

# De la nano geomecánica

*Referencia. Modelaje. Dinámica molecular.*

## Referencia

Esta presentación está tomada de: *Micro-Geomechanics Across Multiple strain Scales. An International Workshop*. Cambridge, England. Cambridge University. March 20-23, 2005.

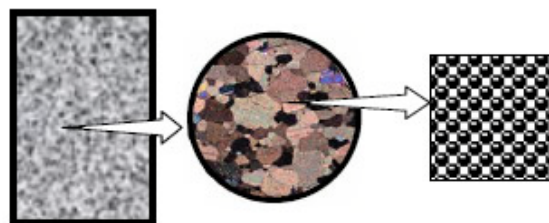
El campo de análisis de la ingeniería geotecnia está basado en teoría de mecánica de suelos referida a un medio continuo. Recientes avances experimentales y numéricos en el campo de la micro-geomecánica complementa y tal vez reemplace en casos la teoría tradicional, y conduzca a una mejor comprensión del comportamiento del material y para el análisis y diseño de sistemas complejos. El taller da la oportunidad de intercambiar información e identificar una estrategia para el futuro de este campo.

Entre las presentaciones se encuentra la siguiente.

Marte S. Gutiérrez. *Nano-geomechanics. Potential Applications of Nano-mechanics in Geotechnical Engineering*. Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental, Virginia Polytechnic Institute and State University.

## Modelaje

Se trata de atraer la atención de los ingenieros geotécnicos sobre el potencial de la nano-mecánica en caracterizar y modelar geo-materiales en un rango amplio de escalas. La nano-mecánica tiene altas posibilidades de explicar: el creep, la fricción, velocidad, dependencia de temperatura, condiciones ambientales extremas (involucrando grandes esfuerzos, altas temperaturas, creep muy alto o cargas muy rápidas) así como la influencia del agua en el comportamiento de geomateriales. Permite mostrar mejor el comportamiento de rocas y suelos.



**MACRO, MICRO Y NANO COMPONENTES  
EN ROCAS**

El modelaje en rocas implica reconocer sus macro, micro y nano componentes. En la nano-escala se trabaja un ensamble de granos individuales y de contacto entre ellos. El nivel microscópico puede conseguirse por análisis de imágenes digitales de microestructuras. El modelo macroscópico es implementado como un modelo constitutivo.

## Dinámica molecular

Es la aproximación de la mecánica clásica para encontrar configuraciones estables para partículas (átomos y moléculas). La *adherencia interna virtual* (VID) conduce a la homogenización continua de modelos de dinámica molecular.

El movimiento de partículas (átomos y moléculas) obedece a las leyes de la mecánica clásica a través de la *función potencial interatómica*,  $U$ .

El movimiento de un sistema de partículas está dado por la ley de Newton:

$$\vec{F}_i = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2}$$

Donde:  $\vec{r}_i$  es la posición de la partícula  $i$ ,  $m_i$  es la masa de la partícula  $i$ ,  $\vec{F}_i$  es la fuerza actuando en una partícula calculada a través de la gradiente de la *función potencial interatómica*,  $U_{ij}$ .

$$\vec{F}_i = \sum_{j (i \neq j)} \vec{F}_{ij} \quad \vec{F}_{ij} = -\nabla U_{ij}$$

Existen varias expresiones para el potencial  $U$ , descomponiendo la parte de atracción de la parte de repulsión de partículas.

### Potencial de atracción

De la ley de Hooke:  $f(x) = k(x - x_{eq})$

Donde  $x_{eq}$  es la posición de equilibrio. Se generaliza a:

$$U(x) = \frac{k}{2}(x - x_{eq})^2 + U_{min}$$

$U_{min}$ : energía potencial mínima.

### Herramientas en dinámica molecular

Relación básica:  $m\ddot{x} = f(x)$

Condiciones iniciales:  $x(0) = x^{(0)} \quad \dot{x}(0) = \dot{x}^{(0)}$

Método de Euler:

$$\begin{aligned} u &= \dot{x} \\ x(t + \Delta t) &= x(t) + u(t)\Delta t \\ u(t + \Delta t) &\sim x(t) + \frac{1}{m}f(x(t))\Delta t \end{aligned}$$