by allowing some bonds to vanish. For this article, free surface,

allowing Rayleigh waves to naturally appear in the simulations, proved the usefulness of this approach. The study and analysis of the elastic percolation model for simulating wave propagation in elastic media with pores, cracks and variable microscopic Poisson's ratio is in progress.

[17] **Acknowledgments.** The authors thank Dr. Raúl Cabrera for helpful remarks. This work has been partially supported by the Instituto Mexicano del Petróleo under their research program PIIG and by CONACyT, Mexico, under project number NC-204.

References

- Allen, M. P., and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, Oxford, England, 1987.
- Curtin, W. A., and H. Scher. Brittle fracture in disordered materials: A spring network model. *J. Mater. Res.*, 5, 535-552, 1990.
- Chakrabarti, B. K., and L. G. Benguigui. *Statistical Physics of Fracture and Breakdown in Disordered Systems*. Clarendon Press, Oxford, England, 1997.
- Cundall, A., and O. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29, 47-65, 1979.
- Del Valle-García, R., and F. Sánchez-Sesma. Wave scattering effects in elastic percolation models. *Mol. Phys.*, 100(19), 3167-3172, 2002.
- Garvin, W. W. Exact transient solution of the buried line source problem. *Proc. R. Soc. London*, A234, 528-541, 1956.
- Herrmann, H. J., and S. Roux (Eds.). *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media*. North-Holland, Amsterdam, Netherlands, 1990.
- Hoover, W. G. *Computational Statistical Mechanics, in Studies in modern thermodynamics, II*. Elsevier Science, Amsterdam, Netherlands, 1991.
- Iurraran-Viveros, U., and F. J. Sánchez-Sesma. A student's guide to the Garvin's solution for the buried line source problem. *Seismol. Res. Lett.*, submitted, 2003.
- Kantor, Y., and I. Wehman. Elastic properties of random percolating systems. *Phys. Rev. Lett.*, 52, 1891-1894, 1984.
- Keating, P. N. Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure. *Phys. Rev.*, 145(2), 637-644, 1966.
- Landau, L. D., and E. M. Lifshitz. *Theory of Elasticity*. Pergamon Press, Oxford, England, 1986.
- Moczko, P., E. Bystriński, J. Kristek, J. Carcione, and M. Bouchon. Hybrid modeling of P-SV seismic motion at inhomogeneous viscoelastic topographic structures. *Bull. Seismol. Soc. Am.*, 87, 1305-1323, 1997.
- Monette, L., and M. P. Anderson. Elastic and fracture properties of the two-dimensional triangular and square lattices. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2, 53-66, 1994.
- Mora, P., and D. Place. A lattice solid model for the nonlinear dynamics of earthquakes. *Int. J. mod. Phys. C*, 4, 1059-1074, 1993.
- Miklosvitz, J. *The theory of elastic waves and waveguides*, 3rd Edition. North-Holland, Amsterdam, Netherlands, 1984.
- Ruffino, E., and P. P. Delsanto. Scattering of ultrasonic waves by void inclusions. *J. Acoust. Soc. Am.*, 108(4), 1941-1945, 2000.
- Saburi, M. *Flow and Transp Porous Media and Fractured Rock*. VCH, Weinheim, Germany, 1995.
- Toomey, A., and C. J. Bean. Numerical simulation of seismic waves using a discrete particle scheme. *Geophys. J. Int.*, 141, 595-604, 2000.
- Ursenbach, C. P. Simulation of elastic moduli of porous media, in *71st Ann. Internat. Mtg., Soc. Expt. Geophys. Expanded Abstracts*, RP 1.3, 1704-1707, 2001.

R. del Valle-García, Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, Edif. Sismología, Cub. 107, Madero 07730, México D. F., México. (rvalleg@imp.mx)

F. J. Sánchez-Sesma, Instituto de Ingeniería, UNAM, Circuito Escolar, Cd. Universitaria, Coyoacán 04510, México, D. F., México. (sesma@servidor.unam.mx)

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Wave scattering effects in elastic percolation models

RAÚL DEL VALLE-GARCÍA^{1,2*} and FRANCISCO SÁNCHEZ-SESMA²

¹ Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, Edif. Sismología, Cub. 207, Madero 07730, México D.F., México

² Instituto de Ingeniería, UNAM, Ciudad Universitaria, Apdo. 70-472, Coyoacán 04510, México D.F., México

(Received 31 August 2001; accepted 14 March 2002)

The study of the propagation of waves in randomly diluted models is presented. Porosity (crack-like) models are simulated by constructing typical elastic percolation networks with random microscopic heterogeneities in order to resemble rock media. Central and bond-bending forces (Born Hamiltonian) models are considered. For each experimental case, the elastic energy of the system is relaxed in equilibrium and then the model is excited by a pulse source in order to produce wave propagation. First, a review is presented of the well established velocity-porosity relationship from rock physics, which shows a linear trend from small porosities up to the critical porosity (percolation threshold) where the rocks fall apart. From the wave propagation analysis a general trend is observed for the attenuation of waves, from the small to the large porosity models, suggesting multiple scattering effects similar to those reported from effective-medium approximations of wave scattering due to random heterogeneities. Finally, the results are compared with those obtained from laboratory experiments on dry rocks with different porosities and different applied stress regimes.

1. Introduction

The acoustic properties of most disordered materials such as rocks are dominated by the presence of pores, micro-cracks and fluids. For dry rocks, most of the wave phenomena effects are associated with the energy scattering from the pores and inclusions. Moreover, dry rocks are acoustically nonlinear, i.e. stress-dependent, and frequency dependence attenuation is observed. This means that wave energy is not absorbed as heat but by scattering. In dry rocks, the attenuation is described well by a fourth-power frequency dependence. Thus it is important to obtain the detailed characteristics of porous materials in order to improve our understanding of wave phenomena in disordered media.

We use the elastic network model to perform wave propagation phenomena in disordered porous media. The spring network models used in many percolation theory problems are suitable for modelling static and dynamic phenomena of disordered media. They have their origin as discrete models for the elastic energy in solids written in terms of atomic or molecular displacements, and they have been used extensively in the study of elastic percolating networks, the dynamics of fracture and the mechanics of composite material. A characteristic of these models is the use of a simple network or

lattice to calculate the equilibrium stresses and dynamics of porous and fractured media.

2. The elastic network model

The elastic percolation network is a vector percolation system constructed of elastic elements or bonds forming, e.g. a triangular lattice in 2 dimensions [1–4]. Thus a porous medium can be constructed by randomly removing bonds of the lattice with a probability $1 - p = \phi$. Where p represents the fraction of intact bonds and ϕ is the fraction of disconnected bonds, or porosity. The elastic modulus E of the diluted system becomes zero, both for longitudinal and shear strains, below the critical concentration or percolation threshold p_c ($p < p_c$). This modulus behaves, depending on the concentration above p_c ($p > p_c$), according to the power law [4]

$$E \approx (p - p_c)^{T_e}, \quad (1)$$

where T_e is called the elastic exponent. For 2 dimensions, $T_e \approx 3.96$ [3]. Several authors have performed extensive studies of the mechanical properties of diluted networks; this includes, e.g. studies on the power law behaviour of the elastic modulus [3, 5–7], vibration properties [8, 9] and effective medium approximation comparisons [10, 11].

In order to construct the system, we utilized the Born Hamiltonian [12] that represents the elastic energy of the

* Author for correspondence e-mail: rvalleg@imp.mx

percolation model with both central and bond bending force constants [4, 5]

$$H = \frac{\alpha}{2} \sum_{\langle ij \rangle} [(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij}]^2 p_{ij} + \frac{\beta}{2} \sum_{\langle jk \rangle} (\delta\theta_{ijk})^2 p_{ij} p_{jk}, \quad (2)$$

where \mathbf{u}_j is the displacement vector of the site i of the network, \mathbf{r}_{ij} is the unit vector connecting sites i and j . The central force and bond-bending force constants are α and β , respectively. The angle at site j between the bonds ij and jk is θ_{ijk} . The probability p_{ij} for diluted networks is defined as $p_{ij} = 1$ when the bond is present, and $p_{ij} = 0$ when the bond is absent. The Born model has been used in various studies of quasistatic and dynamic crack propagation, in which p_{ij} depends on a breaking criterion in order to change [2, 4, 5, 13]. 1- or 2-dimensional networks [5, 14].

$$\delta\theta_{ijk} = (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \times \mathbf{r}_{ij} - (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k) \times \mathbf{r}_{ik}. \quad (3)$$

Note that the force on node i is

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_i} = \alpha \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{r}_{ij} + \beta \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j). \quad (4)$$

For the triangular lattice [15],

$$\alpha = \frac{4}{3\ell^2} (V_p^2 - V_s^2)$$

and

$$\beta = \frac{1}{3\ell^2} (3V_s^2 - V_p^2). \quad (5)$$

Here, V_p and V_s are the longitudinal and transverse wave velocities and ℓ is the lattice spacing as represented for a regular triangular lattice in figure 1. These velocities are related to the Young's modulus E and Poisson's ratio ν , or to other elastic coefficients [16] through

$$V_p^2 = \frac{E(1-\nu)}{\rho(1+\nu)(1-2\nu)} = \frac{K + \frac{4}{3}\mu}{\rho} = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho}$$

and

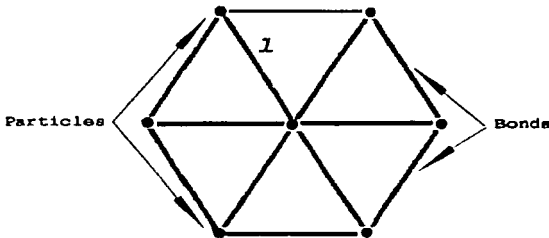


Figure 1. Schematic representation of a triangular lattice element constructed from springs and particles: ℓ is the lattice spacing.

$$V_s^2 = \frac{E}{2\rho(1+\nu)} = \frac{\mu}{\rho}. \quad (6)$$

Here, K and μ are the bulk and shear modulus, respectively, ρ is the density and λ is Lamé's coefficient.

Equations (2)–(4) are second-order ordinary differential equations, and may be interpreted as the equations of motion for a set of nearest neighbour particles in a lattice connected by springs with linear law forces. These equations represent the discretized version of the continuous dynamic displacement field for a triangular lattice [15]:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = V_s^2 \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + (V_p^2 - V_s^2) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)). \quad (7)$$

Here, \mathbf{F} is an inertial term and ∇^2 is the Laplacian operator.

The simulation is performed using an explicit finite difference scheme similar to the conventional molecular dynamics Verlet's algorithm [17, 18]. The most important part of this scheme is the integration incremental time Δt , which has to be chosen small enough to guarantee numerical stability. This becomes preponderant for the diluted network models, since many bonds are broken randomly, causing the numerical scheme to be ill-conditioned. In principle, we need to satisfy the Courant condition [19]

$$\frac{c \Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (8)$$

Here, $c = V_p$ and $\Delta x = \ell$. Therefore, in our models, $\Delta t \leq \ell/V_p$. As V_p is reduced Δt can be increased; however, the 'mass deficiency' created by the dilution causes numerical instabilities, and consequently Δt has to be decreased. We have not found a quantifying decisive factor for the optimal value of Δt , so we have to test empirically for the best value in each simulation. For a non-diluted model, it has been suggested that for adequate precision it is sufficient to consider $\Delta t \leq 0.2\ell/V_p$ [20]. The numerical stability can also be improved by incorporating a viscous factor in the inertial term of equation (7), i.e.

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) - \zeta \frac{d\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{d^2 \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{dt^2} - \zeta \frac{d\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{dt}, \quad (9)$$

where $\zeta < 1$ is a damping factor equivalent to a Maxwellian viscosity term [16, 20].

If a longitudinal wave travels through the lattice model described by a function $\sin(\omega t - kx)$, it can be shown [21] that

$$\omega = 2 \left(\frac{K}{m} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{k\ell}{2} \right), \quad (10)$$

where ω is the angular frequency ($\omega \equiv 2\pi\nu$), ν is the frequency, k is the wavenumber ($k \equiv 2\pi\lambda$), m is the

TESIS COM
FALLA DE ORIGEN

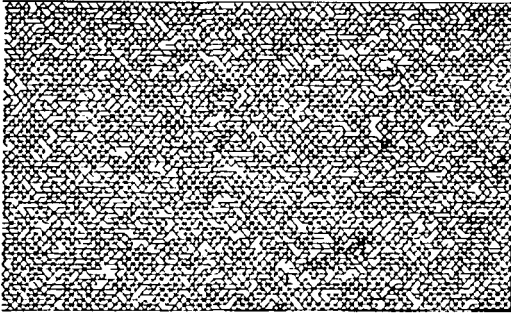


Figure 2. Random diluted model with 30% of pore volume fraction.

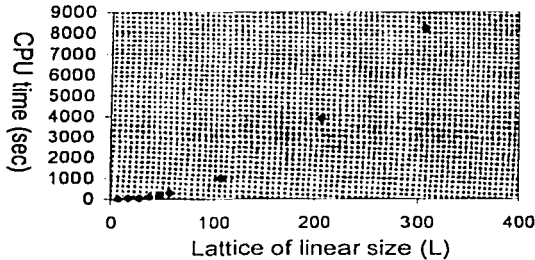


Figure 3. CPU time required for different lattice sizes using a single node on a Cray/Origin 2000 supercomputer. For a linear triangular lattice of size $L = 360$ it takes about 3 hours of CPU time only for the static equilibrium process. For the dynamic process, it is necessary to reduce the time increment substantially in order to have a stable solution for different porosities. A whole experiment could take more than 20 hours of CPU time.

particle mass and λ is the wavelength ($\lambda \equiv V_p/\nu$). Equation (10) indicates that for wavelengths larger than the lattice spacing, $\lambda \geq \ell$, there is no wave dispersion. In other words, for $\omega > 2(K/m)^{1/2}$, there is no value of k for which equation (10) is satisfied, indicating the maximum possible angular frequency of waves in the lattice model.

For a particular experiment, the macroscopic wave velocities $\langle V_p \rangle$ and $\langle V_s \rangle$ are the result of the average force constants, which are made to fluctuate randomly by a small amount for each particular node pair, i.e. we take $\alpha \pm \Delta\alpha$ and $\beta \pm \Delta\beta$. This introduces disorder in the system, and can be tuned at will. Accordingly, the lattice spacing can vary around a small amount $\ell \pm \Delta\ell$. This is desirable, because it reduces the lattice anisotropy. A diluted model, see figure 2, is then constructed by removing randomly a certain number of bonds, creating a desired porosity of the 'rock'. Figure 3 exem-

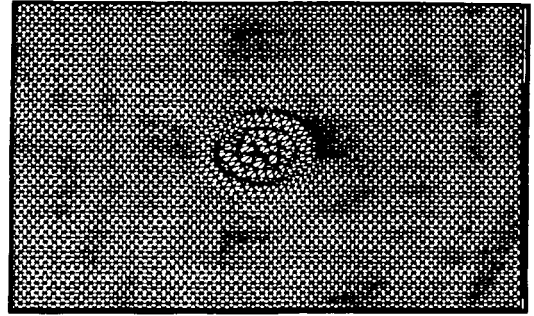


Figure 4. Example of a pulse source: the displacements have been exaggerated in order to visualize the wave field.

plifies the computational time required, varying with the lattice linear size of the model.

For the excitation wave source we use the first derivative of a Gaussian function

$$f(t) = (t - t_0) \exp[-\eta(t - t_0)^2]. \quad (11)$$

Here, η is a coefficient that controls the time interval from negative to positive peak and t_0 is the central time reciprocally associated with the central frequency of the wavelet pulse. For instance, for a model with an average longitudinal velocity of $\langle V_p \rangle = 6 \times 10^9 \text{ km s}^{-1}$ (a typical value for a quartz mineral) and an average lattice spacing of $\langle \ell \rangle = 1 \text{ mm}$, a central pulse source frequency of $\nu = 6 \text{ Mhz}$ is necessary. An example of the source pulse (exaggerated for clarity) is shown in figure 4.

3. Critical porosity effects

Obtaining precise relations between porosity and elastic wave velocities in porous rocks is an important subject of rock physics. Such relations are critical when geophysical data are to be used to infer porosity and porosity-related properties (e.g. permeability, strength, saturation) in oil exploration. This has become especially important in recent years, with the rapid development of seismic and sonic methods, which are applied to the characterization of heterogeneous oil and gas reservoirs. Porosity is one of the most important parameters of rocks and, as verified in the rock physics laboratories, the longitudinal and shear velocities of rocks generally occur between the velocities of the mineral grains in the limit of low porosity and the values of mineral-pore suspension in the limit of high porosity. For most porous materials there is a 'critical porosity' ϕ_c [22] that separates their mechanical and acoustical behaviour into two distinct domains. For porosities lower than ϕ_c the mineral grains are load-bearing, whereas for porosities greater than ϕ_c the material falls apart and becomes

TESIS COM
FALLA DE URGEN

a suspension if fluid saturation is present. Here, we deal only with dry materials that are represented by the elastic network model. The critical porosity is related to the elastic percolation threshold through $\phi_c = 1 - \rho_c$. In the load bearing domain $\phi < \phi_c$, the elastic modulus decreases linearly from the mineral values (the largest value) at zero porosity to zero modulus at the critical porosity. This dependence can be approximated by a straight line when expressed as modulus versus porosity [23]. For dry rocks,

$$K_{\text{dry}} = K_0 \left(1 - \frac{\phi}{\phi_c}\right) \quad (12)$$

and

$$\mu_{\text{dry}} = \mu_0 \left(1 - \frac{\phi}{\phi_c}\right), \quad (13)$$

where K_0 and μ_0 are the mineral bulk and shear moduli, respectively. Thus, a dry rock modulus spans between K_0 , μ_0 at $\phi = 0$ and $K_{\text{dry}} = \mu_{\text{dry}} = 0$ at $\phi = \phi_c$. For instance, the bulk modulus for a quartz mineral is about $K_0 = 37 \times 10^9 \text{ N m}^{-2}$, so we expect a rock, made of quartz minerals (e.g. a sandstone) to have a lower bulk modulus than K_0 . Krief's relations [24] also are empirical relations for the elastic moduli versus porosity:

$$K_{\text{dry}} = K_0 (1 - \phi)^{m(\phi)} \quad (14)$$

and

$$\mu_{\text{dry}} = \mu_0 (1 - \phi)^{m(\phi)}, \quad (15)$$

where $m(\phi) = 3/(1 - \phi)$. Note that these relations are continuous; however, they decay to almost zero around a porosity of 40% which is typical of the behaviour observed in the laboratory for most rocks. Rigorous bounds obtained from effective media theories establish the physical limits of the possible values for the elastic moduli versus porosity. The best bounds, that provide the narrowest range without specifying the geometries of the constituents, are the Hashin-Shtrikman bounds [25, 26]. Recent effective media approaches provide relationships between porosity and elastic moduli significantly consistent with laboratory observations, such as the modified differential effective medium model with critical porosity constraint [27], or semi-empirical arguments to model velocity-porosity relationships with clay contamination [28]. Implicit results of velocity-porosity relationships with critical porosity, similar to the present work, are reported using an elastic network model with granular constraints [29].

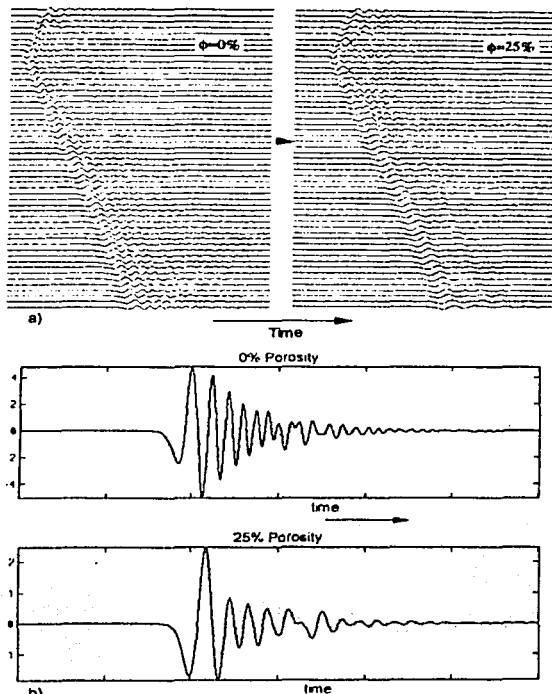


Figure 5. (a) Wave signals from different positions for zero and 25% porosity, and (b) a zoom of one of the signals that shows clearly the time delay for the 25% porosity, signal and frequency dispersion.

4. Results and discussion

We performed several experiments ranging from zero porosity to the critical porosity for typical rock models. For instance, 'synthetic seismograms' from a numerical experiment on wave propagation for a model typical of a sandstone rock ($V_p = 6 \text{ km s}^{-1}$ and $V_s = 4 \text{ km s}^{-1}$) with zero and 25% porosities are shown in figure 5. Clearly a time shift has occurred in the 25% porosity results, as well as a broadening of the wavelets, suggesting frequency dispersion and wave attenuation due to energy scattering in the porous material. Figure 6 shows the power spectrum of the same experiment for two different porosities. Note that the peak frequency at zero porosity ($\phi = 0$) is about 2 MHz, which indicates the central frequency used for the pulse source, and the frequency power has shifted to lower values for the 10% porosity model. By using different confining pressures (boundary conditions) in the model, it is possible to analyse the effect of the confining pressure on the velo-

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

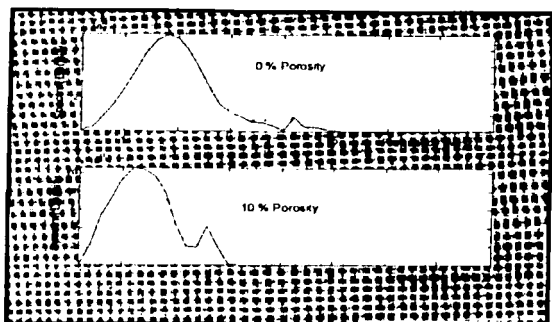


Figure 6. Example of the spectral density of wave signals for zero and 10% porosity showing frequency dispersion and attenuation of energy.

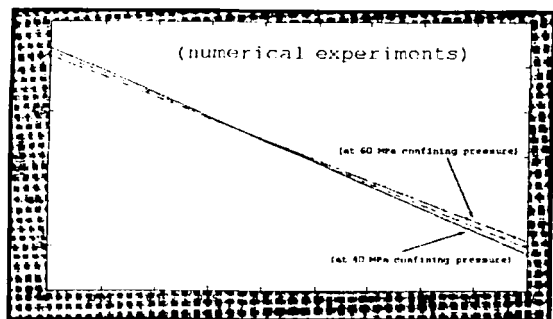


Figure 7. Numerical experiments for the longitudinal velocity versus porosity for different confining stresses. The lines are obtained from the linear fit of the scatter data.

city porosity relationships. This is shown in figure 7 (fitted lines), indicating little dependence on the external stress applied; however, this is sufficient to create stress induced anisotropy if directional stress is applied in the model.

We have compared our experiments with self-consistent (SC) effective medium theory [30]. Using bulk and shear moduli of $K = 46.3$ GPa and $\mu = 30.5$ GPa, respectively, a comparison of the SC approximation and our numerical experiments for elastic modulus versus porosity is shown in figure 8. In our experiments, the elastic moduli were obtained from the longitudinal and shear velocities at different porosities, using the relations

$$K = \rho(V_p^2 - \frac{4}{3}V_s^2)$$

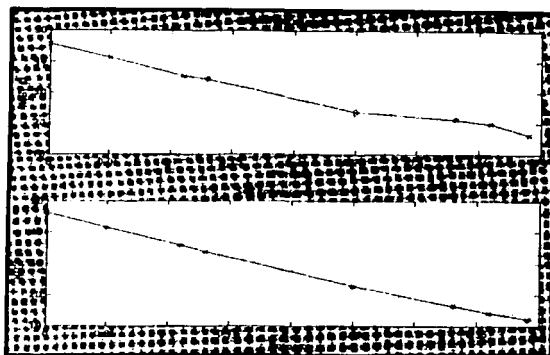


Figure 8. Comparison of the bulk modulus porosity relationship obtained from numerical experiments and self-consistent effective medium theory.

and

$$\mu = \rho V_s^2. \quad (16)$$

The wave attenuation is calculated using the expression

$$\alpha_c = \frac{1}{t_2 - t_1} \ln \left[\frac{A(t_1)}{A(t_2)} \right], \quad (17)$$

where α_c is the attenuation coefficient, t_1 and t_2 are two different nearest times ($t_1 < t_2$) of the signal and $A(t_1)$, $A(t_2)$ are the respective amplitudes. The dissipation factors for longitudinal and shear waves (Q_p^{-1} , Q_s^{-1}) are obtained as

$$Q_p^{-1} = \frac{\alpha_c V_p}{\pi \nu}$$

and

$$Q_s^{-1} = \frac{\alpha_c V_s}{\pi \nu}. \quad (18)$$

Figure 9 presents the attenuation-frequency relationship for different confining pressures for the model used in figure 7, with 0.3 pore volume fraction. The attenuation is frequency dependent, since the scattering effects become larger at higher frequencies (shorter wavelengths), as expected.

5. Conclusion

The results obtained show that the elastic percolation network is a useful tool for reproducing rock physics phenomena, as well as the basic mechanics and dynamics of disordered materials. The wave velocities depend on the porosity of the material. The attenuation depends on porosity and frequency, as shown in the

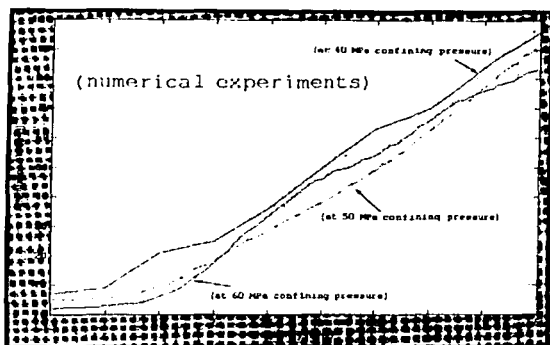


Figure 9. Frequency dependent attenuation for different confining pressures as in figure 7. The porosity of the model is 30%.

experiments, provided that the approach is conservative; the source of wave attenuation is due to scattering effects. We may use this approach for analysing different aspects of complex systems, such as long-range porosity correlations, viscoelastic effects, acoustic localization, solid mixtures and fluid inclusions, in the near future.

References

- [1] ROUX, S., 1990, *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media*, edited by H. J. Herrmann and S. Roux (Amsterdam: North-Holland).
- [2] HERRMANN, H. J., and ROUX, S., 1990, *Statistical Models for the Fracture of Disordered Media*, edited by H. J. Herrmann and S. Roux (Amsterdam: North-Holland).
- [3] STAUFFER, D., and AHARONY, A., 1992, *Introduction to Percolation Theory* (London: Taylor & Francis).
- [4] CHAKRABARTI, B. K., and BENGUIGUI, L. G., 1997, *Statistical Physics of Fracture and Breakdown in Disordered Systems* (Oxford: Clarendon Press).
- [5] SAHIMI, M., 1998, *Phys. Rep.*, **306**, 213.
- [6] FENG, S., and SEN, P. N., 1984, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 216.
- [7] KANTOR, Y., and WERMAN, L., 1984, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1891.
- [8] KIRKWOOD, J. G., 1939, *J. chem. Phys.*, **7**, 506.
- [9] KEATING, P. N., 1966, *Phys. Rev.*, **152**, 774.
- [10] FENG, S., and THORPE, M. F., 1985, *Phys. Rev. B*, **31**, 276.
- [11] SCHWARTZ, L. M., FENG, S., THORPE, M. F., and SEN, P. N., 1985, *Phys. Rev. B*, **32**, 4607.
- [12] BORN, M., and HUANG, K., 1954, *Dynamical Theory of Crystal Lattices* (Oxford University Press).
- [13] CALDERELLI, C., CASTELLANO, C., and VESPIGNANI, A., 1994, *Phys. Rev. E*, **49**, 2673.
- [14] SAHIMI, M., 1994, *Applications of Percolation Theory* (London: Taylor & Francis).
- [15] MARTIN, T., ESPAÑOL, P., RUBIO, M. A., and ZÚÑIGA, I., 2000, *Europhys. Lett.*, **61**, 6120.
- [16] LANDAU, L. D., and LIFSHITZ, E. M., 1986, *Theory of Elasticity* (Oxford: Pergamon Press).
- [17] ALLEN, M. P., and TILDESLEY, D. J., 1987, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon Press).
- [18] RAPAPORT, D. C., 1997, *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge University Press).
- [19] LAPIDUS, L., and PINDER, G. F., 1982, *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering* (New York: Wiley).
- [20] MORA, P., and PLACE, D., 1993, *Int. J. mod. Phys. C*, **4**, 1059.
- [21] TOMEY, A., and BEAN, C. J., 2000, *Geophys. J. Intl*, **141**, 595.
- [22] NUR, A., 1992, *EOS, Trans. Amer. Geophys. Union*, **73**, 43.
- [23] NUR, A., MAVKO, G., DVORKIN, J., and GAL, D., 1995, Critical porosity: The key to relating physical properties to porosity in rocks, in *Proceedings of the 65th Annual International Meeting of the Society for Explorational Geophysics*, p. 878.
- [24] KRIEF, M., GARAT, J., STELLINGWERFF, J., and VENTRE, J., 1990, *The Log Analyst*, **31**, 355.
- [25] HASHIN, Z., and SHTRIKMAN, S., 1963, *J. Mech. Phys. Solids*, **11**, 127.
- [26] CHRISTENSEN, R. M., 1991, *Mechanics of Composite Materials* (Malabar: Krieger).
- [27] MUKERJI, T., BERRYMAN, J. G., MAVKO, G., and BERGE, P. A., 1995, *Geophys. Res. Lett.*, **22**, 555.
- [28] GOLDBERG, I., and GUREVICI, B., 1998, *Geophys. Prospect.*, **46**, 271.
- [29] GIST, G. A., THOMPSON, A. H., KATZ, A. J., and BERRY I., M. J., 1993, *Geophys.*, **58**, 334.
- [30] BERRYMAN, J. G., and BERGE, P. A., 1993, *Homogenisation and Constitutive Modelling for Heterogeneous Materials*, edited by C. S. Chang and J. W. Ju (American Society of Mechanical Engineers).
- [31] TOKSÖZ, M. N., and JOHNSTON, D. H., 1981, *Seismic Wave Attenuation* (Tulsa, OK: SEG).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Spectral attributes for attenuation analysis in a fractured carbonate reservoir

RAÚL DEL VALLE-GARCÍA, Instituto Mexicano del Petróleo

LUIS RAMÍREZ-CRUZ, Instituto de Geofísica, Universidad Nacional Autónoma de México

The attenuation of seismic waves when traveling through viscous fluid-saturated rocks is generally higher than in dry rocks in most of the frequency bandwidth. Furthermore, changes in the spectral and amplitude characteristics of the seismic signal could be associated with the presence of fluids and fractures.

For that reason laboratory measurements of wave attenuation have been performed on sedimentary rocks at several frequency levels. These measurements generally show that lithological factors—such as porosity, permeability, and clay content—are responsible for the wave attenuation.

Some efforts have been made to use the physics of seismic attenuation for reservoir monitoring of an EOR program and even for using attenuation anomalies as a hydrocarbon indicator. This concept seems most promising in carbonate reservoirs so the work described in this article focused on the results/analysis from estimation of seismic attenuation within a fractured carbonate reservoir. The premise is that the analysis of differences in seismic attenuation may help characterize rock properties and understand wave propagation in a complex environment composed of pores and cracks containing fluids.

Traditionally seismic wave attenuation has been determined with time-domain methods or frequency-domain methods. The first attempts to relate the broadening of the pulse width or rise time to the attenuation quality factor Q . The second is based on the frequency content of the seismic pulse and computes attenuation as a function of frequency from the spectra of each pulse.

Another technique, the spectral ratio method, uses the slope of the amplitude or power spectra of different pulses as a function of frequency. An advantage of this method is that, because only frequency characteristics are measured, it does not require true amplitudes. This method provides information on the average frequency energy content of a signal but it provides no explicit information on the time variation of that energy. A common method of dealing with a time-varying signal is to window the data sequentially and to assume the signal to be stationary over the length of the window. This approach is obviously limited because significant properties of the signal must be "traded off" with the type and the length of the chosen window.

However, a joint time-frequency domain provides a new tool for seismic signal analysis and processing (Steechs, 1997) that might overcome these limitations. Recent results (Tobback et al., 1996) show that time-frequency techniques notably improve attribute extraction—for instance, in estimating instantaneous frequency, instantaneous bandwidth, dispersion, and attenuation of seismic reflection data.

The technique uses a "Wigner" distribution—a rescaled short-time Fourier transform that uses the time-reversed signal as window and supplies an optimal time-frequency resolution tradeoff. Many so-called "seismic attributes" are readily obtained from the Wigner distribution of the signal.

In addition to the attenuation appraisal of the seismic data, a parametric spectral estimation should be conducted to qualitatively observe spectral anomalies within the reservoir. Nonparametric (conventional) spectral estimators such

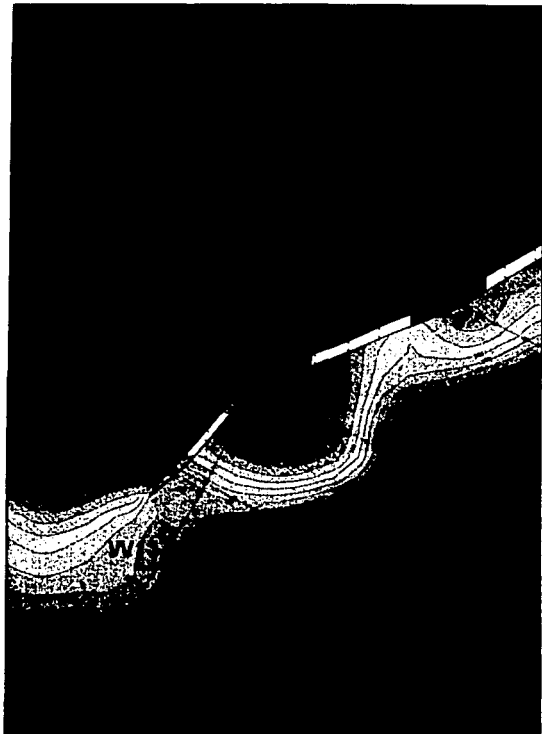


Figure 1. Horizon of F2 formation from Upper Cretaceous showing the location of the seismic line A.

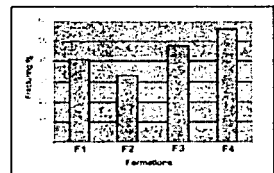


Figure 2. The bar graph shows the density of fracturing of the Cretaceous formations.

as the Fast Fourier Transform (FFT) or autocorrelation methods are limited in their resolving power spectrum and require a long observation interval to achieve acceptable accuracy and to reduce leakage.

On the other hand, a parametric (model-based) spectral estimation has proven useful in extracting high-resolution frequency spectra from relatively short data sets. The basic

Figure 3. Borehole image from well W11, which shows a path of fracture at the formation F1.

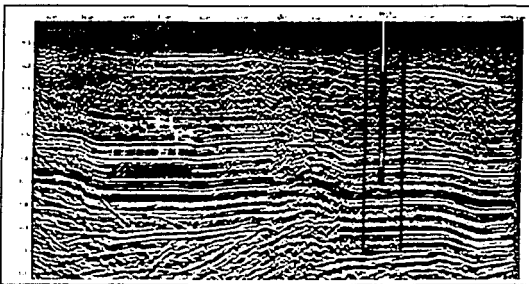
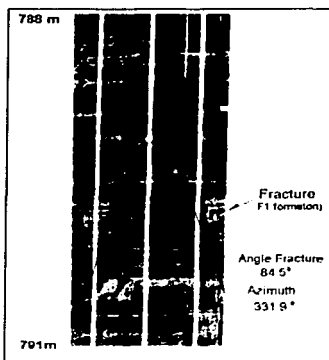


Figure 4. Line A showing the zone of interest indicated by rectangle and delimited by F1 and F2 formations. Also shown is the location of well W11.

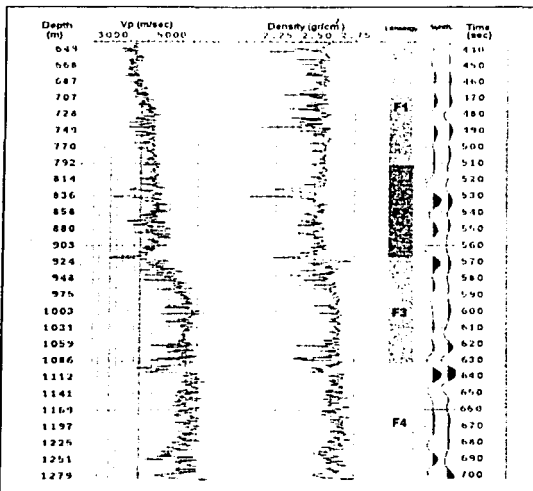


Figure 5. Velocity and density logs from well W11 used in the calibration process. The top and base of each of the cretaceous formations are correlated with the original seismic trace from the well and the synthetic seismogram.

idea is that if a signal depends on a finite set of parameters, all its statistical properties—including its power spectrum—can be expressed in terms of those parameters.

Case history. A mature oil field in northeastern Mexico is in an advanced exploitation stage and production is declining significantly. The primary porosity is low (2-4%) with oil accumulations in fracture zones and vugs (formed by dissolution of the carbonate rocks) having up to 20% of secondary porosity (dual porosity regime).

The play consists of the San Felipe (F1), Agua Nueva (F2) and Upper Tamaulipas (F3) formations, which are Upper Cretaceous limestones and shaly limestones. These formations comprise sedimentary rocks that were deposited below 200 m. Porosity is low and permeability nearly insignificant. Subsequently, these rocks were affected by a secondary phenomena associated with the tectonic stress of the "Laramide" and Tertiary age, that generated an irregular network of faults and fractures, and caused migration of hydrocarbon fluids from source rock to the reservoir rocks. The oil here is heavy, 11-13° API, and it has probably been biodegraded by water because the reservoir is near the surface (at depths of 600-900 m). The fracture system is heterogeneous, making it hard to map potential reservoir zones for development. Figure 1 shows the map of F2 formation from Upper Cretaceous and the location of seismic line A.

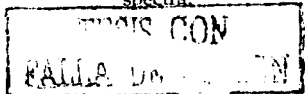
The fracture analysis was made using borehole images—i.e., high-resolution images of the borehole wall that enable detailed fracture measurements. The intersection of the fracture with the borehole wall scatters acoustic energy, producing a dark sinusoidal path on the image from which fracture strike and dip of the fracture can be interpreted. Fracture density in the Cretaceous formations is 35-58% (Figure 2).

The length of the fractures ranges from a few centimeters to 1 m. Orientation is dominantly vertical (70-90°) with a SW-NE azimuth. Fracturing plays an important role in this field because the combination of fractures and rock dissolution elevates porosity as high as 20%, allowing fluid flow and oil accumulation. Figure 3 shows a borehole image of F1 formation. The fracture intersects with the borehole wall in the interval 789-791.5 m with an orientation of 84.5° and azimuth of 331.9°. Because the distribution of fractures controls the reservoir geometry, the goal was to find locations of high fracture density.

The seismic data were processed to preserve amplitude and waveform, because we hoped to see spectral variations. The calibration used logs from well W11. In the first stage of the procedure, data were converted from time to depth to establish the top and the base of each formation. The second stage involved constructing a synthetic seismogram from density and velocity logs to correlate seismic events with formations F1-F4.

Figure 4 shows seismic line A through the zone of interest (indicated by a rectangle around well W11). Figure 5 shows velocity and density logs, the seismic trace, and the synthetic seismogram correlated with the lithology.

The spectral measurements were calculated using the parametric (model-based) method (Eastwood et al., 1993) at two small windows—one above formation F1 and the other below formation F2. The signal power spectrum was estimated trace by trace, in order to get spectral features, such as the pick frequency, the bandwidth, and the quantile frequency, using 100 traces around the well. Once the spectrum was calculated at both windows, the "attenuation spectrum" can be obtained by differencing the normalized spectra.



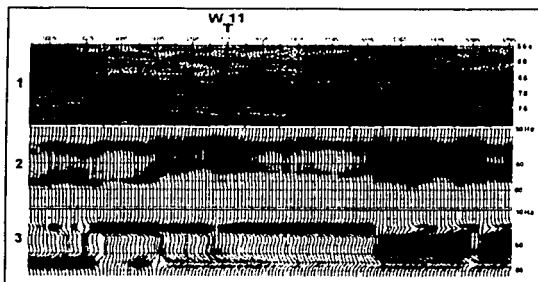


Figure 6. Spectral analysis from F1 and F2 formations. The first panel represents the window of the signal below of zone of interest. Second panel corresponds to the signal spectrum. Third panel shows the principal components of spectrum.

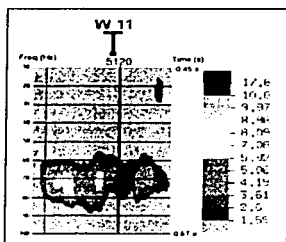


Figure 7. The attenuation spectrum from formations F1 and F2, estimated over 100 traces around the well W11.

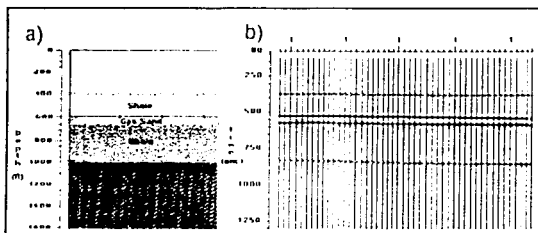


Figure 8. (a) Geologic model of horizontally layered media, which represent a thin gas-sand formation interbedded at shales. (b) Synthetic traces from gas-sand model.

Figure 6 shows the spectral analysis below the zone of interest. The first panel represents the signal in the region of well W11 used to estimate the spectrum. The second panel shows an estimated signal spectrum for each trace (vertical axis = frequency). Finally, the third panel shows the components of the spectrum that are attenuated at higher frequencies.

The effective frequency range is 10-100 Hz. This large bandwidth was possible due to the high-resolution seismic survey used in this work. In Figure 7, the horizontal axis represents distance, and the vertical axis corresponds to time (right side) and frequency (left side). The different colors specify the attenuation level (dB) for formations F1 and F2. The target area has high attenuation around 60-80 Hz. This is probably due to high fracture density (wave scattering) and heavy oil saturation (viscous dissipation) at both formations.

Attenuation coefficient. We next sought to estimate an "attenuation coefficient" (α) along the seismic traces for detecting local attenuation anomalies as a function of time. The method

was based on time-frequency analysis using Wigner distribution.

Once the time-frequency representation is obtained, the power spectrum can be calculated for each sample, subsequently, the spectral radio method is used to estimate the attenuation coefficient. Each attenuation coefficient can be associated to each time sample, so α must be obtained throughout the entire time scale of the signal. This analysis allows monitoring attenuation variations along the seismic trace and building a relative attenuation section as a seismic attribute. We applied this method to synthetic and real data.

A synthetic model was constructed with a horizontally layered media to represent a gas-sand formation surrounded by shale layers (Figure 8a). Velocity, density, and Q are constant in each bed. In order to take into account the attenuation effects in the synthetics, a finite difference algorithm with a viscoelastic term (linear standard model) was used. Figure 8b displays those synthetics from a layered media. Figure 9 shows the relative attenuation section obtained from the optimized Wigner distribution along the synthetic traces. The attenuation effect produced by gas-sand interface is demonstrated by high values of α .

In the real-data example, the method was applied to 100 traces of seismic line A around well W11. Figure 10a shows where the central trace matched the well. The interpretation of the seismic section shows the top of the carbonate formations (F1, F2, F3, and F4), where it is known that F1 and F2 are oil producers. Figure 10b shows the relative attenuation section, which displays attenuation coefficient as a function of time. The zone of interest (square) denotes an attenuation anomaly, which coincides with the production zone according to well logs. Note the attenuation anomalies, denoted by high α values, below the zone of interest at 0.65 s and at 0.75 s. They correspond to Cretaceous formations F3 and F4, and this could indicate two new potentially producing intervals.

Discussion and conclusions. The attenuation analysis based on the parametric spectral method performed well in detecting frequency-dependent anomalous attenuation zones. The attenuation spectrum from seismic line A revealed a clear anomaly that coincides with fractures at 0.48-0.58 s. This interval, according to log data, corresponds to producing formations F1 and F2.

In this case, attenuation is produced by high fracture density, fluid content, and interactions between cracks and fluid. All these factors combined to enhance attenuation. These results are indicative of squirt flow mechanisms because the viscosity of the reservoir oil is quite high, producing high attenuation at low frequencies (around 70 Hz in Figure 7).

The estimation of the attenuation coefficient has advantages over other time-frequency representations because it does not depend on the size of the analysis window, whereas other methods need to improve the sample rate in order to obtain a good estimate of the power spectrum. The power spectrum in this technique is computed for each sample without any interpolation. This preserves the original features of the data and gives an idea of how frequency content changes in time and space.

It was determined that high attenuation anomalies, from the area of interest, associated to the production intervals (F1 and F2 formations) are consistent with the previous results of the first analysis. Additionally, another interesting result from this technique was the discovery of two new potentially producer intervals, at F3 and F4 formations, by observing high attenuation anomalies. Lastly, the attenuation analysis techniques presented here allowed observing spectral anomalous variations, representing an alternative tool for hydrocarbon

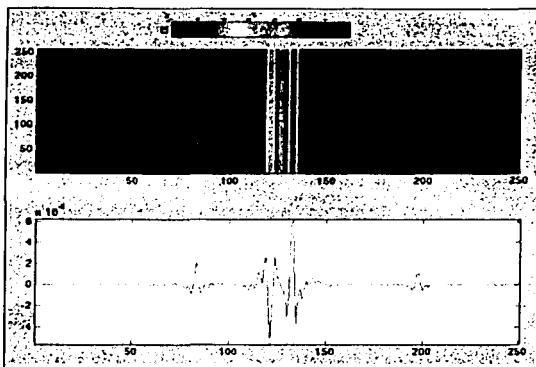
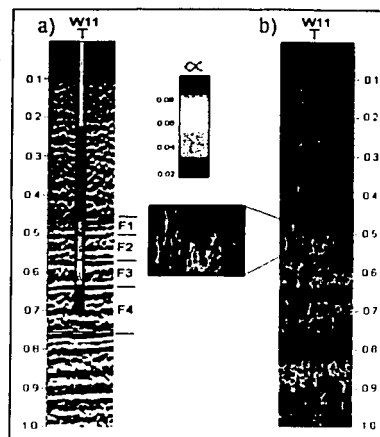


Figure 9. Relative attenuation section (top) from synthetic model (bottom). The attenuation effect produced by gas-sand interface, is confirmed by high α values.

exploration and field development. Moreover, the results of this work helped to identify new potential areas, as well as assisted in the drilling of a horizontal well.

Suggested reading. "Instantaneous bandwidth and dominant frequency with applications to seismic reflection data" by Barnes (Geophysics, 1993). *Time-Frequency Analysis* by Cohen (Prentice-Hall 1995). "Spectral analysis applied to seismic monitoring of thermal recovery" by Eastwood and Dilay (SEG 1993 *Expanded Abstracts*). Local Power Spectra and Seismic Interpretation by

Figure 10. (a) Portion of line A, displaying the zone of interest and the interpretation of Cretaceous formations; the central trace match to well location. (b). Relative attenuation section showing the attenuation coefficient (α) as a function of time. A detail of the zone of interest (on the left), shows the high attenuation anomaly generated by F1 and F2 formations, which are oil producers.



Steeghs (PhD thesis, Univ of Delft, 1997). "An adaptive optimal-kernel time-frequency representation" by Jones and Baraniuk (IEEE Transactions, 1995). "Decomposition of seismic signals via time-frequency representations" by Tobback et al., (SEG 1996 *Expanded Abstracts*). TJE

Acknowledgments: The authors thank Pemex for permission to use its geological and geophysical information.

Corresponding author: luisrc@axayacatl.igeofcu.unam.mx

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN