

**DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA PARA LA
GENERACIÓN DE MODELOS COMPUTACIONALES
ORIENTADOS A LA DETERMINACIÓN DEL PERFIL DE
ESFUERZOS A ESCALA REGIONAL UTILIZANDO EL
MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS (MEF)**

EYBERTH ALEXIS BASTIDAS RUEDA

OMAR YESID DURAN TRIANA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SATANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA DE PETRÓLEOS
BUCARAMANGA**

JUNIO 2010

**DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA PARA LA
GENERACIÓN DE MODELOS COMPUTACIONALES
ORIENTADOS A LA DETERMINACIÓN DEL PERFIL DE
ESFUERZOS A ESCALA REGIONAL UTILIZANDO EL
MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS (MEF)**

**EYBERTH ALEXIS BASTIDAS RUEDA
OMAR YESID DURAN TRIANA**

Tesis de Pregrado

Para optar el título profesional de Ingeniero de Petróleos

Director:

ELKIN RODOLFO SANTAFÉ

M.Sc. - Universidad Industrial de Santander

Codirector:

WILIAN MAURICIO AGUDELO

Ph.D. - ICP

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA DE PETRÓLEOS**

BUCARAMANGA

JUNIO 2010

Agradecimientos

No cabría en un libro todas las personas a las cuales les agradezcamos su apoyo y sus valiosos aportes a este trabajo; sin embargo sea esta la oportunidad para manifestar nuestra gratitud a nuestras familias por permitirnos continuar, a nuestros amigos por su apoyo, a nuestro director por sus valiosos aportes y por último las entidades que mencionaremos a continuación por la generación de espacios para el desarrollo de la investigación realizada

- Grupo de Investigación en Tecnologías Alternativas para Hidrocarburos (GITAH)
- Grupo de Investigación Petrosísmica (PS)
- Escuela de Geología
- Universidad Industrial de Santander UIS
- Instituto Colombiano del Petróleo ICP

Dedicatoria Omar: A mis Padres.

Dedicatoria Eyberth:

A Viviana mi hermana, por ser la persona por la cual afronto el día a día.

A mis padres por ser el soporte de mi vida

Contenido

Título	i
Título	ii
Agradecimientos	vi
Dedicatoria	vii
Dedicatoria	viii
Tabla de contenidos	ix
Lista de Figuras	x
Lista de Tablas	xi
Resumen	xii
Abstract	xiii
1 INTRODUCCIÓN	1
1.1 MODELAMIENTO GEOLÓGICO	1
1.2 FALLAMIENTO	2
1.3 REOLOGÍA DE LOS GEOMATERIALES	4
1.4 MECÁNICA COMPUTACIONAL	5
2 FALLAMIENTO TECTÓNICO	7
2.1 CARACTERÍSTICAS DE LAS FALLAS	7
2.1.1 El Estado de Esfuerzo Crítico	8
2.1.2 Criterios de Falla	13
2.1.3 Aspectos Fenomenológicos del Comportamiento de las Rocas	16
3 TEORÍA DE DEFORMACIÓN	20
3.1 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN - BALANCE	20
3.1.1 Conservación de la masa	21
3.1.2 Cinemática de los campos de velocidades	21
3.2 MODELO DE MATERIAL	22
3.2.1 Axiomas de Cauchy - Ecuación de Momento	22
3.2.2 Tensor de Esfuerzo	22
3.2.3 Vector y Líneas de Flujo	24
3.2.4 Flujo Viscoso	25
3.3 ECUACIONES CONSTITUTIVAS	26
3.3.1 Ecuación de Conservación de Momento en coordenadas espaciales	26
3.3.2 Ecuación de Navier-Stokes	27

3.4	DESCRIPCIÓN CINEMÁTICA DEL MOVIMIENTO	27
3.4.1	Coordenadas	28
3.4.2	Derivadas Materiales de tensores	29
4	FUNDAMENTOS DE MODELAMIENTO CON ELEMENTOS FINITOS	31
4.1	ELEMENTOS FINITOS	31
4.1.1	Estado del arte	31
4.1.2	Sistema de Coordenadas y Funciones de Forma	33
4.1.3	Velocidades dentro del elemento	37
4.1.4	Tasas de deformación	37
4.1.5	Métodos de Aproximación	38
4.2	DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO ALE (ARBITRARY LAGRANGIAN EULERIAN)	40
4.2.1	Formulación en Residuos Ponderados	41
4.2.2	Discretización del tiempo	42
5	METODOLOGÍA DE MODELAMIENTO	46
5.1	PRE-PROCESAMIENTO	46
5.1.1	Extracción de la nube de puntos	48
5.1.2	Generación de la base de datos	49
5.2	PROCESAMIENTO	52
5.3	POST-PROCESAMIENTO	54
6	MODELOS GEOLÓGICOS	56
6.1	MODELO 1 - EXTENSIÓN	56
6.1.1	Descripción	56
6.1.2	Resultados	60
6.2	MODELO 2 - OVER THRUSTING	62
6.2.1	Descripción	63
6.2.2	Resultados	66
6.3	MODELO 3 - EMPUJE TECTÓNICO	69
6.3.1	Descripción	70
6.3.2	Resultados	74
7	DISCUSIÓN	80
7.1	Sobre la investigación y los resultados	80
	Bibliografía	83
A	MODELO 4 - CASO DE ESTUDIO NO EXITOSO	85
A.1	DESCRIPCIÓN	85
A.1.1	Geometría	86
A.1.2	Parámetros Computacionales	87
A.1.3	Condiciones de Frontera	89
A.1.4	Resultados	90

B	Propiedades de los Materiales	102
B.1	Modelo 1	102
B.2	Modelo 2	102
B.3	Modelo 3	104
B.4	Modelo 4	104
C	Fundamentos Matemáticos	107
C.1	Definiciones de Escalar, Vector, Matriz y Tensor	107
C.1.1	Notación de Índices	107
C.1.2	Simetría	109
C.2	Delta de Kronecker y el Símbolo de Permutación	109
C.3	Transformación de Coordenadas Cartesianas	110
C.4	Tensores Cartesianos	111
C.5	Valores Principales y Direcciones de Tensores Simétricos de Segundo Orden.	112
C.6	Cálculo de Tensores Cartesianos	114
C.7	Teorema de Divergencia o Teorema de Gauss	115
C.8	Teorema de Stokes	116
C.9	Teorema de Green en el Plano	116
C.10	Teorema del Valor Cero	116
D	Formato del Archivo de Entrada	117
D.1	Estructura	117
D.1.1	Componentes	117
D.1.2	Plugins	117
D.1.3	EulerDeform	118
D.1.4	Condiciones de frontera	118
D.1.5	Variables	118
E	Formato del Archivo de Salida	119
E.1	Archivos VTK: .vts, .pvts, .vtu, y .pvtu	119
E.2	.dat Archivos ASCII	119
F	Archivos de Soporte	121
F.1	Software CAD - Archivos DXF	121
F.2	Applet Java	123
G	Licencia GNU	125

Lista de Figuras

1.1	Imagen de un modelo estructural y su respectivo modelo computacional simplificado. Referencia <i>www.kminante.cl</i>	2
1.2	Esquema de movimiento de hidrocarburos por diferencia de densidades y diferencias de presión. Referencia <i>Autor</i>	3
1.3	Dorsales oceánicas - principales límites de las placas tectónicas. Referencia <i>www.laalianzadegaia.com</i>	4
1.4	Plegamiento dúctil. Referencia <i>www.granadanatural.com</i>	5
2.1	Orientación del primer principal σ_1 respecto a la superficie de falla. Referencia <i>Autor</i>	8
2.2	Estados límites en el plano de esfuerzos. Referencia <i>Autor</i>	9
2.3	Elementos planares en un espacio físico. cada plano es asociado a los puntos de tangencia T y T' . Referencia <i>MANDL G. 1988</i>	10
2.4	Clasificación de las fallas según Anderson. Referencia <i>MANDL G. 1988</i>	11
2.5	Dualidad de los estados tectónicos límites. Referencia <i>MANDL G. 1988</i>	12
2.6	Debilitamiento tectónico. Referencia <i>Autor</i>	13
2.7	Representación de la configuración de Mohr-Coulomb. Referencia <i>FJAER E. 2008</i>	14
2.8	Sección transversal del criterio de Mohr-Coulomb. Referencia <i>FJAER E. 2008</i>	15
2.9	Representación de la configuración de algunos criterios. Referencia <i>FJAER E. 2008</i>	16
2.10	Comportamiento de los materiales. Referencia <i>SOUZA NETO EA 2008</i> .	17
2.11	Comportamientos característicos del flujo dependiente del tiempo. Referencia <i>SOUZA NETO EA 2008</i>	17
3.1	Postulado de Cauchy. Referencia <i>OLIVER X. 2002</i>	22
3.2	Representación geométrica del tensor de esfuerzos. Referencia <i>Autor</i>	23
3.3	Representación gráfica del vector tasa de desplazamiento. Referencia <i>Autor</i>	24
3.4	Tipos de descripción del movimiento. Referencia <i>Autor</i>	27
3.5	Sistema coordinado. Referencia <i>Autor</i>	29
4.1	Abstracción de una superficie real por medio de una nube de puntos. Referencia <i>www.gecko3d.com.au</i>	32

4.2	Construcción de un modelo en elementos finitos. Referencia <i>CHANDRUPATLA T. 2002.</i>	34
4.3	Sistema coordinado global y local del elemento. Referencia <i>CHANDRUPATLA T. 2002.</i>	35
5.1	Esquema general del proceso. Referencia <i>Autor.</i>	47
5.2	Uso de la entidad línea para dibujar las geometrías a modelar. Referencia <i>Autor.</i>	47
5.3	Forma de dibujar las estructuras. Referencia <i>Autor.</i>	48
5.4	Proceso de reconstrucción de la geometría a analizar. Referencia <i>Autor.</i>	49
5.5	Interfaz de usuario - Visualización utilizando el navegador <i>Mozilla.</i> Referencia <i>Autor.</i>	50
5.6	Botón de preprocesamiento. Referencia <i>Autor.</i>	51
5.7	Botón generación del formulario. Referencia <i>Autor.</i>	51
5.8	Flujo de trabajo del software GALE. Referencia <i>Manual Usuario GALE 1.4.1.</i>	54
5.9	Formato archivo "post.txt" - Archivo creado utilizando el editor <i>gedit</i> de Linux. Referencia <i>Autor.</i>	55
6.1	Domo de sal - Norte de Alemania. Realizado por Behrman 1949 y simplificado por Horsfield en 1980; El cuerpo salino genera múltiples fallas normales conjugadas que afectan los estratos deformados. Referencia <i>Mandl, G. (1988).</i>	57
6.2	Geometría del modelo. A- Modelo dibujado en QCAD. B- Modelo discreto visualizado en Paraview.	58
6.3	Condiciones de borde para el modelo.	60
6.4	Gráfico comparativo; zonas con deformación después de la falla coinciden con las zonas donde el material empieza a perder su continuidad.	61
6.5	Resultados de las variables de campo a las condiciones dadas. A- Campo de velocidad, B- Distribución de los materiales. C- D- Orientaciones de los esfuerzos principales izquierda) σ_1, σ_2 . E- Deformación post falla usando DruckerPrager. F- Velocidad de deformación. Visualizado en Paraview.	62
6.6	Esquema de un múltiple Cabalgamiento Imbricado. Referencia <i>Mandl, G. (1988).</i>	63
6.7	Geometría construida a partir de la tabla-B.2.	64
6.8	Malla y distribución de los materiales. A- En mallado utilizado para el estudio 512 elementos y 585 nodos computacionales. B- Distribución de los materiales en el modelo. Visualizado en Paraview.	65
6.9	Condiciones de frontera para el modelamiento. A- Problema estructural. B- Problema térmico	66
6.11	Fallas formadas debido al empuje impuesto (ver fig.6.9). Visualizado en Paraview.	67

6.10	Resultados a 18000 [años], usando las propiedades de la tabla-B.3. A- Campo de velocidades $\left[\frac{m}{s} \cdot \exp^{-25}\right]$. B- Magnitud y orientación de σ_1 [MPa]. C- Magnitud y orientación de σ_2 [MPa]. D- Magnitud y distribución del esfuerzo cortante máximo τ_{max} [MPa]. E- Campo de presiones [MPa]. F- Campo de temperaturas [K]. Visualizado en Paraview.	67
6.12	Evolución del modelo después de 18000 [años] hasta el tiempo final de 100000 [años]. Visualizado en Paraview.	69
6.13	Mapa de las zonas tectónicas de Colombia. Tomado de Rafiquil, MD. Hayashi, D. (2009) Referencia [25].	71
6.14	Área de estudio. Arriba) Descripción más detallada del área mostrada en la figura-6.13. Abajo) Sección geológica regional A-A'. Tomado de Rafiquil, MD. Hayashi, D. (2009) Referencia Extensional Stress in the Colombian Eastern Cordillera Fold-and-Thrust Belt (Northern Andes): Insights from 2D Finite Element Modeling.	72
6.15	Geometría del modelo dibujado en QCAD.	72
6.16	Malla y distribución de los materiales. A- En mallado utilizado para el estudio 1024 elementos y 1037 nodos computacionales. B- Distribución de los materiales en el modelo. Visualizado en Paraview.	73
6.17	Geometría y condiciones de frontera para el modelamiento. A- Condiciones de borde para el problema estructural. B- Condiciones de borde para el problema térmico.	75
6.18	Resultados usando las propiedades de la tabla-B.4. A- Campo de velocidades $\left[\frac{m}{s} \cdot \exp^{-25}\right]$. B- Magnitud y orientación de σ_1 [MPa]. C- Magnitud y orientación de σ_2 [MPa]. D- Magnitud y distribución del esfuerzo cortante máximo τ_{max} [MPa]. E- Campo de presiones [MPa]. F- Campo de temperaturas [K]. Visualizado en Paraview.	76
6.19	Estudio 1 tabla-B.5 -A. Zonas de deformación después de la falla. A- Experimento 1. B- Experimento 2. C- Experimento 3. D- Experimento 4. Visualizado en Paraview.	77
6.20	Estudio 2 tabla-B.5 -B; Zonas de deformación después de la falla. A- Experimento 5. B- Experimento 6. C- Experimento 7. D- Experimento 8. Visualizado en Paraview.	77
6.21	Estudio 3 tabla-B.5 -C; Zonas de deformación después de la falla. A- Experimento 9. B- Experimento 10. C- Experimento 11. D- Experimento 12. Visualizado en Paraview.	78
6.22	Estado del Experimento 1 a 9000 [años]. A- Campo de velocidades. B- Deformación después de la falla. Visualizado en Paraview.	79
A.1	Imagen sísmica en profundidad de la zona resaltada en la fig. A.2 C. La escala en la dirección horizontal se da en la parte inferior de la imagen.	86
A.2	Evolución geométrica de la zona de estudio.	87
A.3	Malla y distribución de los materiales. A- Enmallado utilizado para el estudio 13900 elementos y 14229 nodos computacionales. B- Distribución de los materiales en el modelo.	88

A.4	Sección del modelo enmallado y su distribución de partículas asociadas	89
A.5	Condiciones de borde. A- Condiciones para el problema estructural. B- Condiciones para el problema térmico.	90
A.6	Dependencia de la viscosidad con la temperatura, para $\eta_0 = 2.317 \exp^{25} [Pa \cdot s]$ y $\theta = 0.011512$	91
A.7	Comparación del las geometrías a 15 [Ma]. A- Modelo computacional discreto. B- Modelo estructural. C- Superposición de las imágenes superiores.	91
A.8	Orientaciones de los esfuerzos principales a 15 [Ma].	92
A.9	Gráfico de contornos. A- Cortante máxima. B- Campo de presiones. C- Campo de viscosidades.	93
A.10	Estado de la zona a 8 [Ma] calculado por GALE. A. Desplazamientos de los materiales. B. Gráfico comparativo con el modelo cinemático al mismo tiempo.	95
A.11	Orientación de los esfuerzos principales y deformación post falla a 8 [Ma]. A- Esfuerzo principal σ_1 . B- Esfuerzo principal σ_2 . C- Deformación post falla; las zonas en colores más cálidos son las zonas más deformadas después de que el material ha fallado según el criterio. . . .	96
A.12	Gráficas de contorno para el estado correspondiente a 8 [Ma]. A- Distribución de la cortante máxima. B- Distribución de la presión. C- Distribución de la temperatura.	97
A.13	Estado de la zona a 15 [Ma] calculado por GALE. A- Desplazamientos de los materiales. B- Gráfico comparativo con el modelo cinemático al mismo tiempo.	99
A.14	Orientación de los esfuerzos principales y deformación post falla a 15 [Ma]. A- Esfuerzo principal σ_1 . B- Esfuerzo principal σ_2 . C- Deformación post falla; las zonas en colores más cálidos son las zonas más deformadas después de que el material ha fallado según el criterio. . . .	100
A.15	Gráficas de contorno para el estado correspondiente a 15 [Ma]. A- Distribución de la cortante máxima. B- Distribución de la presión. C- Distribución de la temperatura.	101
C.1	Sistema Cartesiano rotado	110
F.1	Modelo diseñado a través de software CAD. Referencia <i>Revisiones web</i> .	122
F.2	Duke la mascota de Java. Referencia <i>Revisiones web</i>	124
F.3	Ejecución de un applet. Referencia <i>Autor</i>	124
G.1	Richard Matthew Stallman y sus amigos. Referencia <i>Revisiones web</i> . . .	126

Lista de Tablas

3.1	Comparación de las variables elásticas lineales y viscosas Newtonianas. Jaeger (1962, p.57), Davis and Selvadurai (1996, pp. 46-47)	26
4.1	Línea de tiempo con los más importantes desarrollos del MEF	33
B.1	Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-6.1.	102
B.2	Nube de puntos para la generación de la geometría del modelamiento 6.2.	103
B.3	Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-6.2.	103
B.4	Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-6.3.	104
B.5	Experimentos realizados el trabajo de Rafiqul, MD. Hayashi, D. (2009), en la Referencia [25]. A. Estudio 1; evaluación del aumento de cohesión y ángulo de fricción. B. Estudio 2; evaluación de la variación de la cohesión. C. Estudio 3; evaluación de la variación del ángulo de fricción interna. El indicador † es designado para los valores dados en la tabla-B.4.	105
B.6	Relación índices de material con sus respectivas formaciones.	106
B.7	Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-A.	106

Resumen

Título: *Desarrollo de una Metodología para la Generación de Modelos Computacionales Orientados a la Determinación del Perfil de Esfuerzos a Escala Regional Utilizando el Método de Elementos Finitos (MEF).*¹

Autores: *Omar Yesid Duran Triana.*² - *Eyberth Alexis Bastidas Rueda.*³

Palabras claves: *Elementos finitos, Ecuación Constitutiva, Esfuerzo, Deformación, Velocidad, Teoría de Deformación, Mecánica del continuo.*

La simulación y el modelamiento geomecánico regional intenta recrear la evolución de las diversas estructuras geológicas a lo largo del tiempo. La habilidad y veracidad del modelo permite calcular deformaciones, esfuerzos, temperaturas, vectores de flujo, evolución química de componentes, entre otros. Mejorando así, nuestro conocimiento acerca del comportamiento dinámico de la tierra.

Los modelos geológicos intentan reproducir la forma de las estructuras resultante de la continua evolución de la interacción no lineal de las rocas y un comportamiento de grandes deformaciones; el método de elementos finitos se presenta como técnica de solución numérica alternativa, que debido a su fácil adaptabilidad e implementación en geometrías complejas, permite resolver este tipo de problemáticas mediante la adaptación de modelos constitutivos implementados a través de ecuaciones diferenciales características. El desarrollo de una secuencia de pasos metodológicos que calcula el perfil de esfuerzos y estado de deformación, objeto de este estudio, por lo tanto se convierte en una pieza clave en el análisis geomecánico de la zona de interés; utilizando las ecuaciones planteadas en la dinámica de fluidos las cuales describen el comportamiento de grandes deformaciones en la litósfera, además se hace uso de funciones matemáticas que recrean la fluencia y la regla de flujo asociado a la descripción de posibles zonas fracturadas.

La reología necesaria para describir la litósfera es altamente no lineal y cerca de la superficie donde las temperaturas no son mayores a 600°C (estratos someros) hace necesario considerar un comportamiento lineal durante las primeras etapas de la deformación en el modelo constitutivo del material. La teoría de visco plasticidad por tanto se presenta como la función matemática que caracteriza el comportamiento de los materiales de los modelos simulados en el código GALE escrito en C. Código de libre distribución que ha sido diseñado para modelar procesos tectónicos sobre escalas de tiempo geológico.

¹Proyecto de Grado.

²Facultad Ingenierías Físico-Químicas; Escuela Ingeniería de Petróleos; Director Elkin Santafé; Codirector Willian Agudelo.

³Facultad Ingenierías Físico-Químicas; Escuela Ingeniería de Petróleos; Director Elkin Santafé; Codirector Willian Agudelo.

Abstract

Title: *Development of a Methodology for the Generation of Computer Assisted Models Oriented to Determine the Regional Stress Profile Using the Finite Element Method (FEM).*⁴

Authors: *Omar Yesid Duran Triana.*⁵ - *Eyberth Alexis Bastidas Rueda.*⁶

Key Words: *Finite element, Constitutive equation, stress, strain, velocity, deformation theory, continuum mechanics.*

Basin simulation and geomechanical modeling attempts to recreate the evolution of various geological structures over time. The ability and accuracy of the model give us information about deformation, stress, temperature, flow vectors, chemical evolution of components, etc. Improving our knowledge about the dynamic behavior of the earth.

Geological models attempt to reproduce the shape of the structures resulting from the continuing evolution of the nonlinear interaction of rocks and large strain behavior, the finite element method is presented as an alternative numerical solution technique, which due to its easy adaptability and implementation in complex geometries, solves these problems by adapting constitutive models implemented through differential equations characteristics. The development of a sequence of methodological steps to calculate the stress profile and strain state, the subject of this study, therefore becomes a key player in the geomechanical analysis of a specific area, using the the dynamic fluid equations which describe the behavior of large deformation in the lithosphere, also makes use of mathematical functions to recreate the fluency and flow rule associated with the description of possible fractured zones.

The rheology than describe the lithosphere is highly nonlinear and near the surface where temperatures are not greater than 600 °C (shallow strata) is necessary to consider a linear behavior during the early stages of deformation in the material constitutive model. Visco plasticity theory is therefore presented as a mathematical function that characterizes the behavior of materials models simulated in the code written in C, GALE. Open source code that has been designed to model tectonic processes on geological time scales.

⁴Undergraduate Thesis.

⁵Physical-Chemical Engineering Faculty; Petroleum Engineering Department; Advisor Elkin Santafe; Co-Advisor Willian Agudelo.

⁶Physical-Chemical Engineering Faculty; Petroleum Engineering Department; Advisor Elkin Santafe; Co-Advisor Willian Agudelo.

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1 MODELAMIENTO GEOLÓGICO

La interpretación estructural de datos geológicos, se fundamenta en modelos y conceptos desarrollados en la geología estructural. Estos conceptos explican como las masas rocosas son deformadas por procesos de extensión o compresión generando o destruyendo las formas de la litósfera, de forma general estos modelos y conceptos son de carácter geométrico/cinemático en donde no se tiene en cuenta la configuración interna del medio en cuestión. Aún así, este tipo de análisis ha mejorado el entendimiento de los procesos tectónicos que moldean la superficie de la litósfera.

Por ello se hace necesario observar desde un punto de vista geomecánico como las formas del subsuelo proporcionan una valiosa información sobre la configuración interna de la estructura, haciendo que la tarea de describir como se deforman los cuerpos rocosos tenga un carácter mecánico por excelencia, y por ende el objeto de la geomecánica en la geología estructural, es proporcionar un análisis teórico, computacional y experimental de los procesos tectónicos que provocan las deformaciones. Los modelamientos geológicos se pueden contrastar con los estudios de campo los cuales son elaborados a partir de observaciones e interpretaciones que dan soporte y argumentan los resultados obtenidos a través de este *Laboratorio de pruebas*.

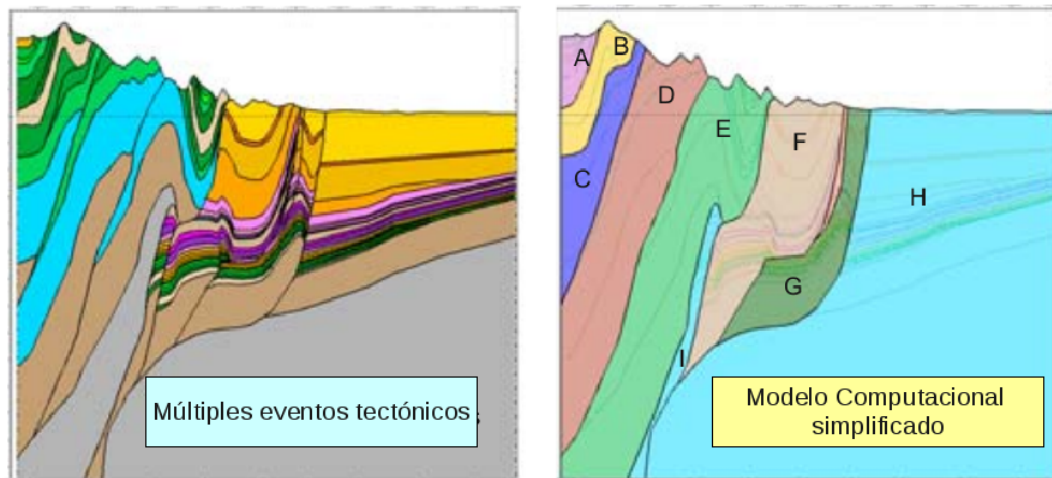


Figura 1.1: Imagen de un modelo estructural y su respectivo modelo computacional simplificado. Referencia www.kminante.cl.

La principal ventaja del modelamiento geológico es la posibilidad de que los parámetros sean controlados y variados para evaluar ciertas relevancias de los procesos que ocurren en la realidad, mediante el uso de ciertas aproximaciones como se observa en la figura 1.1 y aproximaciones como la teoría del medio continuo. Aunque al intentar comprender la gran complejidad del fenómeno de la deformación en las rocas conduzca a modelos discretos o analíticos que están lejos de la realidad, irónicamente son la ventana que ofrece una visión de lo que realmente ocurre. En consecuencia el objetivo del modelamiento geológico es llevar al nivel de la simulación, la habilidad de reproducir la evolución de las estructuras geológicas durante su deformación y simultáneamente la distribución de esfuerzos, temperaturas, flujo de fluidos y comportamientos químicos para mejorar en gran parte el entendimiento de la tierra y sus procesos dinámicos.

Un sistema petrolífero naturalmente es una parte de una gran región la cual fue sometida a cambios energéticos y geomorfológicos, generando estructuras de entrapamiento para la acumulación de hidrocarburos. En este orden de ideas, al usar el modelamiento geológico para encontrar la forma de una estructura en el pasado, proporciona indicios de su generación, la existencia de otras estructuras asociadas, y aún más importante proporciona posibles rutas de migración de los fluidos que saturan el medio, ya que los cambios de esfuerzos de la matriz rocosa tiene una íntima relación con los cambios de presión del fluido contenido en la misma, como se muestra en la fig. 1.2, el fluido se desplaza a las zonas de menor presión y concentración de esfuerzos.

1.2 FALLAMIENTO

Una *falla* puede definirse como una pérdida en la continuidad de un material, la cual permite grandes desplazamientos (del orden de $[Km]$) orientados sobre una superficie denominada *plano de falla*, aunque en realidad dicho plano de falla es una región de alta concentración de deformación con sistemas de fracturas asociados a una tendencia preferencial de movimiento; de hecho todos los sistemas de fallas del planeta son los encargados de disipar la energía acu-

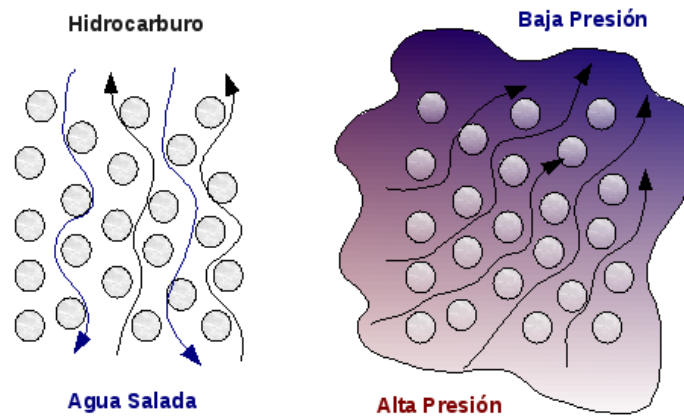


Figura 1.2: Esquema de movimiento de hidrocarburos por diferencia de densidades y diferencias de presión. Referencia *Autor*.

*mulada por los desplazamientos relativos de la placas tectónicas*¹ las cuales dejan sus marcas en los límites de cada placa ya sea en una zona de subducción o una zona extensiva en una dorsal oceánica (fig.1.3). La importancia del estudio de las fallas y sus desplazamientos asociados radican en cómo se acumula y libera la energía en forma de sismos, desde la óptica de la exploración de yacimientos es vital conocer como estos desplazamientos modifican las estructuras haciéndolas propicias para una acumulación o para el escape de fluidos.

¹Turcotte, D. Schubert, G. (1982), *Geodynamics; Applications of Continuum Physics to Geological Problems*. JHON WILEY SONS



Figura 1.3: Dorsales oceánicas - principales límites de las placas tectónicas. Referencia www.laalianzadegaia.com.

En general existen tres procesos que conducen la deformación y el fallamiento a nivel tectónico; cinturones de empuje los cuales son los más complejos debido a que una zona de empuje está en constante modificación de las estructuras generadas creando fallas inversas. Las zonas de extensión las cuales en forma general son las causantes de fallas normales, y zonas de alta flexión las cuales comparten características de las dos anteriores en términos de fallamiento.

1.3 REOLOGÍA DE LOS GEOMATERIALES

Cerca a la superficie las rocas no solo exhiben un comportamiento frágil sino que también se deforman de forma análoga a los fluidos, como lo muestran una gran variedad de pliegues en la corteza terrestre (fig.1.4). Las ondas sísmicas se propagan a través de la corteza y el manto con relativa atenuación.

Por debajo de ciertos regímenes de temperatura, presión y escala de tiempo el comportamiento reológico de los geomateriales suele ser asumido elástico. Sin embargo, los sólidos cristalinos tienen comportamientos de un fluido altamente viscoso a escalas de tiempo cuando menos a 1000 [años]^2 Estos comportamientos de las rocas son el resultado de grandes escalas de tiempo y espacio que permiten que los materiales se deformen en gran magnitud.

²Turcotte, D. Schubert, G. (1982), *Geodynamics; Applications of Continuum Physics to Geological Problems*. JHON WILEY SONS



Figura 1.4: Plegamiento dúctil. Referencia www.granadanatural.com.

Existen modelos extraídos de la mecánica de rocas que tratan de explicar en un modelo matemático la respuesta del medio rocoso ante la aplicación de una fuerza de origen tectónico, denominados en forma general *modelos de material*. La mecánica de rocas divide en dos grandes ramas el comportamiento del material; el comportamiento frágil y dúctil. El primero se designa para materiales que acumulan grandes cantidades de energía (alto potencial elástico) y su deformación es básicamente independiente de la tasa de deformación y la historia de esfuerzos que el material haya experimentado. Por el contrario el comportamiento dúctil relaciona la tasa de deformación con la historia de esfuerzos, haciéndolo dependiente de la misma y por tanto éste tipo de comportamiento disipa más energía (Bajo o nulo potencial elástico) (fig.1.4).

1.4 MECÁNICA COMPUTACIONAL

La mecánica es una rama de la física que describe el movimiento de los cuerpos, y su evolución en el tiempo bajo la acción de una perturbación externa. El conjunto de disciplinas que abarca la mecánica convencional es muy amplio y es posible agruparlo en tres bloques principales

- Mecánica Teórica
- Mecánica Aplicada
- Mecánica Computacional

La mecánica teórica se encarga de construir las leyes fundamentales y principios aplicables con un valor intrínsecamente científico. La mecánica aplicada tiene como objetivo transferir todo este conocimiento teórico de la ciencia pura a las aplicaciones ingenieriles, especialmente a

la construcción de modelos matemáticos del fenómeno físico. Por último la mecánica computacional resuelve problemas específicos por simulación a través de métodos numéricos implementados en computadores³.

Varias ramas de la mecánica computacional se pueden distinguir según a la escala física del problema.

- Nano mecánica
- Mecánica del Continuo
 - Sólidos
 - Fluidos
 - Multifísica
- Sistemas Dinámicos

La mecánica del continuo estudia los cuerpos a un nivel macroscópico formulando relaciones constitutivas para problemas estructurales, geomecánica, mecánica de suelos y mecánica de fluidos, con el fin de dar soluciones a problemas específicos de aplicaciones científicas e ingenieriles.

Como el fundamento y el auge de la mecánica computacional ha sido el avance tanto en métodos numéricos, como también el desarrollo de equipos con capacidad de procesamiento cada vez mayor. La solución al problema estudiado en este trabajo será a través de técnicas por elementos finitos.

El término Método de Elementos Finitos (MEF) actualmente identifica un gran espectro de técnicas numéricas que comparten características similares; dos clasificaciones generales que se utilizan en la mecánica computacional son:

Formulación MEF

- Desplazamientos
- Equilibrio
- Mixta
- Híbrida

Solución MEF

- Rigidez
- Flexibilidad
- Mixta

En resumen en este trabajo el problema de las grandes deformaciones de la corteza terrestre es resuelto como un problema de la mecánica de fluidos y su solución es dada a través de una formulación híbrida que es explicada con más detalle en una sección posterior.

³Parafraseando: *Un mecánico computacional es una persona que busca soluciones a un problema dado. Un mecánico aplicado es una persona que busca problemas para unas soluciones dadas. Un mecánico teórico es una persona que prueba la existencia de un problema y su solución.*

Capítulo 2

FALLAMIENTO TECTÓNICO

Las fuerzas tectónicas junto con los procesos erosivos son los agentes que conducen y determinan la orogénesis de nuestro planeta. Mientras uno se encarga de deformar, elevar o hundir masas rocosas el otro se encarga de esculpir las formas. La deformación y erosión se llevan de manera continua y son parte de la dinámica que transforma nuestro planeta.

Si bien estos dos procesos trabajan en conjunto, en el desarrollo de esta investigación se omitirá la influencia de los procesos erosivos y todo el estudio será centrado en la mecánica de las deformaciones a grandes escalas y su modelamiento mediante técnicas de elementos finitos. En esta sección se pretende mostrar las características generales del fallamiento tectónico y algunos criterios de falla.

Tres procesos de deformación generales (Thrusting, Extension y Wrench) que generan los fallamientos, son ampliamente explicados en la literatura. En aras de no hacer tan extensiva la lectura se recomienda revisar la referencias [1, 2, 5] las cuales tratan estos tipos de procesos tectónicos.

2.1 CARACTERÍSTICAS DE LAS FALLAS

Las inmensas masas de roca que componen las 15^1 placas tectónicas de nuestro planeta están sujetas a enormes tensiones y fuerzas compresivas que acumulan y liberan una poderosa cantidad de energía ($4.2 [ZJ]^2$ para un sismo de 9.0 en la escala de Richter). El efecto combinado de tensión y compresión genera la deformación del medio hasta que se alcanza un límite donde el material se fractura y pierde su continuidad (*Condición límite*).

¹Nemcok, M. Schamel S. Gayer R. (2005), Thrustbelts; Structural Architecture, Thermal Regimes and Petroleum Systems. CAMBRIDGE University Press

² $1 [ZJ] = \text{mil Trillones de Joules } 1 \text{ exp}^{21}$

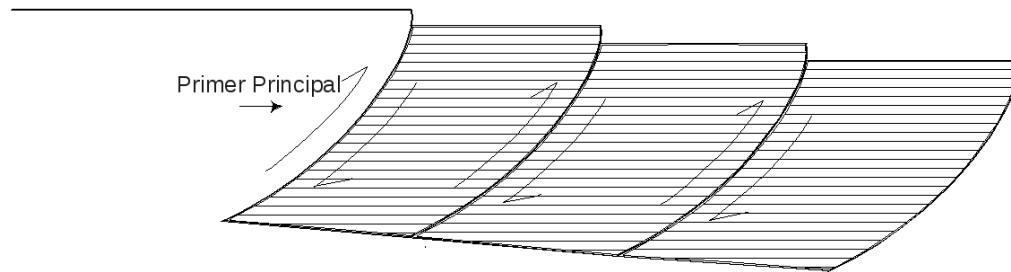


Figura 2.1: Orientación del primer principal σ_1 respecto a la superficie de falla. Referencia *Autor*

El trabajo realizado por las fuerzas tectónicas es totalmente consumido por las fallas, las cuales permiten el reacomodamiento, en ocasiones brusco, de las masas rocosas de la corteza. Por definición el trabajo gastado en un falla activa por $[m^2]$ de su superficie, es el producto del esfuerzo cortante que actúa sobre el plano de falla y el desplazamiento relativo, por lo tanto la orientación del esfuerzo compresivo más grande σ_1 debe hacer un ángulo agudo con la dirección de desplazamiento a lo largo de la falla como se muestra en la figura 2.1.

2.1.1 El Estado de Esfuerzo Crítico

De las pruebas a pequeña escala sobre una variedad de muestras de rocas se concluye que el inicio de un fallamiento a gran escala requiere que el esfuerzo diferencial $\sigma_1 - \sigma_3$ alcance un valor crítico³, en otras palabras cuando el esfuerzo diferencial alcanza un valor igual a dos veces el esfuerzo cortante máximo τ_{max} ; una falla puede iniciarse solo después de que τ_{max} ha alcanzado el valor más alto que el material expuesto puede resistir. Sin embargo en geomateriales este valor crítico no es una constante y es afectado por ciertos factores, entre estos se destaca la presión efectiva de confinamiento σ'

$$\sigma' = \sigma - p = \frac{(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)}{3} - p \quad (2.1)$$

para un geomaterial con un comportamiento frágil, normalmente la ultima fuerza cortante que la roca puede dar, incrementa monótonamente con la presión efectiva de confinamiento. Sin embargo en el rango dúctil este valor es principalmente afectado por la temperatura y la tasa de deformación, disminuye al aumentar la temperatura y aumenta a tasas relativamente rápidas de deformación.

Sin pérdida de generalidad en el estado crítico, los esfuerzos deben cumplir cierta condición límite, en la cual los esfuerzos principales σ_1, σ_2 y σ_3 tiene la siguiente forma

$$\frac{(\sigma_1 - \sigma_3)}{2} = f(\sigma') \quad (2.2)$$

Donde f es una función que incrementa monótonamente con la presión efectiva de confinamiento. A partir de estudios experimentales de rocas se evidencia que el esfuerzo principal

³Mandl, G. (1988), *Mechanics of Tectonic Faulting; Models and Basic Concepts*. ELSEVIER Academic Press.

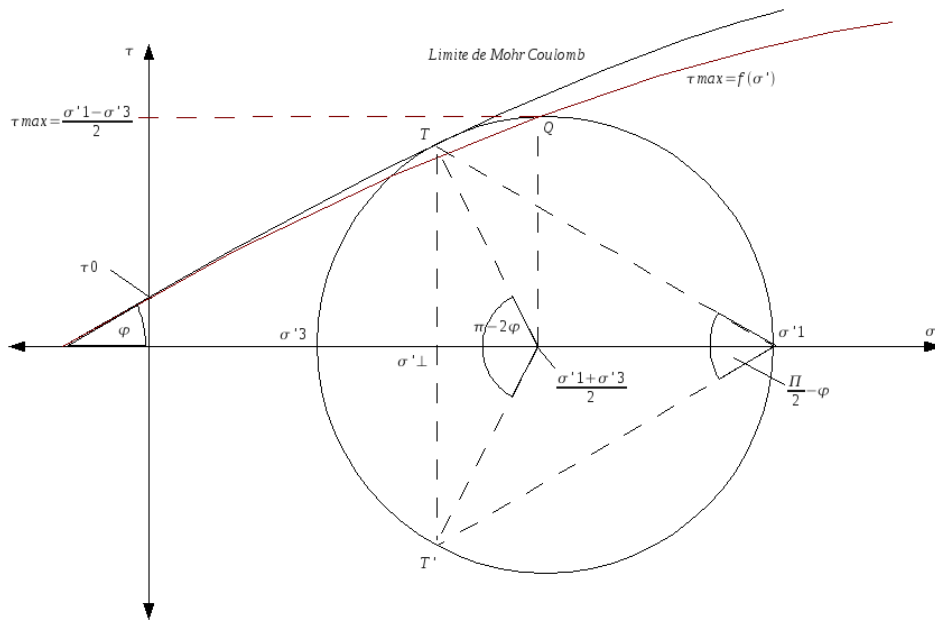


Figura 2.2: Estados límites en el plano de esfuerzos. Referencia *Autor*

medio σ_2 tiene mucha menor influencia que σ_1 y σ_3 por esta razón la condición toma la siguiente forma

$$|\tau_{max}| = \frac{(\sigma_1 - \sigma_3)}{2} = f \left[\frac{(\sigma'_1 - \sigma'_3)}{2} \right] \quad (2.3)$$

la cual es independiente de σ_2 . Para la mayoría de las rocas esta función es aproximadamente lineal bajo cargas compresivas, pero a altas presiones de confinamiento esta línea se curva hasta llegar a ser casi paralela con el eje de los esfuerzos principales como se da en un diagrama circular de esfuerzos mostrado la figura 2.2.

Cualquier punto Q sobre esta línea define un estado de esfuerzos límite con centro en σ'_\perp y vértice Q . El conjunto de todos los estados límites está envuelto por dos líneas; la línea de $f(\sigma')$ y el límite de Mohr Coulomb, el cual en su parte lineal estar dado por

$$|\tau| = \tau_0 + \sigma'_\perp \cdot \tan(\varphi) \quad (2.4)$$

El ángulo de fricción interna es un término original de la mecánica de suelos establecido para la condición límite, e indica la fricción entre partículas, la cual genera una resistencia extra a las fuerzas cortantes que experimenta el material. El parámetro τ_0 es la fuerza de cohesión la cual el material podrá exhibir a cero presión efectiva de confinamiento.

El límite de Mohr Coulomb distingue dos puntos de tangencia (T y T' en la figura 2.2), como la circunferencia asocia los esfuerzos normales y tangenciales a un elemento planar del sólido,

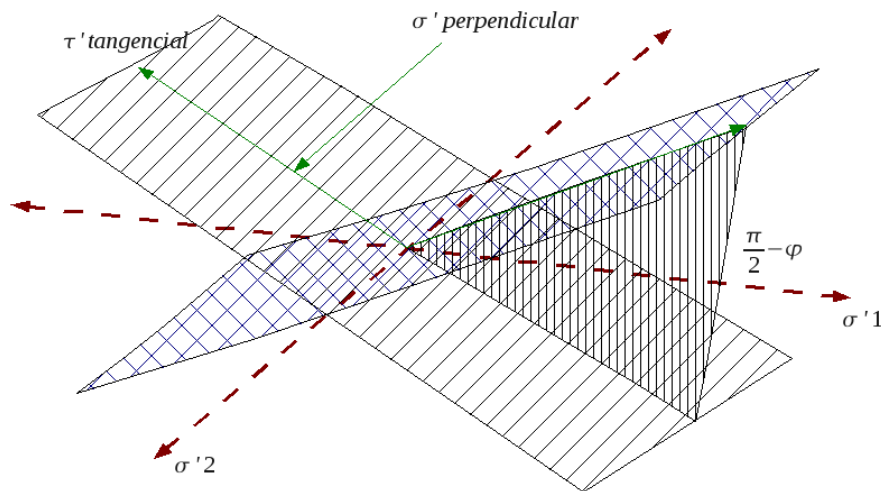


Figura 2.3: Elementos planares en un espacio físico. cada plano es asociado a los puntos de tangencia T y T' . Referencia *MANDL G. 1988*.

dos planos son asociados a un mismo valor de σ'_\perp para dos τ diferentes, los cuales se intersectan en el eje del esfuerzo principal intermedio σ_2 , como es mostrado en la figura 2.3.

Los dos elementos actúan sobre los dos valores críticos de T y T' donde se incluye el ángulo $\frac{\pi}{2} - \varphi$; este ángulo es bisectado por el esfuerzo principal σ_1 , por tanto este debe hacer un ángulo agudo con el plano de falla como es mencionado anteriormente; en términos del límite de Mohr Coulomb el inicio de una falla requiere que sobre un par de elementos planares el valor de la expresión $\left| \frac{\tau - \tau_0}{\sigma'_\perp} \right|$ alcance su máximo valor $\tan(\varphi)$.

La condición límite de Mohr Coulomb es considerada como una definición puramente estática sobre un estado de esfuerzos determinado que dan el inicio de una falla; En este sentido ha sido aceptado por numerosos trabajos y aplicaciones en mecánica de suelos y rocas. El concepto de Mohr Coulomb puede ser considerado como la base de la clasificación de las fallas según Anderson (fig.2.4), esta aplica para campos de esfuerzos tectónicos con direcciones uniformes y con la sobrecarga de los materiales como un esfuerzo principal. Esta condición es llamativamente simple debido a que no tiene en cuenta el efecto del esfuerzo principal intermedio σ_2 .

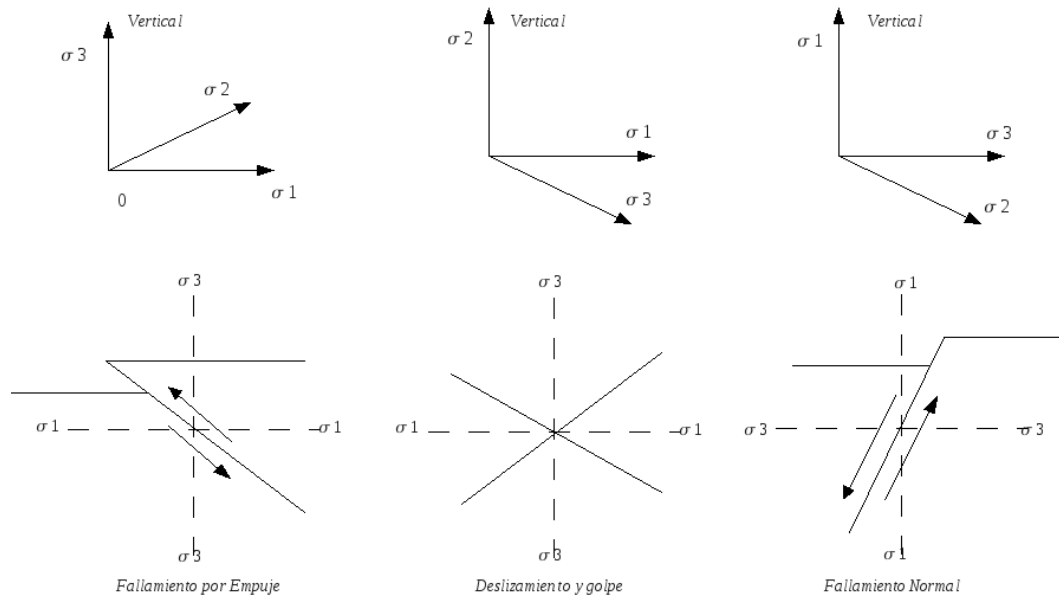


Figura 2.4: Clasificación de las fallas según Anderson. Referencia *MANDL G. 1988*

Estado Limite Tectónico

Cuando un conjunto de estratos está libre de los efectos de un evento tectónico, el esfuerzo principal σ_1 está orientado de forma vertical y el esfuerzo efectivo σ'_1 es el peso de los estratos supra yacentes menos la presión de poro del fluido, por otro lado el esfuerzo horizontal corresponderá al mínimo valor σ_3 . Por tanto la roca en general no estará cerca a su estado límite (fig.2.5), para ello se requiere que un evento tectónico aumente o disminuya lo suficiente el esfuerzo horizontal; en un caso de extensión donde el esfuerzo horizontal se disminuye $\sigma_h \implies \sigma_3$ (fig.2.5) hasta ocurrir fallamiento normal permitiendo que la roca sea extendida en una dirección horizontal; por el contrario en un evento de compresión un segundo estado limite es dado $\sigma_h \implies \sigma_1$ generando fallamiento inversos y demás tipos de falla. Como es mostrado en la figura-2.5 el esfuerzo diferencial en compresión puede ser cuatro veces mayor que su correspondiente para un proceso de extensión, convencionalmente de la mecánica de suelos se adopta la siguiente convención; al estado compresivo se le denomina pasivo y al estado extensivo se le denomina activo. Desde que en un evento de extensión el estado activo es menor ocurrirán fallamientos normales casi de forma general, pero en términos del estado pasivo, una zona sometida a empuje esta embebida en zonas de pre-fallamiento, grandes deformaciones y fallamientos inversos imbricados entre otros.

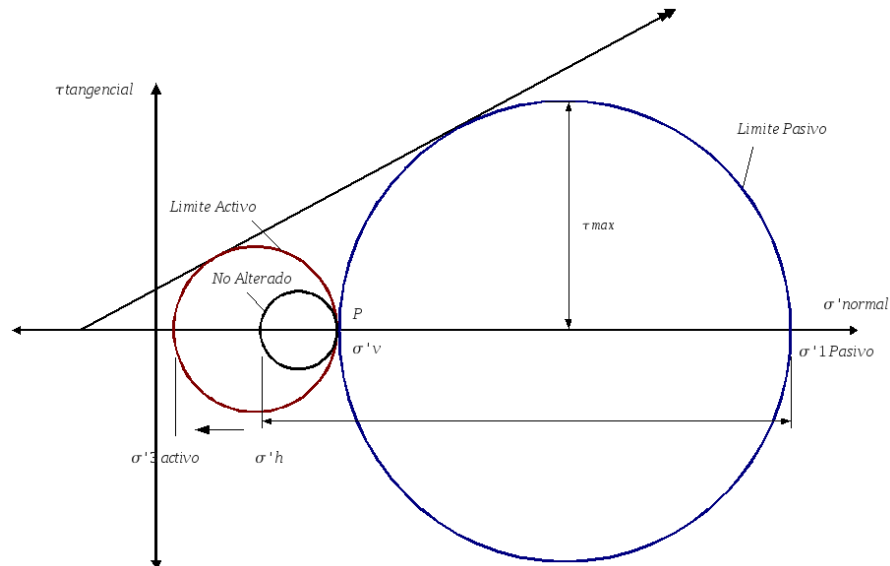


Figura 2.5: Dualidad de los estados tectónicos límites. Referencia *MANDL G. 1988*

Orientación de los planos de Falla

De observaciones de campo y laboratorio, la orientación de un plano de falla está fuertemente controlado por la direcciones de los esfuerzos principales, estas teorías han sido corroboradas por la mecánica del continuo y existe un gran número de criterios de falla en los cuales se crean funciones que dependen de los esfuerzos principales para determinar la falla del material y en algunos casos su orientación preferencial. Como se menciona en el principio del capítulo, la generación de una falla requiere que σ_1 forme un ángulo agudo con el plano de falla que es totalmente desconocido e incierto, aunque por otro lado, si el efecto de σ_2 el esfuerzo intermedio es bastante pequeño se podrá argumentar que la dirección de la cortante sobre un plano de falla deberá ser casi paralela al plano de esfuerzos $\sigma'_1 - \sigma'_3$, y por tanto el plano de falla se intersectará de manera ortogonal al plano de esfuerzos $\sigma'_1 - \sigma'_3$. Aplicando esta teoría al concepto desarrollado por O. Mohr (1900) sobre materiales granulares, donde la resistencia cortante de la roca es la fuerza que conduce el fallamiento, se tiene una seria limitación ante la fuerte anisotropía provocada por la fábrica natural de rocas - *la tierra* - ya que sería el factor del cual el fallamiento dependiera, y en varios casos a pesar de que la roca exhiba planos de foliación y debilidad, en dadas condiciones no fallara preferencialmente por esas áreas de debilidad.

Las fallas conjugadas son un perfecto ejemplo para la orientación no preferencial de los planos de falla. Cuando en un material isotrópico las direcciones de los esfuerzos principales se mantienen fijas durante el proceso de deformación ambos estados límites T y T' de la figura 2.2 tienen la posibilidad de desarrollarse contribuyendo así a la deformación; como en la figura 6.1 un conjunto de fallas conjugadas operan a medida que un cuerpo intrusivo levanta los estratos supra yacentes a este.

El desarrollo de un par de fallas conjugadas requiere de condiciones ideales ya que la rocas por excelencia no son un medio isotrópico y presentan planos de foliación, clivage, entre otras zonas de debilidad, restringiendo más la generación de un par conjugado solo si los esfuerzos principales están orientados sobre los planos de simetría de debilidad del material, caso ideal.

La importancia del Debilitamiento Tectónico

En la mayoría de experimentos se ha establecido que la falla no se forma por una simple propagación de pequeñas fracturas⁴, más bien el mecanismo principal es la acumulación de la deformación, lo cual puede ser inferido de estudios de campo. A medida que la deformación se acumula dentro de una zona se experimenta un decremento en la resistencia del material generando como resultado una no-homogeneidad del mismo y una perturbación del estado de esfuerzos. Por otro lado la generación de una falla va acompañada de una zona de debilidad que se encarga de conducir la dirección de la falla aunque es bien conocido que factores geométricos también pueden modificar la dirección o la generación de las mismas.

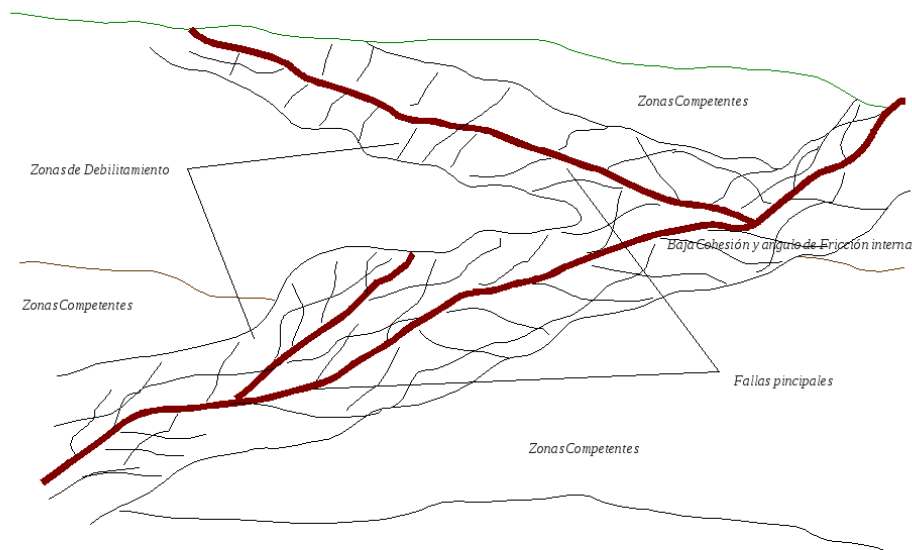


Figura 2.6: Debilitamiento tectónico. Referencia Autor

En conclusión la significancia del debilitamiento en un proceso tectónico es doble; primero, el material al sufrir una modificación en su rigidez crea condiciones para la formación espontánea de una falla, básicamente por la localización de la deformación cortante; segundo, cuando una falla se genera se crea una zona de debilidad alrededor del plano de desplazamiento, zonas que después de un nuevo evento tectónico pueden ser activadas (fig.2.6).

2.1.2 Criterios de Falla

La hipótesis de Mohr mencionada anteriormente da origen a varios criterios que definen el punto de fractura de una roca dependiendo de la función f escogida. El criterio de Mohr-Coulomb supone una dependencia lineal, análoga a la ley de Amonton para deslizamiento de

⁴Hallbauer, 1973; Sobolev 1978

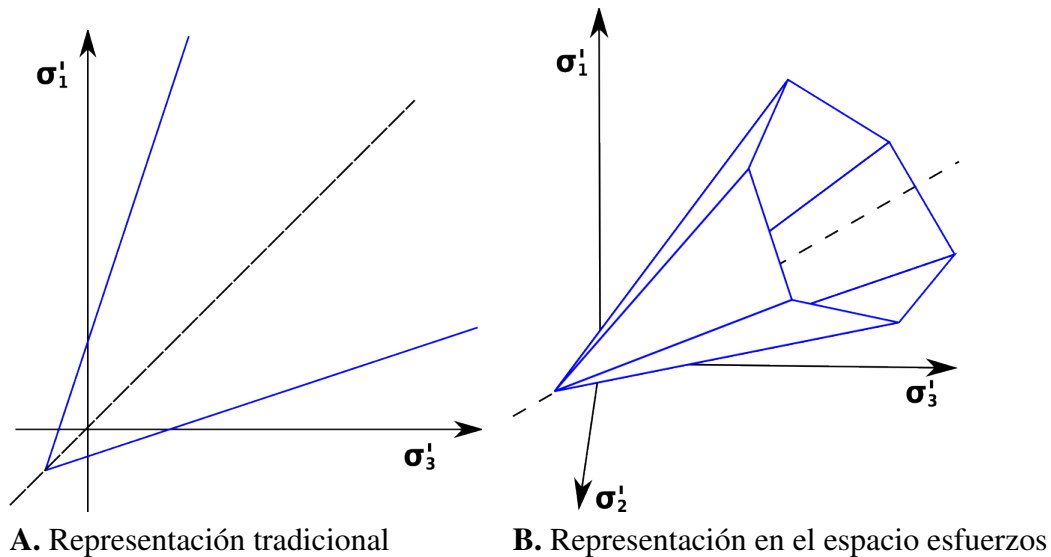


Figura 2.7: Representación de la configuración de Mohr-Coulomb. Referencia *FJAER E. 2008*.

un cuerpo sobre una superficie, sin embargo en la realidad es válida si el mecanismo falla bajo altas cargas confinantes. Griffith (1921) desarrolló un criterio de falla basado en el estudio de micro-fracturas elípticas en modelos bidimensionales en el cual se evidencia un fuerte cambio de pendiente a bajas presiones confinantes correspondiendo con las observaciones de laboratorio. Sin embargo estos criterios no toman en consideración la acción del esfuerzo principal intermedio σ_2 y lo toman como despreciable.

Para el caso tradicional, donde σ_2 es el esfuerzo intermedio se establecen dos opciones; $\sigma_1 > \sigma_3$ y $\sigma_3 > \sigma_1$ estas condiciones de acuerdo a la teoría de Mohr-Coulomb y la formulación presentada pueden ser representadas en el plano como un par de líneas rectas simétricas respecto al eje $\sigma_3 = \sigma_1$ como se muestra en figura 2.7-A. Proyecciones similares pueden ser hechas sobre diferentes planos manteniendo un esfuerzo constante para cada caso (σ_1 y σ_3); la superficie resultante de la proyección, se muestra en la figura 2.7-B formando una pirámide hexagonal que acorde a la teoría de Mohr-Coulomb es independiente del esfuerzo intermedio, puede observarse que la superficie no es diferenciable en las esquinas, hecho que puede ser causal de problemas en el desarrollo de cálculos numéricos que utilizan este criterio.

La superficie de falla comúnmente se presenta como una sección transversal en el espacio de esfuerzos, debido a la complicación que representa dibujar una superficie tridimensional; para el caso de Mohr-Coulomb la proyección se muestra en la figura 2.8 donde el plano es normal al eje hidrostático. Esta proyección resulta ser un hexágono irregular de esquinas punzantes y simetría triple. Generalmente las rocas que presentan la configuración $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3$ resulta ser mas rígidas que aquellas en la que el esfuerzo intermedio iguala cualquiera de los otros dos.

El gran problema de los criterios planteados como se menciono son las esquinas de ángulos agudos que dificultan el modelamiento numérico. Por tanto se han planteado otros criterios que incluyen el esfuerzo intermedio. Una de las soluciones matemáticas más sencillas planteadas para resolver este problema es una simetría rotacional para el plano de esfuerzos. Esto sienta la base de la formulación del criterio de Von Mises (VM) el cual se resume en la ecuación.

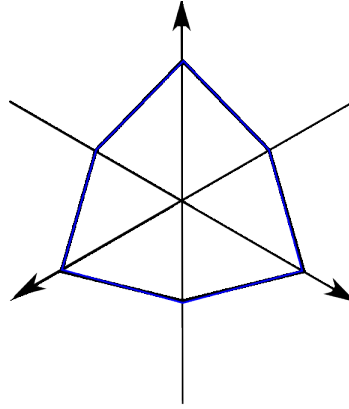


Figura 2.8: Sección transversal del criterio de Mohr-Coulomb. Referencia *FJAER E. 2008*.

$$(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 = C^2 \quad (2.5)$$

siendo C un parámetro relacionado con la cohesión; en el espacio de esfuerzos principales este criterio puede ser representado como un cilindro centrado alrededor del eje hidrostático, como se observa en la figura 2.9; semejante al criterio de Tresca cuando el esfuerzo intermedio iguala a alguno de los dos esfuerzos principales; ambos describen un mecanismo donde la condición de falla por cizalla es independiente del nivel de esfuerzo en el material y por tanto es ampliamente usado para describir la fluencia en metales, sin embargo tiene aplicaciones limitadas para rocas. La generalización del criterio de Mohr-Coulomb se conoce como criterio de Drucker-Prager (DP), la formulación se resume en:

$$\sqrt{\frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]} = C_1 (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + C_2) \quad (2.6)$$

Siendo C_1 y C_2 parámetros del material relacionados con la fricción interna y la cohesión. En el espacio de esfuerzos principales este criterio se representa como un cono regular, como se observa en la figura 2.9. Específicamente este criterio toma la forma

$$\sqrt{\frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]} = A + B (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (2.7)$$

Donde los parámetros A y B se determinan dependiendo del modelo (sobre-estimación o sub-estimación) así.

Superficie de DP circunscribe la superficie dada por Mohr-Coulomb

$$A = \frac{6c \cos\phi}{\sqrt{3}(3 + \sin\phi)}; \quad B = \frac{2 \sin\phi}{\sqrt{3}(3 + \sin\phi)} \quad (2.8)$$

Superficie de DP inscribe la superficie dada por Mohr-Coulomb

$$A = \frac{6c \cos\phi}{\sqrt{3}(3 - \sin\phi)}; \quad B = \frac{2 \sin\phi}{\sqrt{3}(3 - \sin\phi)} \quad (2.9)$$

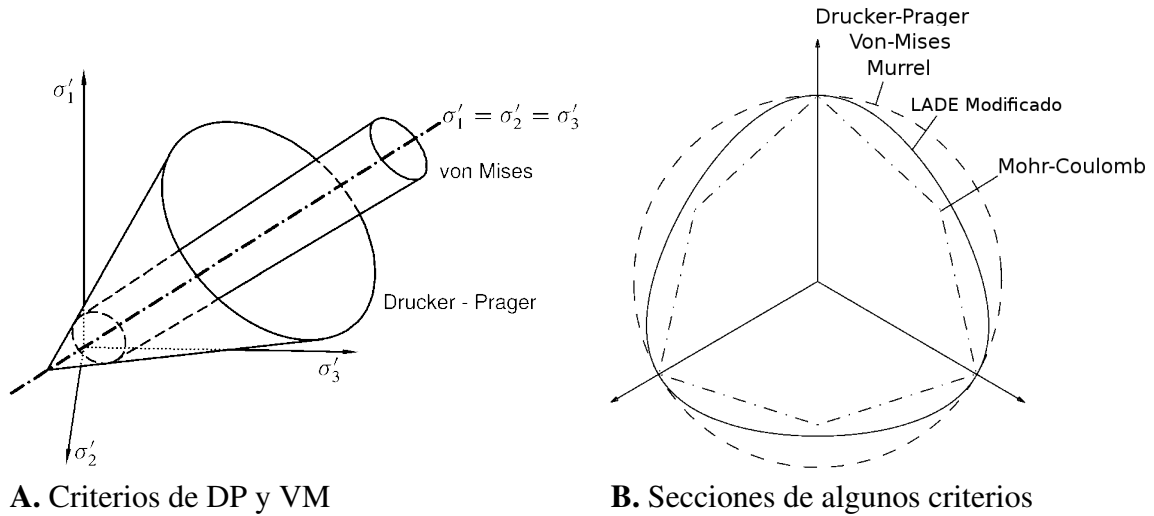


Figura 2.9: Representación de la configuración de algunos criterios. Referencia *FJAER E. 2008*.

2.1.3 Aspectos Fenomenológicos del Comportamiento de las Rocas

El comportamiento de las rocas bajo cargas aplicadas puede variar dependiendo de las condiciones a las que estén sometidas, a profundidades someras la roca exhibe un comportamiento mecánico dado por la ley de Hooke (comportamiento elástico) esto explica la propagación de las ondas sísmicas sin grandes pérdidas de energía. La deformación inelástica de materiales en ocasiones son procesos dependientes del tiempo, en el caso de geomateriales se considera la escala de tiempo geológico que implica una curva de endurecimiento y funciones de fluencia dependientes de la tasa de deformación.

Para explicar los aspectos de endurecimiento y funciones de fluencia se considera una prueba en la cual una barra es sometida a tensión, la curva de esfuerzo vs. deformación mostrada en la figura 2.10-A, la cual, en el caso de un comportamiento independiente del tiempo, muestra un recorrido para el cual la relación esfuerzo vs. deformación se considera lineal hasta que el esfuerzo alcanza un punto (esfuerzo de fluencia) por encima del cual esta relación se rompe y aparece un comportamiento denominado plástico, acompañado de la evolución del esfuerzo de fluencia, proceso denominado endurecimiento.

En contraste, la misma curva para un material que exhibe un comportamiento dependiente de la tasa de deformación el cual se muestra en la figura 2.10-B indica la dependencia mencionada anteriormente, sin embargo existen dos fenómenos característicos de este comportamiento; la reptación (creep) es uno de ellos, este indica la aceleración del flujo plástico a niveles de esfuerzo elevados mostrado en la figura 2.11-A. El otro aspecto a resaltar es el fenómeno de relajación del esfuerzo, este fenómeno mostrado en la figura 2.11-B puede definirse como la continua deformación que se desarrolla sobre un período de tiempo en el cual el esfuerzo decae continuamente.

La deformación axial por tanto se descompondrá en una parte elástica y una parte plástica

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p \tag{2.10}$$

La parte elástica estará definida por una relación lineal entre el esfuerzo y la deformación

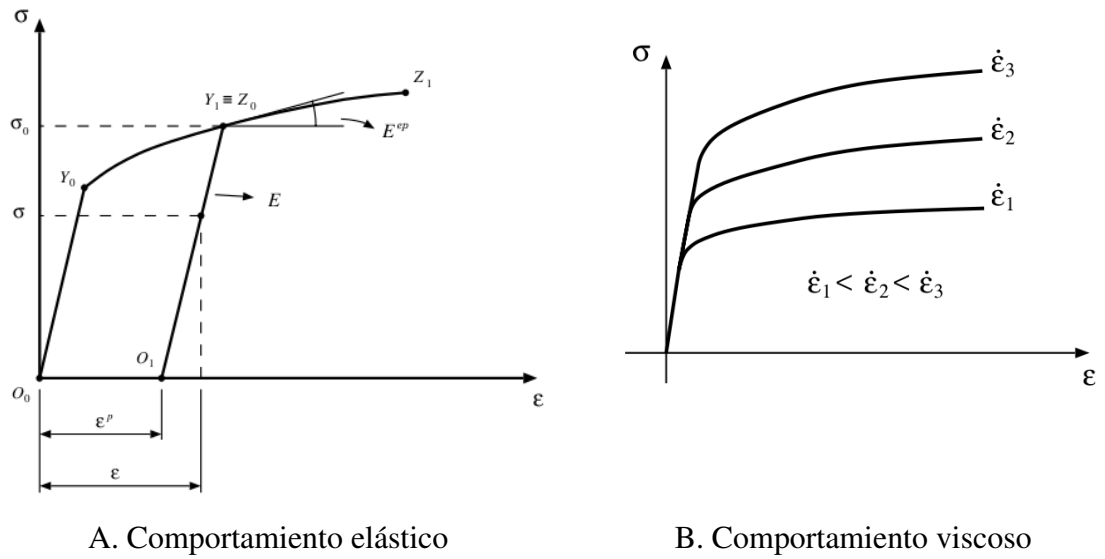


Figura 2.10: Comportamiento de los materiales. Referencia *SOUZA NETO EA 2008*.

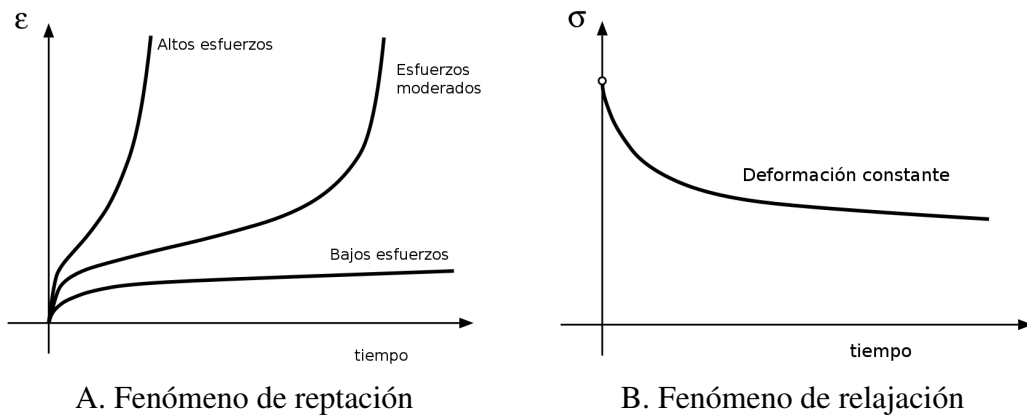


Figura 2.11: Comportamientos característicos del flujo dependiente del tiempo. Referencia *SOUZA NETO EA 2008*.

$$\sigma = E \varepsilon^e \quad (2.11)$$

esta parte estará definida por un dominio limitado por una función que señala la fluencia del material, esta función toma la forma

$$\zeta(\sigma, \sigma_Y) = |\sigma| - \sigma_Y \quad (2.12)$$

donde ζ toma un valor negativo para cualquier punto dentro del dominio elástico y cero para una configuración en el punto de fluencia.

En el dominio plástico la evolución de la deformación es descrita por medio de una función denominada *regla de flujo*, ésta se define por medio de la ecuación

$$\dot{\varepsilon}^p = \dot{\gamma}(\sigma, \sigma_Y) \text{sign}(\sigma) \quad (2.13)$$

donde $\text{sign}(\sigma)$ toma un valor positivo para σ positivos y viceversa. Esta ecuación diferencia el comportamiento independiente del comportamiento dependiente de la tasa de deformación, puesto que el primero implica una derivada respecto a un parámetro de pseudotiempo mientras que el segundo la escala de tiempo es indiferente.

El termino $\dot{\gamma}$ denominado multiplicador plástico para el caso elástico se calcula de forma directa a través del modulo de endurecimiento (H), que a su vez es calculado a partir de la pendiente de la recta tangente de la curva esfuerzo vs. deformación en el punto de fluencia; esto es

$$\dot{\gamma} = \frac{E}{H + E} \text{sign}(\sigma) \quad (2.14)$$

Mientras que para un comportamiento dependiente del tiempo, este multiplicador se define como una función explicita del esfuerzo, el cual modela como la tasa de deformación plástica varia con el nivel de esfuerzo aplicado y es característica del modelo utilizado.

El endurecimiento es un fenómeno que describe el cambio en el esfuerzo de fluencia resultante de la deformación plástica para los casos tanto dependientes como independientes de la tasa de deformación, este fenómeno se incorpora asumiendo que el punto de fluencia es una función de la deformación axial acumulada así

$$\sigma_Y = \sigma_Y(\bar{\varepsilon}^p) \quad (2.15)$$

siendo $\bar{\varepsilon}^p = \int_0^t |\dot{\varepsilon}^p| dt$

La deformación después de alcanzado el punto de fluencia está regida por la ecuación diferencial dada por el coeficiente de plasticidad del material, su solución genera una curva cuya forma definirá la reptación (creep) del material. El fenómeno de relajación puede ser descrito al resolver la misma ecuación y sustituyendo la solución de la deformación en la ecuación de esfuerzo, definiendo de esta manera como cambia el esfuerzo.

Otro tipo de comportamiento mecánico de los materiales diferente a los dos mencionados y denominado anaelástico combina las características elásticas de la ley de Hooke con el comportamiento viscoso del flujo Newtoniano; asumiendo la misma característica que define la deformación (eq. 2.10) resulta

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{d\varepsilon^e}{dt} + \frac{d\varepsilon^p}{dt} = \frac{1}{E} \frac{d\sigma}{dt} + \frac{1}{2\mu} \sigma \quad (2.16)$$

Esta ecuación denominada modelo de Maxwell define una relación entre esfuerzo y deformación para materiales denominados visco elásticos, en su forma simplificada esta ecuación puede ser integrada respecto al tiempo utilizando las mismas condiciones de frontera para definir el relajamiento en la teoría visco plástica resultando en una ecuación de la forma:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{Et}{2\mu}\right) \quad (2.17)$$

donde el término $\frac{\mu}{E}$ se denomina tiempo de relajación visco elástica, este término define el comportamiento del material. Para tiempos mucho menores domina el comportamiento elástico y para tiempos mucho mayores, la ley de Newton para fluidos viscosos domina sobre el otro comportamiento. Para el modelamiento del manto terrestre, un valor de $E = 70GPa$ y $\mu = 10^{21} Pa s$ es apropiado resultando en un valor de 450 años para el tiempo de relajación.

Capítulo 3

TEORÍA DE DEFORMACIÓN

Los cambios en la superficie y al interior de la tierra deben su configuración a la operación de sistemas dinámicos; estudios que implican la consideración de fuerzas y esfuerzos que en una forma no lineal modifican la estructura con grandes deformaciones. Las estructuras así formadas, originadas por el flujo de la roca, son estudiadas haciendo uso de las aproximaciones mecánicas de medios continuos. Debido a la complejidad del comportamiento se asume que el material rocoso obedece una ley específica la cual relaciona la tasa a la que fluye el material con el sistema de esfuerzos impuesto; además de que tome en consideración los efectos de las ondulaciones topográficas por medio de la imposición de condiciones de frontera libre. Las fuerzas externas que dan origen a las grandes deformaciones se clasifican en:

- **Fuerzas de cuerpo:** Las cuales actúan a través del cuerpo entero, estas fuerzas se expresan en unidades de fuerza por unidad de volumen, ejemplos de ellas son la gravedad y el magnetismo.
- **Fuerzas de superficie:** Estas fuerzas se aplican sobre los límites del cuerpo y están dadas en unidades de fuerza por unidad de área.

3.1 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN - BALANCE

La mecánica de medios continuos sienta sus bases en una serie de postulados que se asumen válidos independientemente del tipo de material, el grado de desplazamiento o deformación¹. Estos son:

- Conservación de la masa.
- Balance del momento cinético.
- Balance del momento angular.
- Balance de energía (Primer principio de la termodinámica).
- Segundo principio de la termodinámica (Restricción que rigurosamente no es entendida como postulado).

¹Oliver, X. Agelet de Saracibar C. (2002), Mecánica de Medios Contínuos para Ingenieros.

Estos postulados restringen la solución de las ecuaciones asociadas al fenómeno modelado que para este trabajo serán las asociadas a la cinemática de los campos de velocidades.

3.1.1 Conservación de la masa

Aunque las restricciones sobre el campo de velocidades definida por medio del principio de conservación de masa no son estrictamente cinemáticas, dichos requerimientos son necesarios. Este principio postula que la masa del medio continuo es siempre la misma.

Por tanto para una superficie S cerrada, fija relativa al eje coordenado que encierra un volumen V , ocupado completamente por un fluido de densidad ρ en una posición \mathbf{x} a un tiempo t ; la masa del fluido a cualquier instante será $\int \rho dV$ y la tasa neta a la cual la masa fluye a través de la superficie es $\int \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS$, siendo dV y dS elementos del volumen y el del área de la superficie confinante; en ausencia de fuentes de fluido se tendría entonces:

$$\frac{d}{dt} \int \rho dV = - \int \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \quad (3.1)$$

Puesto que V es un volumen fijo en el espacio, la transformación de la integral de superficie a una integral volumétrica resulta:

$$\int_V \left(\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) dV = 0 \quad (3.2)$$

Esta integral es válida para cualquier volumen situado completamente dentro del dominio; por lo que esta condición se cumplirá solamente si el integrando es nulo en cualquier parte del dominio (Teorema del valor cero). Entonces:

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.3)$$

Esta ecuación denominada de continuidad (debido a la continuidad de la materia) puede ser transformada haciendo uso de la derivada material de la densidad.

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \nabla \cdot (\mathbf{v}) = 0 \quad (3.4)$$

Cuando se trabaja con materiales incompresibles, la densidad no se ve afectada por los cambios de las demás variables implicadas en el *fenómeno específico*, por tanto esta derivada material es nula y la ecuación de conservación de masa o de continuidad toma la forma:

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}) = 0 \quad (3.5)$$

3.1.2 Cinemática de los campos de velocidades

Acorde a la segunda ley de Newton y considerando el primer postulado sobre la masa, la acción de fuerzas de cuerpo (\mathbf{b}) para cualquier configuración del cuerpo deformado resultante debe obedecer las restricciones de balance de momento dado por la ecuación.

$$\int_S \mathbf{t}(n) dA + \int_V \rho \mathbf{b} dV = \int_V \rho \dot{\mathbf{v}} dV \quad (3.6)$$

Junto con las restricciones del balance de momento angular.

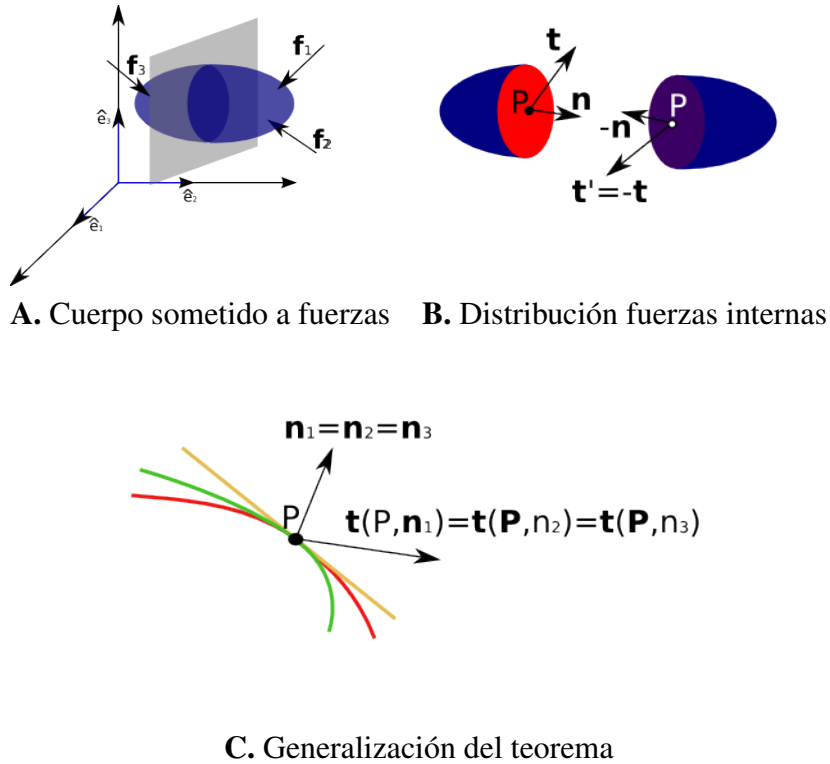


Figura 3.1: Postulado de Cauchy. Referencia OLIVER X. 2002.

$$\int_S \mathbf{x} \otimes \mathbf{t}(n) dS + \int_V \mathbf{x} \otimes \rho \mathbf{b} dV = \int_V \mathbf{x} \otimes \rho \dot{\mathbf{v}} dV \quad (3.7)$$

3.2 MODELO DE MATERIAL

3.2.1 Axiomas de Cauchy - Ecuación de Momento

En un cuerpo sobre el que actúan fuerzas superficiales, una partícula P dentro del medio continuo sobre la cual pasa una superficie arbitraria de normal \mathbf{n} en dicho punto, la cual divide el sólido (Fig. 3.1-A); el vector de tracción \mathbf{t} que actúa en el punto P considerado como parte del contorno es función únicamente del punto P y de la normal (Fig. 3.1-B). Si se considera distintas superficies pero que todas definen un único vector normal en P ; entonces todos los vectores de tracción coinciden (Fig. 3.1-C).

3.2.2 Tensor de Esfuerzo

Como consecuencia de los postulados anteriores la fuerza de superficie \mathbf{t} depende de forma lineal del la normal \mathbf{n} , es decir, existe un campo tensorial de segundo orden $\sigma(\mathbf{x})$ dado por la

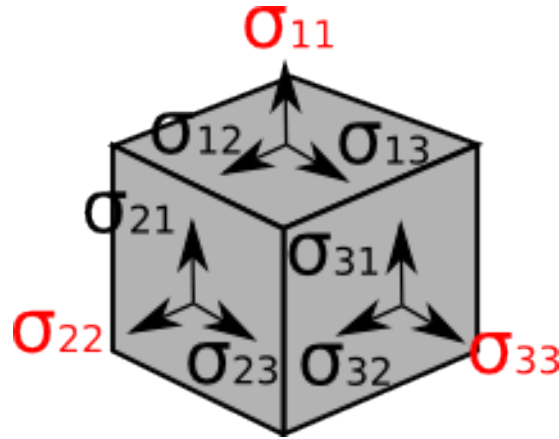


Figura 3.2: Representación geométrica del tensor de esfuerzos. Referencia *Autor*.

ecuación

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \sigma(\mathbf{x})\mathbf{n} \quad (3.8)$$

Este tensor simétrico $\sigma(\mathbf{x})$ es denominado de Cauchy, el cual en una base orto normal $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ queda representado acorde con la ecuación

$$\sigma = \sigma_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \quad (3.9)$$

Geoméricamente este tensor se muestra en la figura 3.2 donde cada componente es la proyección de $\sigma \mathbf{e}_i$ sobre \mathbf{e}_j . Los componentes σ_{ii} representan las tracciones normales a las caras mientras que las demás son las tracciones cortantes dispuestas en forma paralela a las caras.

Debido a la simetría del tensor, este admite ser representado en forma espectral, cuyos componentes normales (eigenvectores) se denominan esfuerzos principales y sus direcciones son las que guían el esfuerzo principal. En la práctica es común dividir el tensor de esfuerzos en la suma de sus componentes hidrostáticas y desviatorias como muestra la ecuación:

$$\sigma = \mathbf{s} + p\mathbf{I} \quad (3.10)$$

Donde el invariante

$$p = \frac{1}{3}I_1(\sigma) = \frac{1}{3}\sigma_{ii} \quad (3.11)$$

es la denominada presión hidrostática (esfuerzo medio, esfuerzo hidrostático o presión normal media) y la componente, esfuerzo desviatorio viene dado por la ecuación:

$$\mathbf{s} = \sigma - p\mathbf{I} \quad (3.12)$$

3.2.3 Vector y Líneas de Flujo

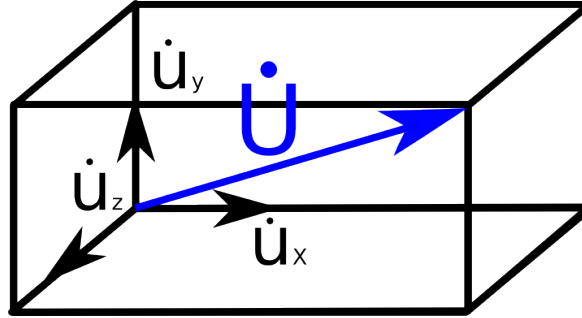


Figura 3.3: Representación gráfica del vector tasa de desplazamiento. Referencia *Autor*.

Cada punto en un fluido está caracterizado por una tasa de desplazamiento particular definida en términos del vector tasa de flujo \dot{U} ; este vector se puede descomponer como se muestra en la figura 3.3, por tanto el ángulo entre el vector tasa de flujo y el eje x vendría dado para el caso 2D por

$$\tan(\phi) = \frac{\dot{u}_y}{\dot{u}_x} \quad (3.13)$$

De la integración del campo de direcciones del vector tasa de flujo representado por los diferentes valores de ϕ sobre el dominio, resulta las denominadas líneas de flujo las cuales no se cruzan o intersectan entre sí, estas líneas representan el camino sobre el cual cualquier punto sobre la línea se moverá; si no existe un cambio de área en la vista 2D del campo de flujo, la convergencia de estas líneas estará acompañado por un incremento de la magnitud de \dot{U} en la misma dirección de convergencia y viceversa.

Como resultado de las diferencias o *gradientes en los vectores tasa de flujo* las deformaciones locales son configuradas. Estas se definen como los componentes de la tasa de deformación infinitesimal normal (\dot{e}_x y \dot{e}_y para el caso 2D) o cortante ($\dot{\nu}_{xy}$ para el caso 2D) calculadas de acuerdo a las ecuaciones:

$$\dot{e}_x = \frac{\delta \dot{u}_x}{\delta x} \quad (3.14)$$

$$\dot{e}_y = \frac{\delta \dot{u}_y}{\delta y} \quad (3.15)$$

$$\dot{\nu}_{xy} = \frac{\delta \dot{u}_x}{\delta y} + \frac{\delta \dot{u}_y}{\delta x} \quad (3.16)$$

En esta configuración denominada comúnmente de esfuerzo plano ($\dot{u}_z = 0$) la dirección de los ejes de tasa de deformación principales (forma espectral) se encuentran en la dirección dada por:

$$\tan(2\theta) = \frac{\dot{\nu}_{xy}}{\dot{e}_x - \dot{e}_y} \quad (3.17)$$

y de magnitud:

$$\dot{\epsilon}_1 \text{ y } \dot{\epsilon}_2 = \frac{1}{2}(\dot{\epsilon}_x + \dot{\epsilon}_y \pm ((\dot{\epsilon}_x + \dot{\epsilon}_y)^2 + \nu_{xy}^2)^{1/2}) \quad (3.18)$$

La tasa de rotación, o vorticidad $\dot{\omega}$ es:

$$\dot{\omega} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta \dot{u}_y}{\delta x} \right) - \frac{\delta \dot{u}_x}{\delta y} \quad (3.19)$$

3.2.4 Flujo Viscoso

Las ecuaciones que describen el flujo viscoso relacionan el esfuerzo con la tasa de desplazamiento y la tasa de deformación mediante un factor de proporcionalidad (coeficiente de Viscosidad) que para el caso incompresible con flujo viscoso laminar lento (comportamiento que se cree caracterizar el flujo tectónico de material rocoso en geología), toma un valor variante dependiendo de las condiciones a las que esté sometido el material. Específicamente este parámetro relaciona el esfuerzo cortante con la tasa de deformación que en el caso de tomar un valor constante para cualquier valor de esfuerzo o tasa de deformación cortante, el flujo se denomina de tipo *laminar* o *Newtoniano*.

$$\tau = \mu \dot{\nu} \quad (3.20)$$

Comportamiento Elástico de los materiales

Un modelo de material comúnmente conocido es el comportamiento elástico, sus ecuaciones relacionan el esfuerzo y la deformación de forma lineal. Los factores de proporcionalidad denominados *módulos elásticos* se emplean en el planteamiento de las ecuaciones de flujo, formulación dada por la ley generalizada de Hooke² que para el caso 2D serian:

$$\epsilon_x = \frac{\sigma_x}{E} - \nu \frac{\sigma_y}{E} \quad (3.21)$$

$$\epsilon_y = -\nu \frac{\sigma_x}{E} + \frac{\sigma_y}{E} \quad (3.22)$$

$$\epsilon_z = -\nu \frac{(\sigma_x + \sigma_y)}{E} \quad (3.23)$$

$$\epsilon_{ij} = \frac{2(1+\nu)}{E} \tau_{ij} \quad \forall i \neq j \quad (3.24)$$

Siendo

E =Modulo de Young

ν =Módulo de Poisson

Comportamiento Viscoso

La formulación para describir el flujo viscoso es análoga a la formulación elástica; la equivalencia entre los dos comportamientos es resumida en la tabla 3.1

²Chandrupatla, T. Belengundu, A. (2002), Introduction to finite element in engineering. Prentice Hall.

Elasticidad	Viscosidad
Deformación	Tasa de deformación
Desplazamientos	Velocidades
Módulo Cortante G	Coefficiente de Viscosidad μ
Relación de Poisson ν	V (Parámetro relacionado con la Compresibilidad)
Módulo de Young E	$\eta = 2\mu(1 + V)$

Tabla 3.1: Comparación de las variables elásticas lineales y viscosas Newtonianas. Jaeger (1962, p.57), Davis and Selvadurai (1996, pp. 46-47)

Por medio de esta equivalencia se establece que para el caso en que no hay cambio volumétrico es decir el fluido es incompresible, V toma el valor de $1/2$ y por tanto:

$$\dot{e}_x = \frac{1}{\eta} \left(\sigma_x - \frac{1}{2}(\sigma_y + \sigma_z) \right) = \frac{1}{3\mu} \left(\frac{2\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z}{2} \right) \quad (3.25)$$

Por tanto los esfuerzos desviatorios s vendrían dados por las ecuaciones:

$$\sigma'_x = \sigma_x - \frac{\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z}{3} = 2\mu\dot{e}_x \quad (3.26)$$

$$\sigma'_y = \sigma_y - \frac{\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z}{3} = 2\mu\dot{e}_y \quad (3.27)$$

$$\tau_{xy} = \mu\dot{v}_x \quad (3.28)$$

Para este caso particular la formulación del esfuerzo en notación de índices puede ser escrita formalmente como:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu(e_{ij} + e_{ji}) \quad (3.29)$$

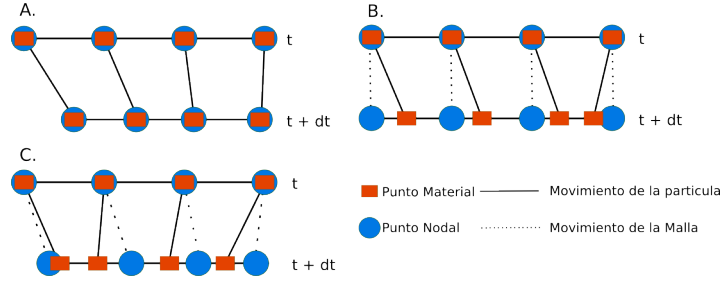
Donde δ_{ij} es el operador delta de Kronecker y $e_{ij} = \frac{\delta u_i}{\delta x_j}$

3.3 ECUACIONES CONSTITUTIVAS

Una ecuación constitutiva es una relación entre las variables termodinámicas y/o mecánicas de un sistema físico: presión, volumen, tensión, deformación, temperatura, densidad, entropía, etc. Los materiales poseen una ecuación constitutiva específica que depende de la organización molecular interna y que sumadas a las ecuaciones de balance y el modelo de material conforman el conjunto de ecuaciones del modelo a tratar.

3.3.1 Ecuación de Conservación de Momento en coordenadas espaciales

La ecuación 4.41 es la forma general de la ecuación de conservación de momento que obedece a la segunda ley de Newton; de forma análoga al planteamiento de la ecuación de conservación de masa en coordenadas espaciales (eq. 3.4) la cual hace uso del teorema de divergencia se llega a la ecuación:


 Figura 3.4: Tipos de descripción del movimiento. Referencia *Autor*.

$$\rho \frac{D u_i}{D t} = \rho F_i + \frac{\delta \sigma_{ij}}{\delta x_j} \quad (3.30)$$

Conocida como Ecuación de Cauchy o ecuación de movimiento la cual determina la aceleración del fluido en términos de coordenadas espaciales.

3.3.2 Ecuación de Navier-Stokes

La ecuación 3.29 es una forma simplificada de la ecuación que gobierna el movimiento de un fluido Newtoniano; en general la relación entre el esfuerzo desviatorio \mathbf{S} y la tasa de deformación $\dot{\epsilon}$ toma en cuenta un término denominado tasa de expansión. Esta ecuación tiene la forma:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu(\Theta_{ij} - \frac{1}{3}\Upsilon\delta_{ij}) \quad (3.31)$$

Donde $\Theta_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right)$ y $\Upsilon = \Theta_{ii}$

La sustitución de esta ecuación en la ecuación de Cauchy (eq. 3.30) resulta:

$$\rho \frac{D u_i}{D t} = \rho F_i - \frac{\delta p}{\delta x_i} + \frac{\delta}{\delta x_j} \left[2\mu \left(\Theta_{ij} - \frac{1}{3}\Upsilon\delta_{ij} \right) \right] \quad (3.32)$$

En donde el término $\frac{1}{3}\Upsilon\delta_{ij} = \frac{2}{3}\nabla \cdot (\mathbf{v}) = 0$ debido a las consideraciones de continuidad para un fluido incompresible que constituyen el modelo trabajado.

3.4 DESCRIPCIÓN CINEMÁTICA DEL MOVIMIENTO

La dinámica de fluidos asocia grandes distorsiones de la geometría inicial, además de movimiento de superficies libres que conforman la frontera. Para representar esta evolución a lo largo del tiempo, los algoritmos de la mecánica del continuo usan dos descripciones del movimiento.

- Lagrangiana.
- Euleriana.

En la primera descripción cada nodo de la malla computacional sigue un punto material asociado durante el transcurso del movimiento (fig. 3.4-B) mientras que en la descripción euleriana la malla computacional se fija mientras que el fluido se distorsiona (fig. 3.4-A).

El método Euleriano tiene ciertas ventajas:

1. El fluido puede migrar arbitrariamente dentro de las celdas con grandes distorsiones y sin pérdida de precisión.
2. Las fronteras de flujo son fáciles de mantener.

Sin embargo presentan las siguientes problemáticas:

1. Las interfaces entre materiales se pierden durante la simulación cuando el fluido se mueve a través de la malla y debido a que esto implicaría una lógica especial complicada,
2. Las zonas refinadas son difíciles de manipular.

Por otra parte la descripción Lagrangiana permite:

1. Definir las interfaces de los materiales.
2. Calcular el movimiento de las fronteras libres de una forma fácil.
3. Definir fronteras rígidas con curvaturas de forma arbitraria.

Pero presenta los inconvenientes:

1. Es incapaz de hacer frente a las fuertes distorsiones que caracterizan el movimiento de los fluidos.

A partir de estos dos tipos de descripciones surge una descripción de carácter híbrido, que combina las mejores características de las dos metodologías descritas. La descripción Arbitraria Euleriana-Lagrangiana o en forma corta ALE, descripción usada en este trabajo. En la descripción tipo ALE los nodos de la malla computacional pueden moverse con el fluido (forma Lagrangiana) o pueden fijarse (forma Euleriana) de una forma prescrita arbitraria para dar una capacidad de rezoñificación de la malla computacional (fig. (fig. 3.4-C).

3.4.1 Coordenadas

Los puntos materiales de un medio continuo al tiempo $t = 0$ ocupan una región B, por tanto el vector posición de un punto material P en esta región esta dado por:

$$\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3) \quad (3.33)$$

Las coordenadas X_i son las denominadas coordenadas materiales. En la configuración deformada la partícula P estará ubicada en la posición dada por

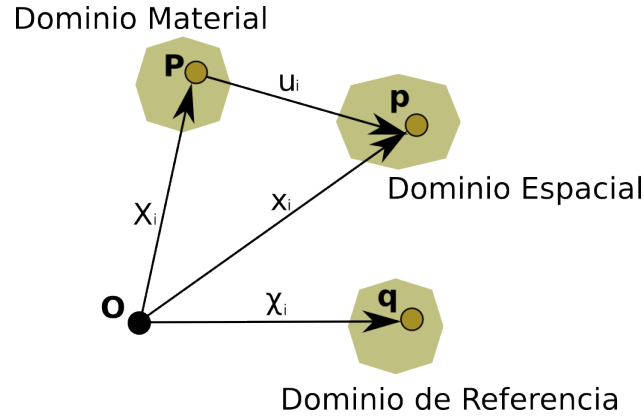
$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \quad (3.34)$$

Estas coordenadas se denominan espaciales. Como se menciono anteriormente, en la configuración Lagrangiana la posición espacial diversa que toman las partículas del cuerpo está en función de la posición inicial de la partícula analizada, esto es:

$$x_i = x_i(X_j, t) \quad (3.35)$$

Y por tanto la función inversa única para la descripción Euleriana será:

$$X_i = X_i(x_j, t) \quad (3.36)$$


 Figura 3.5: Sistema coordenado. Referencia *Autor*.

La condición necesaria y suficiente para que exista esta inversa está definida por el Jacobiano:

$$J = \det \left| \frac{\delta x_i}{\delta X_j} \right| \neq 0 \quad (3.37)$$

En adición al sistema coordenado material y espacial, un sistema coordenado de referencia definido como se muestra en la figura 3.5, el cual independientemente de la prescripción es función del espacio y del tiempo, esto es:

$$\chi_i = \chi_i(x_j, t) \quad (3.38)$$

La cual por analogía:

$$\bar{J} = \det \left| \frac{\delta x_i}{\delta \chi_j} \right| \neq 0 \quad (3.39)$$

3.4.2 Derivadas Materiales de tensores

Puesto que las tasas de cambio resultan más importantes que las cantidades cinemáticas en sí, la derivada de la función recibe el nombre dependiendo del argumento respecto al cual está definida la función, así:

$$\text{Derivada material de la posición: } f_{,t[X]} = \left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{X_i}$$

$$\text{Derivada espacial de la posición: } f_{,t[x]} = \left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{x_i}$$

$$\text{Derivada del sistema de referencia: } f_{,t[\chi]} = \left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{\chi_i}$$

La diferencia entre las velocidades de las partículas materiales (v_i) (representación Lagrangiana) y velocidad de la malla (w_i) (Derivada de la posición dada en función de las coordenadas de referencia) definen la velocidad convectiva c_i

$$c_i = v_i - w_i \quad (3.40)$$

La derivada material definida como

$$\frac{Df}{Dt} = \left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{\chi_i} + \frac{\delta f}{\delta \chi_i} \frac{\delta \chi_i}{\delta t} \quad (3.41)$$

para el caso particular de la descripción ALE en la cual se toma la derivada material como la velocidad de una partícula, esta ecuación puede ser descrita como

$$v_i = w_i + \frac{\delta x_i}{\delta \chi_j} \frac{\delta \chi_j}{\delta t} \quad (3.42)$$

Re arreglando términos se obtiene:

$$\frac{\delta \chi_j}{\delta t} = (v_i - w_i) \frac{\delta \chi_j}{\delta x_i} \quad (3.43)$$

Reintroduciendo estos resultados en la formulación general (eq. 3.41) se tiene que la derivada material es igual a:

$$\frac{Df}{Dt} = \left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{\chi_i} + \frac{\delta f}{\delta x_i} (v_i - w_i) \quad (3.44)$$

Y de forma análoga, la aceleración de las partículas para la formulación ALE están dadas por:

$$a_i = \left. \frac{\delta v_i}{\delta t} \right|_{\chi_i} + c_j v_{i,j} \quad (3.45)$$

Nótese el cambio de subíndices, el último término significa la derivada de la velocidad de las partículas respecto a la coordenada x_j

$$v_{i,j} = \nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{v_i}{x_j} \quad (3.46)$$

Esta notación se detalla en el siguiente capítulo cuando se plantee la formulación en elementos finitos de la ecuación de Navier-Stokes.

Capítulo 4

FUNDAMENTOS DE MODELAMIENTO CON ELEMENTOS FINITOS

4.1 ELEMENTOS FINITOS

Con los recientes avances en la tecnología asistida por computador y sistemas CAD, las geometrías complejas pueden ser modelados con relativa facilidad, las estructuras al interior de la corteza por ejemplo pueden ser recreadas a través de puntos pertenecientes a un dominio en el espacio 3D al cual se le asignan condiciones en las fronteras (Fig. 4.1); formando de esta manera un cuerpo sólido con propiedades características, cambiantes al interior del dominio debido a los efectos de anisotropía y a las condiciones a las cuales está sometido el material (Carga, Temperatura, Estado de esfuerzos, etc.).

La geometría modelada a la cual se referirá como dominio entonces se ve sometida a cambios descritos por medio de ecuaciones diferenciales cuya solución analítica a través del medio continuo resulta difícil de obtener; el conjunto de ecuaciones que describen el proceso físico conforman el denominado modelo diferencial o matemático. La solución de este modelo se obtiene a través de métodos numéricos que son implementados en geometrías simples discretas con grados de libertad finitos y que en conjunto conforman el dominio geométrico; este modelo, denominado numérico se centrara entonces en obtener la solución de variables desconocidas en puntos discretos, denominados nodos, a través del modelo matemático constitutivo, las propiedades de los materiales y la incorporación de valores en la frontera de la variable de interés y condiciones iniciales en el caso de ser un análisis dinámico.

4.1.1 Estado del arte

El método de elementos finitos se presenta como la técnica de solución utilizada debido a que es matemáticamente consistente y numéricamente robusto; este método se originó cuando un grupo de ingenieros en 1930 se cuestionó acerca de la solución de problemas de entramados

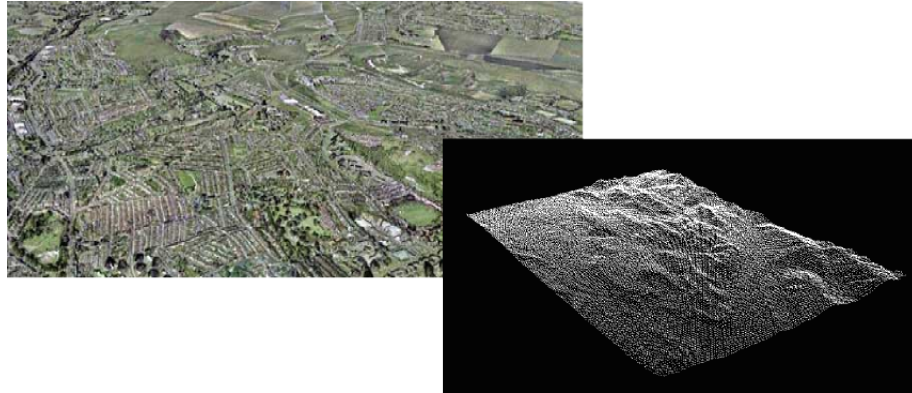


Figura 4.1: Abstracción de una superficie real por medio de una nube de puntos. Referencia www.gecko3d.com.au

con infinito número de puntos interconectados. Intuitivamente en 1941 Hrenikoff¹ presentó una solución a dicho problema, el denominado método de estructura de trabajo (frame work method) en el cual asumía la estructura continua como un conjunto finito de elementos o secciones estructurales y combinaba las características de cada elemento con las leyes de equilibrio para dar un sistema de ecuaciones que al resolverse permitía encontrar las variables desconocidas de fuerza y deflexión. En la tabla 4.1 se pueden observar la línea de tiempo con algunos de los desarrollos más importantes que ha tenido esta técnica.

¹Hreinkoff A. (2002), Solution of Problems in Elasticity by the Framework Method j. appl. mech. vol. 8; 1941; pp 169-175.

Tecnología de Computador	Año	Tecnología de Análisis
	1941	Método de Estructura de Trabajo
	1942	
	1943	Estudios de Courant St. Torsión Venant
	1944	Circuitos Equivalentes de Campos Eléctricos
	1945	
ENIAC 1	1946	
Invencción del transistor	1947	Método de Hypercirle
	1948	
	1949	
	1950	
	1951	
	1952	
Primer computador de propósito general desarrollado por IBM	1953	
Creación de FORTRAN	1954	Técnicas de solución eficiente - Argyris
	1955	
	1956	Publicación soluciona esfuerzos planos
	1957	
	1958	
	1959	Aproximación por discretización de Greenstadt
	1960	Frase elemento finito es inventada
Primer circuito integrado comercial	1961	
	1962	
Patenta el mouse	1963	
CDC introduce CDC600 con palabras de 60-bit	1964	Primera oferta comercial de software de elementos finitos
Se Crea BASIC.		
Primeras tablas con gráficos		

Tabla 4.1: Línea de tiempo con los más importantes desarrollos del MEF. Referencia *media.wiley.com*.

La construcción de un modelo en elementos finitos para resolver un problema en particular implica seguir un número de etapas que pueden ser resumidas como se muestra en la figura 4.2.

4.1.2 Sistema de Coordenadas y Funciones de Forma

La discretización del dominio se realiza mediante el uso de figuras geométricas representativas denominadas elementos, en la dimensión n la figura más elemental que puede ser usada la constituye el elemento simplex; definido como una figura geométrica convexa de $n+1$ puntos o nodos cada uno con N grados de libertad, dependiendo de las variables calculadas de la forma:

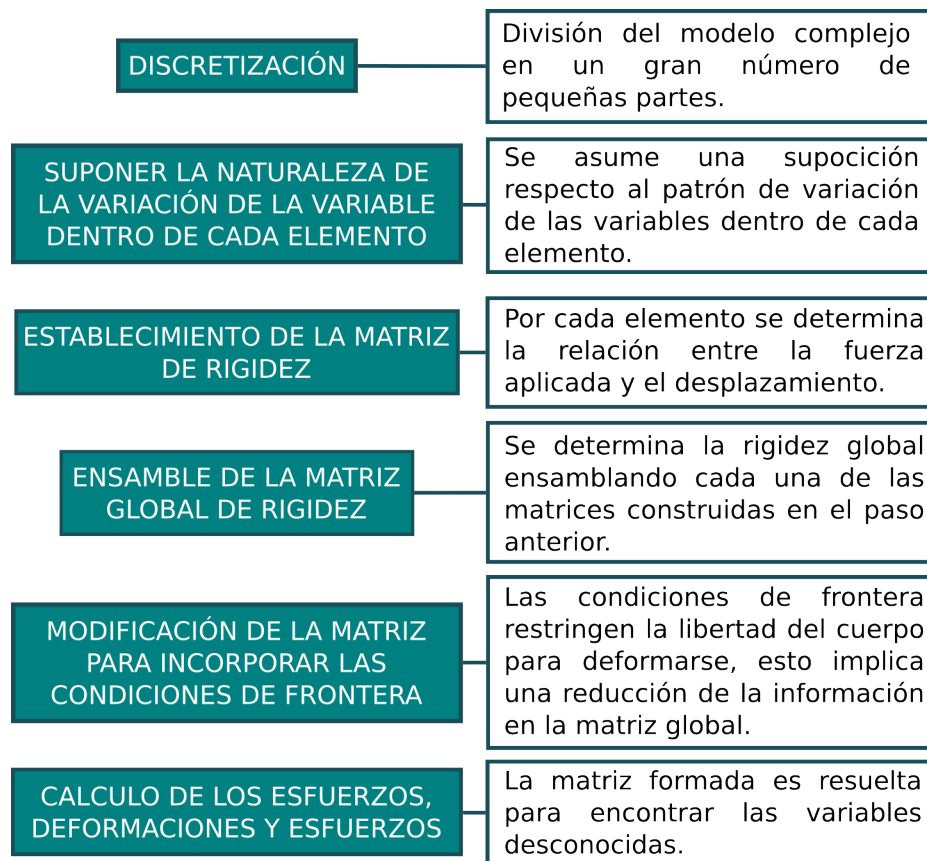


Figura 4.2: Construcción de un modelo en elementos finitos. Referencia *CHANDRU-PATLA T. 2002.*

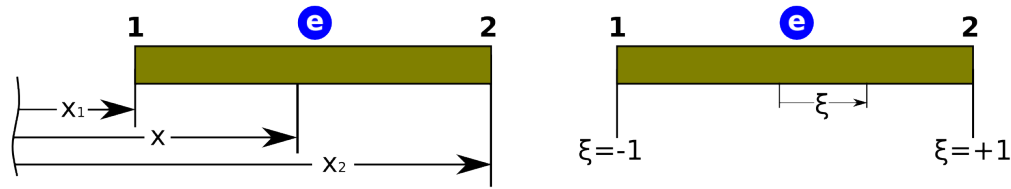


Figura 4.3: Sistema coordinado global y local del elemento. Referencia CHANDRU-PATLA T. 2002.

$$\{Q\} = [Q_1 \quad Q_2 \quad \dots \quad Q_N] \quad (4.1)$$

Computacionalmente la información de la discretización es representada en la forma de coordenadas nodales y conectividad entre nodos; las coordenadas se almacenan en un arreglo matricial representado por el número total de nodos y las coordenadas espaciales por nodo y la conectividad puede obtenerse al aislar los elementos que conforman el dominio y definir localmente la numeración global de cada nodo. La numeración local permite trabajar de forma análoga cada elemento.

Puesto que el desplazamiento de los puntos al interior del elemento requieren ser representados en términos de los desplazamientos nodales del elemento los cuales están definidos con una técnica notación se requiere definir en primera instancia un sistema coordinado *natural* o *intrínseco* que permita definir la posición al interior del elemento definiendo la variable:

$$\xi = \frac{2}{x_2 - x_1}(x - x_1) - 1 \quad (4.2)$$

Se puede apreciar en la figura 4.3 que las coordenadas están normalizadas en un recorrido de -1 a 1 donde el campo de desplazamientos desconocido dentro del elemento podrá ser interpolado dependiendo de la función utilizada y las condiciones de frontera impuestas en los nodos, en este ejemplo el tipo de interpolación es lineal, como se intuirá la aproximación se torna más precisa dependiendo de la cantidad de elementos utilizados. Implementar esta interpolación lineal requiere el uso de las denominadas funciones de forma, para el caso 1D estas funciones se definen como se muestra

$$N_1(\xi) = \frac{1 - \xi}{2} \quad (4.3)$$

$$N_2(\xi) = \frac{1 + \xi}{2} \quad (4.4)$$

Se observa que los valores dados por las funciones de forma, ponderan el valor de la variable en el nodo siendo igual a uno en la posición del nodo y se reduce gradualmente a cero en los nodos vecinos mientras que se mantiene en 0 para los demás nodos pertenecientes a los demás elementos. Entonces el campo de velocidades dentro del elemento puede ser descrito en términos de las velocidades nodales como:

$$\mathbf{v} = N_1 q_1 + N_2 q_2 \quad (4.5)$$

Donde $\begin{bmatrix} q_1 & q_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_x & u_y \end{bmatrix}$ para este caso en particular

La ecuación puede ser escrita en forma matricial así:

$$v = \mathbf{N} \mathbf{q} \quad (4.6)$$

Representación Bidimensional Para el caso bidimensional la locación de cualquier punto dentro del elemento triangular es especificado por tres funciones de forma que obedecen la ecuación

$$N_1 + N_2 + N_3 = 1 \quad (4.7)$$

De las cuales dos son funciones linealmente independientes y la tercera se determina a partir de las dos variables del sistema intrínseco

$$N_1 = \xi \quad (4.8)$$

$$N_2 = \kappa \quad (4.9)$$

$$N_3 = 1 - \xi - \kappa \quad (4.10)$$

Siendo ξ y κ las coordenadas naturales. De esta forma un punto en el sistema de coordenadas local está relacionado con su locación externa o global por medio de las ecuaciones:

$$x = N_1x_1 + N_2x_2 + N_3x_3 \quad (4.11)$$

$$y = N_1y_1 + N_2y_2 + N_3y_3 \quad (4.12)$$

o

$$x = (x_1 - x_3)\xi + (x_2 - x_3)\kappa + x_3 \quad (4.13)$$

$$y = (y_1 - y_3)\xi + (y_2 - y_3)\kappa + y_3 \quad (4.14)$$

Siendo (x_1, y_1) , (x_2, y_2) y (x_3, y_3) las coordenadas externas de los nodos 1, 2 y 3 del elemento simplex.

Usando la notación $a_{ij} = x_i - x_j$ y $b_{ij} = y_i - y_j$ se puede reescribir las ecuaciones como

$$x = a_{13}\xi + a_{23}\kappa + x_3 \quad (4.15)$$

$$y = b_{13}\xi + b_{23}\kappa + y_3 \quad (4.16)$$

4.1.3 Velocidades dentro del elemento

Las velocidades en el espacio 2D son especificados a través de 6 cantidades u_{x_1} , u_{y_1} , u_{x_2} , u_{y_2} , u_{x_3} y u_{y_3} denominadas q_1 , q_2 , q_3 , q_4 , q_5 y q_6 respectivamente, por tanto al interior del elemento donde los gradientes se asumen también constantes, se especifican de acuerdo a la ecuación:

$$v_x = N_1 q_1 + N_2 q_3 + N_3 q_5 \quad (4.17)$$

$$v_y = N_1 q_2 + N_2 q_4 + N_3 q_6 \quad (4.18)$$

o haciendo uso de las coordenadas locales

$$v_x = (q_1 - q_5)\xi + (q_3 - q_5)\kappa + q_5 \quad (4.19)$$

$$v_y = (q_2 - q_6)\xi + (q_4 - q_6)\kappa + q_6 \quad (4.20)$$

Las ecuaciones 4.17 y 4.18 pueden ser escritas de forma matricial

$$\mathbf{v} = \mathbf{N}\mathbf{q} \quad (4.21)$$

Siendo

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

Esta formulación se denomina representación isoparamétrica

4.1.4 Tasas de deformación

Al evaluar las tasas de deformación aparecen derivadas parciales de \mathbf{v} respecto a las coordenadas globales que a su vez son funciones de las coordenadas naturales. Usando la regla de la cadena se obtiene

$$\frac{\delta v_x}{\delta \xi} = \frac{\delta v_x}{\delta x} \frac{\delta x}{\delta \xi} + \frac{\delta v_x}{\delta y} \frac{\delta y}{\delta \xi} \quad (4.23)$$

$$\frac{\delta v_x}{\delta \kappa} = \frac{\delta v_x}{\delta x} \frac{\delta x}{\delta \kappa} + \frac{\delta v_x}{\delta y} \frac{\delta y}{\delta \kappa} \quad (4.24)$$

Las cuales pueden escribirse en forma matricial

$$\begin{Bmatrix} \frac{\delta v_x}{\delta \xi} \\ \frac{\delta v_x}{\delta \kappa} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\delta x}{\delta \xi} & \frac{\delta y}{\delta \xi} \\ \frac{\delta x}{\delta \kappa} & \frac{\delta y}{\delta \kappa} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\delta v_x}{\delta x} \\ \frac{\delta v_x}{\delta y} \end{Bmatrix} \quad (4.25)$$

Donde la matriz cuadrada (2x2) es el Jacobiano de la transformación dado por

$$\mathbf{J}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \begin{bmatrix} b_{23} & -b_{13} \\ -a_{23} & a_{13} \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

$$\det \mathbf{J} = a_{13}b_{23} - a_{23}b_{13} \quad (4.27)$$

Entonces a partir de las ecuaciones 4.25 y 4.26 se tendría

$$\begin{Bmatrix} \frac{\delta v_x}{\delta x} \\ \frac{\delta v_x}{\delta y} \end{Bmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \begin{Bmatrix} b_{23} \frac{\delta v_x}{\delta \xi} & -b_{13} \frac{\delta v_x}{\delta \kappa} \\ -a_{23} \frac{\delta v_x}{\delta \xi} & a_{23} \frac{\delta v_x}{\delta \kappa} \end{Bmatrix} \quad (4.28)$$

y de forma análoga

$$\begin{Bmatrix} \frac{\delta v_y}{\delta x} \\ \frac{\delta v_y}{\delta y} \end{Bmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \begin{Bmatrix} b_{23} \frac{\delta v_y}{\delta \xi} & -b_{13} \frac{\delta v_y}{\delta \kappa} \\ -a_{23} \frac{\delta v_y}{\delta \xi} & a_{23} \frac{\delta v_y}{\delta \kappa} \end{Bmatrix} \quad (4.29)$$

Haciendo uso de las relaciones esfuerzo-tasa de deformación y de las definiciones de x_{ij} y y_{ij} , se puede escribir $y_{31} = y_{13}$, $y_{12} = y_{13} - y_{23}$ y así sucesivamente, entonces acorde con las ecuaciones 4.19 y 4.20 se tiene

$$\dot{\mathbf{e}} = \begin{bmatrix} \frac{\delta v_x}{\delta x} \\ \frac{\delta v_y}{\delta x} \\ \frac{\delta v_x}{\delta y} + \frac{\delta v_y}{\delta x} \end{bmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \begin{Bmatrix} b_{23}q_1 + b_{31}q_3 + b_{12}q_5 \\ a_{32}q_2 + a_{13}q_4 + a_{21}q_6 \\ a_{32}q_1 + b_{23}q_2 + a_{13}q_3 + b_{31}q_4 + a_{21}q_5 + b_{12}q_6 \end{Bmatrix} \quad (4.30)$$

Ecuación que puede ser convertida en forma matricial como

$$\dot{\mathbf{e}} = \mathbf{B}\mathbf{q} \quad (4.31)$$

$$\text{Donde } \mathbf{B} = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \begin{bmatrix} b_{23} & 0 & b_{31} & 0 & b_{12} & 0 \\ 0 & a_{32} & 0 & a_{13} & 0 & a_{21} \\ a_{32} & b_{23} & a_{13} & b_{31} & a_{21} & b_{12} \end{bmatrix}$$

\mathbf{B} es una matriz de términos constantes expresados en términos de las coordenadas nodales.

4.1.5 Métodos de Aproximación

La solución de un modelo matemático expresado a través de una ecuación diferencial se soluciona a través de métodos numéricos aproximados que siguen una metodología común; el desarrollo de MEF sienta sus bases en tres métodos de solución:

Solución Directa

En el caso de poseer una solución analítica del problema se puede calcular una solución de las variables en cada nodo, entonces MEF sería usado para interpolar la solución a través de los nodos.

Solución Utilizando Principios Variacionales

Considere el ejemplo de una partícula de masa M moviéndose de un punto P_0 a un punto P_1 a lo largo de una trayectoria bajo la acción de la gravedad; el tiempo que requerirá la partícula para trasladarse dependerá de la trayectoria tomada $t = F(y)$ (siendo y la trayectoria), a su vez dicha trayectoria es una función del sistema coordenado es decir $y = f(x)$ (siendo x la variable independiente), por tanto el tiempo es función de una función; esto se conoce como funcional, una función cuyo dominio consiste de un conjunto de funciones.

Las ecuaciones diferenciales son formuladas con el fin de que se satisfagan en todos los puntos que pertenecen al dominio sin embargo estas ecuaciones describen un proceso físico que implica un gasto de energía. Por tanto para que el proceso sea real (acorde con las leyes de la termodinámica) el gasto de energía asociado al fenómeno debe ser mínimo. Así el funcional de energía asociado a la ecuación diferencial, deberá ser minimizado acorde con las reglas del cálculo variacional o de variaciones.

El principio de energía potencial mínima en el campo de la mecánica de sólidos es uno de los principios que garantiza la existencia de una función que torna estacionario un funcional, para los problemas elásticos se tiene que el funcional π asociado a la EDP de la deformación es

$$\pi = \text{Energía de deformación} + \text{Trabajo potencial} \quad (4.32)$$

Donde

$$\text{Energía de deformación} = \frac{1}{2} \int_V \sigma^T \epsilon \, dV \quad (4.33)$$

$$\text{Trabajo potencial} = - \int_V \mathbf{u}^T \mathbf{f} \, dV - \int_S \mathbf{u}^T \mathbf{T} \, dS - \sum_i \mathbf{u}_i^T p_i \, dV \quad (4.34)$$

Entonces para satisfacer el principio de energía potencial mínima en este caso se requiere minimizar el funcional respecto a los desplazamientos o sea

$$\frac{\delta \pi}{\delta q_i} = 0 \quad (4.35)$$

Solución Utilizando Residuos Ponderados

Este método utiliza un conjunto de ecuaciones gobernantes en el desarrollo de la forma integral. Considerando una representación general de la ecuación que gobierna un dominio V:

$$L\mathbf{\dot{u}} = F$$

siendo \mathbf{u} el conjunto de variables independientes y L el operador diferencial. La solución exacta deberá satisfacerse se introduce un error denominado residuo:

$$R = L\tilde{\mathbf{u}} - F \quad (4.36)$$

El método de aproximación gira en torno a configurar el residuo en relación con las funciones definidas como de ponderación de la forma

$$\int_V W_i (L\tilde{\mathbf{u}} - F) = 0 \quad (4.37)$$

La escogencia de W_i conduce a varios métodos de aproximación, en el método de Galerkin esta función equivale a la función escogida como base para la construcción de $\tilde{\mathbf{u}}$ usualmente polinomios:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \sum_{i=1}^n C_i f_i \quad (4.38)$$

Reemplazando esta ecuación (4.38) en la ecuación 4.37 y utilizando el teorema de divergencia se llega a una expresión que para el caso elástico puede ser descrita por medio de la ecuación

$$-\int_V \sigma^T \epsilon(W) d - \int_V W^T \mathbf{f} dV - \int_S W^T \mathbf{T} dS - \sum_i W^T p = 0 \quad (4.39)$$

Conocida como forma variacional de Galerkin o forma débil. Esta ecuación es sustentada por medio del principio de trabajo virtual el cual determina las variables, en este caso velocidades virtuales cinemáticamente admisibles. Este principio afirma que si un cuerpo está en equilibrio si el trabajo virtual interno iguala el trabajo externo para cada campo de velocidad admisible. En otras palabras la función que se asume válida deberá equilibrar el trabajo que se aplica externamente debido a la aplicación de fuerzas con los trabajos internos asumidos por medio de esta función.

4.2 DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO ALE (ARBITRARY LAGRANGIAN EULERIAN)

El esquema de simulación descrito consiste de un problema con fronteras libres, de estado transitorio para un dominio V rodeado por superficies suaves sometido a la acción de la gravedad. La mecánica de fluidos restringe la formulación por medio de las ecuaciones de conservación de momento y masa para un fluido Newtoniano incompresible que conforma el modelo matemático dado por la ecuación constitutiva de Navier-Stokes mostrada en el capítulo anterior :

$$\rho \frac{D u_i}{D t} = \rho F_i - \frac{\delta p}{\delta x_j} + \mu \frac{\delta}{\delta x_j} \left[\left(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right) \right] \quad (4.40)$$

A continuación la notación de subíndices se modificara para minimizar la notación sin perder detalle de la formulación. Tomando en cuenta la cinemática de la descripción ALE para de esta forma incluir el sistema coordenado de referencia explicado en el último apartado del capítulo anterior, el modelo matemático (ecuación diferencial) queda:

$$\frac{\delta v_i}{\delta t} |_{\mathcal{X}} + c_j v_{i,j} - \sigma_{ij,j} = f_i \quad (4.41)$$

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \varpi (v_{i,j} + v_{j,i}) \quad (4.42)$$

Y debido a los requerimientos de la ecuación de continuidad

$$v_{i,i} = 0 \quad (4.43)$$

Donde ϖ es la viscosidad cinemática del fluido.

Nótese que los subíndices i o j señalan la posición dentro de un vector (tensor de primer orden); ij señalan la posición dentro de una matriz (tensor de segundo orden); si dentro del subíndice aparece una coma el término a la derecha será el subíndice de la variable espacial con respecto al cual se deriva el argumento que está a la izquierda; si no aparece ningún argumento a la izquierda de la coma indicara que esta variable es un tensor de orden 0.

Las condiciones de frontera son iguales para la formulación Lagrangiana o Euleriana, en este caso se posee dos tipos de fronteras una superficie libre sobre S_2 y otra superficie para los límites de las fronteras del contenedor S_1 . Entonces las condiciones para la velocidad y la tracción (fuerza de superficie) se introducen como:

$$v_i = \hat{v}_i \text{ sobre } S_2 \quad (4.44)$$

$$t_i = \{-p\delta_{ij} + \varpi (v_{i,j} + v_{j,i})\} n_j = \hat{t}_i \text{ sobre } S_1 \quad (4.45)$$

Donde el superíndice $\hat{}$ denota la función la cual es definida en el límite y n_j como se venía tratando es el vector unitario normal a la superficie límite. En el caso de superficie libre como frontera, la evolución en el tiempo de la función de altura es gobernada por la ecuación cinemática que expresa el hecho que una superficie libre se mueve con el fluido

$$\frac{\delta h}{\delta t}|_X + (v_i^{(s)} - w_i^{(s)})h_{,i} \quad (4.46)$$

Donde h es la elevación de la superficie medida desde el nivel de fluido elemental $v_i^{(s)}$ y $w_i^{(s)}$ son los componentes x_i de la velocidad de las partículas del fluido y la velocidad de la malla en el punto nodal de la superficie libre.

Las condiciones iniciales para el problema de Navier-Stokes consisten en especificar los valores de la velocidad y presión al tiempo inicial

$$v_i(x_i, 0) = v_i^{(0)}(x_i) \quad (4.47)$$

$$p(x_i, 0) = p^{(0)}(x_i) \quad (4.48)$$

Con $v_i^{(0)}(x_i)$ satisfaciendo la condición de incompresibilidad.

$$v_{i,i}^{(0)} = 0 \quad (4.49)$$

4.2.1 Formulación en Residuos Ponderados

Una formulación débil del problema es obtenida multiplicando la ecuación diferencial por funciones de peso apropiada e integrando sobre el dominio $V(\chi_i, t)$, la cual es rodeada por una superficie S con un vector unitario normal n_i . A continuación, se multiplica la ecuación de momento (eq. 4.41) por la función de peso v_i^* , y la ecuación de continuidad (eq. 4.43) por la función de peso q^* , y se integran sobre V . Después de integrar por partes el término de esfuerzo, usando el teorema de divergencia y las condiciones de frontera (eq. 4.45), la siguiente forma débil del problema original es obtenida:

$$\int_V \left(v_i^* \frac{\delta v_i}{\delta t} \right) dV = - \int_V (v_i^* c_j v_{i,j}) dV + \int_V (v_{i,i}^* p) dV - \varpi \int_V v_{i,j}^* (v_{i,j} + v_{j,i}) dV + \int_V (v_i^* f_i) - \int_S \{ v_i^* [-p\delta_{ij} + \varpi (v_{i,j} + v_{j,i}) n_j] dS \} \quad (4.50)$$

$$\int_V (q^* v_{i,i}) dV = 0 \quad (4.51)$$

con

$$v_i = \hat{v}_i \text{ sobre } S1 \quad (4.52)$$

$$v_i(x_i, 0) = v_i^{(0)}(x_i) \text{ sobre } S1 \quad (4.53)$$

En forma similar, la forma débil de la ecuación 4.46 puede ser obtenida multiplicando por la función de peso η^* como

$$\int_V \left(h^* \frac{\delta h}{\delta t} \right) dV + \int_V (h^* c_i^s h_{,i}) = 0 \quad (4.54)$$

Bajo condiciones suaves para los datos de límites \hat{v}_i y \hat{t}_i , el problema de Navier-Stokes admite al menos una solución.

4.2.2 Discretización del tiempo

En orden de implementar una solución numérica para la formulación ALE, la ecuación de momento y la limitante de incompresibilidad son tratados acorde a un procedimiento de tres fases. Sea v_i^n y p^n los campos de presión al tiempo t^n , donde $t^n = t^{n+1} + \Delta t$. De v_i^n , p^n y las especificaciones para los límites, los campos v_i^{n+1} y p^{n+1} se calcula como se describe

Fase I: Cálculos Lagrangianos

Esta fase está gobernada por los cálculos lagrangianos obtenidos de las ecuaciones configurando c_j en cero. En esta fase la aceleración del material puede ser aproximada por el incremento de la velocidad de la siguiente forma:

$$\frac{\delta v_i}{\delta t} \Big|_{X_i} \frac{(v_i^L - v_i^n)}{\Delta t} \quad (4.55)$$

donde las velocidades y posiciones de cada partícula de fluido $P_k = P_k(x_i^0, t_0)$ con la locación inicial x_i^0 al tiempo t^0 está definido por

$$v_i^n = v_i(P_k, t^n) \quad (4.56)$$

$$x_i^n = x_i(P_k, t^n) \quad (4.57)$$

y

$$v_i^L = v_i(P_k, t^{n+1}) \quad (4.58)$$

$$x_i^L = x_i(P_k, t^{n+1}) \quad (4.59)$$

Al principio, un campo de velocidades intermedio \tilde{v}_i^L , que no satisface la limitación de incompresibilidad, es derivada de una versión discreta del tiempo de la forma débil de la ecuación de momento en la cual el término de presión es omitido. Entonces, el campo \tilde{v}_i^L es descompuesto en la suma de un campo de vectores con cero divergencia y un campo de vectores con cero rotación. El componente libre de divergencia es el paso final del vector de velocidad Lagrangiano v_i^L , mientras el no rotacional está relacionado con el gradiente del campo de presión p^L .

El campo de velocidades nodal Lagrangiano intermedio \tilde{v}_i^L , es derivado del ciclo de vectores de velocidad, vectores de posición y fuerzas de cuerpo previo usando un esquema explícito de primer orden de Euler:

$$\int_V (v_i^* \tilde{v}_i^L) dV = - \int_{V^n} (v_i^* v_i^n) dV - \Delta t [A + B - C] \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} A &= \int_{V^n} (v_i^* f_i) dV \\ B &= \varpi \left\{ \int_{V^n} (v_{i,j}^* v_{i,j}^n) dV + \int_{V^n} (v_{i,j}^* v_{j,i}^n) dV \right\} \\ C &= \varpi \left\{ \int_{S^n} (v_i^* v_{i,j}^n + v_i^* v_{j,i}^n) n_j dS \right\} \end{aligned}$$

$$\tilde{u}_i^L = \hat{v}_i \text{ sobre } S_2 \quad (4.61)$$

Una vez la velocidad intermedia ha sido calculada, la velocidad al final de paso v_i^L es obtenida añadiendo a \tilde{v}_i^L el efecto dinámico de la presión p^L aun desconocida, la cual se determina de la forma débil de la ecuación que satisface la condición de incompresibilidad

$$\int_V (v_i^* v_i^L) dV = \int_{V^L} (v_i^* \tilde{v}_i^L) dV - \Delta t \left[\int_{V^L} (v_i^* p_{,i}^L) dV \right] \quad (4.62)$$

$$\int_{V^L} (q^* v_{i,i}^L) dV = 0 \quad (4.63)$$

Esta configuración utiliza un orden de interpolación igual para la velocidad y la presión lo que representa un importante punto de partida para el uso de una aproximación de orden mixto.

Usando el teorema de divergencia junto con la condición de incompresibilidad $v_{i,i}^L = 0$, el siguiente sistema de ecuaciones lineal, que gobierna el campo de presiones es derivado de la ecuación 4.62

$$\int_{V^L} (q^* p_{,ii}^L) dV = \frac{1}{\Delta t} \int_{V^L} (q^* \tilde{v}_{i,i}^L) dV \quad (4.64)$$

El lado izquierdo de esta ecuación contiene derivadas de segundo orden las cuales pueden ser reducidas a una integral de primer orden por medio de la integración por partes

$$\int_{V^L} (q^* p_{,ii}^L) dV = - \frac{1}{\Delta t} \int_{V^L} (q^* \tilde{v}_{i,i}^L) dV = \int_{S^L} (q^* p_{,i}^L n_i) dS \quad (4.65)$$

donde el teorema de divergencia ha sido usado para calcular la integral de límite puesto que está condicionada por las fronteras:

$$P^L = 0 \text{ sobre } S_1 \quad (4.66)$$

$$P_{,i}^L n_i = 0 \text{ sobre } S_2 \quad (4.67)$$

Una vez la presión ha sido calculada de la ecuación 4.65, las velocidades Lagrangianas son calculadas de la ecuación 4.62. Finalmente, las coordenadas de los vértices al final de la fase Lagrangiana son calculados por

$$x_i^L = x_i^n + \frac{\Delta t}{2} (v_i^L + v_i^n) \quad (4.68)$$

Para procedimientos solamente Lagrangianos los vértices se mueven acorde a esta ecuación y este paso se repite hasta alcanzar el tiempo total de simulación

Fase II - Rezonificación de velocidades

En la dinámica de fluidos es necesario cambiar la malla debido a que los cálculos Lagrangianos tornan la malla muy distorsionada. Cuando esto ocurre es necesario transferir la información de la malla vieja a la nueva, este proceso de interpolación es denominado rezonificar. Este proceso puede ser muy arbitrario sin embargo se debe respetar las ecuaciones de balance en el cálculo de los cambios de rezonificación necesarios, esto es flujo convectivos y difusivos.

Hasta este punto un campo de velocidades de los vértices de la malla, w_i ha sido creado de una forma apropiada respecto a una punto fijo, el esquema de referencia Euleriano. Entonces, para un cálculo netamente Euleriano se tiene:

$$w_i = 0 \quad (4.69)$$

Por otro lado, un esquema netamente Lagrangiano se tendría:

$$w_i = v_i \quad (4.70)$$

En general, las velocidades de la malla pueden ser cualquier función designada, y como tal no son esquemas puros. Una vez se asigna la rezonificación o las velocidades de la malla, los vértices se mueven acorde a la prescripción

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t w_i \quad (4.71)$$

De estos valores, nuevos elementos y masas pueden ser calculados.

Fase III - Cálculos del flujo convectivo

Existen dos tipos de cantidades a ser cargadas en la rezonificación: cantidades del elemento principalmente masa y volumen; y cantidades de vértices principalmente componentes del campo de velocidades y presiones.

A través del uso de la ecuación calcula nuevas masas y volúmenes pueden ser calculadas; queda ahora describir los cálculos que implican la transferencia de masa y momentum entre los elementos durante la rezonificación. Un campo de velocidades temporal es calculado primero para determinar el flujo convectivo:

$$\int_{V^{n+1}} (v_i^* \tilde{v}_i^{n+1}) dV = \int_{V^L} (v_i^* \tilde{v}_i^L) dV + \Delta t \int_{V^L} (v_i^* c_j v_{i,j}^n) dV \quad (4.72)$$

$$\tilde{v}_i^{n+1} = \hat{v}_i \text{ sobre } S_2 \quad (4.73)$$

La velocidades finales para el ciclo es obtenido combinando la velocidad temporal \tilde{v}_i^{n+1} con la aceleración (presión) de la siguiente manera

$$\int_{V^{n+1}} (v_i^* \tilde{v}_i^{n+1}) dV = \int_{V^{n+1}} (v_i^* \tilde{v}_i^L) dV - \Delta t \int_{V^{n+1}} (v_i^* p_{i,i}^{n+1}) dV \quad (4.74)$$

$$\int_{V^{n+1}} (q^* v_{i,i}^{n+1}) dV = 0 \quad (4.75)$$

La presión necesaria en la ecuación anterior (eq. 4.74) es la que asegura la satisfacción de la condición de incompresibilidad. Esto es, la velocidad final debe contener una divergencia de

velocidad cero en cualquier elemento, como se describe en la ecuación 4.75 . Esto es realizado resolviendo la ecuación que gobierna el campo de presión

$$\int_{V^{n+1}} (q^* p_{,ii}^{n+1}) dV = \frac{1}{\Delta t} \int_{V^{n+1}} (q^* \tilde{v}_{i,i}^{n+1}) dV \quad (4.76)$$

Esta ecuación puede ser reducida a una de primer orden así

$$\int_{V^{n+1}} (q^* p_{,i}^{n+1}) dV = \frac{1}{\Delta t} \int_{V^{n+1}} (q^* \tilde{v}_{i,i}^{n+1}) dV + \int_{S^{n+1}} (q^* p_{,i}^{n+1} n_i) dV \quad (4.77)$$

Las condiciones de frontera utilizadas son

$$p^{n+1} = 0 \text{ sobre } S_1 \quad (4.78)$$

$$p_{,i}^{n+1} n_i = 0 \text{ sobre } S_2 \quad (4.79)$$

Una vez se obtiene la presión, la velocidad al final del paso se obtiene a partir de la ecuación 4.74. La posición de la superficie libre es calculada de la ecuación

$$\int_{V^{n+1}} (h^* h^{n+1}) dV = \int_{V^L} (h^* h^L) dV - \Delta t \int_{V^{n+1}} (h^* c_i^{(S)} h_{,i}^L) dV = 0 \quad (4.80)$$

Completando de esta forma la carga de datos.

Capítulo 5

METODOLOGÍA DE MODELAMIENTO

Durante el proceso de construcción de un modelo computacional es de gran importancia depurar la información; desde la obtención de datos sin ningún tipo de tratamiento, hasta el manejo de los resultados de una simulación de manera que la selección, manipulación y depuración de estos datos alimenten correctamente el modelo creado y de esta forma de solución a la problemática en cuestión.

Por ello este trabajo se enfoca en el desarrollo de una metodología orientada a la construcción de modelos computacionales que haciendo uso de teorías bien fundamentadas, realiza cálculos de tipo estructural en una zona de interés; mejorando así la interpretación de la misma. En el transcurso del capítulo se explica en forma detallada el desarrollo de la metodología planteada y los mecanismos usados para implementarla en los casos particulares expuestos en el siguiente capítulo.

La metodología propuesta se enmarca en una serie de pasos, divididos fundamentalmente en tres partes:

- Pre-Procesamiento.
- Procesamiento.
- Post-Procesamiento.

Cada módulo es independiente el uno del otro.

El esquema general propuesto se puede observar en la figura 5.1 y en las siguientes secciones se detallara el proceso que se desarrolla en cada módulo.

5.1 PRE-PROCESAMIENTO

La adquisición de estructuras geológicas y su interpretación conducen a la creación de geometrías complejas las cuales deben someterse a un proceso de suavizado para evitar inconvenientes en la simulación. El objetivo aquí es reconstruir la geometría a analizar de forma suave, creando superficies cerradas a través de líneas con ayuda de un software CAD. Para este trabajo se utilizó el software de libre distribución Q-CAD; este programa y en general cualquier software

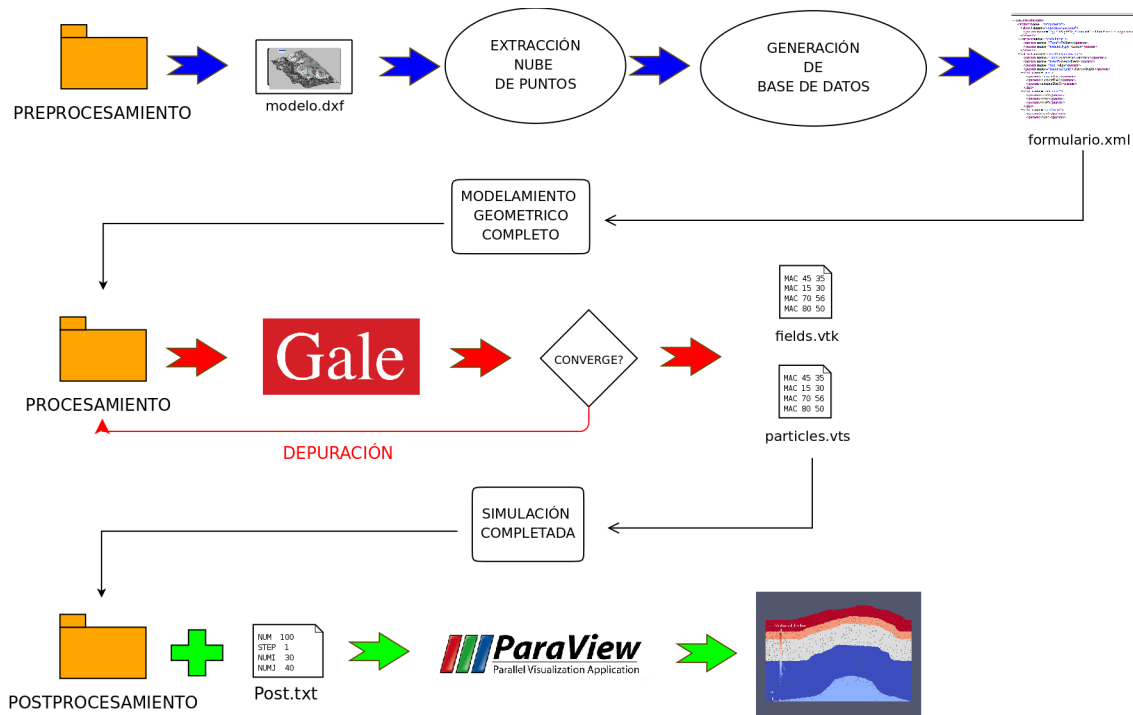
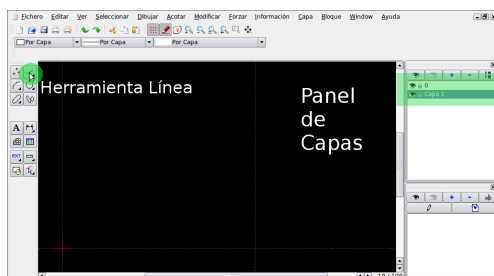


Figura 5.1: Esquema general del proceso. Referencia Autor.

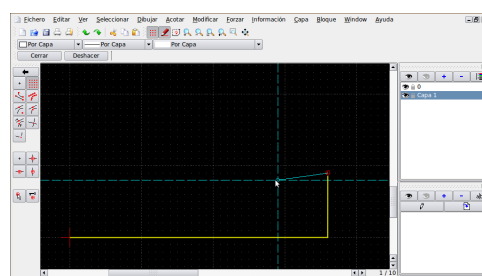
CAD poseen una entidad llamada línea, esta entidad es el elemento escogido para el desarrollo del prototipo por medio del cual se redibuja la estructura.

Cada estructura debe ser dibujada de forma independiente en una sola y única capa; el nombre que se asigne a la capa será la etiqueta a la cual pertenecerán el conjunto de puntos coordenados que unen las líneas que conforman la estructura. En la figura 5.2-A se muestra el panel básico de trabajo: la entidad Línea y el panel de Capas. Y en la figura 5.2-B se indica la forma de trabajar, el conjunto de líneas rojas (Propiedad de la capa) pertenecen a la capa denominada “Capa 1” y sobre esta capa se dibuja un polígono cerrado representativo de la estructura.

De esta forma uno a uno se dibuja las formas que representan la geometría a modelar. Es necesario resaltar que el proceso se debe realizar de forma ordenada, cada coordenada que ter-



A. Herramientas utilizadas



B. Creación de las geometrías.

Figura 5.2: Uso de la entidad línea para dibujar las geometrías a modelar. Referencia Autor.

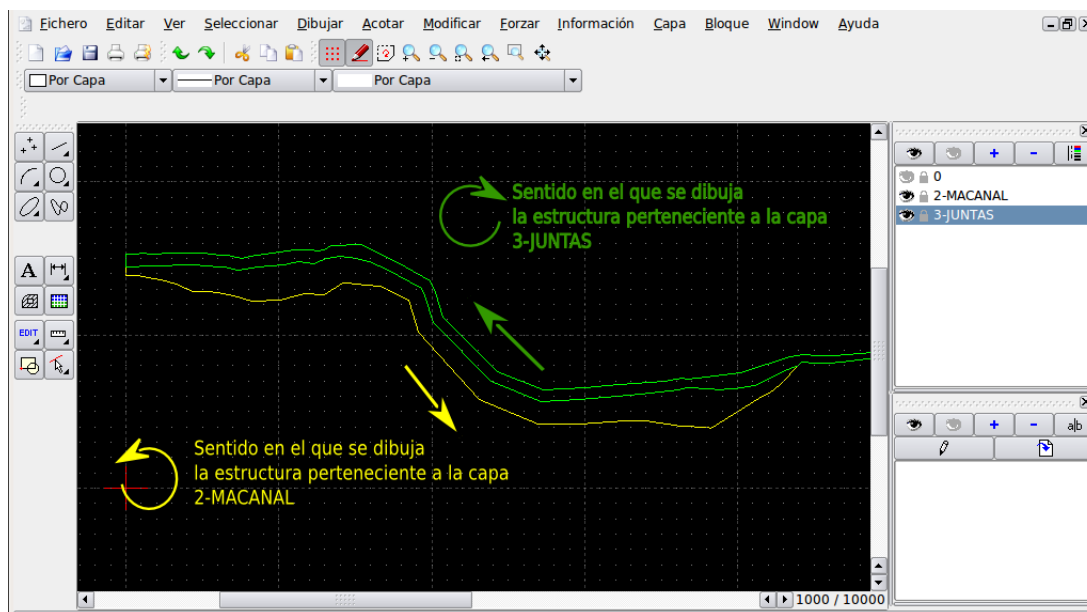


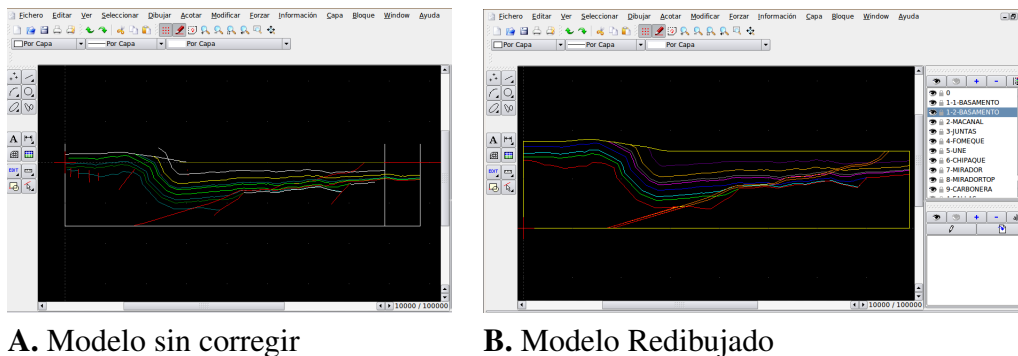
Figura 5.3: Forma de dibujar las estructuras. Referencia *Autor*.

mina una línea debe ser la coordenada inicial de la próxima, de esta forma cada estructura será dibujada siguiendo un sentido o horario o anti horario. Este sentido debe ser respetado en el caso de ser requerido copiar un tramo; por ejemplo el tramo que conforma la parte superior de un estrato inferior, deberá ser el mismo tramo que conforma la parte inferior del estrato supra yacente, de esta forma se puede copiar el tramo dibujado (capa inferior) y pegarlo en la capa en la cual se dibujara el nuevo estrato (capa superior); hay que considerar que las posiciones deben ser exactamente las mismas; sin embargo si el estrato inferior es dibujado en sentido horario, el estrato superior dibujado en la nueva capa deberá ser dibujado en sentido anti horario. Esto se muestra en la figura 5.3 donde para crear el tramo correspondiente a la parte inferior de la capa 3-JUNTAS se copio el tramo superior de la capa 2-MACANAL, y se pegó este tramo en la nueva capa (Dejando intacto el primero) y se procedió a seguir dibujando la estructura como se indica.

Todos los software CAD por defecto traen una capa denominada “0”, la cual no puede ser eliminada, esta capa se escogió como la capa en la cual se dibuja el esbozo general del modelo, es decir el modelo sin los estratos en este caso, esto con el fin incluir los datos de topografía en los siguientes pasos, hay que resaltar que es muy importante que esta capa sea la última en ser dibujada para efectos de no omitir detalle y debido a que el programa que tomara estos puntos para construir el modelo, por defecto toma la última capa como dato de entrada para formar el archivo ASCII de topografía explicado en las siguientes secciones. En la gráfica 5.4 se puede observar el resultado final del ajuste.

5.1.1 Extracción de la nube de puntos

Una vez finalizado el diseño del modelo se procede a crear la base de datos para el modelo de simulación, para ello se hace uso del applet diseñado. El applet se ejecuta al abrir el archivo “*Index.html*” paso seguido se abrirá el explorador de internet predeterminado y se lanzara una pantalla de advertencia en donde se pide permisos para acceder a los recursos del sistema. Los



A. Modelo sin corregir

B. Modelo Redibujado

Figura 5.4: Proceso de reconstrucción de la geometría a analizar. Referencia *Autor*.

applet de Java por cuestiones de seguridad requieren de una firma digital para poder acceder a los recursos del disco, esta firma contiene la información acerca de los autores del applet y es decisión del usuario dar permiso para este acceso o negarlo. Una vez se da autorización para acceder a los recursos aparece una pantalla como la que se muestra en la figura 5.5, aquí se puede observar que la división mencionada anteriormente con un botón extra. El pre-procesamiento lo conforman dos botones el botón “Nube de puntos” y el botón “Generación de la base de datos” esto con el fin de mantener un control sobre los datos. En este apartado se explicara el procedimiento a desarrollar del primer botón, al segundo se referirá en la siguiente apartado.

El applet toma los datos a partir de un directorio fijo este depende del sistema operativo utilizado

- **Para Linux:** /tmp
- **Para Windows:** C:\\

Dentro de este directorio deben depositarse 2 archivos de entrada, el primero es el archivo DXF con el nombre de “modelo.dxf” y el segundo archivo “datos.txt”, el segundo archivo es utilizado por el botón “Generación del formulario” y se explicara en el siguiente apartado.

Al dar click sobre el botón “Preprocesamiento” el applet leerá el archivo “modelo.dxf” depositado en el directorio y arrojará dos archivos referencia.txt y coordenadas.txt. El primero contiene el número de capas del archivo, seguido por el número de puntos contenidos en cada capa; el segundo archivo lo constituye tres columnas en la cual se imprime la información correspondiente a la capa a la que pertenece el punto, la coordenada x y la coordenada y de cada punto en el archivo como se muestra en la figura 5.6.

5.1.2 Generación de la base de datos

Este botón toma los archivos creados anteriormente junto con el archivo “datos.txt” y ubica los datos dentro de la estructura St Germain además de crear el archivo que modifica la topografía del modelo, en otras palabras construye el archivo “formulario.xml” y el archivo “ascii_topo_2D” que son el alimento para el simulador Gale.

La construcción de las geometrías al interior de la base de datos se realiza por medio de los archivos “coordenadas.txt” y “referencia.txt”. Se toma las coordenadas pertenecientes cada capa y a partir de la estructura denominada “PolygonShape” se crea las geometrías dentro de la base

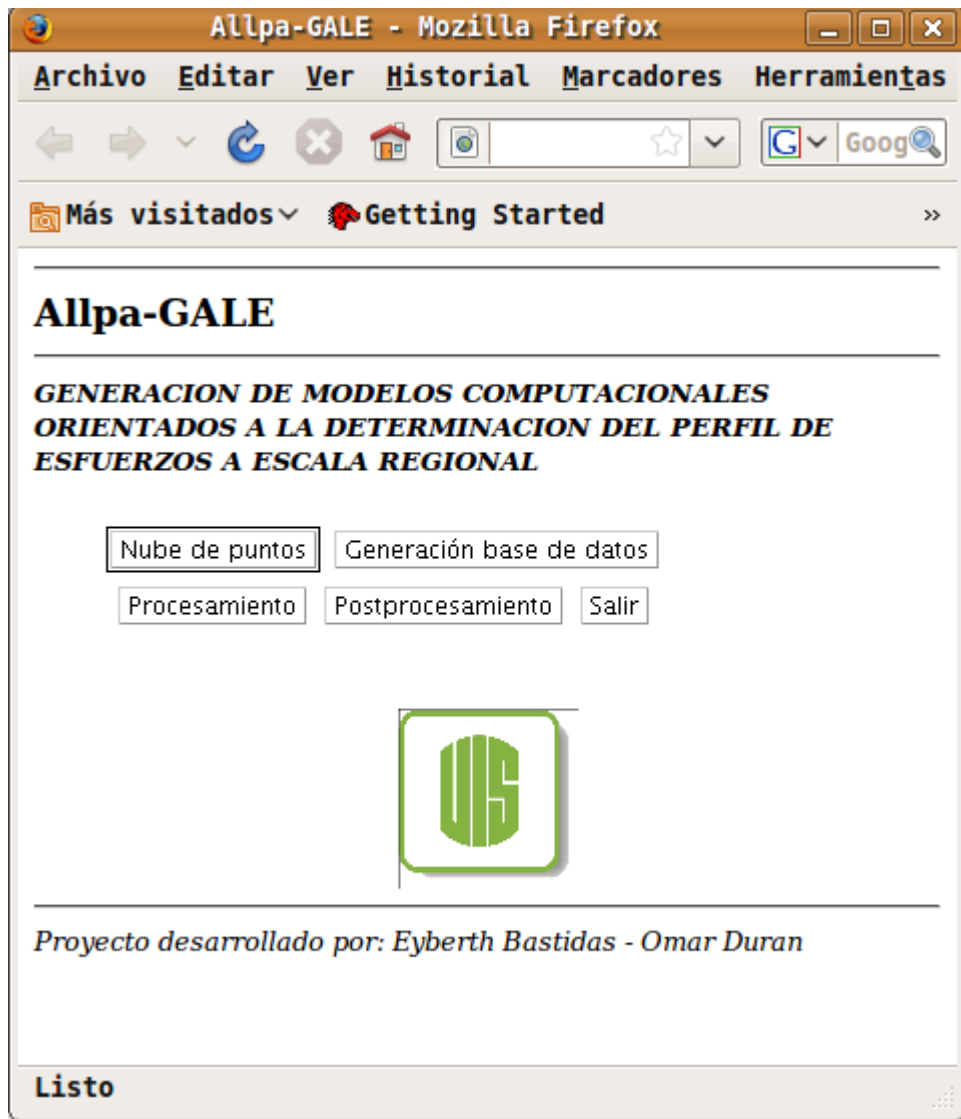


Figura 5.5: Interfaz de usuario - Visualización utilizando el navegador *Mozilla*. Referencia *Autor*.

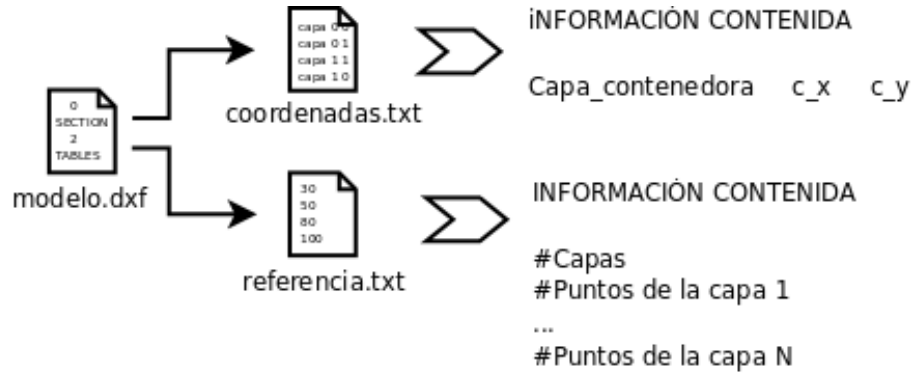


Figura 5.6: Botón de preprocesamiento. Referencia *Autor*.

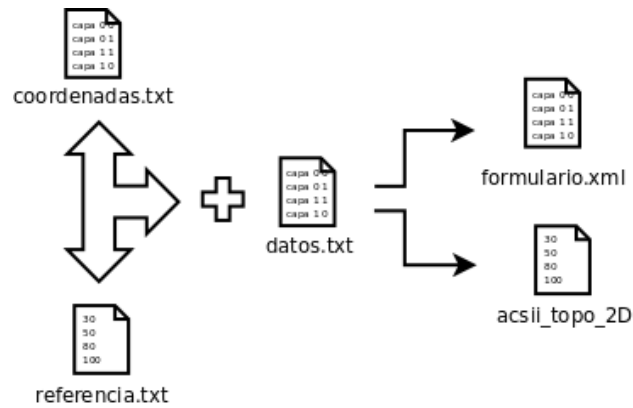


Figura 5.7: Botón generación del formulario. Referencia *Autor*.

de datos que alimenta el simulador Gale. La estructura recibe el mismo nombre que el de la capa en el archivo dxf a excepción de la capa nombrada “0”, las coordenadas de esta capa se almacenan en un archivo denominado “ascii_topo_2D”, a través de este archivo se deforma la superficie superior del modelo para que tome la forma de la topografía del terreno (fig. 5.7).

Este último procedimiento es una nueva propuesta para mejorar los modelos 2D, para implementarla en el simulador Gale es necesario modificar los archivos “SurfaceAdaptator.c” y “SurfaceAdaptor.h” del programa con los archivos presentados y compilarlo.

Una vez construidas las geometrías, el applet procede a leer el archivo “datos.txt” en el cual está consignada una información básica relacionada con el término hidrostático y el comportamiento del material.

La primera parte contiene los valores para incluir una estructura hidrostática:

- Densidad en la parte superior
- Alpha superior
- Densidad en el nivel inferior
- Alpha inferior
- Límite del material

La segunda parte está dedicada a crear los materiales al interior de la base de datos, por defecto se trabaja con viscosidades tipo FrankKamenetskii y materiales visco plásticos con modelo de DruckerPrager, el material creado toma el nombre que se le dé en este archivo. Es importante resaltar que el nombre puede ser diferente al de las capas originalmente depositado en el archivo DXF sin embargo esta maniobra requerirá la definición de una geometría, esto resulta útil cuando se realizan intersecciones o uniones de formas ya que la nueva geometría nombrada como aparece en el archivo será igual a la intersección o unión de las geometrías cuyo nombre reside en el archivo DXF.

ACLARACIÓN: La base de datos formada de esta forma no pretende abarcar toda la información que define el modelo a simular, simplemente es una propuesta para ayudar a modelar las complejas geometrías puesto que este paso resulta ser tedioso y toma mucho tiempo, la implementación del software CAD permite agilizar este proceso para concentrarse en la simulación y el análisis de resultados. Esta base de datos asume valores que se consideraron estables para que en un primer intento, el usuario pueda visualizar al menos un paso de tiempo en el cual se muestre el prototipo del modelo que confrontará con la estructura de interés. Dentro del programa existe la limitante de 11 estructuras que obedecen a al modelo de DruckerPrager, si existen más de 11 materiales se recomienda modificar la geología de algunos a un tipo viscoso independiente de la temperatura como se muestra en el anexo, sin embargo la documentación detallada se encuentra en el manual del usuario de Gale.

5.2 PROCESAMIENTO

El desarrollo de este trabajo es soportado sobre un software bajo la licencia GNU, denominado GALE. Este software es un código paralelo 2D/3D basado en una descripción Arbitraria Euleriana - Lagrangiana que puede resolver problemas relacionados con grandes deformaciones

a escala tectónica. El programa es una propuesta desarrollada originalmente por VPAC (Victorian Partnership for Advanced Computing) y mejorado por IG (Computational Infrastructure for Geodynamics). Una vez depurada la base de datos se ejecuta un binario Gale para procesar la información.

Con las modificaciones realizadas se pretende construir geometrías complejas que permitan modelar en una forma más verídica las estructuras geológicas. En el desarrollo del trabajo se requirió procesar en paralelo debido a que el solver no-lineal (*Algoritmo de Usawa*) se torna lento (se utilizó más de 10000 elementos) debido a las propiedades complejas del material y el acople del fenómeno de transporte de calor.

Si el binario es copiado en el directorio fuente, el applet da el comando para correr la simulación mediante el botón correr, sin embargo es recomendable utilizar el terminal de Linux o el cmd de Windows para correr la simulación.

GALE hace uso de librerías físicas, de código abierto para elementos finitos que han sido desarrolladas por los autores y el grupo de la Universidad de Monash dirigido por el profesor Luis Moresi. Este programa hace uso también de las librerías PETSc, estas son un conjunto de estructuras para la solución en paralelo de aplicaciones científicas modeladas a través de ecuaciones diferenciales parciales.

A continuación se hace una breve descripción del conjunto de librerías utilizadas.

StGermain

StGermain (URL <http://www.stgermainproject.org/>).

Es una tecnología de mecánica computacional desarrollada por VPAC que proporciona una infraestructura que puede ser utilizada para crear ambientes reutilizables de colaboración para el desarrollo computacional. Su objetivo es proporcionar la eficiencia y el estilo de codificación cercano al tradicional HPC (High-performance computing), así como nuevas técnicas y métodos en la computación científica.

StgFEM

StgFEM (URL <http://www.stgermainproject.org/StgFEM.html/>).

Utiliza la filosofía StGermain de reutilización y desarrollo de colaboración para crear un compositor de problemas en elementos finitos tanto de los sistemas lineales a resolver como para la discretización en elementos finitos de dominio del problema. La composición puede ser descrita en XML y puede ser representado en un diagrama de red con una herramienta adecuada.

PiCellerator

PICellerator (URL <http://www.stgermainproject.org/PICellerator.html/>).

(Partícula en Cellerator), es un esquema de integración de puntos lagrangianos de Elementos Finitos; se implementa como un sustituto del esquema de integración para el régimen de Gauss por defecto en StgFEM. El concepto PiCellerator ha crecido hasta convertirse en un marco general del esquema de integración de Lagrange.



Figura 5.8: Flujo de trabajo del software GALE. Referencia *Manual Usuario GALE 1.4.1*.

UnderWorld

Underworld (URL <http://www.underworldproject.org/>) es una estructura de modelamiento en paralelo StGermain. Un código de investigación en Geociencias que utiliza una metodología de partículas en celdas de Lagrange (cuyo prototipo es el mismo código Ellipsis), visualizado en gLucifer.

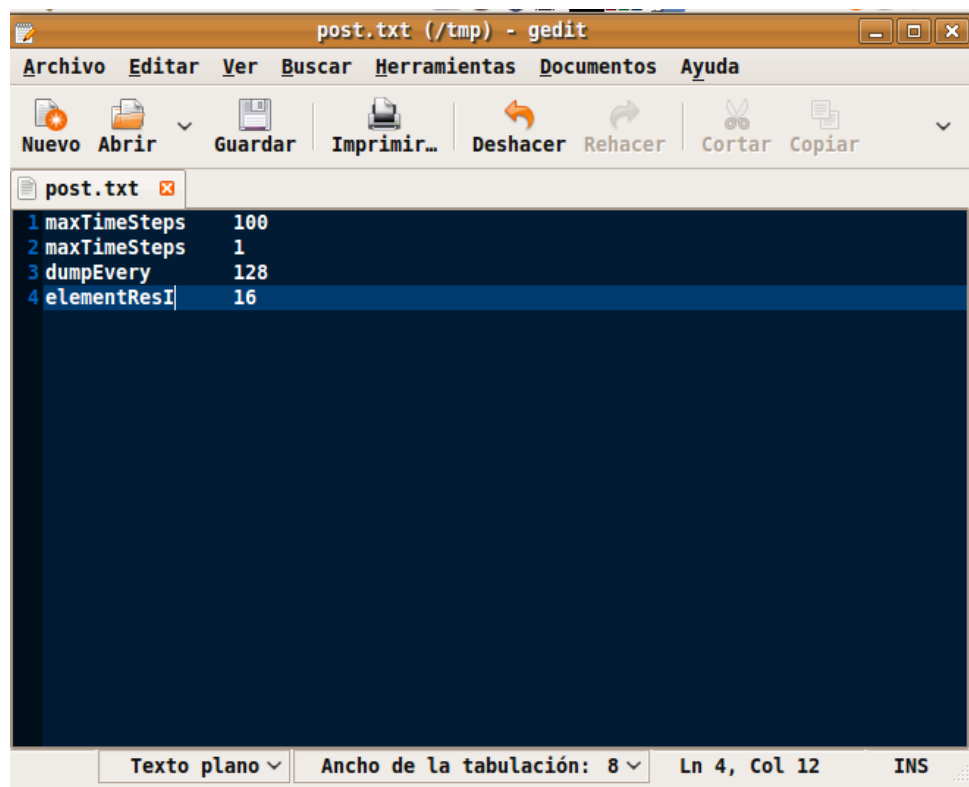
En general el flujo de trabajo se puede entender por medio de la figura 5.8

5.3 POST-PROCESAMIENTO

Terminado el procesamiento, se realiza un proceso a los archivos de salida del tipo VTK con extensión **.vts* los cuales tienen la información del tensor de esfuerzos y de deformación en coordenadas cartesianas, entre otra información; este último proceso se encarga de tomar el tensor de esfuerzos y rotarlo para obtener los esfuerzos principales y hacer posible su visualización. Como ya fue mencionado los archivos resultantes de la simulación son de tipo VTK y para su visualización se puede usar varios programas como Mayavi, Paraview, Octave, Gnuplot y Matlab. En este trabajo se hizo uso del visualizador Paraview.

El botón de “PostProcesamiento” se encarga de realizar esta última operación, para ello los archivos resultantes de la simulación deben ser trasladados al directorio de trabajo y la carpeta que contiene estos archivos se debe renombrar “simulacion”, para finalizar, este programa requiere de los datos: “*maxTimeSteps*”, “*dumpEvery*”, “*elementResI*” y “*elementResJ*” colocados dentro de la base de datos para la simulación. Estos datos se colocan dentro de un archivo denominado “*post.txt*” que se encontrará en el directorio junto con la carpeta “*/simulacion*”. El formato del archivo “*post.txt*” simplemente puede ser el que se muestra en la figura 5.9, al hacer click en el botón de Post-Procesamiento, el programa transformará todos los archivos con extensión **.vts* para que los valores y direcciones del tensor de máximo y mínimo esfuerzo puedan ser visualizados.

Como resultado de la metodología se obtienen perfiles de esfuerzo, mapas de densidad de fracturas y perfiles térmicos; a partir de una geometría y ciertos parámetros computacionales.



The image shows a screenshot of the gedit text editor window. The title bar reads "post.txt (/tmp) - gedit". The menu bar includes "Archivo", "Editar", "Ver", "Buscar", "Herramientas", "Documentos", and "Ayuda". The toolbar contains icons for "Nuevo", "Abrir", "Guardar", "Imprimir...", "Deshacer", "Rehacer", "Cortar", and "Copiar". The main editing area shows a file named "post.txt" with the following content:

```
1 maxTimeSteps 100
2 maxTimeSteps 1
3 dumpEvery 128
4 elementResI 16
```

The status bar at the bottom indicates "Texto plano", "Ancho de la tabulación: 8", "Ln 4, Col 12", and "INS".

Figura 5.9: Formato archivo “post.txt” - Archivo creado utilizando el editor *gedit* de Linux. Referencia *Autor*.

Capítulo 6

MODELOS GEOLÓGICOS

Con el fin de demostrar el uso y el potencial de la metodología desarrollada, se crearon varios modelos sintéticos. El estudio esta orientado al modelamiento de esfuerzos acoplado el flujo de calor, y estos son usados para explicar el estado de esfuerzos y deformación que tuvo la zona de estudio hace millones de años.

6.1 MODELO 1 - EXTENSIÓN

6.1.1 Descripción

La situación mostrada en la figura 6.1 se resume básicamente en una serie de estratos, los cuales han sufrido una fuerte deformación debido a la intrusión de un cuerpo salino, así como también procesos de erosión, sedimentación y calentamiento, generando un anticlinal con múltiples fallas normales conjugadas. Este anticlinal de comparación es tomado de la Referencia [1]; el cual fue reconstruido a partir de datos, corazones de pozos petrolíferos; típico problema de reconstrucción del subsuelo y por tanto estará sujeto a interpretaciones que no son discutidas aquí.

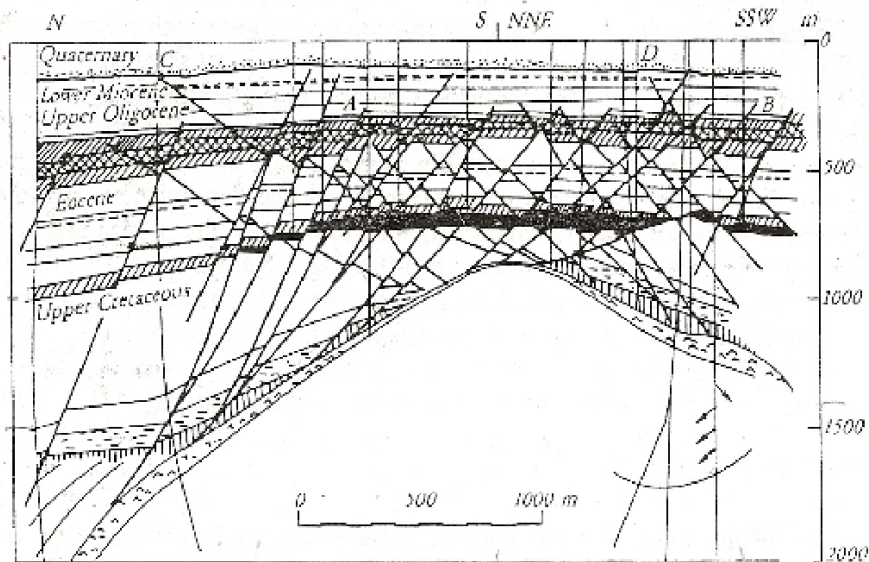


Figura 6.1: Domo de sal - Norte de Alemania. Realizado por Behrman 1949 y simplificado por Horsfield en 1980; El cuerpo salino genera múltiples fallas normales conjugadas que afectan los estratos deformados. Referencia *Mandl, G. (1988)*.

La construcción del modelo se basa en datos sintéticos, y su principal objetivo es reproducir las principales tendencias de falla asociadas a una historia de esfuerzos debido a la intrusión de un cuerpo, sin tener en cuenta los procesos de superficie tales como la erosión, y sedimentación que dan lugar a cambios tanto geométricos como de tendencia de falla; el objeto de este caso de estudio no es más que el de mostrar la capacidad de la metodología para simular una posible situación real.

Geometría

La figura 6.2-A, muestra el modelo redibujado, archivo **dxf*, a partir de las coordenadas nodales obtenidas de la escala de la figura 6.1 y tratado con el debido pre-procesamiento. Como resultado se obtiene el modelo y la geometría procesada. En la figura-6.2-B se muestra el modelo computacional discreto y sus respectivas dimensiones.

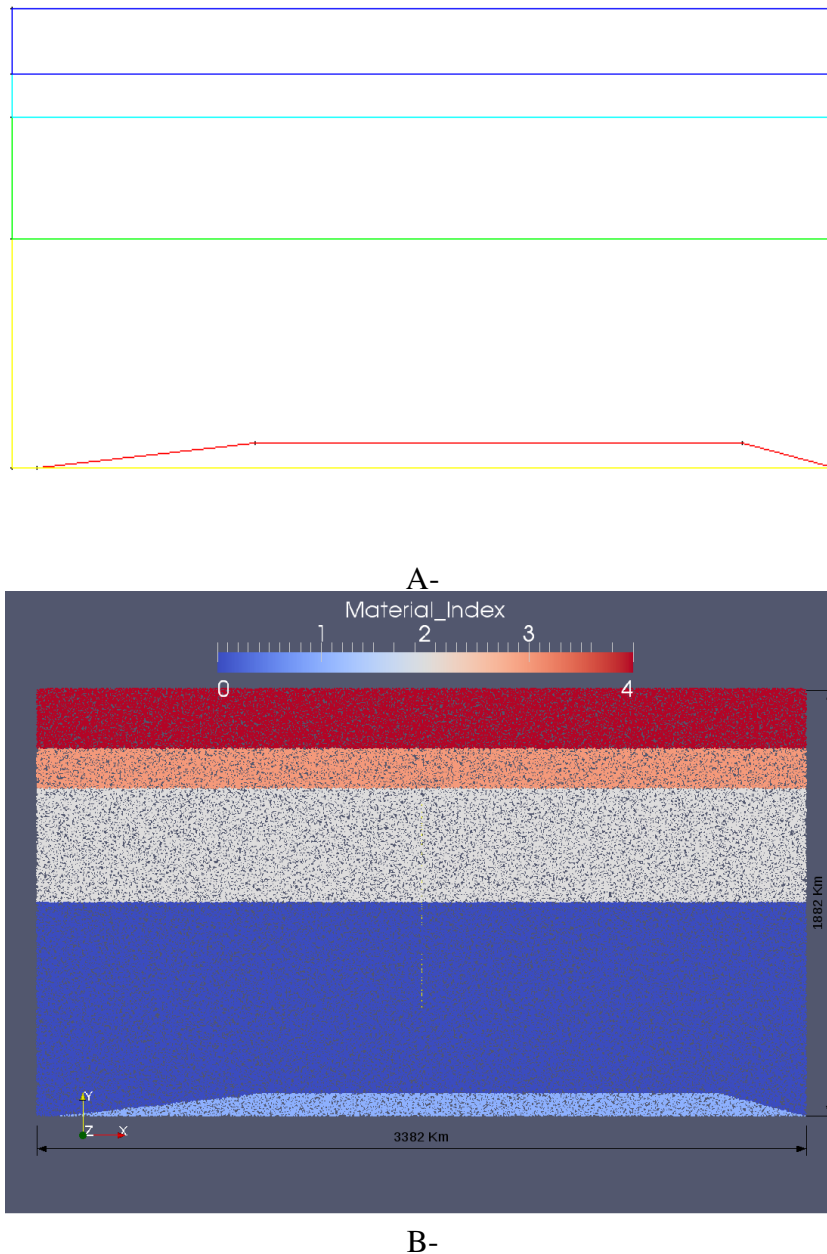


Figura 6.2: Geometría del modelo. A- Modelo dibujado en QCAD. B- Modelo discreto visualizado en Paraview.

Parámetros Computacionales

La malla de esta modelamiento es lineal, se compone de 9380 elementos (*134 en la dirección i, 70 en la dirección j*) cuadriláteros con interpolación lineal.

Se utiliza 30 [*Partículas/elemento*] para registrar el movimiento del medio a lo largo de la deformación. Para el algoritmo de Usawa se uso una tolerancia lineal de $1 \exp^{-5}$ y una tolerancia

no lineal de $1 \exp^{-2}$, de forma análoga a los demás modelos.

Propiedades del Material

Los parámetros computacionales usados se muestran en la tabla B.1. Estos valores son obtenidos de revisiones bibliográficas, y por ende no tiene un carácter cuantitativo ni determinista de la zona, por el contrario la intención es dar a conocer el potencial de la metodología para reproducir ciertos escenarios reales.

Condiciones de Frontera

Debido a la intrusión de un cuerpo los estratos supra yacentes sufren un proceso de extensión en la parte superior y un proceso de compresión en la parte inferior de los mismos a medida que dicho cuerpo levanta los estratos; el cuerpo intrusivo penetra en el modelo a un velocidad máxima v_{max} de $1 \left[\frac{cm}{año} \right]$, se hace uso de una distribución normal (eq. 6.1) con los siguientes valores $c = 2000 [m]$, $w = 500 [m]$ para la distribución de la velocidad en la parte inferior de la frontera. Las condiciones del modelo se dan en la figura 6.3.

$$v = v_{max} \exp \left[- \left(\frac{C-x}{w} \right)^2 \right] \quad (6.1)$$

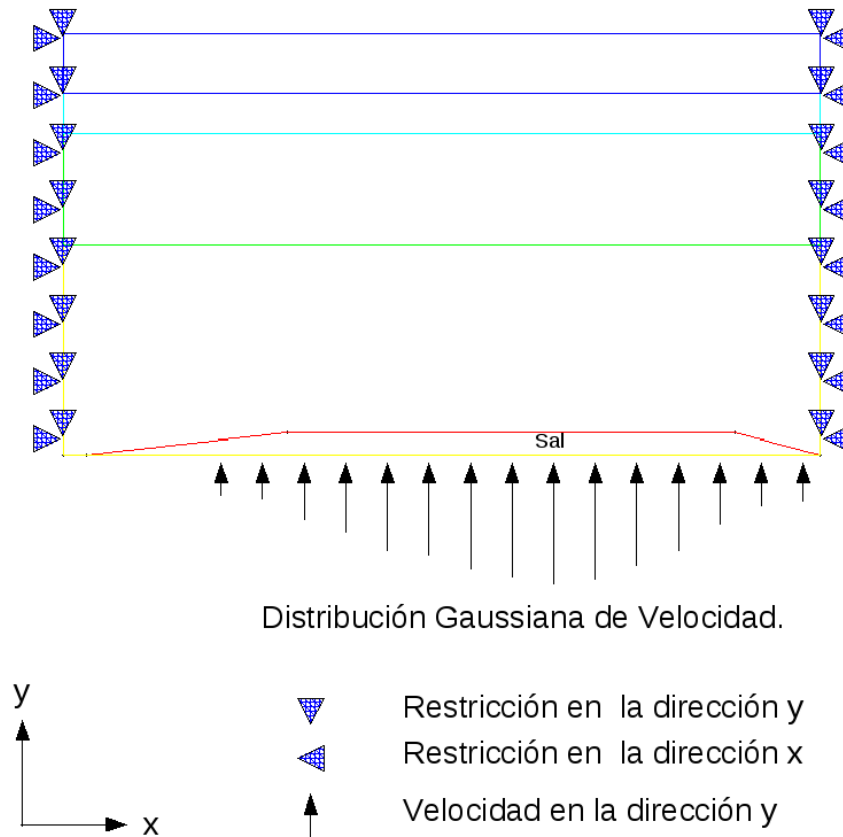


Figura 6.3: Condiciones de borde para el modelo.

6.1.2 Resultados

Al aplicar las condiciones de frontera dadas anteriormente se obtiene la respuesta del modelo; en la figura 6.5-B se observa como los materiales han sido desplazados en la dirección vertical por el material entrante, mientras que los gradientes de velocidad tienen una tendencia hacia la parte derecha de la zona (fig.6.5-A) e indican las áreas que sufren una alta deformación por cambios drásticos en el gradiente de velocidad; en términos de los esfuerzos principales, el esfuerzo vertical σ_1 (fig.6.5-D) sufre una ligera desviación de la vertical por encima de la cresta del material intrusivo, mientras que en los laterales la orientación cambia casi a 45° de la vertical debido a que el material de las fronteras laterales no está sufriendo movimiento; con respecto a σ_2 (fig.6.5-C) el esfuerzo horizontal se hace bastante grande en las zonas donde el cuerpo salino afecta directamente a la capa más inferior someténdola a fuertes tensiones y zonas bastante fracturadas. En términos de fallamiento las figuras 6.5-E y -F, indican las áreas que han sufrido deformación después de la falla y la velocidad de deformación respectivamente, de forma lógica las zonas que se deforman más rápido son aquellas que fallarán primero, de ahí la consistencia entre las tendencias de las dos figuras, si comparamos las figuras-6.5-E y -B las zonas de falla coinciden con las zonas de donde el material empieza a perder su continuidad generando planos de fallamiento como se muestra en la figura-6.4.

En comparación con el anticlinal de la figura 6.1, el modelo reproduce ciertos comportamientos como la generación de zonas altamente falladas en la parte superior del domo; Se generan fallamientos normales conjugados en la capa inmediatamente superior del cuerpo intrusivo y varias tendencias generales del fallamiento dando así a conocer el potencial de este modelamiento para grandes deformaciones; aunque como se ha mencionado anteriormente, los procesos de erosión respectivos no son modelados y las tendencias de falla mostradas aquí muy seguramente no aflorarían a superficie, pero sí afectarían la zona completa como es mostrado en la figura 6.1.

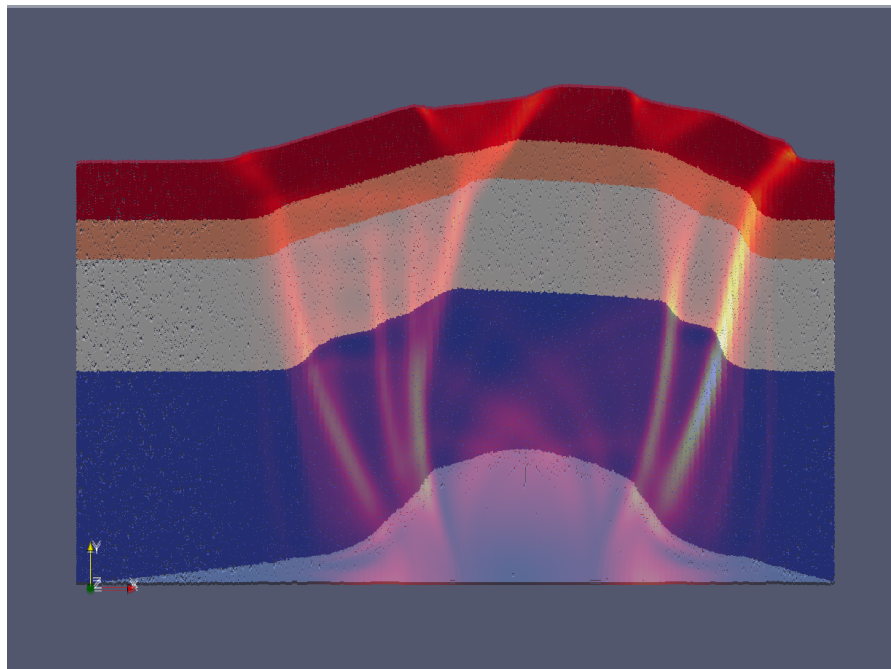


Figura 6.4: Gráfico comparativo; zonas con deformación después de la falla coinciden con las zonas donde el material empieza a perder su continuidad.

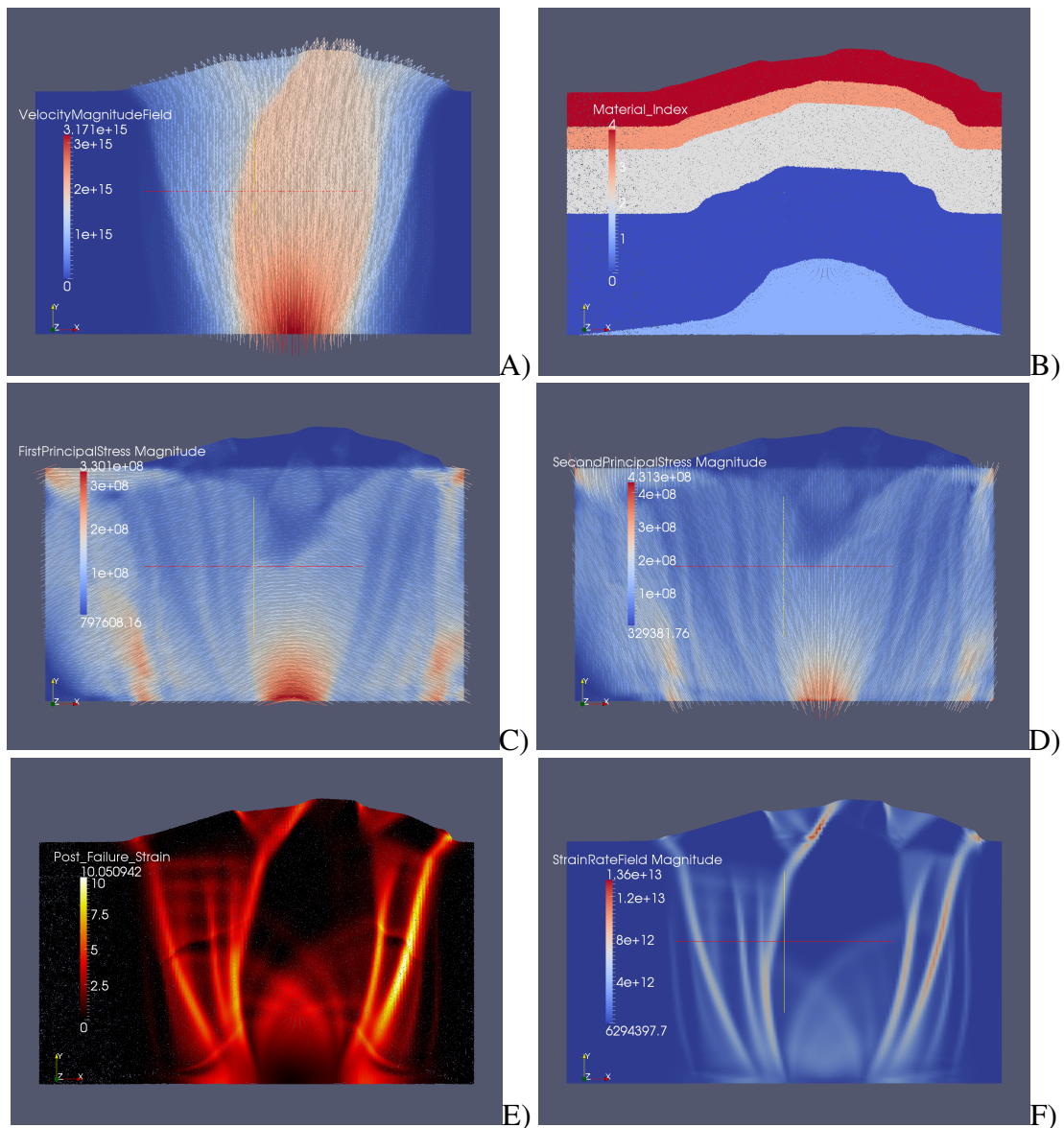


Figura 6.5: Resultados de las variables de campo a las condiciones dadas. A- Campo de velocidad, B- Distribución de los materiales. C- D- Orientaciones de los esfuerzos principales izquierda) σ_1 , σ_2 . E- Deformación post falla usando DruckerPrager. F- Velocidad de deformación. Visualizado en Paraview.

6.2 MODELO 2 - OVER THRUSTING

En el siguiente caso de estudio se pretende evaluar mediante una aproximación analítica, un esquema simplificado de cabalgamiento mostrado en la figura 6.6, el cual es explicado a continuación.

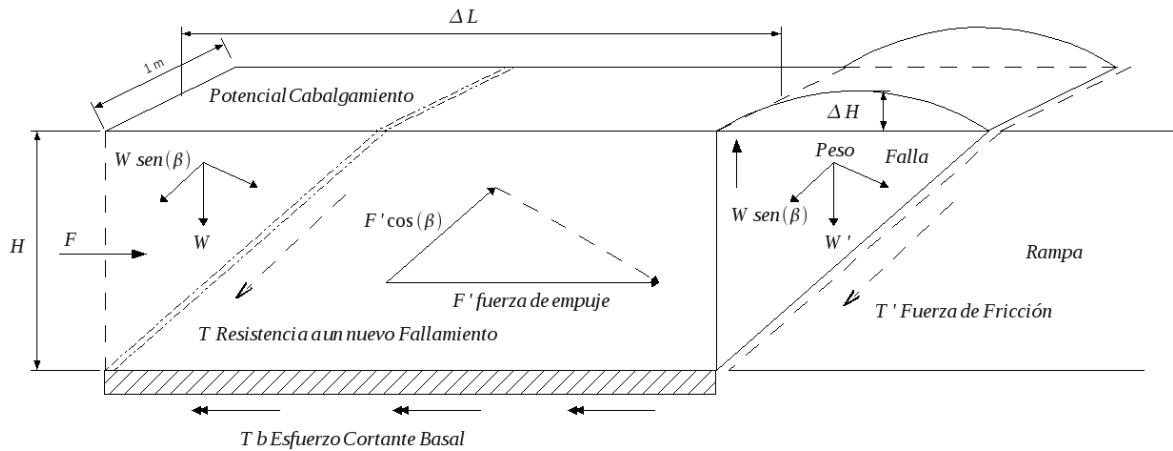


Figura 6.6: Esquema de un múltiple Cabalgamiento Imbricado. Referencia Mandl, G. (1988).

6.2.1 Descripción

Cuando un perfil de empuje es separado de su base, una parte frontal usualmente se montará sobre un bloque posterior dirigido sobre un ángulo inclinado de falla - *pie de falla* - como es mostrado esquemáticamente en la figura 6.6. La fricción a lo largo de la falla y el peso de la roca en la región del pie de falla adicionan resistencia al cabalgamiento, con el fin de tener en cuenta este efecto una aproximación¹, se ha incluido dentro de un idealizado pie triangular, el balance de fuerzas general.

Haciendo una restricción a un caso 2D con material isotrópico, denotamos una fuerza F que actúa sobre una superficie horizontal de profundidad unitaria en la parte izquierda de la zona (fig. 6.6), la cual lógicamente disminuye por el efecto de la fricción en la base. Si es considerado a ΔL como la longitud entre el pie del plano de falla actual y el consecuente plano de falla generado por el avanzado cabalgamiento, el balance de fuerzas horizontales es dado como

$$F = F' + \tau_b \cdot \Delta L \quad (6.2)$$

Donde F y F' actúan sobre la parte posterior y la parte frontal del cabalgamiento respectivamente, y τ_b es el esfuerzo cortante debido a la fricción uniforme con la base. La fuerza F' debe ser balanceada por las fuerzas que actúan sobre el plano de falla por tanto el balance de fuerzas sobre el plano de falla deber ser

$$F' \cos(\beta) = T' + W' \sin(\beta) \quad (6.3)$$

A medida que el cabalgamiento continua, las fuerzas sobre el plano de falla siguen incrementándose hasta llegar a un punto crítico donde el cabalgamiento se detiene, haciendo que la fuerza F provoque un potencial plano de falla a una distancia ΔL (fig. 6.6), donde este empezará un nuevo cabalgamiento si la componente $F \cos(\beta)$ alcanza un equilibrio con el peso, las fuerzas cohesivas y de fricción del material no fallado. Como sigue

¹Trabajo realizado por Raileg y Griggs (1963). Referencia Mandl, G. (1988), Mechanics of Tectonic Faulting; Models and Basic Concepts.

$$F \cos (\beta) = T + W \sin (\beta) \quad (6.4)$$

si se compara el balance del cabalgamiento actual y el balance del potencial cabalgamiento, se resalta que la resistencia T a lo largo del potencial plano de falla es mayor que la resistencia T' , igualmente el ángulo de fricción interna debe ser mayor en la zona potencial que el cabalgamiento totalmente desarrollado, como también los esfuerzos por ser $F > F'$ y la presión de poro que no es tomada en cuenta en este análisis; sin embargo debido a cierto incremento en el peso existe una distancia crítica ΔL a la cual se genera el nuevo cabalgamiento. Esta crítica distancia es encontrada reemplazando las ecuaciones 6.3 y 6.4 en la ecuación 6.2, obteniendo

$$\Delta L = \frac{T - T' + (W - W') \sin (\beta)}{\tau_b \cos (\beta)} \quad (6.5)$$

La ecuación 6.5 indica que el potencial cabalgamiento es iniciado para un valor de $\Delta L > 0$ para una configuración T , T' y τ_b , la longitud de ΔL aumenta con el incremento en el ángulo ya que el coseno se hace pequeño al contrario del seno, también la diferencia entre T y T' hace que se requiera más fuerza para empezar un nuevo cabalgamiento, por otro lado la influencia del esfuerzo cortante tiende a acortar la distancia lógicamente por que aumenta la fuerza necesaria para alcanzar el equilibrio con la fuerza cohesiva T .

Por último se construyó un modelo para evaluar el resultado dado en la ecuación-6.5 con la metodología propuesta.

Geometría

La geometría es construida a partir de una nube de puntos dada en la tabla B.2, el respectivo modelo redibujado y sus dimensiones se muestran en la figura 6.7.

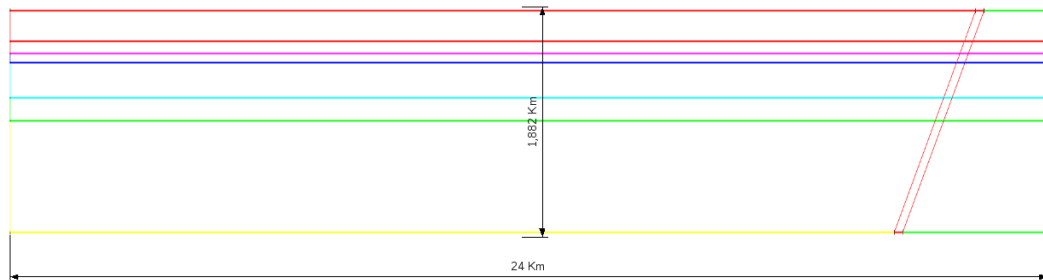


Figura 6.7: Geometría construida a partir de la tabla-B.2.

Parámetros Computacionales

La malla mostrada en la figura 6.8, es lineal, se compone de 512 elementos (64 en la dirección i , 8 en la dirección j) cuadriláteros con interpolación lineal.

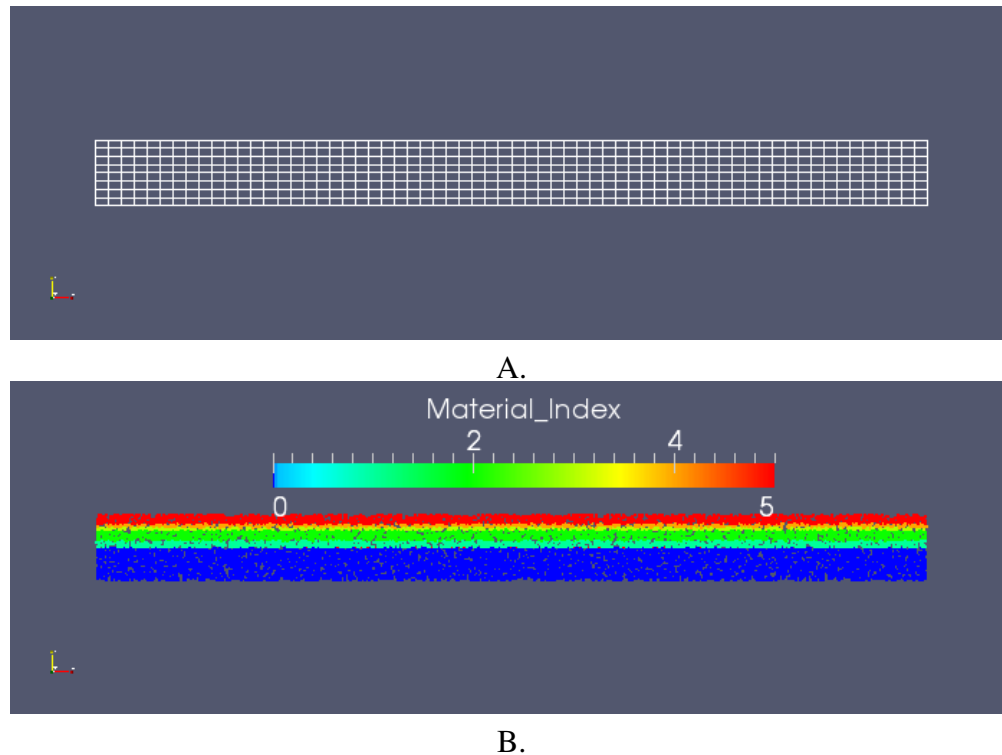


Figura 6.8: Malla y distribución de los materiales. A- En mallado utilizado para el estudio 512 elementos y 585 nodos computacionales. B- Distribución de los materiales en el modelo. Visualizado en Paraview.

Se utiliza 30 [*Partículas/elemento*] para registrar el movimiento del medio a lo largo de la deformación. Para el algoritmo de Usawa se usó una tolerancia lineal de $1 \exp^{-5}$ y una tolerancia no lineal de $1 \exp^{-2}$, de forma análoga a los demás modelos.

Propiedades de los Materiales

Las propiedades usadas son mostradas en la tabla B.3, y son las mismas para todos los materiales con el objetivo de evaluar un modelo isotrópico de un solo material con diferentes índices de material a fin de poder visualizar los cambios de la geometría en el material del interior.

Condiciones de Frontera

Las condiciones de frontera son dadas en la figura 6.9, donde se aplica un esfuerzo de $1 [MPa]$ en la dirección negativa horizontal y se impuso una velocidad de $1 \left[\frac{cm}{año} \right]$ en la parte izquierda del modelo por un tiempo de simulación de 100000 [*años*], el desplazamiento aplicado son $1 [Km]$. Para simular el plano de inclinación o rampa en la figura 6.6 se impuso una zona triangular de pendiente 45° con movimiento nulo para completar la restricción del pie de falla necesario (fig.6.9-A). Para el problema térmico se usaron dos isotermas de 30 y 81 [*C*] en la parte superior e inferior respectivamente, en las partes laterales se impuso un gradiente geotérmico de $30 [C/Km]$ como se ilustra en la figura-6.9-B.

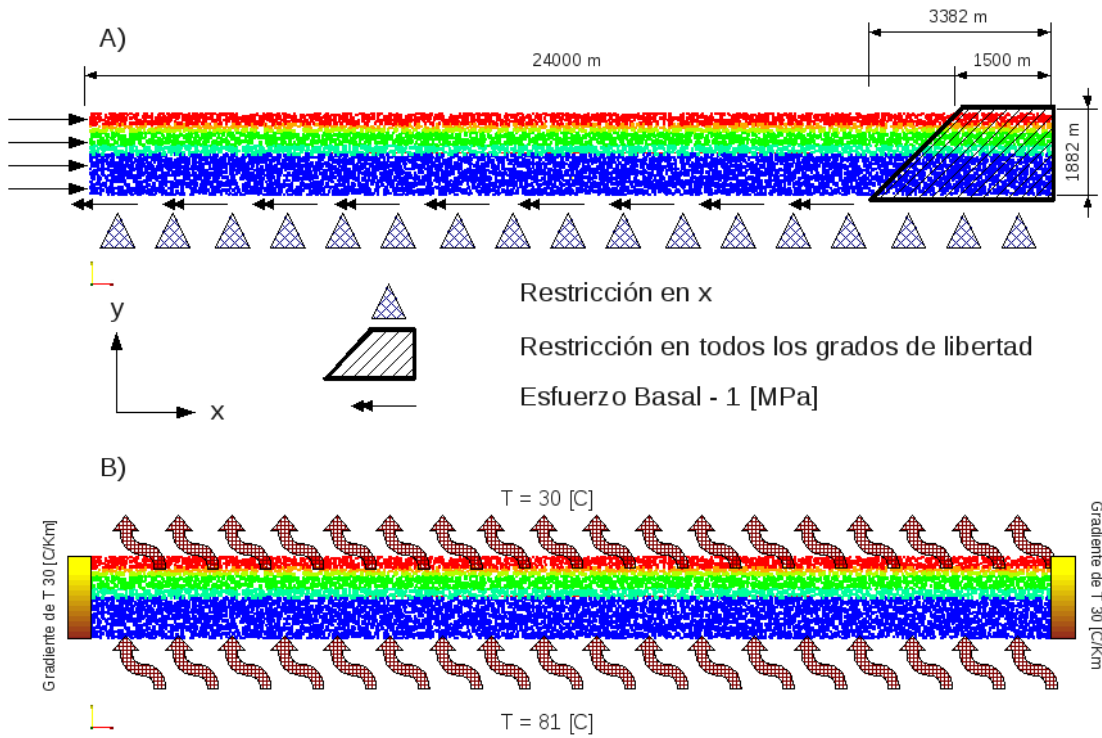


Figura 6.9: Condiciones de frontera para el modelamiento. A- Problema estructural. B- Problema térmico

6.2.2 Resultados

Con base en las condiciones impuestas se reprodujeron los siguientes resultados mostrados en la figura 6.10. el campo de velocidades de la figura 6.10-A indica como en la zona cercana a la rampa empieza a elevarse debido al empuje de la frontera izquierda, en relación a esto los principales de la figura 6.10-B y -C sufren una ligera inclinación en la zona cerca a la rampa. La distribución de τ_{max} (fig. 6.10 -D) indica como en la zona cerca de la rampa ya se está entrando en un proceso de liberación de energía y por el lado izquierdo este se incrementa indicando la zona potencial a fallar en forma de v. Por otro lado la distribución de presión es perturbada en la zona de la rampa y en la zona izquierda del modelo; es importante recalcar que la parte intermedia está bastante relajada en términos de concentración de esfuerzo, por lo cual también de τ_{max} y presión. Para el caso térmico (fig. 6.10-F) una importante perturbación en el perfil de temperatura se da en el pie de la rampa y es asociado al transporte de energía por advección marcado por el campo de velocidades en esta zona.

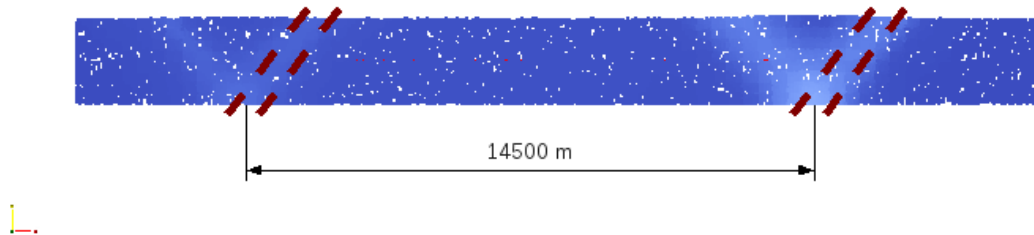


Figura 6.11: Fallas formadas debido al empuje impuesto (ver fig.6.9). Visualizado en Paraview.

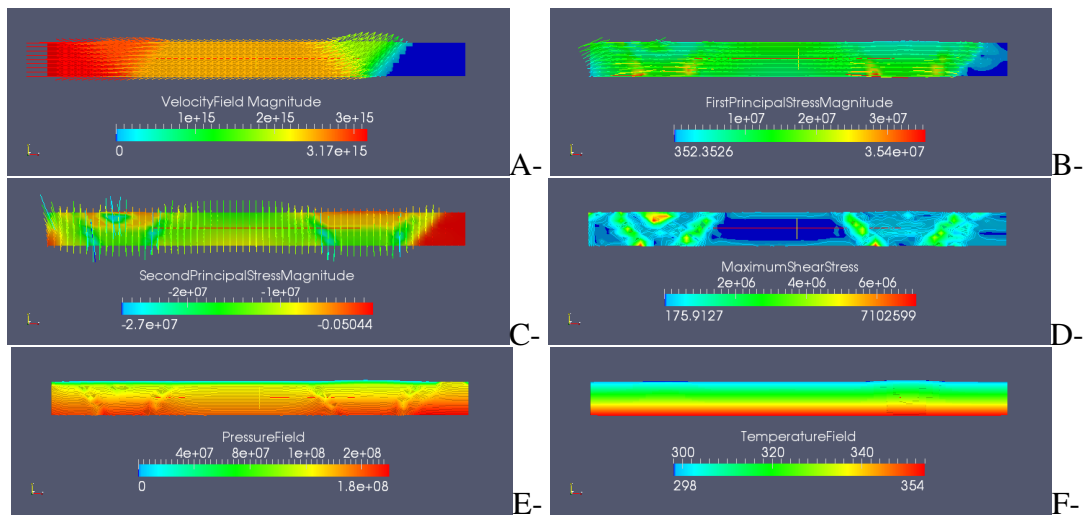


Figura 6.10: Resultados a 18000 [años], usando las propiedades de la tabla-B.3. A- Campo de velocidades $\left[\frac{m}{s} \cdot \exp^{-25}\right]$. B- Magnitud y orientación de σ_1 [MPa]. C- Magnitud y orientación de σ_2 [MPa]. D- Magnitud y distribución del esfuerzo cortante máximo τ_{max} [MPa]. E- Campo de presiones [MPa]. F- Campo de temperaturas [K]. Visualizado en Paraview.

Cálculo de ΔL

En la figura 6.12 en la parte izquierda se muestra el esfuerzo post falla, en el cual se dan dos marcas tendencias en forma de v a una distancia aproximada de 14,5 [Km] del punto de inicio de las dos v. Estas v son formadas por la falla real y su correspondiente conjugada como se explica en la sección 2, por ello en un caso real donde una vez se inicia una falla el borde rígido deja de serlo evitando que se forme su conjugada correspondiente (Ver Referencia [1]) por lo cual solo existirían dos fallas en lugar de cuatro como se muestra en la figura 6.11.

En base a este resultado y con ángulo de la rampa β de 45° , se calculan los términos de la

ecuación 6.5, como sigue

- $W = \rho g A \cdot (1 [m]) [N]$
- $W' = \rho g A' \cdot (1 [m]) [N]$
- $T = coe_{fricción} W \cos(\beta)$
- $T' = coe'_{fricción} W \cos(\beta)$

Donde los términos primados son los correspondientes a la zona cerca a la rampa. Para calcular el área A y A' se usa un aproximación por triángulos, siendo $A = \frac{b \cdot h}{2}$ y $A' = \frac{b \cdot h}{2} + \frac{b \cdot dh}{2}$, procediendo a calcular los valores con $b = 1882 [m]$, $h = 1882 [m]$, $dh = 335 [m]$ como valores medidos al estado correspondiente de 18000 [años]. También con $\tau_b = 1000000 [Pa]$ $\rho = 2750 \left[\frac{Kg}{m^3} \right]$, $g = 9.81 \left[\frac{m}{s^2} \right]$, $coe_{fricción} = 0.57735$ y $coe'_{fricción} = 0.057735$ obtenidos de los valores dados para el modelamiento. Realizando los respectivos cálculos se obtiene

- $A = 1770962 [m^2]$
- $A' = 1770962 + 315235 = 2086197 [m^2]$
- $W = 47776127355 [N]$
- $W' = 56280379567.5 [N]$
- $T = 19504513223.68 [N]$
- $T' = 2297635803.24 [N]$
- $\Delta L = \frac{19504513223.68[N] - 2297635803.24[N] + (47776127355[N] - 56280379567.5[N]) \cdot \sin(45)}{1000000[Pa] \cdot \cos(45)} = 15829.95 [m]$

Comparado con el ΔL medido de 14500 [m] se obtiene un resultado muy bueno en términos de la distancia esperada ecuación 6.5 y la calculada por GALE con un error relativo de $err_{rel} = \left(\frac{15829.95 - 14500}{15829.95} \right) \cdot 100\% = 8.4\%$. Con este resultado se demuestra la validez de la mecánica de los resultados comparados un esquema basado en un balance de fuerzas, el cual es la principal diferencia en el modelamiento y el valor calculado por la ecuación 6.5.

Con el objetivo de conocer lo que acontece después 18000 [años] se muestra en la figura 6.12, la evolución del modelo hasta el tiempo final de 100000 [años], lo cual nos revela un interesante comportamiento; a medida que se avanza en la simulación el comportamiento del campo de velocidad cambia de forma drástica con el dado en la figura 6.10 -A, debido a que el potencial fallamiento se ha vuelto real, el campo de velocidades se redirige en el sentido del material que se desliza sobre el nuevo plano de falla, como también es notado en las figuras de la izquierda se incrementa la deformación después de la falla hasta la figura 6.12-F. Después de 18000 la energía se ha acumulado lo suficiente en la nueva zona de falla que se reactiva la deformación en la zona cerca a la rampa, cambiando de nuevo la dirección del campo de velocidades y elevándose más material en la zona que había cesado su deformación (fig. 6.12).

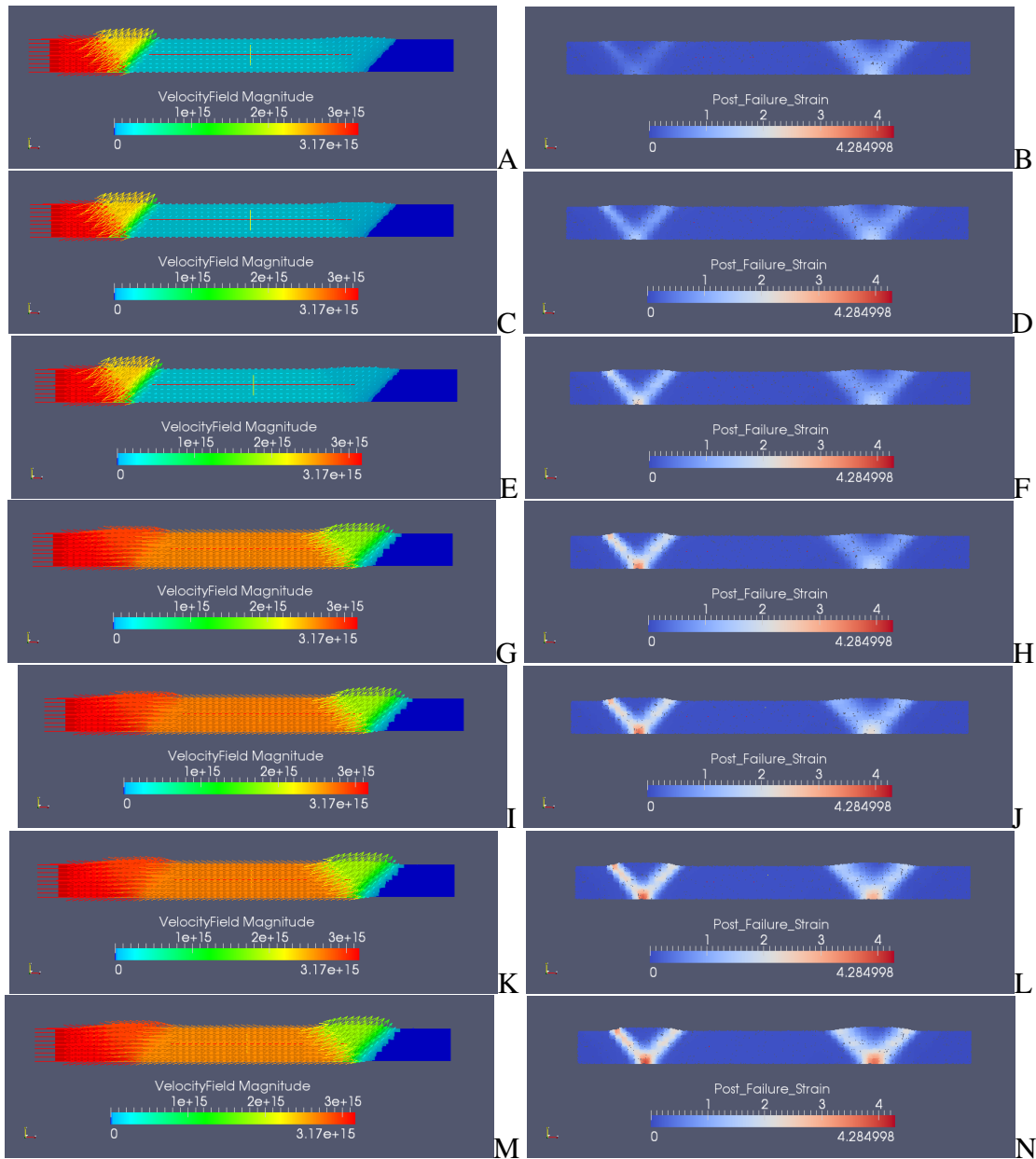


Figura 6.12: Evolución del modelo después de 18000 [años] hasta el tiempo final de 100000 [años]. Visualizado en Paraview.

6.3 MODELO 3 - EMPUJE TECTÓNICO

El modelo estudiado fue tomado de la Referencia [17], disponible en URL-[25], en donde el objetivo principal es la evaluación de la exactitud en los elementos de falla de la zona de estudio, a partir de un análisis paramétrico de los cambios de cohesión y ángulo de fricción interna de cada material, llegando a definir zonas de densidad de fracturas usando el criterio de falla de Mohr-Coulomb.

El objeto es el de reproducir esas zonas de fractura usando el criterio de Falla de Drucker-Prager², como también las distribuciones de los esfuerzos principales con la metodología propuesta de manera que sean consistentes los resultados obtenidos con los datos en la Referencia [17].

6.3.1 Descripción

El cinturón Andino se extiende cerca de 9000 [Km] a lo largo del margen occidental del continente suramericano. La fisiografía de Colombia es dominada al occidente por las montañas Andinas y por la cuenca del amazonas en el oriente, los Andes Colombianos son separados por tres diferentes rangos; La cordillera occidental WC (por sus siglas en inglés, West Cordillera), La cordillera central CC y la cordillera oriental EC. Los eventos tectónicos de mayor importancia que influenciaron el desarrollo de las cuencas colombianas son enteramente asociados a la evolución de los márgenes activos del occidente de Suramérica. La EC representa el principal indicador de la deformación del norte de los Andes, el cual también ha sido influenciado por los márgenes del norte de Suramérica. En la zona norte de las estructuras relacionadas con fallas de empuje tienen una tendencia NW-SE debida a la influencia de los márgenes de mayor latitud, mientras el resto de la EC tiene una tendencia general de NE-SW (Corredor, 2003a).

La ubicación del área de estudio es dada en la figura 6.13 , y sus detalles con un respectivo perfil en la figura 6.14. Los respectivos sistemas de fallas de la zona de estudio son ilustrados en la figura 6.14.

Geometría

La figura 6.15, muestra el modelo redibujado archivo *.dxf a partir de las coordenadas nodales. Como resultado se obtiene el modelo y la geometría procesada. En la figura 6.16 se muestra el modelo computacional discreto. Las dimensiones del modelo son mostradas en la figura 6.17-A.

Parámetros Computacionales

La malla mostrada en la figura 6.16, es lineal, se compone de 1024 elementos (64 en la dirección i , 16 en la dirección j) cuadriláteros con interpolación lineal.

² El cual para el caso 2D es idéntico al criterio de Mohr Coulomb ver sección 2.

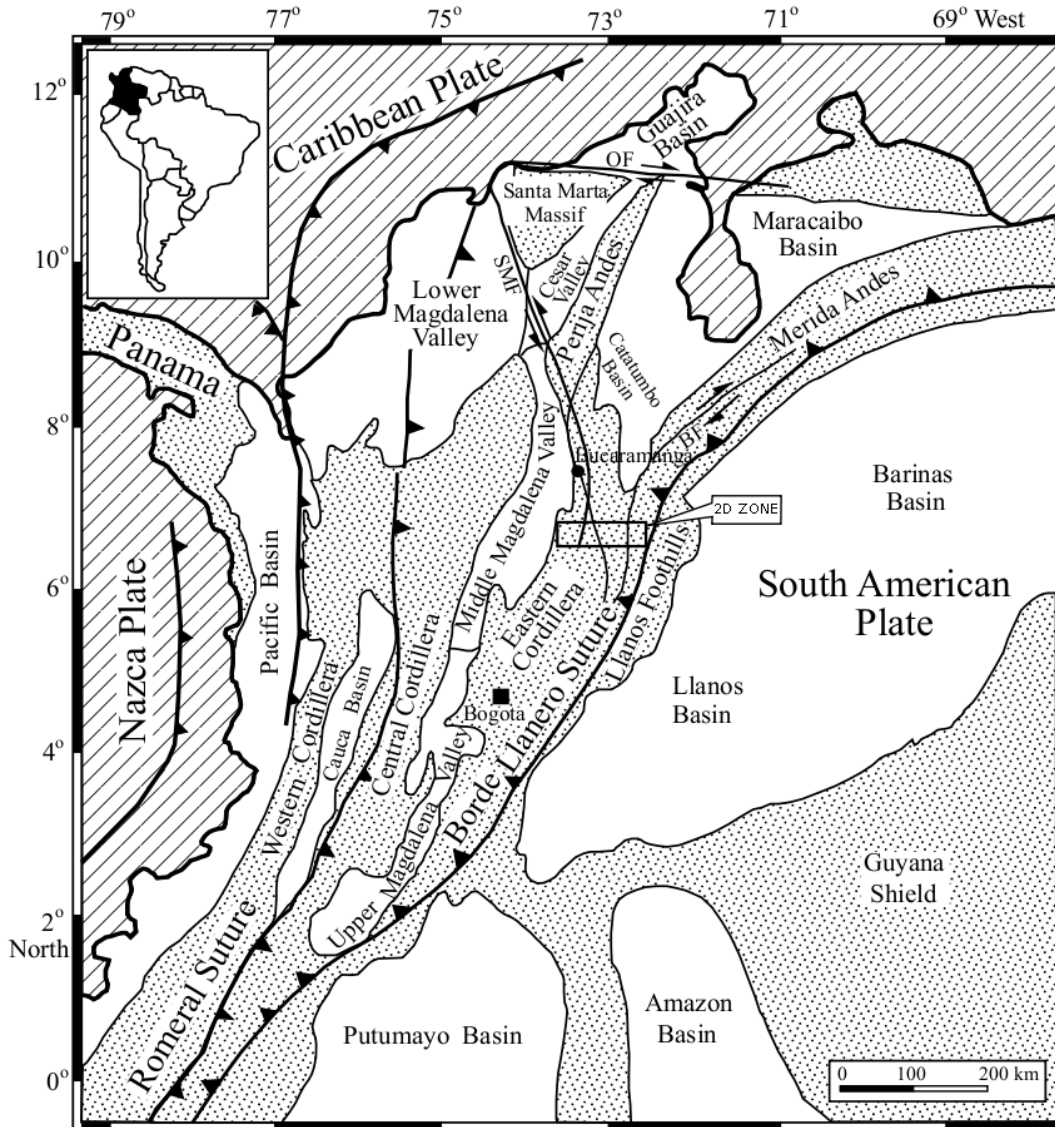


Figura 6.13: Mapa de las zonas tectónicas de Colombia. Tomado de Rafiquil, MD. Hayashi, D. (2009) Referencia [25].

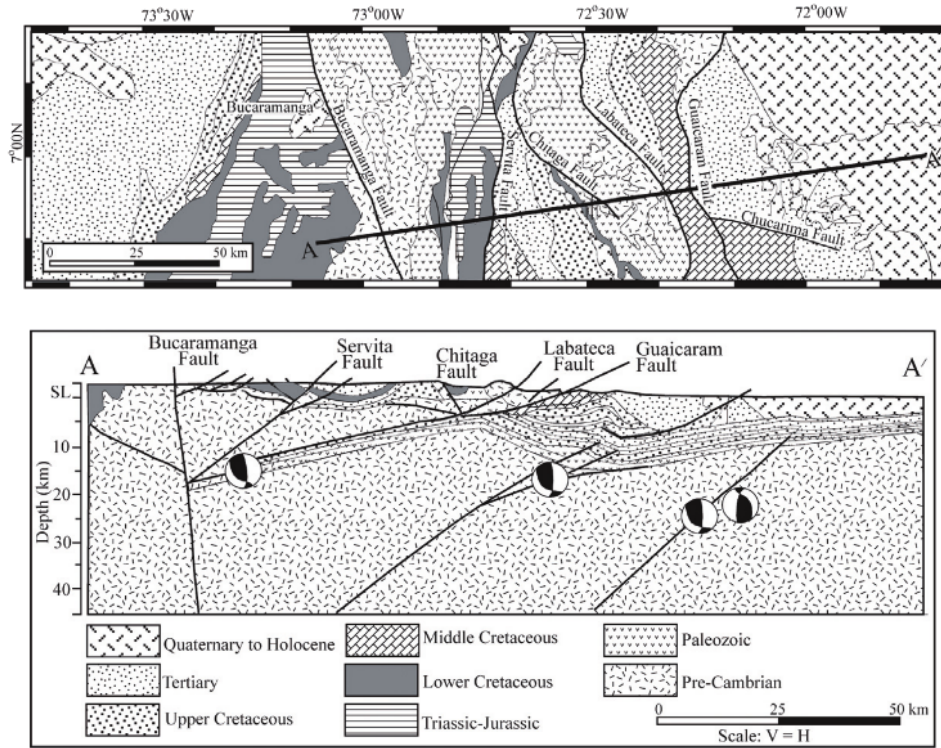


Figura 6.14: Área de estudio. Arriba) Descripción más detallada del área mostrada en la figura-6.13. Abajo) Sección geológica regional A-A'. Tomado de Rafiqul, MD. Hayashi, D. (2009) Referencia Extensional Stress in the Colombian Eastern Cordillera Fold-and-Thrust Belt (Northern Andes): Insights from 2D Finite Element Modeling.

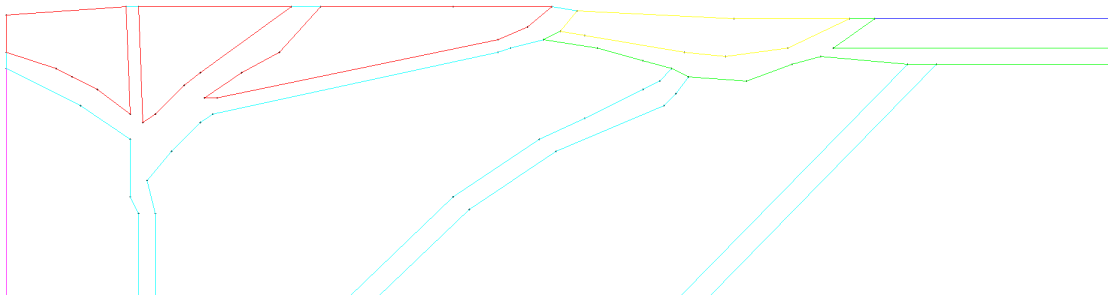


Figura 6.15: Geometría del modelo dibujado en QCAD.

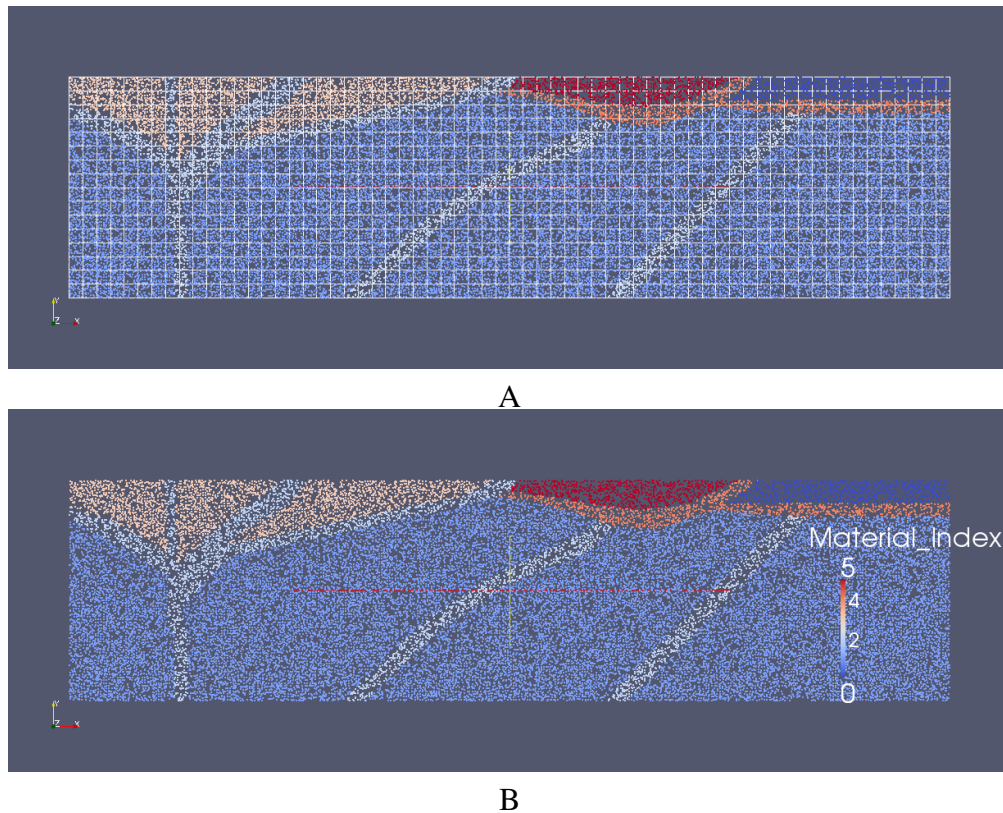


Figura 6.16: Malla y distribución de los materiales. A- En mallado utilizado para el estudio 1024 elementos y 1037 nodos computacionales. B- Distribución de los materiales en el modelo. Visualizado en Paraview.

Se utiliza 30 [*Partículas/elemento*] para registrar el movimiento del medio a lo largo de la deformación. Para los parámetros numéricos se utilizó el algoritmo de Usawa con un tolerancia lineal de $1 \exp^{-5}$ y una tolerancia no lineal de $1 \exp^{-2}$.

Propiedades de los Materiales

Las propiedades de los materiales son dadas en el apéndice B.3, junto con los tres experimentos. En el primero se estudia la respuesta de las zonas de falla a tres aumentos monótonos en los valores de cohesión y ángulo de fricción interna, en los otros dos se evalúa la respuesta al incremento y al decremento de los dos parámetros. Como en el estudio de comparación el problema es resuelto a través de una formulación estática mediante la teoría elástica, por tanto para efectos de modelamiento el valor de viscosidad tomado para los materiales es igual; es decir la zona es vista desde esta escala es un fluido homogéneo con alta viscosidad lo cual genera valores de esfuerzos aproximados a los generados por un comportamiento elástico.

Para poder simular las principales fallas se hace la siguiente simplificación, como se explica en la sección 2, las fallas no son únicamente una superficie desplazamiento, son un conjunto de pequeños sistemas de fractura, los cuales son el resultado de múltiples procesos de desplazamiento que llevan una tendencia general la cual es llamado plano de falla, por esta razón las fallas son modeladas como una banda con propiedades distintas a los demás materiales, en el

trabajo realizado por Rafiqul, MD. Hayashi, D. (2009) Referencia [25], las zonas de fallas tiene propiedades con baja resistencia y densidad nula, aunque en este modelamiento no se considera la densidad nula debido al problema térmico, una densidad de cero resultaría en una conductividad térmica nula, en lugar de esto se considera una densidad 10% menor que los demás materiales con el fin de modelar el ligero peso de esta zonas y tener en cuenta el efecto térmico.

Condiciones de Frontera

En este caso el modelo construido en la Referencia [17] es estacionario y es usado el criterio de falla de Mohr-Coulomb para definir las zonas de potenciales fracturas; las condiciones de frontera para el modelamiento se dan en la figura-6.17 .

El empuje horizontal se traduce aquí en una velocidad de $9 [cm/año]^3$ modelado sobre un paso de tiempo de $1000 [años]$ esto es con el fin de simular el comportamiento estático⁴ a un desplazamiento de $900 [m]$; movimiento asociado con la velocidad de subducción de la placa de nazca en el margen occidental de Suramérica. Por el otro lado el modelo se restringe en la frontera derecha, debido a que la parte oriental es inalterada hablando en términos de deformación por la subducción de la placa oceánica.

6.3.2 Resultados

Los resultados obtenidos a partir de las condiciones de frontera son mostrados en las figura 6.18, la distribución de velocidades de la figura 6.18 -A revela que una zona en la parte izquierda superior sufre un desplazamiento respecto a un bloque inferior denotado por un cambio fuerte en la velocidad (cambio drástico de amarillo a verde), esta zona está relacionada con un cambio en las orientaciones de los esfuerzos principales figura-6.18 -B y -C y la concentración del cortante es máxima en esta zona indicándonos una zona de falla, esta conjetura es corroborada por el criterio de falla en la figura 6.19. En forma general la concentración del cortante esta sobre la zona más somera indicándonos las zonas más propensas a fallar según lo tratado en la sección 2.

Por otro lado la distribución de la presión está afectada por el empuje horizontal aplicado en la dirección del desplazamiento, marcando una zona de posibles migraciones de fluidos hacia las partes de menor presión (las más verdes y azules) de la figura 6.18 -E.

³Este valor es un promedio de la velocidad de la placa extraído de revisiones de internet.

⁴En el trabajo de Rafiqul, MD. Hayashi, D. (2009), no son dados los valores usados de desplazamiento por ello es usado una velocidad promedio de la placa.

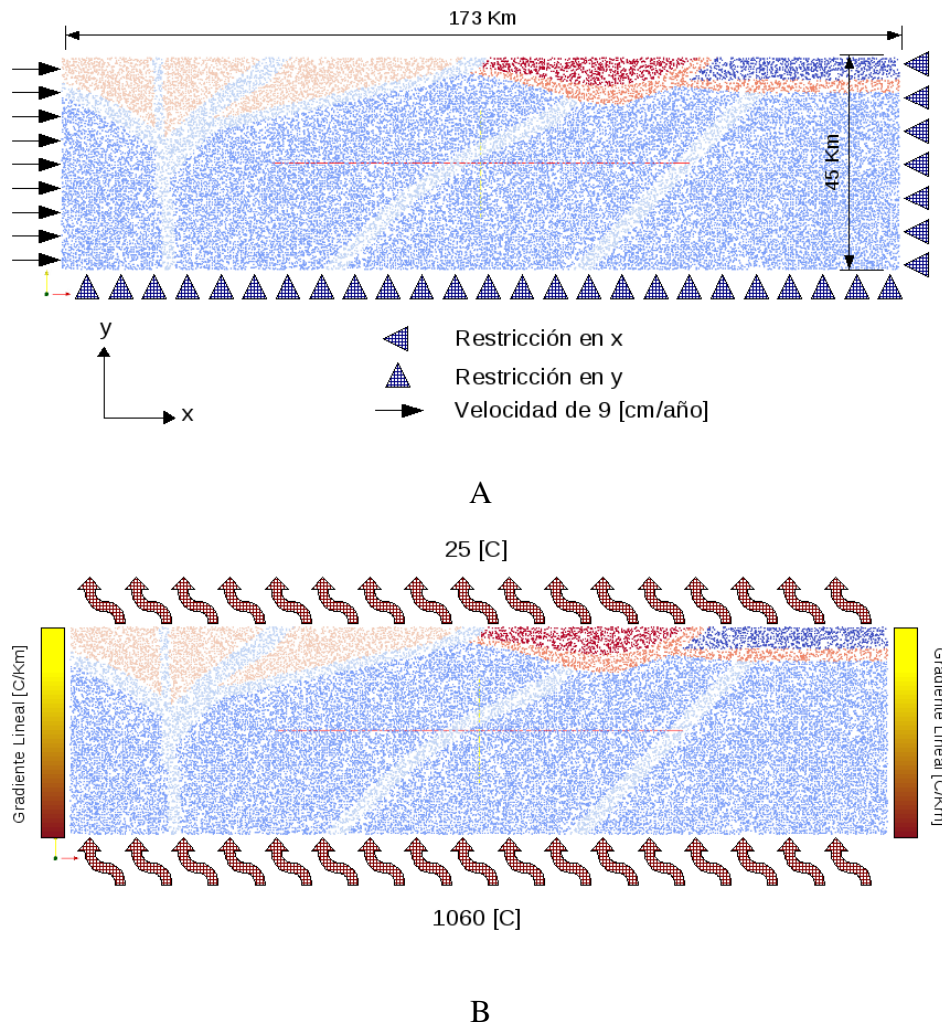


Figura 6.17: Geometría y condiciones de frontera para el modelamiento. A- Condiciones de borde para el problema estructural. B- Condiciones de borde para el problema térmico.

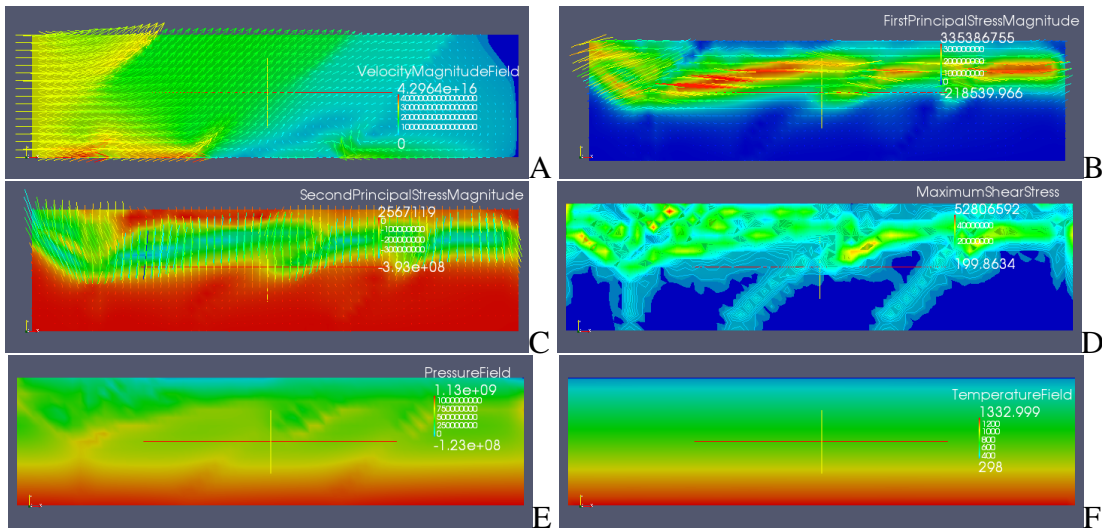


Figura 6.18: Resultados usando las propiedades de la tabla-B.4. A- Campo de velocidades $\left[\frac{m}{s} \cdot \exp^{-25}\right]$. B- Magnitud y orientación de σ_1 $[MPa]$. C- Magnitud y orientación de σ_2 $[MPa]$. D- Magnitud y distribución del esfuerzo cortante máximo τ_{max} $[MPa]$. E- Campo de presiones $[MPa]$. F- Campo de temperaturas $[K]$. Visualizado en Paraview.

Las zonas fracturadas por los esfuerzos inducidos son mostradas en la figura 6.19 como un contorno de las deformaciones que han ocurrido después de la falla de los elementos de material.

Como es reproducido en el trabajo de comparación, al incrementar la cohesión y el ángulo de fricción interna hará que la roca resista más esfuerzo, un importante apreciación puede ser dada como resultados de la deformación después del fallamiento; como se muestra en la figura 6.19, -A la deformación o zona más fracturada es la correspondiente al sistema de la falla de servita (ver figura 6.14) en donde el modelo muestra un falla que está en deslizamiento por lo cual no se permite que las zonas después de la falla se deformen. Al seguir aumentando la cohesión y la fricción del material no se permite mayores desplazamientos, por ende la deformación es más distribuida en las zonas someras, mientras en profundidad hay una tendencia de la deformación marcada por las zonas predefinidas como fallas en el modelamiento.

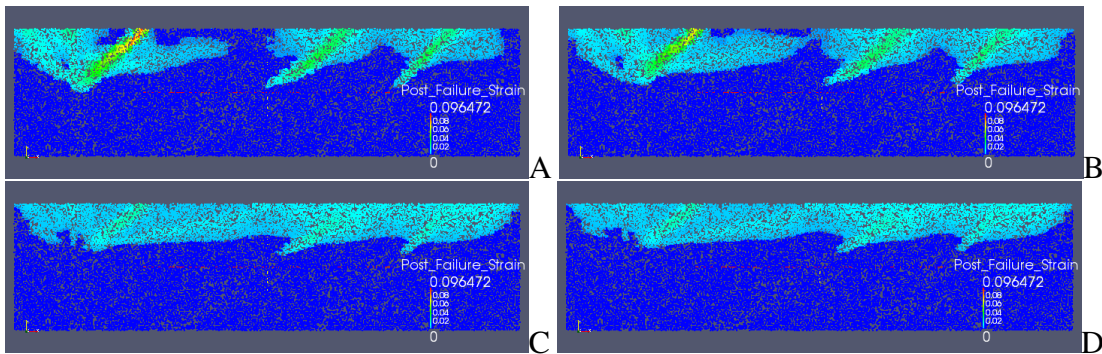


Figura 6.19: Estudio 1 tabla-B.5 -A. Zonas de deformación después de la falla. A- Experimento 1. B- Experimento 2. C- Experimento 3. D- Experimento 4. Visualizado en Paraview.

Los resultados del segundo estudio son dados en la figura 6.20, con el cual se pretende evaluar los cambios de cohesión; En forma general la variación dada en los cambios de cohesión no afecta los resultados obtenidos en comparación la figura 6.19 -A, pero cabe resaltar que la disminución en el parámetro permite la propagación de los elementos fallados, y por el contrario al aumentarlo se hace más difícil que la roca se fracture.

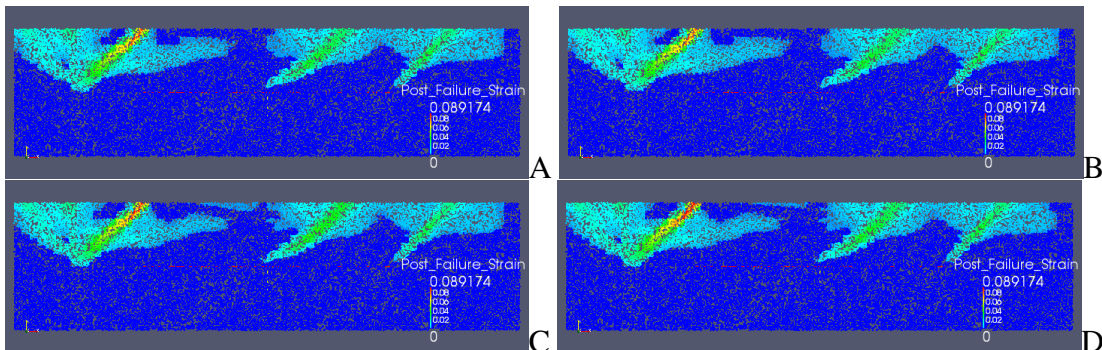


Figura 6.20: Estudio 2 tabla-B.5 -B; Zonas de deformación después de la falla. A- Experimento 5. B- Experimento 6. C- Experimento 7. D- Experimento 8. Visualizado en Paraview.

Los resultados del tercer estudio son dados en la figura 6.21, con el cual se pretende evaluar los cambios en el ángulo de fricción interna. La variación dada en los cambios del parámetro en cuestión muestra que al incrementarse no favorece las fracturas de los materiales como se dio en el estudio uno, pero al disminuir el aumento en las zonas de fallas se hace más definidas y mostrando una tendencia de propagación.

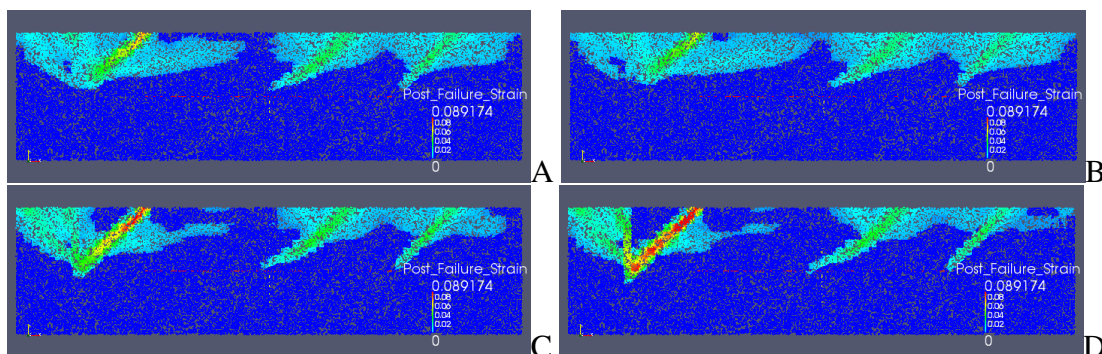


Figura 6.21: Estudio 3 tabla-B.5 -C; Zonas de deformación después de la falla. A- Experimento 9. B- Experimento 10. C- Experimento 11. D- Experimento 12. Visualizado en Paraview.

Como resultado general del modelamiento se reprodujo las tendencias de fractura a pesar de la naturaleza de las ecuaciones constitutivas en los dos estudios, y más importante aún el estudio realizado en la referencia [17], muestra la sensibilidad de las zonas de falla a cambios grandes en el ángulo de fricción y poco sensible para la cohesión, resultado que fue obtenido mediante la metodología satisfactoriamente.

Agregado a esto existen algunos comportamientos que no son tenidos en cuenta en el modelamiento por elasticidad; como los cambios de los módulos en temperatura y más aun para los valores de temperatura obtenidos por encima de los 600 [C], en donde el comportamiento debe modelarse como un fluido altamente viscoso⁵. Por otro lado la formulación utilizada además de permitir un modelamiento transitorio, puede modelar un comportamiento plástico y así seguir cambios en las estructuras, como se muestra en la figura 6.22 en donde se siguió modelando el experimento 1, lo cual revela un posible levantamiento del bloque delimitado por la falla de servita y la falla de Bucaramanga, si la velocidad es mantenida por 8000 [años] mas.

⁵Tomado de la Referencia Moresi, L. Dufour, F. Muhlhaus, H.B. (2003), A Lagrangian Integration Point Finite Element Method for Large Deformation Modeling of Viscoelastic Geomaterials.

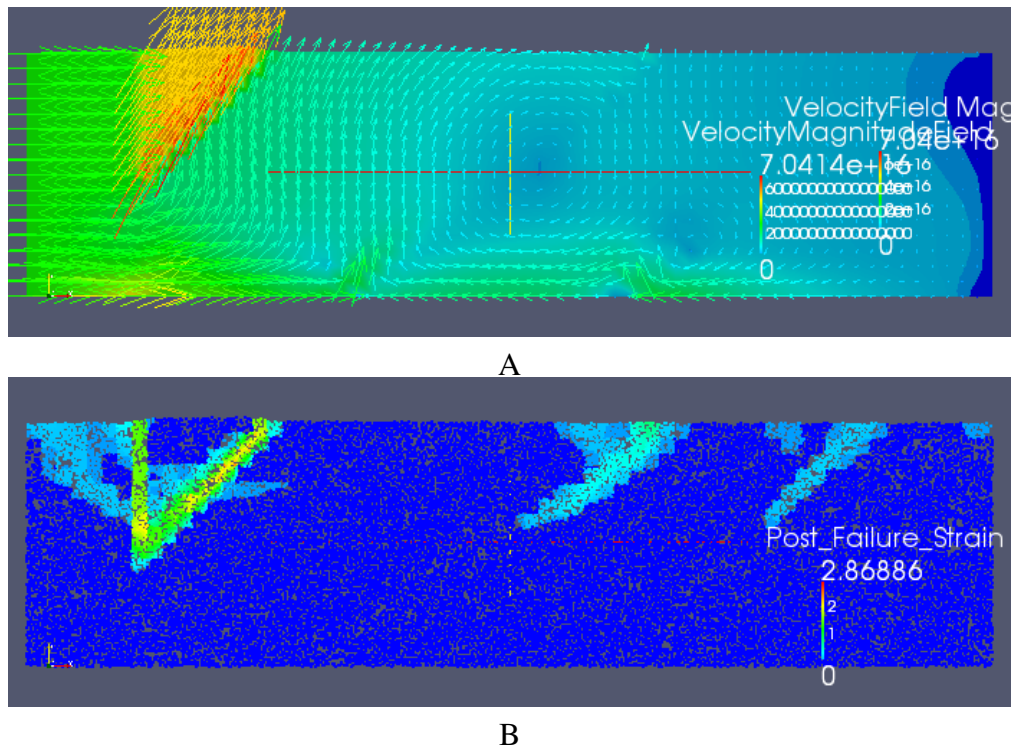


Figura 6.22: Estado del Experimento 1 a 9000 [años] . A- Campo de velocidades. B- Deformación después de la falla. Visualizado en Paraview.

Capítulo 7

DISCUSIÓN

7.1 Sobre la investigación y los resultados

El uso de técnicas por elementos finitos ha mejorado el entendimiento del comportamiento mecánico en todo tipo de material pero en términos de las rocas el problema principal es su carácter anisotrópico, de esta manera incluir en un modelo computacional la variación de las propiedades mecánicas resulta una tarea compleja y por tal motivo se hace indispensable el uso de modelos discretos, en donde se agrupan en un sector un compendio de materiales con propiedades características, no solo la variación del comportamiento del material según sea la escala temporal y espacial determinan las funciones características del modelo, sino que también se debe considerar el modelamiento de los procesos estructurales, térmicos y químicos que restringen el modelo y modifican su respuesta, temática de alta complejidad debido a su carácter no lineal.

En este desarrollo se atacó con éxito el problema estructural de la deformación de las rocas a grandes escalas, logrando definir zonas de alta deformación en el medio, lo cual nos indica las áreas sensibles a sufrir fallamiento. Adicional se realizó un análisis parcialmente acoplado del modelo de transporte de energía con la deformación estructural del medio; logrando modelar fenómenos como la conducción y la advección térmica; estudios que son realmente muy importantes en el análisis de un sistema petrolífero, además de ofrecer una visión más específica de los procesos que ocurren en nuestro planeta.

La hidrología no solamente analiza el fenómeno asociado a la distribución y transporte de masa, en cuyo caso específico esta relacionado directamente con los fluidos que saturan el medio poroso, sino que también analiza los posibles entrampamientos estructurales que deben su origen a la deformación provocada por la actividad tectónica resaltando de esta manera la importancia de comprender este complejo proceso.

Conclusiones

En el desarrollo de esta metodología de modelamiento se concluye:

1. El modelamiento regional es el punto de partida de un estudio geomecánico de una zona de menor escala como un yacimiento petrolífero, por que genera datos sobre orientación y

magnitud de los esfuerzos principales, perfiles térmicos, y mapas de las zonas densamente fracturadas.

2. Este tipo de estudios apoya la rama exploratoria de la industria petrolera dando estudios más detallados de los cambios estructurales y energéticos que la zona de interés ha sufrido.
3. El uso de una teoría de la mecánica de fluidos ha sido usada con éxito en el modelamiento de grandes deformaciones en un medio rocoso a ciertas escalas de tiempo y espacio, con el cual se reprodujo tres escenarios de la realidad de un proceso estructural.
4. En un modelamiento parcialmente acoplado del problema estructural con el problema térmico; se demuestra el potencial del método de elementos finitos en la solución de problemas de multifísica sobre un mismo esquema de discretización y de esta forma facilita el desarrollo en paralelo de soluciones a problemas específicos, que al acoplarlos generan una solución general a problemas de gran impacto como la deformación del yacimiento y la migración de hidrocarburos entre otros.
5. Es vital que el análisis estructural realizado por un intérprete sea auxiliado por herramientas que integren la mecánica a los modelamientos realizados tradicionalmente. Validando de esta forma hipótesis y suposiciones relacionados con la datación y la cinemática de eventos geológicos de tipo estructural.
6. El método de elementos finitos es una técnica numérica que permite el acople de diferentes formas de discretización lo cual en términos de modelamiento geométrico la hace muy fuerte respecto a otros esquemas discretos como el método de las diferencias finitas (MDF).
7. A escala regional el uso de un modelo de material adecuado permite realizar un buen ajuste de la deformación, sin embargo se requiere que la descripción considere dentro de sus cálculos la fenomenología asociada a las grandes deformaciones sin que ellas conduzcan a la no convergencia del modelo.

Recomendaciones

A fin de mejorar los estudios posteriores sobre esta temática se recomienda que:

1. El acoplamiento total entre las dos fenomenologías debido a que cambios de temperatura modifican los esfuerzos y cambios en los esfuerzos modifican las propiedades térmicas de las zonas.
2. Usar la formulación mixta usada en este trabajo en un análisis de migración de fluidos, con el acople de la ecuación de transporte de masa dada por los simuladores de yacimientos convencionales.
3. Realizar estudios más precisos enfocados al modelamiento térmico.
4. Realizar estudio en tres dimensiones.
5. Realizar una sensibilidad sobre los parámetros computacionales usados.

6. Comprobar varios criterios de falla con el ánimo de hacer una sensibilidad sobre el cambio en las zonas inestables cuando un criterio es usado.
7. Realizar estudios en los cuales se tenga en cuenta los tres comportamientos fundamentales de la reología de las rocas; el comportamiento elástico, el plástico y el viscoso.

Bibliografía

- [1] Mandl, G. (1988), Mechanics of Tectonic Faulting; Models and Basic Concepts. *ELSEVIER Academic Press, ISBN 0-444-4246-8 (Vol.1)*.
- [2] Nemcok, M. Schamel S. Gayer R. (2005), Thrustbelts; Structural Architecture, Thermal Regimes and Petroleum Systems. *CAMBRIDGE University Press ISBN-13 978-0-521-82294-7*.
- [3] Neugebauer, H. Simmer C. (2003), Dynamics of Multiscale Earth Systems. *Springer-Verlag Berlín Heidelberg ISBN 0930-0317*.
- [4] Ramsay, G. Lisle, R. (2000), The Techniques of Modern Estrutural Geology; Applications of Continuum Mechanics in Structural Geology. *ELSEVIER Academic Press, ISBN 0-12-576923-7 (Vol.3)*.
- [5] Turcotte, D. Schubert, G. (1982), Geodynamics; Applications of Continuum Physics to Geological Problems. *JHON WILEY & SONS ISBN 0-471-06018-6*.
- [6] FJaer, E. Holt, R.M. Horsrud, P. Raaen A.M. Risnes R. (2008), Petroleum Related Rocks Mechanics. *ELSEVIER Academic Press ISBN 978-0-444-50260-5 (Second Edition)*.
- [7] Hantschel, T. Kaureauf, A. (2009), Fundamentals of Basin and Petroleum Systems. *SPRINGER-Verlag Berlín Heidelberg ISBN 978-3-540-72317-2*.
- [8] Allen, J. Allen, P. (2005), Basins Analysis; Principles and Applications. *BLACKWELL Publishing ISBN-13 978-0-632-05207-3 (Second Edition)*.
- [9] Pinchover, Y. Rubinstein, J. (2005), An Introduction to Partial Differential Equations. *CAMBRIDGE University Press ISBN-13 978-0-521-61323-1*.
- [10] Oliver, X. Agelet de Saracibar C. (2002), Mecánica de Medios Contínuos para Ingenieros. *Ediciones UPC S.L. ISBN 970-15-0778-9*.
- [11] Sadd, M. (2005), Elasticity; Theory, Applications and Numerics. *ELSEVIER Academic Press, ISBN 0-12-605811-3*.
- [12] Chakrabarty, J. (2006), Theory of Plasticity. *ELSEVIER Academic Press, ISBN-13 978-0-7506-6638-2 (Third Edition)*.
- [13] Brenner, S. Ridgway, S. (2008), The Matematical Theory of Finite Element Methods. *SPRINGER Science ISBN 978-0-387-75933-3 (Third Edition)*.

- [14] Zienkiewicz, O.C. Taylor R.L. Nithiarasu P. (2005), The Finite Element Method for Fluid Dynamics. *ELSEVIER Academic Press, ISBN 0-7506-6322-7 (Sixth Edition)*.
- [15] Singiresu, R. (2004), The Finite Element Method in Engineering. *ELSEVIER Science ISBN 0750678283 (Fourth Edition)*.
- [16] GALE, Manual User , ver. 1.4.1 Landry, W. Hodkinson, L. Kientz, S.
- [17] Rafiqul, MD. Hayashi, D. (2009), Extensional Stress in the Colombian Eastern Cordillera Fold-and-Thrust Belt (Northern Andes): Insights from 2D Finite Element Modeling.
- [18] Moresi, L. Dufour, F. Muhlhaus, H.B. (2003), A Lagrangian Integration Point Finite Element Method for Large Deformation Modeling of Viscoelastic Geomaterials. *Journal of Computational Physics*.
- [19] Ramaswamy, B. Kawahara, M. (1987), Arbitrary Lagrangian-Eulerian Finite Element Method For Unsteady, Convective, Incompressible, Viscous Free Surface Fluid Flow. *International Journal for Numerical Method in Fluids*.
- [20] Felippa, C. Profesor de Ingeniería Aeroespacial Universidad de Colorado; Curso en línea - Introduction to finite Element Method <http://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/IFEM.d/Home.html>
- [21] Felippa, C. Profesor de Ingeniería Aeroespacial Universidad de Colorado; Curso en línea - Nonlinear Finite Element Method <http://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/NFEM.d/Home.html>
- [22] Felippa, C. Profesor de Ingeniería Aeroespacial Universidad de Colorado; Cursos en línea - Advance Finite Element Method <http://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/AFEM.d/Home.html>
- [23] VPAC <http://www.vpac.org/>
- [24] CIG - GALE <http://www.geodynamics.org/cig/software/packages/long/gale/>
- [25] Rafiqul, MD. Hayashi, D. (2009), Extensional Stress in the Colombian Eastern Cordillera Fold-and-Thrust Belt (Northern Andes): Insights from 2D Finite Element Modeling. <http://www.geologica-acta.com/MostrarAbstractAC.do?abstract=gav0703a03>
- [26] Frank-Kamenetskii <http://garfield.chem.elte.hu/combustion/Frank-Kamenetskii/DAFK.htm>
- [27] Chandrupatla, T. Belengundu, A. (2002), Introduction to finite element in engineering *Prentice Hall - ISBN 0-13-061591-9 (Third Edition)*.
- [28] Hreinkoff A. (2002), Solution of Problems in Elasticity by the Framework Method *j. appl. mech. vol. 8; 1941; pp 169-175*.
- [29] Schubert; G. Turcotte; D.; Donald L. (2004), Mantle Convection in the Earth and Planets *Cambridge University Press - ISBN 0-521-79836-1*

Apéndice A

MODELO 4 - CASO DE ESTUDIO NO EXITOSO

A.1 DESCRIPCIÓN

Descripción

En este modelo el objetivo es reproducir una serie de secuencias en los cambios de la estructura mostrada en las Figuras A.2- A, B y C. La zona se enmarca dentro de una caja de 87,554 Km de longitud por 15,681 Km en profundidad en la cual se distribuyen 9 diferentes materiales con propiedades descritas en la tabla-B.7. Las propiedades son obtenidas de imágenes sísmicas como la que se muestra en la figura A.1¹. Zona la cual es relativamente pequeña comparada con el tamaño del modelo regional.

¹Caso discutido en sesión técnica (Ph.D. Carlos Piedrahita, M.Sc. Elkin Santafé, Andrés Mora, Ph.D. Willian Agudelo - Grupo de Geodinámica Computacional ICP-Ecopetrol 2009; Michael Nemckoc - Universidad Utah.

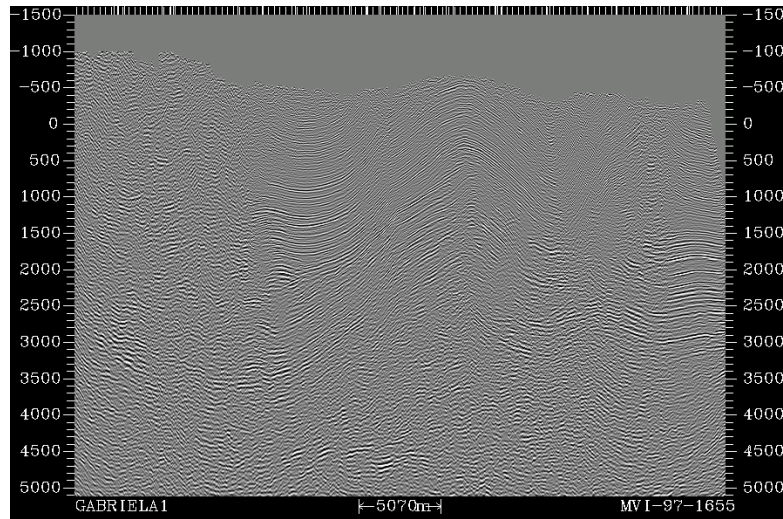


Figura A.1: Imagen sísmica en profundidad de la zona resaltada en la fig. A.2 C. La escala en la dirección horizontal se da en la parte inferior de la imagen.

A partir de la imagen sísmica mostrada en la figura A.1, un intérprete construye un modelo estructural para el estado actual de la zona, la cual es resaltada en la figura A.2 A, los posteriores estados geométricos observados en la figura A.2 B, y C, son obtenidos mediante ajuste en el tiempo de termomarcadores naturales y son el resultado de una interpretación estructural del pasado de la zona a partir de conceptos cinemáticas. lo cual indica que existe una fuerte incertidumbre de la historia de deformación estudiada aquí y por ende los resultados son netamente cualitativos.

Como se explica en las secciones anteriores, el carácter de la geometría de las capas es consecuencia de múltiples procesos tanto erosivos como mecánicos de un medio continuo, y por ende la deformación de la zona es puramente mecánica. El modelo térmico asociado, contiene valores sintéticos y valores reales de la zona, y los resultados expuestos son validados con un estudio térmico del área mediante un modelamiento estático por MEF.

El problema en cuestión cuenta con una gran carga de incertidumbre, relacionada a las zonas por fuera de la iluminación sísmica, el principal problema es la falta de datos para un estudio regional haciendo difícil un análisis cuantitativo y preciso de los resultados. Cabe resaltar que las retro deformaciones son basadas en un modelo actual con pocos datos y usando técnicas cinemáticas.

A.1.1 Geometría

Las figuras-A.2 A, B y C, son imágenes exportadas de sus respectivos archivos *.dxf, los cuales son procesados con la Allpa-Gale (Herramienta - Prototipo) desarrollada en éste trabajo, después de realizar el proceso de redibujado; como resultado se obtiene el modelo geométrico mostrado en la figura (dxf del estado inicial). Mediante Allpa-Gale se procesa la geometría a partir del archivo *Geometria_Redibujada.dxf*, el cual contiene todas las coordenadas de los puntos que conforman el grafo reproduciendo fielmente la geometría del modelo de estudio.

Las dimensiones del modelos son mostradas en la figuraA.2 y la geometría del estado inicial se muestra en la figura A.3.

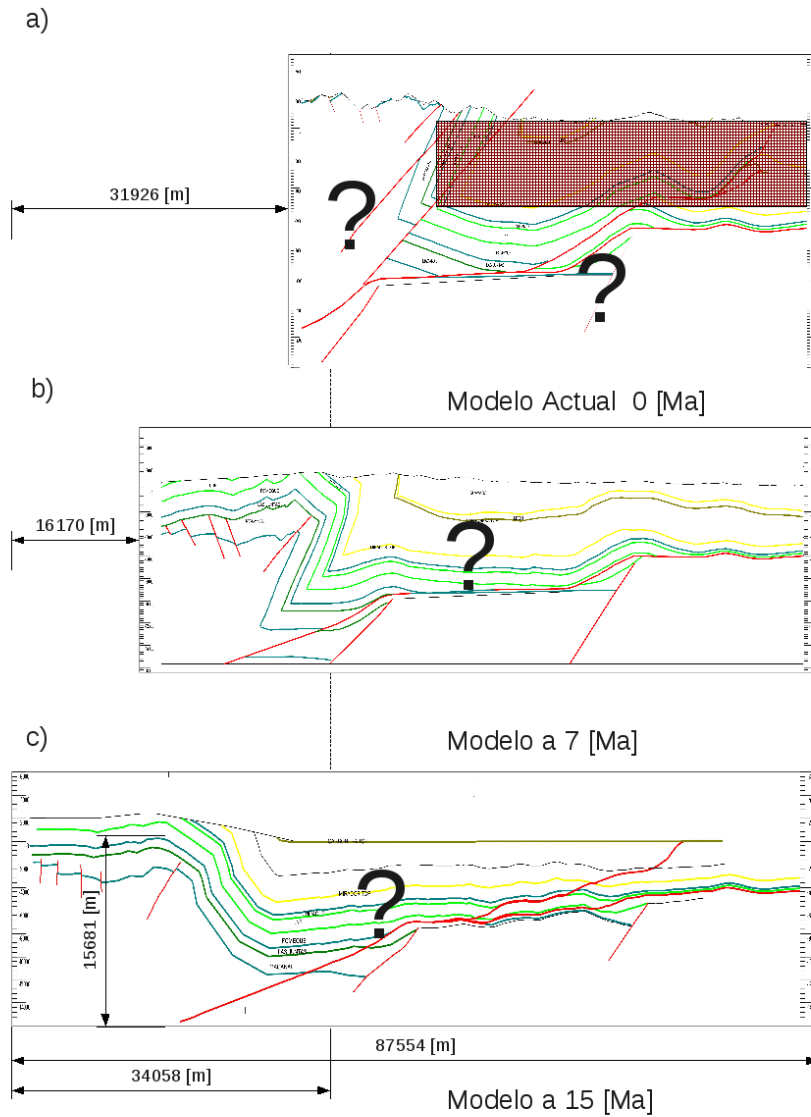


Figura A.2: Evolución geométrica de la zona de estudio.

A.1.2 Parámetros Computacionales

Malla y Tipo Elemento

La malla mostrada en la figura A.3 b), es lineal y está compuesta por 13900 (278 en la dirección i , 50 en la dirección j) Cuadriláteros con interpolación lineal, para realizar la descripción Lagrangiana, la cual permite el registro de las partículas que pasan a través de un cada nodo computacional para realizar la descripción Euleriana y así poder modelar grandes deformaciones, entre otras cualidades de esta formulación mixta.

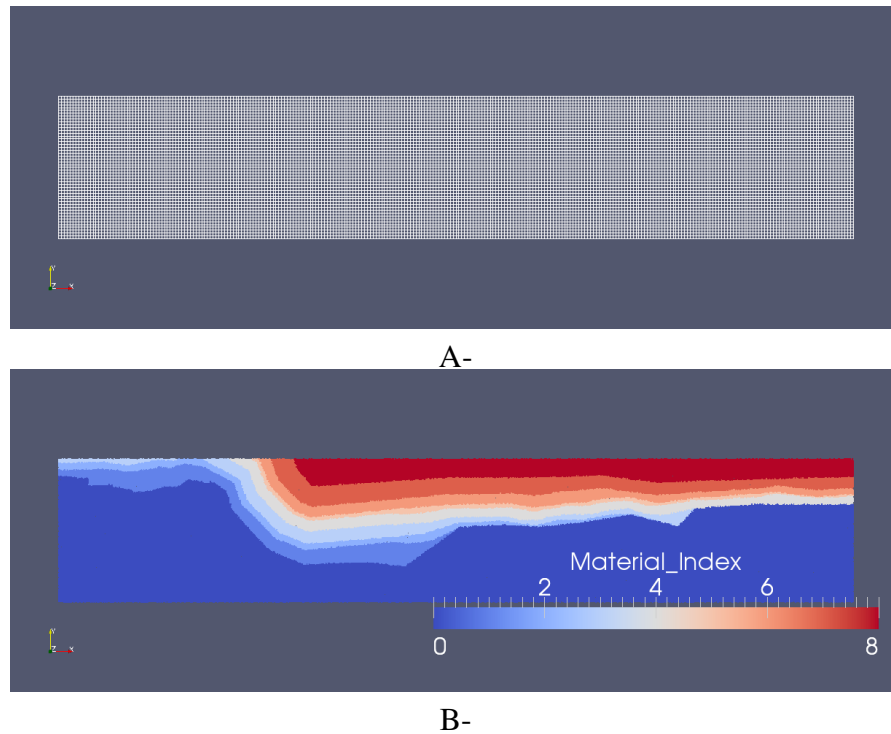


Figura A.3: Malla y distribución de los materiales. A- Enmallado utilizado para el estudio 13900 elementos y 14229 nodos computacionales. B- Distribución de los materiales en el modelo.

Para cada elemento se le asigna un parámetro el cual indica el número de partículas que debe contener cada elemento, como ha sido en todos los casos será 30 [*Partículas/elemento*], en total se utilizan 417000 partículas para registrar los movimientos del continuo. Una parte de la maya y sus partículas asociadas se muestra en la figura A.4, donde se muestra la naturaleza del método como una de *descripción Lagrangiana (Malla Computacional)* inmersa en una *descripción Euleriana (Distribución de la Partículas)*.

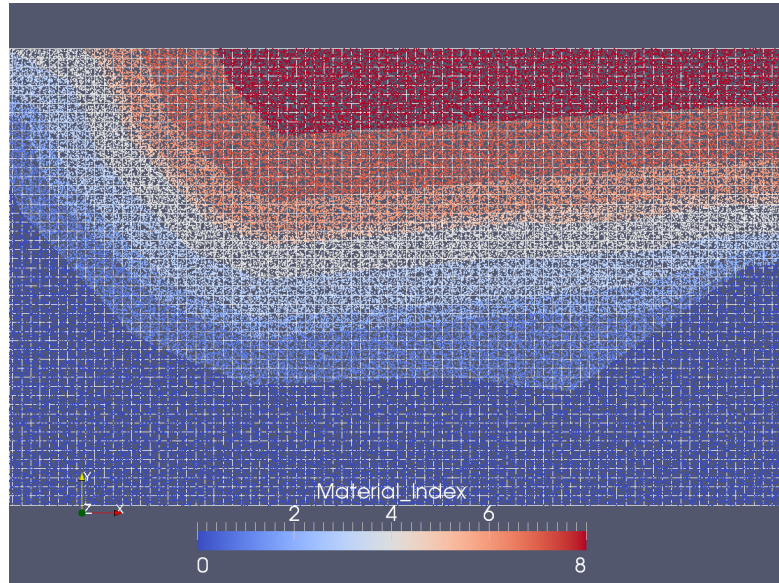


Figura A.4: Sección del modelo enmallado y su distribución de partículas asociadas

Propiedades de los Materiales

Como es mostrado en la figura-A.3-B el modelo es discretizado en 9 materiales con las propiedades y respectivo índices de material dados en la tabla-B.7.

La cohesión y el ángulo de fricción de la zona son datos proporcionados, al igual que las conductividades térmicas, densidades y calor específico de los materiales. Los demás valores son obtenidos de la literatura y propiedades de rocas, debido a que no existe un estudio enfocado a la reología de la zona.

A.1.3 Condiciones de Frontera

La evolución en la zona de estudio se da desde 15 [Ma] de años atrás figura-A.2- C donde la estructura se encuentra con un bajo grado de plegamiento y deformación, posteriormente la frontera izquierda se desplaza a una velocidad de $0,24 \text{ [cm/año]}^2$, desplazando las masas rocosas y generando la deformación mostrada en la figura-A.2-B, las líneas rojas corresponden a las fallas trazadas para que cinemáticamente este movimiento se genere. La deformación sigue con la misma velocidad en la parte izquierda hasta llegar al estado actual figura-A.2-A.

Las condiciones de frontera se dan en la figuras-A.5-A y A.5B, para los dos fenómenos el deformación y el fenómeno de transferencia de calor respectivamente, el valor de velocidad es obtenido a partir de la distancia final de acortamiento aproximadamente 31 [Km] y los 15 [Ma] transcurridos, esto nos da un valor promedio de $0,21 \text{ [cm/año]}$, nótese que en la figura-A.5-A en la frontera izquierda hay un condición con una discontinuidad en la velocidad haciendo con movimiento la parte inferior y sin movimiento con la parte superior. Para el fenómeno térmico se usan básicamente dos isotermas, en el tope superior 25 [C] y para la parte inferior 410 [C], esta última temperatura no es probable encontrar hidrocarburos o si es el caso gas seco. Por la parte

²Velocidad promedio entre el estado a 0 [Ma] y 15 [Ma], y una distancia de 31.926 [Km] recorrido mostrado en la figura-A.2-A.

lateral se uso un perfil de temperatura de tipo lineal en el cual se toma un gradiente promedio de $0.024 [K/m]^3$, sobre toda la zona para concluir las condiciones iniciales del modelo.

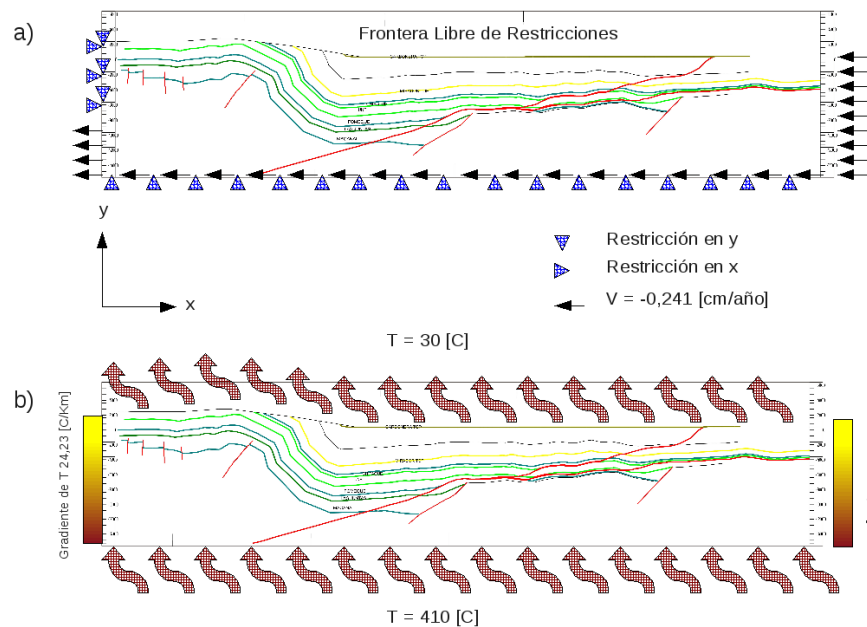


Figura A.5: Condiciones de borde. A- Condiciones para el problema estructural. B- Condiciones para el problema térmico.

Haciendo a un lado las incertidumbres del modelo, el estado presente figura-A.2-A, ha sido alcanzado por la actividad de los márgenes occidentales de Suramérica debido a fuertes procesos compresivos que fueron lentamente realizando un proceso de acortamiento y de plegamiento de las estructuras del modelo inicial hace 15 [Ma].

A.1.4 Resultados

En base a las condiciones dadas se obtuvieron los siguientes resultados de los perfiles de esfuerzos asociados los tres estados de la figura-A.2. En la figura-A.7 se muestra como coinciden el modelo estructural dado y el modelo discreto son sus 9 materiales. Como es descrito en la secciones anteriores, el problema es tratado como un problema directo iniciando desde 15 [Ma] al presente 0 [Ma]. Los perfiles mostrados en la figura-A.8 muestran las orientaciones para el estado inicial, los efectos dados por los cambios en la viscosidad debido al aumento de la temperatura con la profundidad se hacen evidentes, la gráfica de $\eta = \eta_0 \cdot \exp(-\theta \cdot T)^4$ se da en la figura-A.6. La parte inferior derecha de la figura-A.8-A, muestra la disminución de

³Un valor de $0.02423 [K/m]$ equivale a $0.02423 [C^\circ /m] = 24.23 [C^\circ /Km]$.

⁴Viscosidad tipo Frankementtski

los esfuerzos debido a la baja viscosidad del material, lo cual en últimas modifica su rigidez haciendo que su respuesta a la carga aplicada sea muy baja. Los esfuerzos principales en la parte derecha del modelo son inalterados por los movimientos de la frontera izquierda, mientras al otro lado, las direcciones de los esfuerzos principales se orientan en un ángulo agudo positivo ocasionado por el empuje horizontal.

En la figura-A.9-A se muestra la concentración del esfuerzo cortante hacia el margen alterado por la carga aplicada, de igual manera la presión y el campo de viscosidades se ve alterado por el constante empuje.

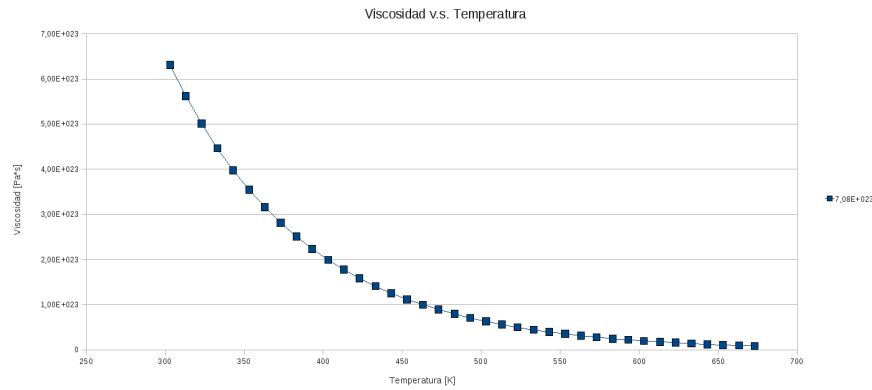


Figura A.6: Dependencia de la viscosidad con la temperatura, para $\eta_0 = 2.317 \exp^{25} [Pa \cdot s]$ y $\theta = 0.011512$.

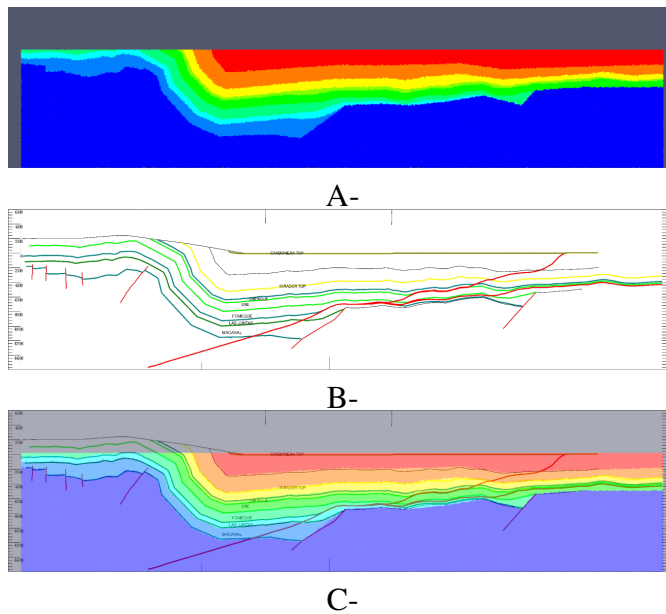
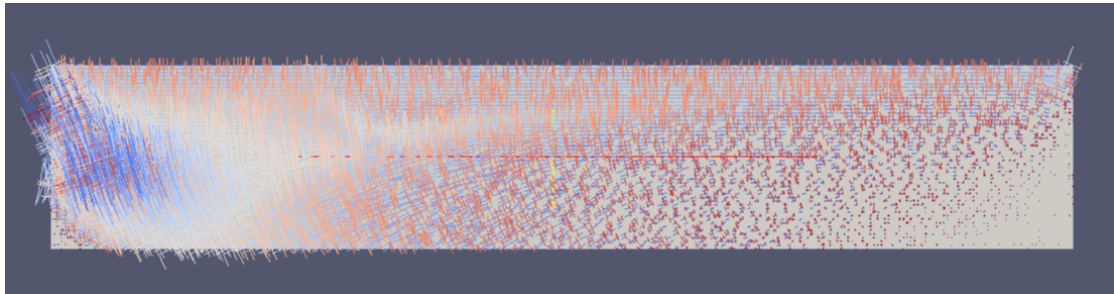
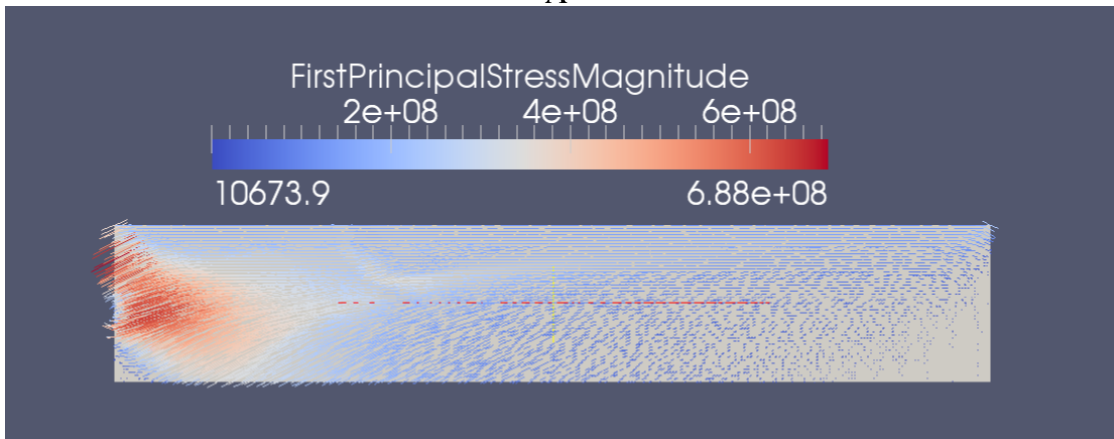


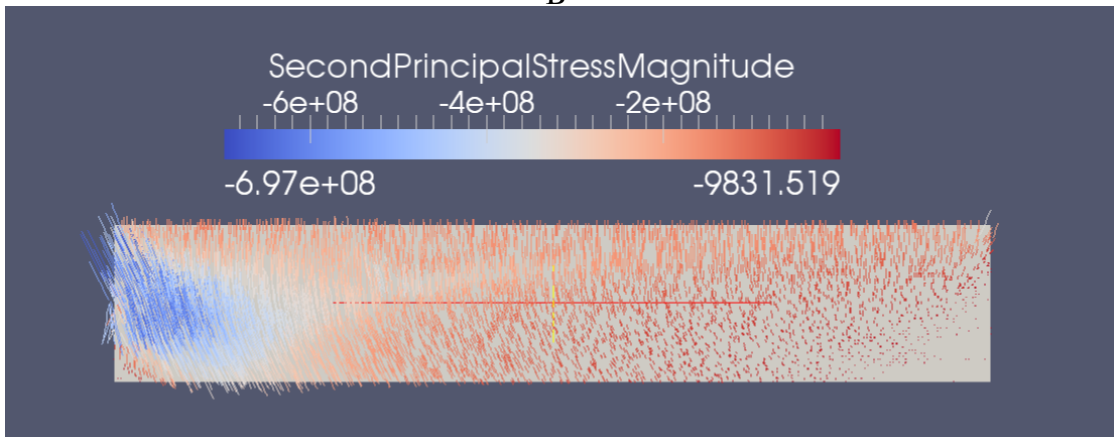
Figura A.7: Comparación de las geometrías a 15 [Ma]. A- Modelo computacional discreto. B- Modelo estructural. C- Superposición de las imágenes superiores.



A-

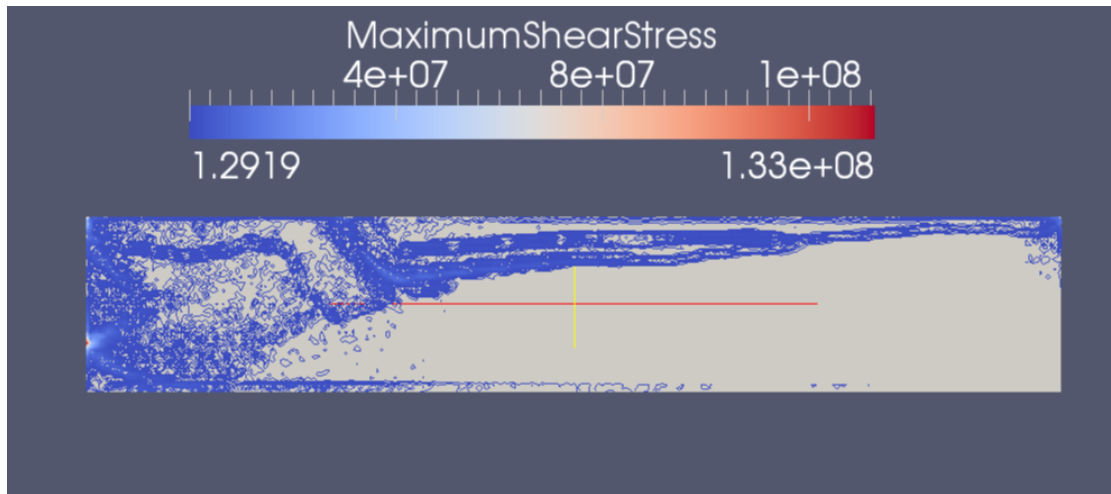


B-

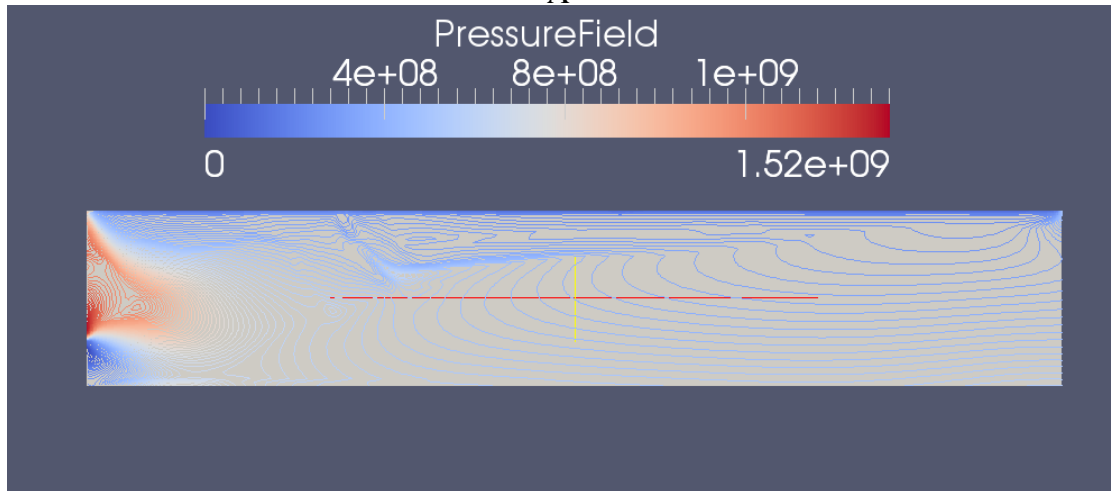


C-

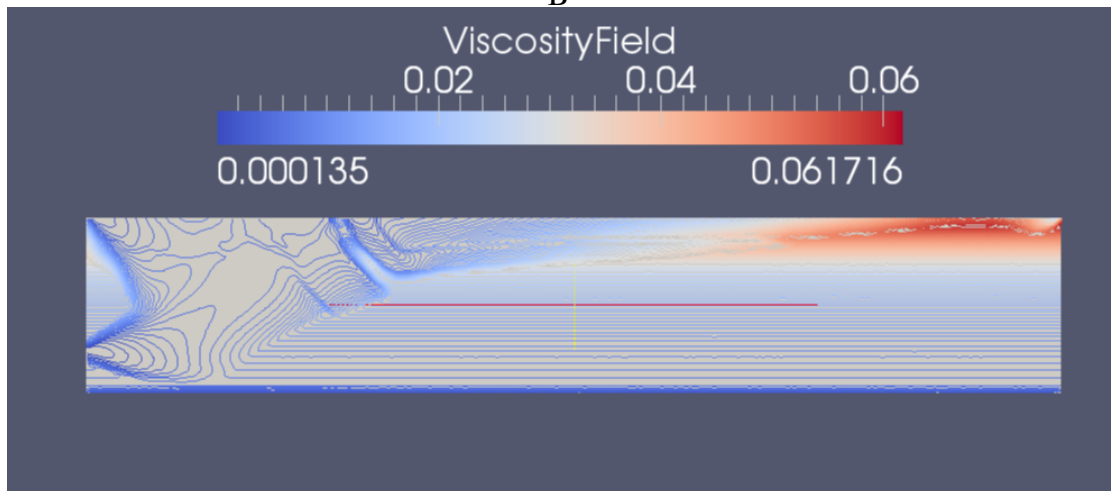
Figura A.8: Orientaciones de los esfuerzos principales a 15 [Ma].



A-



B-

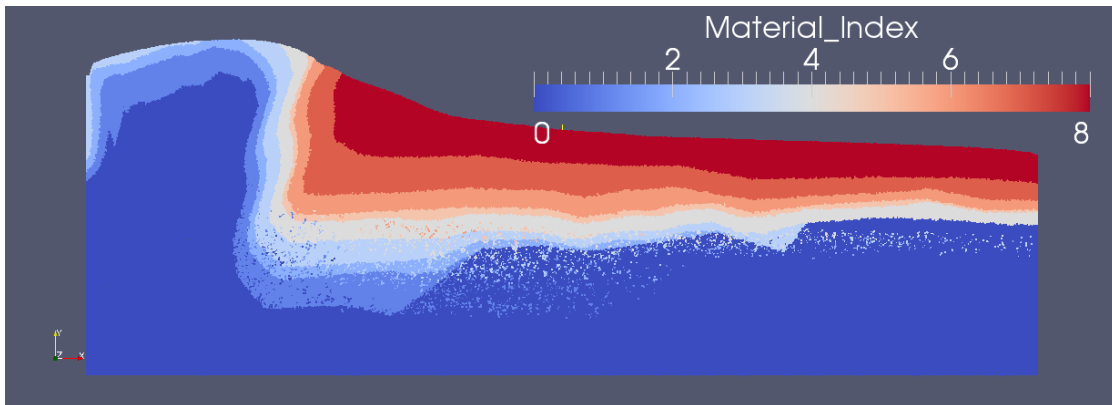


C-

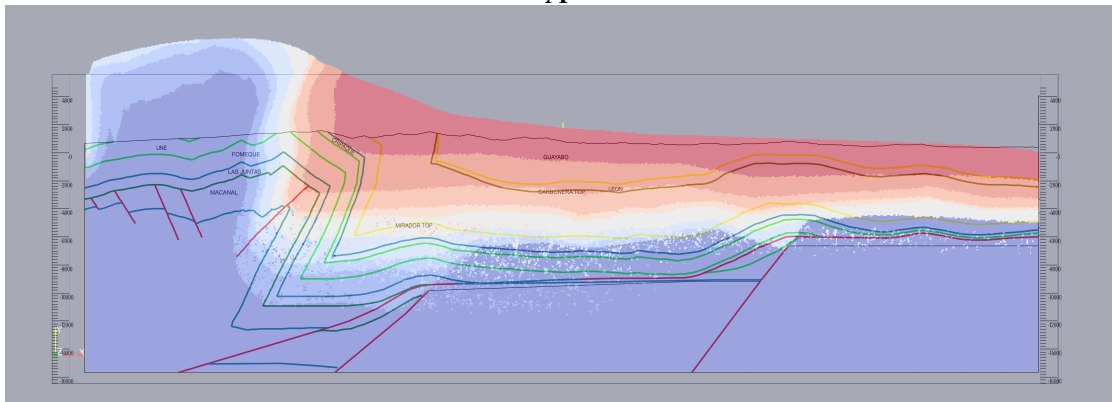
Figura A.9: Gráfico de contornos. A- Cortante máxima. B- Campo de presiones. C- Campo de viscosidades.

A medida que el movimiento continua, los materiales sufren una fuerte deformación causando que en la parte izquierda se inclinen de una forma casi vertical como se muestra en la figura-A.10. Mediante el uso del Criterio de Falla de Drucker Prager se definen zonas de fractura las cuales coinciden con la concentración de las tasas de deformación más altas; las zonas de fallas coinciden en las zonas donde el material se ha deformado de forma más rápida; logrando así definir una posible orientación de las fallas indicadas por el criterio en la región de estudio. Por otro lado las orientaciones de los esfuerzos principales se han perturbado fuertemente por el desplazamiento aplicado. Cabe resaltar que en las zonas de altas deformaciones después de la fractura el esfuerzo principal horizontal que provoca el empuje mantiene una orientación con un ángulo muy agudo con las línea de deformación favoreciendo a el desplazamiento y al esfuerzo tangencial que actúa sobre las zonas de deformación mostradas en las figura-A.11. Una observación más detallada de la figura-A.11-C, muestra dos principales tendencias de falla y un ligera discontinuidad que las atraviesa, esta zona que presenta poco fallamiento corresponde a la formación número 6 la cual es una formación muy competente desde el punto de vista de la cohesión y el ángulo de fricción interna, ofreciendo mayor resistencia al fallamiento que las demás formaciones.

En términos de la distribución de la cortante máxima se encuentra un importante resultado ya que las concentraciones de las cortantes máximas indican que zonas son las próximas a sufrir altas deformaciones y fallamiento como se da en la figura-A.12-A. Por otro lado en las zonas con altas deformación los esfuerzos se relajan cayendo su magnitud y por ende también la magnitud de la cortante. La distribución de la presión indica las mismas observaciones de la cortante máxima las zonas de más altas presión no deben ser tomadas en cuenta debido a que esta sobre presión es exagerada por la discontinuidad de la velocidad en la frontera izquierda (fig.-A.5), pero de forma general las zonas de mayor presión provocará que el material falle por exceso de esta. Por medio de la distribución de temperatura se puede dar una importante bondad de este modelamiento semi-acoplado; al poder modelar el comportamiento estructural y llevar un seguimiento de las partículas, no solo se modela transporte de energía por conducción también se tiene en cuenta la advección térmica la cual es muy importante en la evaluación de perfiles de temperatura de una zona altamente afectada por procesos tectónicos, como se muestra la figura-A.12-C gran parte de la energía es transportada por el material que se desplaza hacia arriba, calentando las zonas superiores, así por medio de este fenómeno se pueden corregir la distribución de temperaturas de un zona de interés.



A-



B-

Figura A.10: Estado de la zona a 8 [Ma] calculado por GALE. A. Desplazamientos de los materiales. B. Gráfico comparativo con el modelo cinemático al mismo tiempo.

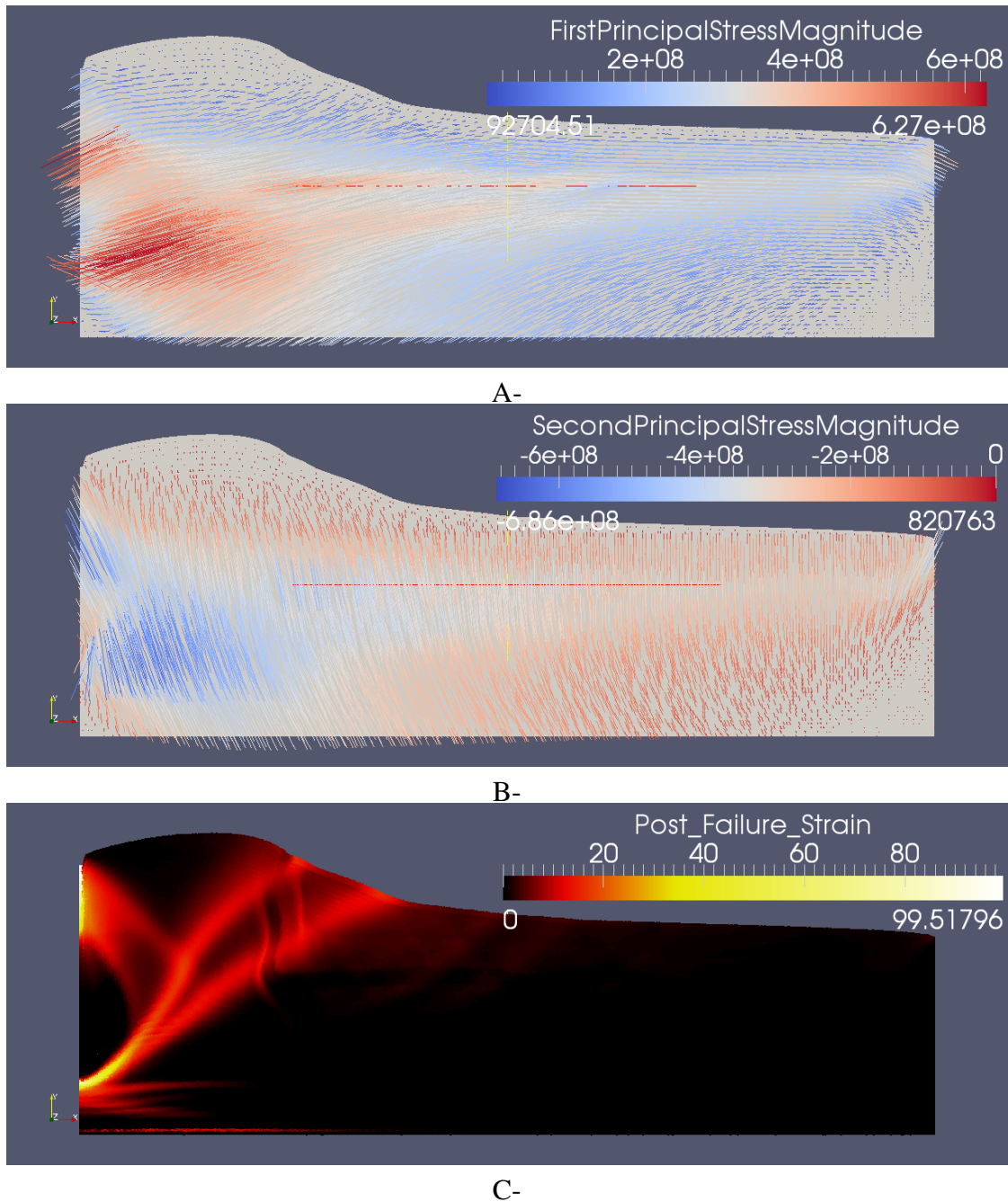


Figura A.11: Orientación de los esfuerzos principales y deformación post falla a $8 [Ma]$. A- Esfuerzo principal σ_1 . B- Esfuerzo principal σ_2 . C- Deformación post falla; las zonas en colores más cálidos son las zonas más deformadas después de que el material ha fallado según el criterio.

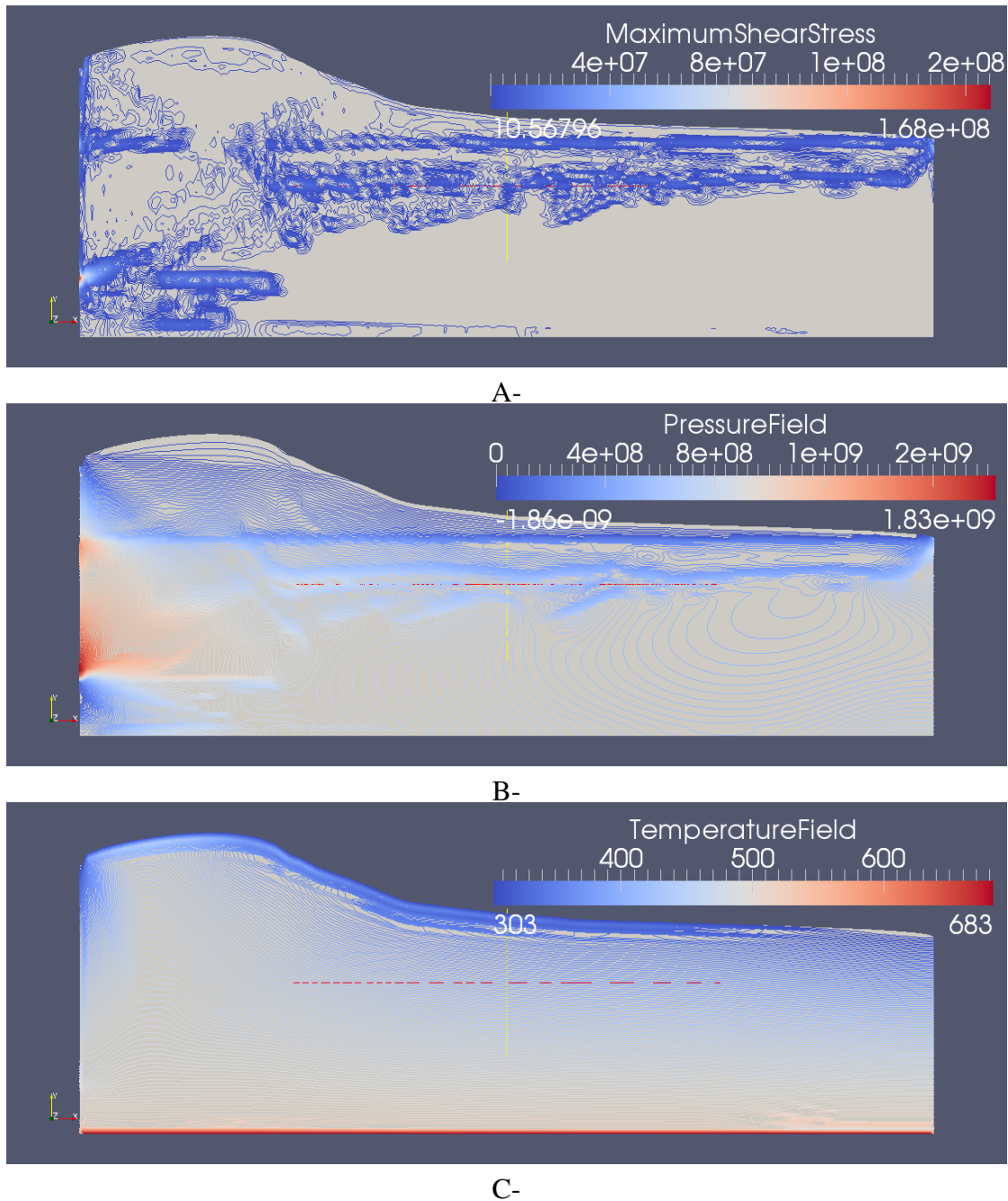


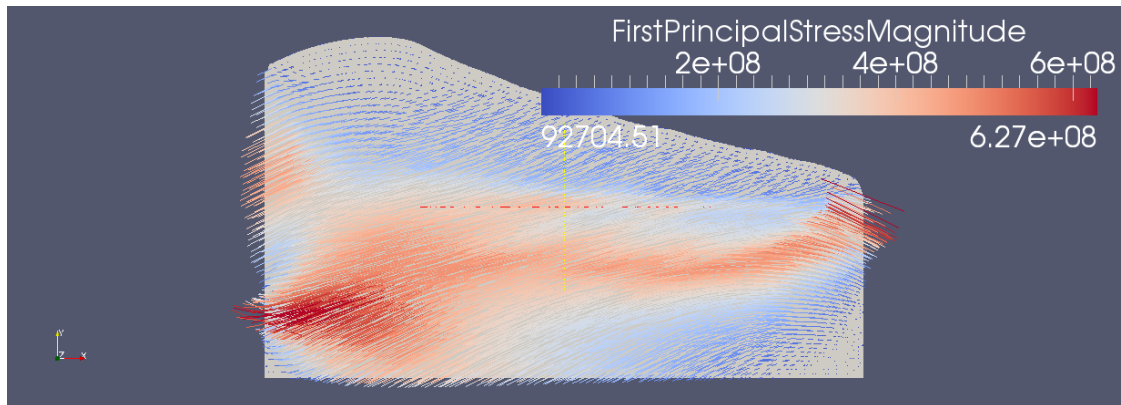
Figura A.12: Gráficas de contorno para el estado correspondiente a 8 [Ma]. A- Distribución de la cortante máxima. B- Distribución de la presión. C- Distribución de la temperatura.

Al continuar el desplazamiento, el modelo llega a su estado final a 15 [Ma] después del estado inicial, obteniendo el desplazamiento de material mostrado en la figura-A.13 entre el modelo cinemático y el modelo calculado por GALE. Notorias inconsistencias se encuentran al final de la simulación las cuales son básicamente a dos factores; el primero es el hecho de no tener en cuenta procesos de superficies tanto de erosión como de sedimentación los cuales se

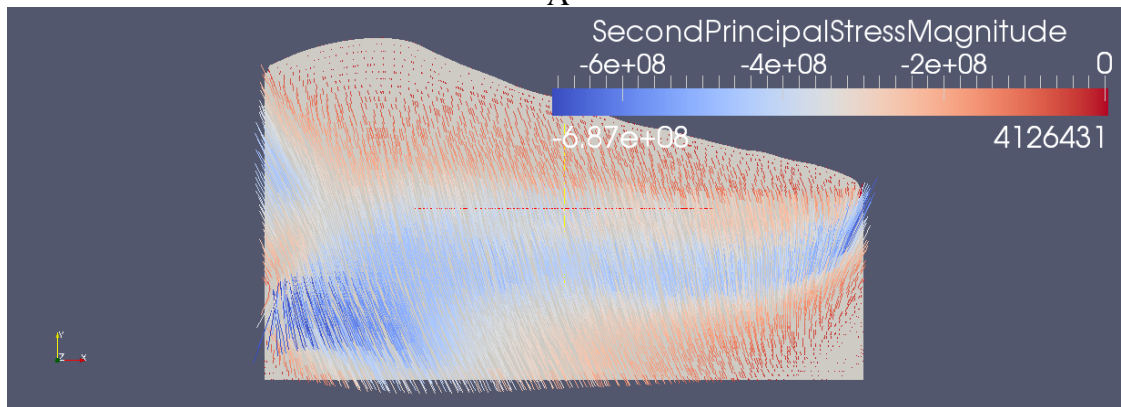
encargarían de que el material no se acumulara constantemente sobre la zona de levantamiento (zona de empuje); el segundo es la falta del conocimiento de las condiciones de frontera debido a que es un fenómeno del pasado. Agregado a esto es necesario un grupo de trabajo interdisciplinar entre el geólogo interprete y el modelador con el fin seguir la evolución de una zona bajo criterios estructurales y con las debidas simplificaciones impuestas al modelo, lo que lleva a evidenciar la complejidad del problema tratado mediante un punto de vista mecánico.

Las orientaciones de los esfuerzos principales son mostrados la figura-A.14 A y B, donde las orientaciones de σ_1 tiene un ángulo bastante inclinado pero de forma general se mantiene la orientación preferencial con las fallas identificadas por el criterio de falla, Estas fallas las cuales tienen una inclinación mayor a 45° se generan sobre toda la extensión del modelo, afectando las capas todas las capas hasta la roca más resistente, el basamento. Por otra parte la distribución de τ_{max} es dada en la figura-A.15 A, donde la concentración de la cortante máxima se centra sobre las zonas que no han sufrido un altos grados de fallamiento, indicando cuales son las zonas más propensas a fallar en tiempos posteriores.

En términos de temperatura como ha sido mencionado anteriormente debido al transporte de energía por advección los perfiles son fuertemente alterados y han cambiado de un carácter lineal a un no lineal.



A-



B-

C-

Figura A.14: Orientación de los esfuerzos principales y deformación post falla a 15 [Ma]. A- Esfuerzo principal σ_1 . B- Esfuerzo principal σ_2 . C- Deformación post falla; las zonas en colores más cálidos son las zonas más deformadas después de que el material ha fallado según el criterio.

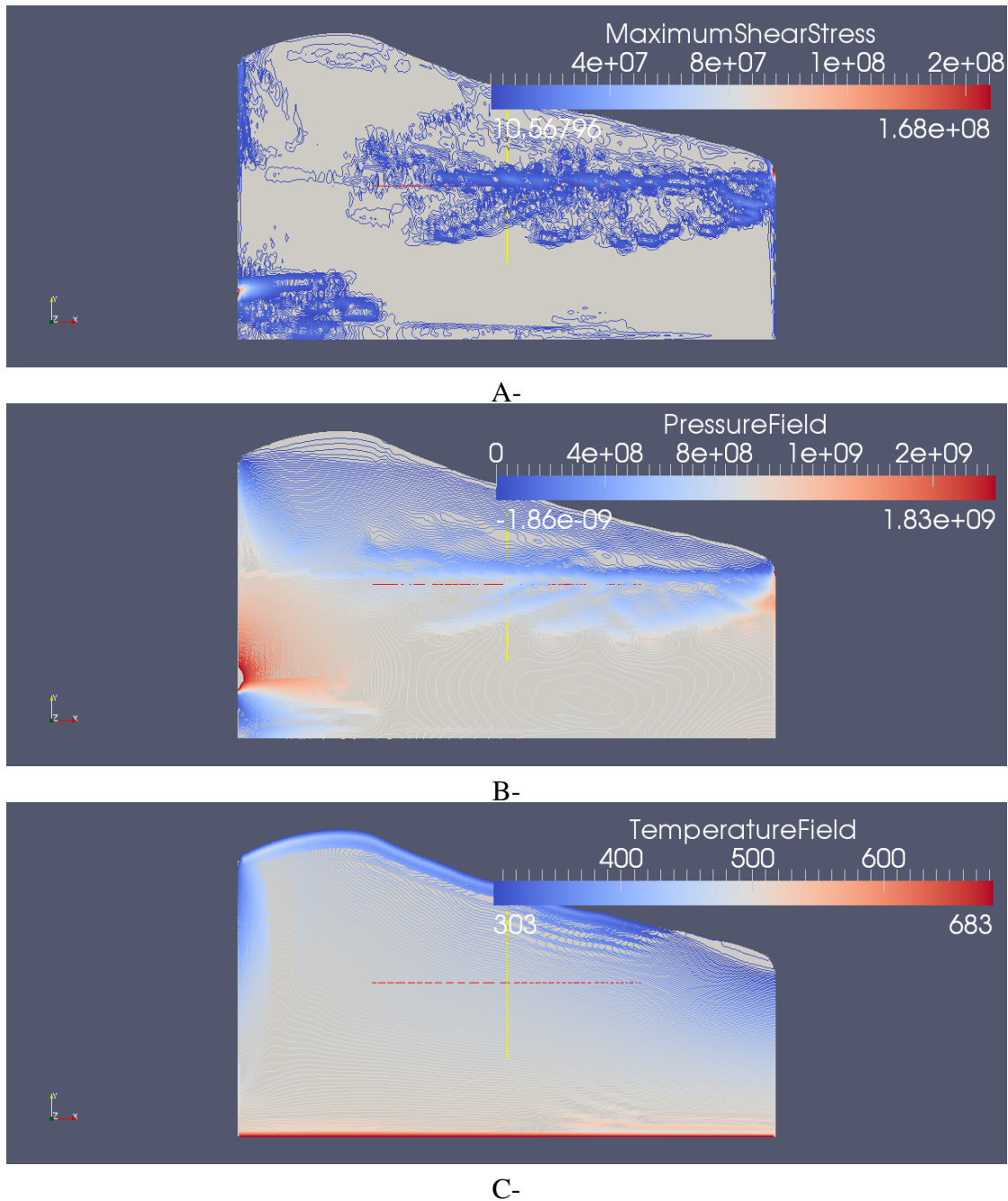


Figura A.15: Gráficas de contorno para el estado correspondiente a $15 [Ma]$. A- Distribución de la cortante máxima. B- Distribución de la presión. C- Distribución de la temperatura.

Apéndice B

Propiedades de los Materiales

B.1 Modelo 1

Las propiedades dadas son valores obtenidos de la Referencia [5] y de revisiones bibliográficas.

Indice de Material	0	1	2	3	4
Viscosidad [$Pa \cdot s$] ($1 \exp^{25}$)	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31
Densidad [Kg/m^3]	2600	2800	2750	2750	2750
Cohesión [MPa]	50	50	30	30	30
Angulo de Fricción [Deg]	30	30	30	30	30
Coefficiente de Fricción	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773
Cohesión Después Debilitamiento [MPa]	9	5	3	3	3
Angulo de Fricción Después Debilitamiento [Deg]	30	3.304	3.304	3.304	3.304
Coefficiente de Fricción Después Debilitamiento	0.5773	0.05773	0.05773	0.0577	0.0577

Tabla B.1: Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-6.1.

B.2 Modelo 2

Nube de puntos para la generación de la geometría del la figura- en QCAD.

Coordenada	x [m]	y [m]
1	0	0
2	0	941
3	0	1141
4	0	1441
5	0	1517
6	0	1617
Coordenada	x [m]	y [m]
7	0	1882
8	20418	0
9	20618	0
10	24000	0
11	24000	941
12	24000	1141
Coordenada	x [m]	y [m]
13	24000	1441
14	24000	1517
15	24000	1617
16	24000	1882
17	22500	1882
18	22300	1882

Tabla B.2: Nube de puntos para la generación de la geometría del modelamiento 6.2.

Las propiedades dadas son valores obtenidos de la Referencia [5] y de revisiones bibliográficas.

Indice de Material	0	1	2	3	4	5
Viscosidad [$Pa \cdot s$] ($1 \exp^{25}$)	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31
Densidad [Kg/m^3]	2750	2750	2750	2750	2750	2750
Cohesión [MPa]	30	30	30	30	30	30
Angulo de Fricción [Deg]	30	30	30	30	30	30
Coefficiente de Fricción	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773
Cohesión Después Debilitamiento [MPa]	3	3	3	3	3	3
Angulo de Fricción Después Debilitamiento [Deg]	3.304	3.304	3.304	3.304	3.304	3.304
Coefficiente de Fricción Después Debilitamiento	0.05773	0.05773	0.05773	0.05773	0.05773	0.05773
Coefficiente Exp. Térmica [$1/K$] ($1 \exp^{-5}$)	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
Conductividad Térmica [$W/m \cdot K$]	0.97	0.97	0.97	0.97	0.97	0.97
Calor Específico [$J/Kg \cdot K$]	795	795	795	795	795	795
Difusividad Térmica [m^2/s] ($1 \exp^{-6}$)	1.0	1.0	0.1	1.0	1.0	1.0
Tasa Radiogénica de Generación [K/s] ($1 \exp^{-12}$)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

Tabla B.3: Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-6.2.

B.3 Modelo 3

Los datos base del modelo se dan en la tabla-B.4.

Indice de Material	0	1	2	3	4	5
Viscosidad [$Pa \cdot s$] ($1 \exp^{25}$)	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31
Theta	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151
Densidad [Kg/m^3]	2680	2800	280	2700	2680	2680
Cohesión [MPa]	25	50	25	40	30	30
Angulo de Fricción [Deg]	20	35	15	35	20	20
Coefficiente de Fricción	0.3639	0.7002	0.2679	0.7002	0.3639	0.3639
Cohesión Después Debilitamiento [MPa]	2.5	5.0	2.5	4.0	3.0	3.0
Angulo de Fricción Después Debilitamiento [Deg]	2.084	4.005	1.5348	4.005	2.084	2.084
Coefficiente de Fricción Después Debilitamiento	0.0363	0.07	0.0267	0.07	0.0363	0.0363
Coefficiente Exp. Térmica [$1/K$] ($1 \exp^{-5}$)	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
Conductividad Térmica [$W/m \cdot K$]	2.1306	2.226	0.222	2.1465	2.1306	2.1306
Calor Específico [$J/Kg \cdot K$]	795	795	795	795	795	795
Difusividad Térmica [m^2/s] ($1 \exp^{-6}$)	1.0	1.0	0.1	1.0	1.0	1.0
Tasa Radiogénica de Generación [K/s] ($1 \exp^{-12}$)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

Tabla B.4: Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-6.3.

En este análisis se lleva a cabo unos experimentos paramétricos con los valores de cohesión y angulo fricción interna mostrados en la tabla-B.5.

Los valores del coeficiente de fricción se obtienen de la tangente del angulo de fricción interna $Coe\ fricción = \tan(\phi)$, los valores correspondientes a los estados después del debilitamiento del material corresponden a $Cohesión_{debilitamiento} = 0.1 \cdot Cohesión$ y $Coe\ fricción_{debilitamiento} = 0.1 \cdot Coe\ fricción$. y son los que determinan el comportamiento del material después de la fluencia.

B.4 Modelo 4

Los siguientes datos son obtenidos de mediciones de pozo, reportes de campo. Las propiedades térmicas son obtenidas de la Referencia [2]. Para la construcción del estudio térmico de la zona, los índices de material corresponden a los de la figura-A.3, y su relación con las formaciones de la zona se dan en la tabla-B.6.

Experimento	1		2		3		4	
Parámetros Variados	$c \dagger$	$\phi \dagger$	$c + 5$	$\phi + 5$	$c + 10$	$\phi + 10$	$c + 15$	$\phi + 15$
0	25	20	30	25	35	30	40	35
1	50	35	55	40	60	45	65	50
2	25	15	30	20	35	25	40	30
3	40	35	45	40	50	45	55	50
4	30	20	35	25	40	30	45	35
5	30	20	35	25	40	30	45	35
Figura	6.19 a)		6.19 b)		6.19 c)		6.19 d)	
c =Cohesión [MPa]	ϕ =Angulo de Fricción [deg]							

A)

Experimento	5		6		7		8	
Parámetros Variados	$c + 5$	$\phi \dagger$	$c + 10$	$\phi \dagger$	$c - 5$	$\phi \dagger$	$c - 10$	$\phi \dagger$
0	30	20	35	20	20	20	15	20
1	55	35	60	35	45	35	40	35
2	30	15	35	15	20	15	15	15
3	45	35	50	35	35	35	30	35
4	35	20	40	20	25	20	20	20
5	35	20	40	20	25	20	20	20
Figura	6.20 a)		6.20 b)		6.20 c)		6.20 d)	
c =Cohesión [MPa]	ϕ =Angulo de Fricción [deg]							

B)

Experimento	9		10		11		12	
Parámetros Variados	$c \dagger$	$\phi + 5$	$c \dagger$	$\phi + 10$	$c \dagger$	$\phi - 5$	$c \dagger$	$\phi - 10$
0	25	25	25	30	25	15	25	10
1	50	40	50	45	50	30	50	25
2	25	20	25	25	25	10	25	5
3	40	40	40	45	40	30	40	25
4	30	25	30	30	30	15	30	10
5	30	25	30	30	30	15	30	10
Figura	6.21 a)		6.21 b)		6.21 c)		6.21 d)	
c =Cohesión [MPa]	ϕ =Angulo de Fricción [deg]							

C)

Tabla B.5: Experimentos realizados el trabajo de Rafiqul, MD. Hayashi, D. (2009), en la Referencia [25]. A. Estudio 1; evaluación del aumento de cohesión y angulo de fricción. B. Estudio 2; evaluación de la variación de la cohesión. C. Estudio 3; evaluación de la variación del angulo de fricción interna. El indicador † es designado para los valores dados en la tabla-B.4.

Índice de Material	Formación
0	Roca Competente - Basamento
1	Formacion1
2	Formacion2
3	Formacion3
4	Formacion4
5	Formacion5
6	Formacion6
7	Formacion7
8	Formacion8

Tabla B.6: Relación índices de material con sus respectivas fomaciones.

Indice de Material	0	1	2	3	4	5	6	7	8
Viscosidad [$Pa \cdot s$] ($1 \exp^{25}$)	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31	2.31
Theta	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151	0.1151
Densidad [Kg/m^3]	2800	2750	2750	2750	2750	2700	2700	2700	2650
Cohesión [MPa]	50	30	30	30	30	31	48	11	7
Angulo de Fricción [Deg]	30	30	30	30	30	30	35	30	35
Coefficiente de Fricción	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.5773	0.7	0.5773	0.7
Cohesión Después Debilitamiento [MPa]	5	3	3	3	3	3.1	3.5	1.1	0.7
Angulo de Fricción Después Debilitamiento [Deg]	3.304	3.304	3.304	3.304	3.304	3.304	4	3.304	4
Coefficiente de Fricción Después Debilitamiento	0.05773	0.05773	0.05773	0.05773	0.05773	0.05773	0.07	0.05773	0.07
Coefficiente Exp. Térmica [$1/K$] ($1 \exp^{-5}$)	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
Conductividad Térmica [$W/m \cdot K$]	3.2	3	3	3	2.1	2	1.5	3.2	1.3
Calor Específico [$J/Kg \cdot K$]	795	795	795	795	795	795	795	795	795
Difusividad Térmica [m^2/s] ($1 \exp^{-6}$)	1.44	1.37	1.37	1.37	0.961	0.932	1.4	0.699	0.617
Tasa Radiogénica de Generación [K/s] ($1 \exp^{-12}$)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

Tabla B.7: Propiedades usadas para el modelamiento de la sección-A.

Apéndice C

Fundamentos Matemáticos

C.1 Definiciones de Escalar, Vector, Matriz y Tensor

La teoría de la mecánica de medios continuos está formulada en términos de diferentes tipos de variables, como cantidades escalares, las cuales representan una simple magnitud de un punto en el espacio, tales como la densidad, temperatura, presión, modulus o propiedades de un material como su viscosidad y cohesión. Otras variables de gran importancia son las cantidades vectoriales las cuales se expresan en términos de componentes como una fuerza o un desplazamiento, y aún más importante la formulación de la teoría requiere del uso de variables matriciales las cuales expresan los esfuerzos y las deformaciones del medio.

$$[Tensor\ de\ orden\ 0] \text{ Densidad} = \rho \quad (C.1)$$

$$[Tensor\ de\ orden\ 1] \text{ Vector de Desplazamiento} = \mathbf{u} = u\mathbf{i} + v\mathbf{j} + w\mathbf{k} \quad (C.2)$$

$$[Tensor\ de\ orden\ 2] \text{ Matriz de Esfuerzos} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (C.3)$$

C.1.1 Notación de Índices

Las teorías de deformación hacen uso del formalismo del tensor usando una notación de índices, esto permite una eficiente representación de las variables antes mencionadas y de más alto orden, mediante la representación de tensores de diferentes orden.

La notación de índices es un esquema corto de escritura por el cual un conjunto de números (Elementos o Componentes) es representado por un símbolo con subíndices.¹ Estas representaciones pueden ser escritas de diferentes maneras y lo más común es usar un esquema relacionado con los formatos de un vector y una matriz como tal

$$\mathbf{a}_i = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}, \mathbf{a}_{i,j} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}, \text{ donde } i, j \in [1, 2, 3] \quad (C.4)$$

¹Sadd, M. (2005), Elasticity; Theory, Applications and Numerics.

En forma general un símbolo $\mathbf{a}_{i,j,\dots,k}$ con n distintos índices representa 3^n distintos números, donde $i, j, \dots, k \in [1, 2, 3]$, y de forma indistinta $\mathbf{a}_{i,j,k}$ y $\mathbf{a}_{l,m,n}$ representan los mismos números. En el caso de adición o substración se obtiene

$$\mathbf{a}_i \pm \mathbf{b}_i = \begin{bmatrix} a_1 \pm b_1 \\ a_2 \pm b_2 \\ a_3 \pm b_3 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{a}_{i,j} \pm \mathbf{b}_{i,j} = \begin{bmatrix} a_{11} \pm b_{11} & a_{12} \pm b_{12} & a_{13} \pm b_{13} \\ a_{21} \pm b_{21} & a_{22} \pm b_{22} & a_{23} \pm b_{23} \\ a_{31} \pm b_{31} & a_{32} \pm b_{32} & a_{33} \pm b_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{C.5})$$

de igual manera la multiplicación por un escalar

$$\lambda \mathbf{a}_i = \begin{bmatrix} \lambda a_1 \\ \lambda a_2 \\ \lambda a_3 \end{bmatrix}; \quad \lambda \mathbf{a}_{i,j} = \begin{bmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \lambda a_{13} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \lambda a_{23} \\ \lambda a_{31} & \lambda a_{32} & \lambda a_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{C.6})$$

La multiplicación de símbolos con diferentes índices es llamado *producto exterior* y es dado como

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & a_1 b_3 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & a_2 b_3 \\ a_3 b_1 & a_3 b_2 & a_3 b_3 \end{bmatrix} \quad (\text{C.7})$$

Tales operaciones obedecen las leyes básicas como la conmutación, asociación y distribución como sigue

$$\mathbf{a}_i + \mathbf{b}_i = \mathbf{b}_i + \mathbf{a}_i \quad (\text{C.8})$$

$$\mathbf{a}_{ij} \mathbf{b}_k = \mathbf{b}_k \mathbf{a}_{ij} \quad (\text{C.9})$$

$$\mathbf{a}_i + (\mathbf{b}_i + \mathbf{c}_i) = (\mathbf{a}_i + \mathbf{b}_i) + \mathbf{c}_i \quad (\text{C.10})$$

$$\mathbf{a}_i (\mathbf{b}_{jk} \mathbf{c}_l) = (\mathbf{a}_i \mathbf{b}_{jk}) \mathbf{c}_l \quad (\text{C.11})$$

$$\mathbf{a}_{ij} (\mathbf{b}_k + \mathbf{c}_k) = \mathbf{a}_{ij} \mathbf{b}_k + \mathbf{a}_{ij} \mathbf{c}_k \quad (\text{C.12})$$

Por otro lado relaciones de la forma $\mathbf{a}_i = \mathbf{b}_j$ o $\mathbf{a}_{ij} = \mathbf{b}_{kl}$, tienen un significado ambiguo debido a que son de diferente subíndice y esta clase de expresiones son evitadas en este esquema notacional.

En forma general, los distintos subíndices sobre los elementos en una ecuación deben coincidir. El uso de tres o más subíndices repetidos como \mathbf{a}_{iii} , \mathbf{b}_{jjj} ó $\mathbf{a}_{iii} \mathbf{b}_{jjj}$ tiene un significado ambiguo por lo cual también es evitado. En un símbolo dado el proceso de configurar dos subíndices iguales es llamado *contracción en i sobre j*, en base a esto la operación de un *producto exterior* de dos símbolos indexados seguida por la *contracción* de uno de los índices de cada símbolo es llamado *producto interior*, como sigue; si $\mathbf{a}_{ij} \mathbf{b}_{jk}$ es un *producto interior* puede ser obtenido a partir del *producto exterior* $\mathbf{a}_{ij} \mathbf{b}_{mk}$ por la *contracción* de j sobre m .

C.1.2 Simetría

Un símbolo es simétrico respecto a un par de índices $m n$ si

$$\mathbf{a}_{ij\dots m\dots n\dots k} = \mathbf{a}_{ij\dots n\dots m\dots k} \quad (\text{C.13})$$

y es antisimétrico cuando

$$\mathbf{a}_{ij\dots m\dots n\dots k} = -\mathbf{a}_{ij\dots n\dots m\dots k} \quad (\text{C.14})$$

Sí $\mathbf{a}_{ij\dots m\dots n\dots k}$ es simétrico en $m n$ y $\mathbf{b}_{pq\dots m\dots n\dots r}$ es antisimétrico en $m n$, entonces su producto tensorial es cero

$$\mathbf{a}_{ij\dots m\dots n\dots k} \mathbf{b}_{pq\dots m\dots n\dots r} = 0 \quad (\text{C.15})$$

A partir de este resultado una útil identidad puede ser escrita como

$$\mathbf{a}_{ij} = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_{ij} + \mathbf{a}_{ji}) + \frac{1}{2} (\mathbf{a}_{ij} - \mathbf{a}_{ji}) = \mathbf{a}_{(ij)} + \mathbf{a}_{[ij]} \quad (\text{C.16})$$

El primer término $\mathbf{a}_{(ij)} = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_{ij} + \mathbf{a}_{ji})$ es simétrico, mientras $\mathbf{a}_{[ij]} = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_{ij} - \mathbf{a}_{ji})$ es antisimétrico, de esta manera *cualquier tensor se compone de su parte simétrica y su parte antisimétrica*.

C.2 Delta de Kronecker y el Símbolo de Permutación

Un útil símbolo especial es el *delta de Kronecker*, definido por

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j \\ 0, & \text{si } i \neq j \end{cases} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{C.17})$$

además se ser simétrico cuenta con las siguientes propiedades

$$\delta_{ij} \mathbf{a}_j = \mathbf{a}_i \delta_{ij} \mathbf{a}_i = \mathbf{a}_j \quad (\text{C.18})$$

$$\delta_{ij} \mathbf{a}_{jk} = \mathbf{a}_{ik} \delta_{jk} \mathbf{a}_{ik} = \mathbf{a}_{ij} \quad (\text{C.19})$$

$$\delta_{ij} \mathbf{a}_{ij} = \mathbf{a}_{ii} \delta_{ij} \mathbf{a}_{ij} = 3 \quad (\text{C.20})$$

Otro símbolo especial es el símbolo de permutación, definido por

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{si } ijk \text{ es par,} \\ -1 & \text{si } ijk \text{ es impar,} \\ 0 & \text{si existe otro caso} \end{cases} \quad (\text{C.21})$$

en consecuencia $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$; $\varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = -1$, $\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$; $\varepsilon_{113} = \varepsilon_{131} = \varepsilon_{222} = 0$, existen 27 posibles conmutaciones de las cuales tres son iguales a 1, tres iguales a -1 y el resto iguales a 0. Este símbolo es útil en la evaluación de determinantes y productos cruz de vectores, el determinante de un arreglo \mathbf{a}_{ij} puede ser escrito como

$$\det [\mathbf{a}_{ij}] = |\mathbf{a}_{ij}| = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \varepsilon_{ijk} \mathbf{a}_{1i} \mathbf{a}_{2j} \mathbf{a}_{3k} = \varepsilon_{ijk} \mathbf{a}_{i1} \mathbf{a}_{j2} \mathbf{a}_{k3} \quad (\text{C.22})$$

Donde el primer término representa la expansión de la fila y el segundo la expansión de la columna, usando la propiedad

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{pqr} = \begin{vmatrix} \delta_{ip} & \delta_{iq} & \delta_{ir} \\ \delta_{jp} & \delta_{jq} & \delta_{jr} \\ \delta_{kp} & \delta_{kq} & \delta_{kr} \end{vmatrix} \quad (\text{C.23})$$

entonces el determinante de \mathbf{a}_{ij} es igual a

$$\det [\mathbf{a}_{ij}] = \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{pqr} \mathbf{a}_{ip} \mathbf{a}_{jq} \mathbf{a}_{kr} \quad (\text{C.24})$$

C.3 Transformación de Coordenadas Cartesianas

Es conveniente y de hecho necesario expresar las ecuaciones en varios diferentes sistemas coordenados, en el caso cartesiano existen particulares reglas de transformación para diversos tipos de variables de diferente orden, en la Fig-C.1 se muestran dos sistemas cartesianos $(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3)$ y $(\mathbf{X}'_1, \mathbf{X}'_2, \mathbf{X}'_3)$ de diferente orientación y sus respectivos vectores unitarios $\{\mathbf{e}_i\} = \{e_1, e_2, e_3\}$ y $\{\mathbf{e}'_i\} = \{e'_1, e'_2, e'_3\}$.

Figura C.1: Sistema Cartesiano rotado

Haciendo \mathbf{Q}_{ij} el coseno del ángulo entre el eje \mathbf{X}'_i y el eje \mathbf{X}_i

$$\mathbf{Q}_{ij} = \cos(\mathbf{X}'_i, \mathbf{X}_i) \quad (\text{C.25})$$

usando esta definición el sistema coordenado primado puede ser facilmente expresado en términos del sistema no primado

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_1 &= Q_{11} \cdot e_1 + Q_{12} \cdot e_2 + Q_{13} \cdot e_3 \\ \mathbf{e}'_2 &= Q_{21} \cdot e_1 + Q_{22} \cdot e_2 + Q_{23} \cdot e_3 \\ \mathbf{e}'_3 &= Q_{31} \cdot e_1 + Q_{32} \cdot e_2 + Q_{33} \cdot e_3 \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

en notación de índices

$$\mathbf{e}'_i = \mathbf{Q}_{ji} \cdot \mathbf{e}_j \text{ o } \mathbf{e}_i = \mathbf{Q}_{ji} \cdot \mathbf{e}'_j \quad (\text{C.27})$$

siendo \mathbf{v} un vector arbitrario el cual puede ser escrito en dos sistemas como

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= v_1 \cdot e_1 + v_2 \cdot e_2 + v_3 \cdot e_3 = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_i \\ \mathbf{v} &= v'_1 \cdot e'_1 + v'_2 \cdot e'_2 + v'_3 \cdot e'_3 = \mathbf{v}'_i \cdot \mathbf{e}'_i \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

de forma análoga se obtiene

$$\mathbf{v} = v_i Q_{ji} \mathbf{e}'_j \quad (\text{C.29})$$

si $\mathbf{v} = v'_j \cdot \mathbf{e}'_j$ a partir de lo anterior obtenemos.

$$\mathbf{v}'_j = v_i Q_{ji} \quad (\text{C.30})$$

$$\mathbf{v}'_i = Q_{ij} v_j \quad (\text{C.31})$$

de forma similar

$$\mathbf{v}_i = Q_{ji} \mathbf{v}'_j \quad (\text{C.32})$$

Estas dos últimas ecuaciones constituyen las leyes de transformación de componentes cartesianas de un vector. Las transformaciones hechas entre sistemas coordenados ortogonales dan algunas restricciones a la matriz de los cosenos directores.

Partiendo de las dos últimas ecuaciones

$$\mathbf{v}_i = Q_{ji} \mathbf{v}'_j = Q_{ji} Q_{jk} \mathbf{v}_k \quad (\text{C.33})$$

De las propiedades del delta de Kronecker esta expresión puede ser escrita como

$$\delta_{ik} \mathbf{v}_k = Q_{ji} Q_{jk} \mathbf{v}_k \text{ o } (Q_{ji} Q_{jk} - \delta_{ik}) \mathbf{v}_k = 0 \quad (\text{C.34})$$

para que esta ecuación se cumpla en todo \mathbf{v}_k debe ser $(Q_{ji} Q_{jk} - \delta_{ik}) = 0$

$$Q_{ji} Q_{jk} = \delta_{ik} \quad (\text{C.35})$$

$$Q_{ij} Q_{kj} = \delta_{ik} \quad (\text{C.36})$$

Estas dos relaciones comprenden las condiciones de ortogonalidad que la matriz Q_{ij} debe cumplir, tomando el determinante en cada relación se obtiene

$$\det [Q_{ij}] = \pm 1 \quad (\text{C.37})$$

Las matrices que cumplen estas relaciones son *ortogonales* y las transformaciones referidas a ellas son *transformaciones ortogonales*.

C.4 Tensores Cartesianos

Escalares, vectores, matrices y cantidades de alto orden pueden ser representadas por tensores de diferentes orden, de forma análoga a las transformaciones hechas anteriormente; Las relaciones de transformaciones para cantidades de varios ordenes pueden ser escritas como

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a}' &= \mathbf{a} \text{ Orden cero (escalar)} \\
 \mathbf{a}'_i &= \mathbf{Q}_{ip} \mathbf{a}_p \text{ Orden uno (vector)} \\
 \mathbf{a}'_{ij} &= \mathbf{Q}_{ip} \mathbf{Q}_{jq} \mathbf{a}_{pq} \text{ Orden dos (matriz)} \\
 \mathbf{a}'_{ijk} &= \mathbf{Q}_{ip} \mathbf{Q}_{jq} \mathbf{Q}_{kr} \mathbf{a}_{pqr} \text{ Orden tres (arreglo de elementos matriciales)} \\
 &\vdots \\
 \mathbf{a}'_{ijk\dots m} &= \mathbf{Q}_{ip} \mathbf{Q}_{jq} \mathbf{Q}_{kr} \cdots \mathbf{Q}_{mt} \mathbf{a}_{pqr\dots t} \text{ Orden general}
 \end{aligned} \tag{C.38}$$

Esta teoría de transformación provee una importante ayuda en la determinación de los desplazamientos, esfuerzos y las deformaciones en diferentes sistemas coordenados.

La distinción entre las componentes y el tensor de esfuerzos deben ser entendidas de manera similar a la descomposición de un vector en dos sistemas cartesianos, un tensor de segundo orden puede ser escrito

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a} &= a_{11}e_1e_1 + a_{12}e_1e_2 + a_{13}e_1e_3 + \\
 &\quad a_{21}e_2e_1 + a_{22}e_2e_2 + a_{23}e_2e_3 + \\
 &\quad a_{31}e_3e_1 + a_{32}e_3e_2 + a_{33}e_3e_3 \\
 \mathbf{a} &= a_{ij}e_i e_j = a'_{ij}e'_i e'_j
 \end{aligned} \tag{C.39}$$

La representación usada anteriormente es comunmente llamada *notación diádica*. Las expresiones anteriores indican que cualquier tensor puede ser expresado en términos de cualquier sistema coordenado usando la apropiada transformación. En el caso del tensor de esfuerzos la apropiada transformación para cualquier sistema coordenado es la que corresponde a un tensor de segundo orden como se dan al ecuación-C.38, la cual permite describir el estado de esfuerzos de un punto bajo diferentes sistemas coordenados.

C.5 Valores Principales y Direcciones de Tensores Simétricos de Segundo Orden.

Si en una transformación se elige un sistema coordenado que ha sido rotado de tal forma que $\mathbf{v} = (0, 0, |\mathbf{v}|)$. Para este caso, dos de los componentes han sido reducidos a cero, mientras el resto de componentes se hacen lo más grande posible (La magnitud total).

Esta situación es útil para tensores simétricos de segundo orden. Los cuales representan el estado de esfuerzo o de deformación en un punto de un medio continuo. La dirección determinada por el vector unitario \mathbf{n} es una dirección principal ó el eigenvector del tensor simétrico de segundo orden \mathbf{a}_{ij} si existe un parámetro λ tal que

$$\mathbf{a}_{ij} \mathbf{n} = \lambda \mathbf{v}_i \tag{C.40}$$

Donde λ es llamado el valor principal o eigenvalor del tensor. Al escribir la relación anterior como

$$(\mathbf{a}_{ij} - \lambda \delta_{ij}) \mathbf{n}_j = 0 \tag{C.41}$$

Se encuentra un sistema homogéneo de tres ecuaciones lineales, en las tres incógnitas n_1 , n_2 y n_3 . El sistema posee una solución no trivial si y solo si el determinante de sus coeficientes es cero, lo cual resulta

$$\det [\mathbf{a}_{ij} - \lambda \delta_{ij}] = 0 \quad (\text{C.42})$$

Al expandir el determinante se produce una ecuación cúbica en términos de λ

$$\det [\mathbf{a}_{ij} - \lambda \delta_{ij}] = \begin{bmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - \lambda \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{C.43})$$

$$-\lambda^3 + \lambda^2 \mathbf{I}_a - \lambda \mathbf{II}_a + \mathbf{III}_a = 0 \quad (\text{C.44})$$

donde

$$\mathbf{I}_a = a_{11} + a_{22} + a_{33}$$

$$\mathbf{II}_a = (a_{11} \cdot a_{33} - a_{13} \cdot a_{31} + a_{11} \cdot a_{22} - a_{12} \cdot a_{21} + a_{22} \cdot a_{33} - a_{23} \cdot a_{32})$$

$$\mathbf{III}_a = a_{11} (a_{22} \cdot a_{33} - a_{23} \cdot a_{32}) - a_{12} (a_{21} \cdot a_{33} - a_{23} \cdot a_{31}) + a_{13} (a_{21} \cdot a_{32} - a_{31} \cdot a_{22})$$

En forma compacta

$$\mathbf{I}_a = a_{ii} \quad (\text{C.45})$$

$$\mathbf{II}_a = \frac{1}{2} \cdot (a_{ii} a_{jj} - a_{ij} a_{ji}) \quad (\text{C.46})$$

$$\det [\mathbf{a}_{ij}] \quad (\text{C.47})$$

Los escalares \mathbf{I}_a , \mathbf{II}_a y \mathbf{III}_a son llamados las invariantes fundamentales del tensor \mathbf{a}_{ij} y la ecuación polinómica de tercer grado recibe el nombre de *ecuación característica*. Como su nombre lo indica las invariantes no cambian su valor bajo una transformación a otro sistema coordenado.

Bajo la condición de que los componentes de \mathbf{a}_{ij} son reales se puede demostrar que las tres raíces de la *ecuación característica* λ_1 , λ_2 y λ_3 son reales, de esta manera se puede afirmar que *cualquier tensor simétrico de segundo orden tiene por lo menos 3 direcciones principales mutuamente perpendiculares* por ser un sistema ortogonal. Por denotación las direcciones principales $\mathbf{n}^{(1)}$, $\mathbf{n}^{(2)}$ y $\mathbf{n}^{(3)}$ corresponden a los valores principales mutuamente perpendiculares λ_1 , λ_2 y λ_3 , por lo tanto surgen tres posibilidades.

1. $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$ *Los tres corresponden a las principales direcciones y son únicas.*
2. $\lambda_1 \neq \lambda_2 = \lambda_3$ *La principal dirección $\mathbf{n}^{(1)}$ es única, y cada dirección perpendicular a $\mathbf{n}^{(1)}$ es una dirección principal asociada con $\lambda_2 = \lambda_3$.*
3. $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ *Cualquier dirección es principal y el tensor asociado es isotrópico.*

Es así como al cambiar a un sistema coordenado el cual las direcciones principales actúan en las direcciones unitarias del nuevo sistema coordenado, el tensor toma su forma diagonal

$$\mathbf{a}_{ij} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} \quad (\text{C.48})$$

A partir de esta forma las invariantes se pueden expresar en términos de los valores principales.

$$\mathbf{I}_a = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \quad (\text{C.49})$$

$$\mathbf{II}_a = \lambda_1 \cdot \lambda_2 + \lambda_2 \cdot \lambda_3 + \lambda_3 \cdot \lambda_1 \quad (\text{C.50})$$

$$\mathbf{III}_a = \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \lambda_3 \quad (\text{C.51})$$

En consecuencia de este resultado se obtiene una relación a través de las invariantes entre cualquier sistema coordenado y el sistema correspondiente al tensor diagonalizado.

C.6 Cálculo de Tensores Cartesianos

La mayoría de las variables usadas en el desarrollo de las secciones teoricas de este trabajo son variables de campos vectoriales o escalares, las cuales son funciones de las coordenadas espaciales y en problemas transitorios tiene una variación dependiente del tiempo, por tanto los tensores son variables de campo, e involucran operadores diferenciales y de integración.

El concepto de campo espacial para las componentes de un tensor puede ser expresado de esta manera

$$\begin{aligned} a &= a(x_1, x_2, x_3) = a(\mathbf{x}) \\ \mathbf{a}_i &= \mathbf{a}_i(x_1, x_2, x_3) = \mathbf{a}_i(\mathbf{x}) \\ \mathbf{a}_{ij} &= \mathbf{a}_{ij}(x_1, x_2, x_3) = \mathbf{a}_{ij}(\mathbf{x}) \\ &\vdots \end{aligned}$$

otra conveniente notación es la *notación coma*, para diferenciación parcial:

$$\mathbf{a}_{,i} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \mathbf{a}, \quad \mathbf{a}_{i,j} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \mathbf{a}_i, \quad \mathbf{a}_{ij,k} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \mathbf{a}_{ij} \dots$$

Cuando la diferenciación de índices es distinta el grado del tensor se incrementa en uno, si es derivado el vector $\mathbf{a}_{i,j}$ produce un tensor de segundo orden

$$\mathbf{a}_{i,j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \mathbf{a}_1 & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2} \mathbf{a}_1 & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_3} \mathbf{a}_1 \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \mathbf{a}_2 & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2} \mathbf{a}_2 & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_3} \mathbf{a}_2 \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \mathbf{a}_3 & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2} \mathbf{a}_3 & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_3} \mathbf{a}_3 \end{bmatrix}$$

Usando coordenadas catersianas (x, y, z) , considere la derivada de direccional de un campo escalar f con respecto a la dirección s .

$$\frac{df}{ds} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{ds} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{dz}{ds} \quad (\text{C.52})$$

El vector unitario en la dirección s es

$$\mathbf{n} = \frac{dx}{ds} \cdot \mathbf{e}_1 + \frac{dy}{ds} \cdot \mathbf{e}_2 + \frac{dz}{ds} \cdot \mathbf{e}_3 \quad (\text{C.53})$$

así la derivada direccional puede ser expresada como un producto escalar:

$$\frac{df}{ds} = \mathbf{n} \cdot \nabla f \quad (\text{C.54})$$

Donde ∇f es llamado el gradiente de la función escalar f definido por

$$\nabla f = \text{grad}[f] = e_1 \frac{\partial f}{\partial x} + e_2 \frac{\partial f}{\partial y} + e_3 \frac{\partial f}{\partial z} \quad (\text{C.55})$$

y el operador ∇ es llamado operador *Nabla*.

Por tanto las siguientes operaciones diferenciales pueden ser escritas en notación de índices

$$\begin{aligned} \text{Gradiente de un escalar } \nabla \phi &= \phi_{,i} \mathbf{e}_i \\ \text{Gradiente de un vector } \nabla \mathbf{u} &= \mathbf{u}_{,i,j} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \\ \text{Laplaciano de un escalar } \nabla^2 \phi &= \nabla \cdot \nabla \phi = \phi_{,ii} \\ \text{Laplaciano de un vector } \nabla^2 \mathbf{u} &= \mathbf{u}_{,i,kk} \mathbf{e}_i \\ \text{Divergencia de un vector } \nabla \cdot \mathbf{u} &= \mathbf{u}_{,i,i} \\ \text{Rotacional de un vector } \nabla \times \mathbf{u} &= \varepsilon_{ijk} \mathbf{u}_{k,j} \mathbf{e}_i \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

Si ϕ y ψ son campos escalares y \mathbf{u} , \mathbf{v} campos vectoriales existen varias identidades útiles como sigue

$$\begin{aligned} \nabla(\phi\psi) &= (\nabla\phi)\psi + (\nabla\psi)\phi \\ \nabla^2(\phi\psi) &= (\nabla^2\phi)\psi + (\nabla^2\psi)\phi + 2 \cdot \nabla\phi \nabla\psi \\ \nabla \cdot (\phi\mathbf{u}) &= \nabla\phi \cdot \mathbf{u} + \phi(\nabla \cdot \mathbf{u}) \\ \nabla \times (\phi\mathbf{u}) &= \nabla\phi \times \mathbf{u} + \phi(\nabla \times \mathbf{u}) \\ \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v}) &= \mathbf{v} \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) - \mathbf{u} \cdot (\nabla \times \mathbf{v}) \\ \nabla \times \nabla\phi &= 0 \\ \nabla \cdot \nabla\phi &= \nabla^2\phi \\ \nabla \cdot \nabla \times \mathbf{u} &= 0 \\ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla^2\mathbf{u} \\ \mathbf{u} \times (\nabla \times \mathbf{u}) &= \frac{1}{2} \nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) - \mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} \end{aligned} \quad (\text{C.57})$$

C.7 Teorema de Divergencia o Teorema de Gauss

Sea s una superficie continua o continua a trozos que delimita una región del espacio V . Si el campo vectorial \mathbf{u} es continuo y tiene primeras derivadas continuas en V , entonces

$$\int \int_s \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds = \int \int \int_V \nabla \cdot \mathbf{u} dV \quad (\text{C.58})$$

Donde \mathbf{n} es el vector externo normal a la superficie s . Este resultado también es cierto para tensores de cualquier orden.

$$\int \int_s \mathbf{a}_{ij\dots k} \mathbf{n}_k ds = \int \int \int_V \mathbf{a}_{ij\dots k,k} dV \quad (\text{C.59})$$

C.8 Teorema de Stokes

Este teorema establece una relación entre una integral de línea y una integral de superficie

$$\oint_c \mathbf{u} \cdot d\mathbf{r} = \int_s (\nabla \times \mathbf{u}) \cdot d\mathbf{s} \quad (\text{C.60})$$

Donde s es una superficie abierta y c es la curva cerrada que limita a dicha superficie, la dirección de recorrido de la curva c determina la orientación del vector $d\vec{s}$, el cual es normal a la superficie. De igual manera este resultado es válido para tensores de cualquier orden.

$$\oint_c \mathbf{a}_{ij\dots k} dx_t = \int_s \varepsilon_{rst} \mathbf{a}_{ij\dots k,s} \mathbf{n}_r ds \quad (\text{C.61})$$

C.9 Teorema de Green en el Plano

Aplicando el teorema de Stokes a un dominio planar s con el campo vectorial como $\mathbf{u} = f\mathbf{e}_1 + g\mathbf{e}_2$ da el resultado

$$\int \int_s \left(\frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial y} \right) dx dy = \int_c (f dx + g dy) \quad (\text{C.62})$$

Afortunadamente, si se elige $f = 0$ ó $g = 0$ implica respectivamente

$$\int \int_s \frac{\partial g}{\partial x} dx dy = \int_c g \mathbf{n}_x ds, \quad \int \int_s \frac{\partial f}{\partial y} dx dy = \int_c f \mathbf{n}_y ds \quad (\text{C.63})$$

C.10 Teorema del Valor Cero

Sea $f_{ij\dots k}$ un campo tensorial continuo de cualquier orden, definido en una región arbitraria V . Si la integral de $f_{ij\dots k}$ sobre V desaparece, entonces $f_{ij\dots k}$ debe desaparecer en V .²

$$\int \int \int_V f_{ij\dots k} dV = 0 \implies f_{ij\dots k} = 0 \in V \quad (\text{C.64})$$

²Las Referencias[11, 12, 15, 9, 13], cuentan con un gran background matemático para el lector más interesado a cerca de este tema, o tal vez revizar libros de cálculo tensorial y mecánica de medios continuos como la Referencia [10].

Apéndice D

Formato del Archivo de Entrada

Los archivos de entrada para el procesamiento son **.xml*, su utilidad es debido a su conocido uso, y a su ventajosa forma de especificar conceptos como encabezados, listas, parámetros y estructuras arbitrarias. Todos los encabezados, listas de parámetros y estructuras de parámetros están localizados dentro de una estructura de datos denominada *StGermainData*. Para ver una descripción más profunda del archivo de entrada al GALE se remite al lector a los archivos generados por Allpa-GALE los cuales están debidamente comentados.

D.1 Estructura

En forma general las estructuras de parámetros están distribuidas en cinco partes fundamentales que siguen una secuencia, los componentes, los plugins, el EulerDeform, las condiciones de frontera y las variables, aunque dentro de cada parte no importa cual estructura del archivo va primero o va después de otra, si es necesario respetar esta secuencia con el objetivo de llevar un orden en las estructuras y componentes usados, a continuación se esboza las cinco partes básicas y su uso.

D.1.1 Componentes

Los componentes comprenden la parte mas grande del archivo **.xml* y es en donde la mayoría de las ideas que involucran la construcción de un modelo se determinan, definiciones como la malla, el tipo de elemento, geometría, tipos de materiales, propiedades, tipos de solucionador, y parámetros de convergencia son usados aquí. Es valido resaltar que existen más componentes de los estudiados en este apartado, por tanto se recomienda estudiar bien el archivo generado por Allpa-Gale, las estructuras explicadas obedecen a la construcción de un modelo base y es tarea del usuario modificar este resultado para satisfacer sus necesidades. Para mas detalles ver Referencia [16].

D.1.2 Plugins

Posterior a los componentes le sigue los plugins, son complementos programados para el GALE, los cuales requieren de un profundo conocimiento del código para su implementación. Los plugins disponibles se deben agregar en esta sección para que sean ignorados por GALE.

D.1.3 EulerDeform

El EulerDeform es el plugin más importante de GALE, esta implementación permite que las fronteras sea movidas, fijadas y definir entradas de materia y salida en el modelamiento.

D.1.4 Condiciones de frontera

Toda solución numérica de una EDP obedece a unas condiciones iniciales y sus respectivas condiciones de frontera, en esta parte se definen las condiciones de ambos fenómenos el problema estructural y el problema térmico.

D.1.5 Variables

Por ultimo se definen las variables que no son más que parámetros que el usuario define y en su mayoría son necesitados por los componentes definidos en la sección componentes D.1.1. Junto con las condiciones iniciales estas son las partes que el usuario modificará con más frecuencia.

En resumen todo el compendio de componentes necesario para un simulación básica lo genera Allpa-Gale, pero no se pretende dar una generalización de un modelo base, en vez de ello se propone un platilla *formulario.xml* para que el usuario la modifique a sus necesidades.

Apéndice E

Formato del Archivo de Salida

Para la Salida de resultados se recomienda los archivos **.vtk*, ya que son mas universales en términos de visualización.

E.1 Archivos VTK: *.vts*, *.pvts*, *.vtu*, y *.pvtu*

Estos archivos son impresos por el pulgín Underworld_VTKoutput. Los **.vst* y **.pvts* contienen información acerca de las cantidades que son relativas a la malla, en cambio los **.vtu* y **.pvtu* contienen al información relativa al enjambre de partículas del modelo.

En general estos archivos con bien reconocidos por varios visualizadores especializados como Paraview (Recomendado y usado en este trabajo) y MayaVi. Visit puede leer solo los **.vts* y **.vtu*.

para usar estos archivos solo basta con adicionar el plugin UnderworldVTKOutput, descrito en la sección anterior y en la Referencia [16].

Dependiendo de la resolución del modelo y del número de partículas, vizualizar los archivos **.vtu* y **.pvtu* requiere de procesamiento para la visualización y una buena tarjeta aceleradora de gráficos.

E.2 *.dat* Archivos ASCII

Los archivos *.dat* son ideales para trabajar con los datos y hacer cálculos adicionales, en cada archivo **.dat* se encuentra un variable asociada a la malla, por ejemplo para un archivo llamado Pressurefield.00001.dat se tendría

```
1 0.093718938361 0.01086189374 0 17.733201951569
2 0.156266350344 0.01043031399 0 37.01780188199
3 0.218747570009 0.01076815161 0 45.623762140766
4 0.281218838265 0.01087088561 0 65.22484518426
```

Donde el primer número corresponde a el nodo de la malla lagrangiana, los siguientes tres a sus coordenadas *x*, *y* y *z* y por último el valor de la presión.

A continuación se da la lista de variables que se maneja en el código.

Escalar Valor

Vector 2D: $x\ y$, 3D: $x\ y\ z$.

Tensor 2D: $xx\ xy, yx\ yy$, 3D: $xx\ xy\ xz, yx\ yy\ yz, zx\ zy\ zz$.

Tensor Simétrico 2D: $xx\ yy\ xy$, 3D: $xx\ yy\ zz\ xy\ xz\ yz$.

Tensor Antisimétrico 2D: $xx\ xy, yx\ yy$, 3D: $xx\ xy\ xz, yx\ yy\ yz, zx\ zy\ zz$. (Donde la diagonal principal es cero)

Escalar Presión

Vector Velocidad

Tensor Gradiente de velocidad

Tensor Simétrico Tasa de deformación, Esfuerzo

Tensor Antisimétrico Vorticidad

Un completa descripción se da en el Manual de Usuario de Gale 1.4.1 (Referencia [16]).

Apéndice F

Archivos de Soporte

F.1 Software CAD - Archivos DXF

El diseño asistido por computador, más conocido por sus siglas en inglés CAD (computer-aided design), es el uso de un amplio rango de herramientas computacionales que asisten al usuario en el diseño de estructuras, piezas, volúmenes, etc. Estas herramientas se pueden dividir básicamente en programas de dibujo en 2D y modeladores en 3D. Las herramientas de dibujo en 2D se basan en entidades geométricas vectoriales como puntos, líneas, arcos y polígonos, con las que se puede operar a través de una interfaz gráfica. Los modeladores en 3D añaden superficies y sólidos (Fig. F.1).

El usuario puede asociar a cada entidad una serie de propiedades como color, capa, estilo de línea, nombre, definición geométrica, etc., que permiten manejar la información de forma lógica. De esta manera se puede obtener una documentación técnica específica del modelo desarrollado además de poder visualizarlo en tiempo real.

En 1982 apareció el formato de texto ASCII denominado DXF (acrónimo de Drawing Exchange Format) que permite almacenar datos de tipo vectorial para aplicaciones CAD. Este formato apareció junto con la primera versión del programa AutoCAD; sin embargo con el transcurso del tiempo, este formato se ha convertido en un formato de carácter universal, compatible con una gran cantidad de software, entre ellos:

Software privativo:

- Adobe Illustrator.
- AutoCAD.
- Corel Draw.
- Maple 12.
- Mathematica.
- Microsoft Word.
- Microsoft Visio.
- Paint Shop Pro.

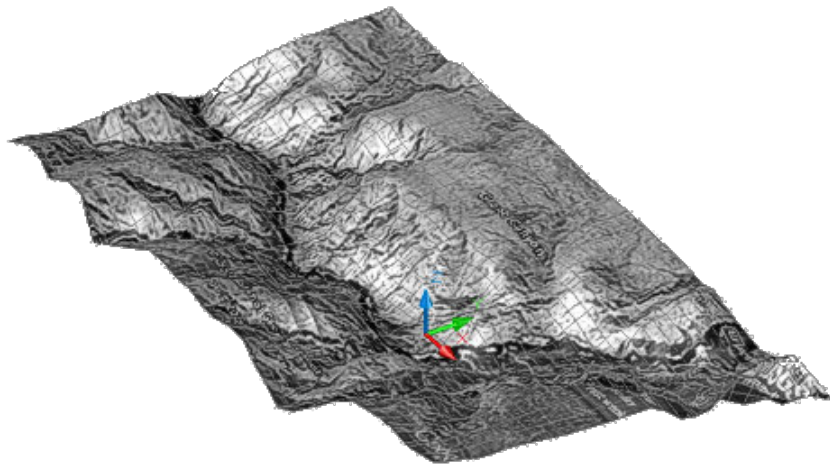


Figura F.1: Modelo diseñado a través de software CAD. Referencia *Revisiones web*.

- SolidWORKS.

Software libre:

- QCad.
- Inkscape.

La etiquetación de datos permite representar la información vectorial en un archivo de texto plano, el etiquetado de datos significa que cada elemento del conjunto de datos en el archivo es precedido de un número entero que se denomina código de grupo. Este valor indica también el significado del dato para un objeto determinado. El uso de estos códigos permite organizar el archivo general en secciones dentro de las cuales cada código de grupo y el valor del elemento se encuentran cada uno en una única línea.

Cada sección comienza con un código de grupo “0” seguido de la cadena “SECCION”. A continuación el código de grupo “2” y una cadena que indica el nombre de la sección (por ejemplo “HEADERS”). Dentro de la sección se asignan códigos de grupo representativos y los valores que definen a sus elementos. Una sección termina con un “0” seguido de la cadena “ENDSEC”.

El archivo DXF lo componen 5 secciones en las cuales se deposita toda la información que el usuario especifica en su diseño, estas secciones son:

- **HEADERS (Encabezado):** Contiene información general sobre el dibujo. Se compone de la versión de la base de datos y una versión de las variables del sistema.
- **CLASSES:** Contiene la información relacionada con las clases definidas por la aplicación cuyas instancias aparecerán en las secciones BLOCKS, ENTITIES y OBJECTS de la base de datos. La definición de una clase permanecerá dentro de la jerarquía.
- **TABLES:** Esta sección contiene varias tablas cada una de las cuales puede contener un número variable de entradas, algunas de las más importantes son:
 - APPID (tabla de identificación de la aplicación)

- BLOCK_RECORD (tabla de referencia de los bloques)
 - DIMSTYLE (tabla de estilo de las dimensiones)
 - LAYER (tabla de las capas contenidas)
 - LTYPE (tabla del tipo de línea usado)
 - STYLE (tabla del estilo de texto utilizado)
 - UCS (tabla del sistema coordinado empleado)
 - VIEW (tabla relacionada con la vista)
 - VPORT (tabla de configuración de visualización)
- **BLOCKS:** Contiene la definición de los bloques y las entidades del dibujo que conforman cada referencia a bloque en el mismo.
 - **ENTITIES:** Contiene los objetos gráficos (entidades) en el dibujo, incluidas las referencias de bloque (entidades de inserción).
 - **OBJECTS:** Contiene los objetos no gráficos del dibujo. Todos los objetos que no son entidades o registros o de tablas de símbolos, se almacenan en esta sección. Ejemplos de entradas en la sección son los diccionarios.
 - **THUMBNAILIMAGE:** Contiene los datos de previsualización de la imagen para la del dibujo.

Una información detallada sobre las distintos códigos de grupo empleados se puede encontrar en paginas de internet¹. En este trabajo únicamente se emplearon dos secciones, la tabla LAYERS y la sección ENTITIES y los modelos se crearon en el programa QCAD.

F.2 Applet Java

Java es un lenguaje de programación orientado a objetos desarrollado por Sun Microsystems a principios de los años 90. Java esta distribución bajo licencia GNU GPL; el lenguaje en sí mismo toma mucha de su sintaxis de C y C++ pero tiene un modelo de objetos más simple y elimina herramientas de bajo nivel. Su sintaxis se deriva en gran medida de C++ sin embargo Java fue construido para ser completamente orientado a objetos; todo en Java es un objeto (salvo algunas excepciones), y todo en Java reside en alguna clase (una clase es un molde a partir del cual pueden crearse varios objetos).

La clase utilizada en este trabajo se denomina Applet, esta clase posee una interfaz gráfica que realiza una función específica en el entorno de otro programa, en este caso un navegador web. Los applets de Java proporcionan funciones interactivas en el navegador mediante la Máquina Virtual de Java (JVM). Esta clase esta compuesta de varios métodos dentro de los cuales se escriben las instrucciones que se requieren ser ejecutadas; la visualización de los archivos se realiza a través de un visualizador de applets de java. El flujo de trabajo para la construcción de los applets se indica en la figura F.3.

¹<http://www.autodesk.com/techpubs/autocad/acad2000/dxf/index.htm>

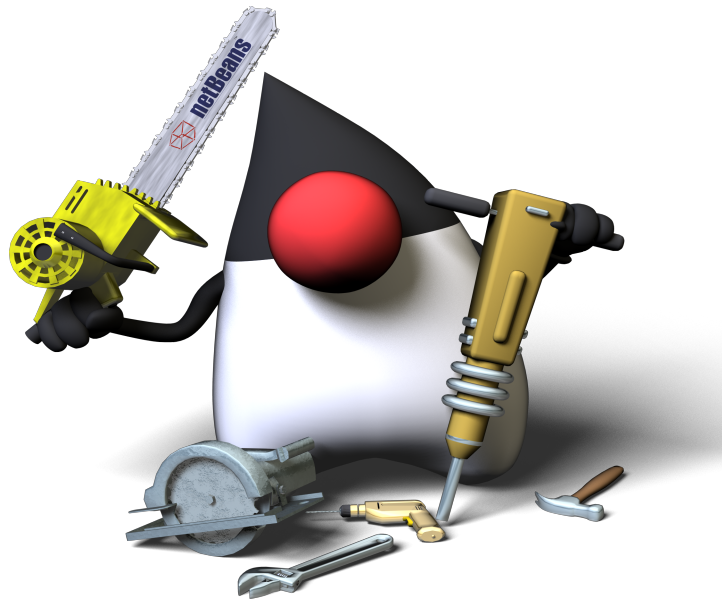


Figura F.2: Duke la mascota de Java. Referencia *Revisiones web*.

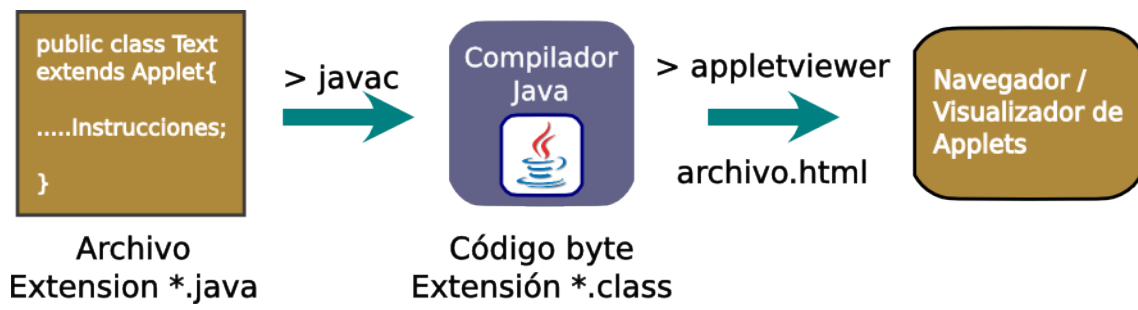


Figura F.3: Ejecución de un applet. Referencia *Autor*.

Apéndice G

Licencia GNU

GNU *General Public License* Version 2, Junio 1991. A Cada quién es permitido la copia y distribución literal de este documento¹, pero no es permitido modificarlo.

Las licencias para la mayoría de software son diseñadas para no permitir la libre copia y distribución. En contraste la GNU *General Public License* tiene la intención de garantizar la copia y distribución de software, asegurando que el software es libre a todos los usuarios. Esta licencia GNU aplica para la mayoría de software de fundaciones de software libre, y otros programas los cuales sus autores la usan, y es aplicable por el lector de esta también.

cuando hablamos de software libre, aquí se esta refiriendo a la libertad, más no el precio del mismo. La GNU esta diseñada para asegurar la libertad de copiar y distribuir software (como también cambiarlo para el servicio de quién lo desee), que se reciba y esté bajo esta licencia, usted puede tomarlo y modificarlo cambiar piezas del código fuente o usarlas en sus nuevos programas reconociendo los derechos del autor que los ha creado.

Para proteger los derechos de autor, se hacen las siguientes restricciones que privan a cualquiera de negar estos derechos o de pedir una renuncia a ellos. Estas restricciones trasladan ciertas responsabilidades a usted si modifica o distribuye software bajo una licencia GNU.

Por ejemplo si usted distribuye copias de tal programa gratis o para un pago u honorario, usted debe dar los derechos de todos los beneficiarios que de tal programa. Usted debe estar seguro de que ellos también tiene acceso al código. Usted debe mostrarles los términos y que ellos conozcan sus derechos.

La licencia protege sus derechos con dos pasos:

1. Proteger los derechos autor del software.
2. Ofrecer un permiso legal de copiar, distribuir y modificar el software.

También para la protección de cada autor, la licencia asegura que cualquiera entienda que no hay garantía para este software. Si el software es modificado o pasado, los usuarios deben saber que no es el original y que cualquier problema introducido por otro autor no se reflejará en las reputaciones de los autores originales.

¹Extraído del Apéndice D, de la Referencia [16]. Traducida al Español por los Autores. (NOTA: Esta es una traducción no oficial y su intención es informar al lector en español sobre los terminos de uso de las modificaciones hechas en este trabajo a GALE. La version oficial de la licencia se da en la web: licencia GNU <http://macgpg.sourceforge.net/gpl.html>).



Figura G.1: Richard Matthew Stallman y sus amigos. Referencia *Revisiones web*.

Finalmente, cualquier programa libre es tratado constantemente por patentes de software. Para evitar el peligro de que cualquier distribuidor se haga propietario de un programa. Para prevenir esto, se hace claro que cualquier patente debe ser licenciada por su autor.

Los términos y condiciones para copiado, distribución y modificación son dados en licencia GNU <http://macgpg.sourceforge.net/gpl.html>.

Richard Matthew Stallman

(nacido en Manhattan, Nueva York, 16 de marzo de 1953), con frecuencia abreviado como "rms", es un programador estadounidense y figura relevante del movimiento por el software libre en el mundo.

Entre sus logros notables como programador incluyen la participación en el editor de texto GNU Emacs, el compilador GCC, y el depurador GDB, bajo la rúbrica del Proyecto GNU. Sin embargo, es principalmente conocido por el establecimiento de un marco de referencia moral, político y legal para el movimiento del software libre, como una alternativa al desarrollo y distribución del software no libre o privativo. Es también inventor del concepto de copyleft (aunque no del término), un método para licenciar software de tal forma que su uso y modificación permanezcan siempre libres y queden en la comunidad.