Boletín Técnico de la Asociación Mexicana de Geofísicos de Exploración, A.C.

VOLUMEN 48 NÚMERO 4 OCTUBRE-DICIEMBRE, 2008

ASOCIACIÓN MEXICANA DE GEOFÍSICOS DE EXPLORACIÓN, A.C.

(MIEMBRO DE LA FACCTIEM, SEG, UMAI y ULG)

CONSEJO DIRECTIVO
2007-2009

M. en I. EFRAÍN MÉNDEZ HERNÁNDEZ
Presidente

Ing. JULIO PÉREZ ALDANA
Vicepresidente

M. en I. RICARDO VÁZQUEZ ROMERO
Secretario

Ing. JOSÉ ALBERTO SANTANA FERNÁNDEZ
Prosecretario

Ing. EVERARDO CASTRO MEDELLÍN
Tesorero

Ing. ADOLFO HUIDOBRO GONZÁLEZ
Protesorero

Dr. RAÚL DEL VALLE GARCÍA
Dr. RAÚL CABRERA GARCÍA
Dr. RAFAEL AVILA-CARRERA
M. en C. JORGE ESTRADA GALICIA
M. en I. ROBERTO FIGUEROA ABARCA
Comité Editorial

Ing. HUMBERTO SALAZAR SOTO
Coordinación de Eventos Técnicos

Biol. JULIETA MARTÍNEZ GARCÍA
Coordinación de Eventos Sociales

Ing. EDUARDO RAMÍREZ RESÉNDIZ
Ing. JOSÉ RODOLFO ROCHA RUIZ
Coordinación de Membresía

Ing. JAVIER NÚÑEZ ARIZA
Coordinador del Exterior

Ing. JAIME GUERRA ORTIZ
Coordinador de Jubilados

M. en I. RICARDO VÁZQUEZ ROMERO
Coordinador de la Gaceta

Ing. FRANCISCO MURGUÍA SANDRIA
Coordinador de Apoyo Informático y Difusión

CONSEJO DE HONOR Y JUSTICIA

Ing. CÉSAR NAVARRO TAFOLLA
Ing. JORGE R. VERA SÁNCHEZ
Ing. ARTURO PÉREZ ALDANA

PRESIDENTES DELEGACIONALES

Ing. MARCO A. GHENO JUÁREZ
Cd. del Carmen, Camp.

Dr. RAÚL DEL VALLE GARCÍA
Cd. de México

Ing. JOSÉ GPE. GONZÁLEZ ZÚÑIGA
Coatzacoalcos, Ver.

Dr. RUBÉN DARÍO MARTÍNEZ
Houston, Tx.

Ing. JESÚS ARREDONDO FRAGOSO
Morelia, Mich.

Ing. FRANCISCO J. MURGUÍA SANDRIA
Poza Rica, Ver.

Ing. CLAUDIO NIETO GARCÍA
Reynosa, Tamps.

Ing. EDUARDO MACÍAS ZAMORA
Tampico, Tamps.

Ing. NOÉ LOYO HERNÁNDEZ
Veracruz, Ver.

Ing. GERARDO CLEMENTE MARTÍNEZ
Villahermosa, Tab.

VOCALÍAS

Dr. OSCAR CAMPOS HENRÍQUEZ
Instituto de Geofísica

M. en I. HERMES AGUIRRE VARGAS
U. Latinoamericana de Geofísica

Ing. FRANCISCO RUBÉN ROCHA
IPN

Ing. EDUARDO AMADOR TERRAZAS
UNAM

Ing. JUAN PASILLAS RAMÍREZ
Instituto Tecnológico de Madero

Dr. JUAN GARCÍA ABSDELEM
CICESE

Dr. COSME POLA ZIMUTA
UANL (Campus Linares)

JALAPA 92 (planta baja), DEPTO. 1, COL. ROMA, DELEG. CUAUHTÉMOC, 06700 MÉXICO, D.F., TEL.: 5514-2530
e-mail: emendezh@pep.pemex.com • e-mail: rvalleg@imp.mx

ASOCIACIÓN MEXICANA DE GEOFÍSICOS DE EXPLORACIÓN, A.C.
(MIEMBRO DE LA FACCTIEM, SEG, UMAI y ULG)

MENSAJE DEL EDITOR

Estimados Colegas:

El cráter de impacto de Chicxulub, en la Península de Yucatán, es sin duda una de las áreas actuales de estudio más activas por la comunidad geofísica, tanto nacional como internacional, por representar un gran valor científico. Eduardo Salguero y asociados presentan un estudio muy interesante utilizando datos sísmicos 2D y su correspondiente análisis a partir de la traza compleja de los datos. Es decir, a partir de los atributos analíticos o instantáneos (envolvente, fase y frecuencia) y del atributo geométrico conocido como ''similaridad'' o similitud ('análogo al atributo de coherencia'). El propósito fue investigar la estructura del cráter, su estratigrafía y caracterización litológica. El análisis permitió identificar, por ejemplo, el relleno del cráter (material Terciario) y distinguirlo de la roca de impacto. Se identificó también el piso del cráter, compuesto aparentemente de brecha rica en cuarzo, tipo suevita (roca parcialmente fundida). Se comenta además que fue difícil distinguir entre la roca fundida, el carbonato (Cretácico) y el basamento dentro del cráter transitorio. Los resultados permiten regularmente inferir la estructura del cráter compuesta de material del Terciario, brecha, Cretácico, roca de fusión, anillos, acuñamientos y terrazas. Se sugiere que un ulterior trabajo incluya análisis de atenuación espectral y utilizar redes neuronales para mejorar la interpretación geológica de este importante cráter de impacto.

El siguiente artículo trata sobre el Modelado de Física de Rocas por Raúl del Valle. El trabajo establece y proporciona los elementos teóricos y prácticos para la simulación numérica de algunos fenómenos de física de rocas, tanto estática como dinámicamente. Se utilizaron modelos discretos de partícula que representa mejor un modelo discreto. Además, esto permite representar medios con aspectos no lineales y no locales, como es el caso de una roca con presencia de poros y fracturas. Esto significa que se pueden simular fenómenos de dinámica de fracturas y propagación de ondas en medios desordenados con alta precisión. Se proporciona en gran detalle los aspectos teóricos y numéricos de los modelos de retícula. Finalmente se exponen varios ejemplos de aplicación práctica como es el fracturamiento hidráulico y su respuesta sísmica, así como la propagación de ondas elásticas en medios desordenados (rocas porosas).

Reciban un cordial saludo.

Dr. Raúl del Valle García
Editor

rvalleg@imp.mx

Boletín Técnico
de la Asociación Mexicana de
Geofísicos de Exploración, A.C.

VOLUMEN 48 NÚMERO 4 OCTUBRE-DICIEMBRE, 2008

Contenido

ANÁLISIS DE TRAZA COMPLEJA EN DATOS SÍSMICOS MARINOS 2D: IMÁGENES Y RESULTADOS PRELIMINARES DEL CRÁTER DE CHICXULUB, YUCATÁN, MEXICO 1

EDUARDO SALGUERO HERNÁNDEZ. JAIME URRUTIA FUCUGAUCHI y ANA MARIO SOLER-ARECHALDE

MODELADO DISCRETO DE PARTÍCULAS PARA SIMULAR FÍSICA DE ROCAS 17

RAÚL DEL VALLE GARCÍA

Análisis de Traza Compleja en Datos Sísmicos Marinos 2D: Imágenes y Resultados Preliminares del Cráter de Chicxulub, Yucatán, México

Eduardo Salguero Hernández[1], Jaime Urrutia Fucugauchi[2] y Ana Mario Soler-Arechalde[2]

RESUMEN

En las últimas 2 décadas, el cráter de impacto de Chicxulub ha sido estudiada con un amplio arreglo de técnicas geofísicas, recuperación continua de núcleos con perforación de pozo y campañas de adquisición sísmica marina con alta resolución, con el propósito de investigar la estructura del cráter, su estratigrafía y caracterización litológica de impacto. En nuestro estudio usamos por primera vez los atributos sísmicos para un mayor análisis de los datos sísmicos marinos de Chicxulub. Los atributos sísmicos son una herramienta poderosa para realzar la información; calculando la traza compleja y caracterizando su información geofísica. Los atributos sísmicos instantáneos Amplitud Envolvente, Frecuencia, Fase y Similaridad son útiles en la correlación de eventos sísmicos aunque una interpretación precisa sería difícil si no hay información calibrada. Los 4 atributos sísmicos convencionales fueron calculados en 2 líneas sísmicas 2D Chicx-A0 y Chicx-A1, las cuales son colineales y corren a través del cráter en la dirección oeste-este. En este artículo se presentan los primeros resultados al aplicar esta tecnología que, sin duda, puede ser fuertemente complementada con un correcto acondicionamiento de datos, el adiestramiento de una red neuronal o incluso un análisis de atenuación espectral.

Los atributos sísmicos fueron consistentes al mostrar las características principales: (1) carbonatos del Terciario, estratificaciones, bloques desplazados del Cretácico y bloques de Basamento (debajo de las terrazas) son identificadas como zonas de valor alto para el atributo de Similaridad; (2) el contacto entre la brecha de impacto y los carbonatos del Terciario al interior de la cuenca presenta una anomalía continua de alta energía con frecuencias más altas que los reflectores del Terciario o roca de fusión; (3) la mayoría del cráter transitorio muestra una gran zona de frecuencias mayores comparadas con el exterior en el mismo doble tiempo de viaje; (4) las zonas de fracturamiento en los bloques desplazados son observados como zonas de baja energía y baja frecuencia; (5) las brechas que están fuera de la cuenca presentan una peculiar señal sísmica en el atributo

[1] Instituto Mexicano del Petróleo.
[2] Instituto de Geofísica.

de Fase, contrastante con las señales del Terciario y Cretácico; y (6) el atributo de Fase permite el reconocimiento de la continuidad lateral en muchos reflectores del Terciario y Cretácico.

Se identificó mayor deformación del lado oeste que esté a lo largo de la secuencia Mesozoica. Aunque al interior del cráter transitorio existe un arreglo complejo de unidades con diferentes litologías, los atributos proveen imágenes sísmicas de las principales unidades permitiendo la diferenciación de unidades y contacto de unidades desde la superficie hasta debajo de las terrazas. De este modo, el uso y estudio de los atributos sísmicos podrían ser una opción real para la obtención de un modelo de distribución litológica de impacto al interior del cráter transitorio donde la presencia de grandes volúmenes de roca fundida no permite la presencia de eventos reflectivos que delineen una arquitectura más clara.

INTRODUCCIÓN

La mayoría de los cuerpos que golpean la Tierra son desintegrados por fricción mientras atraviesan la atmósfera. Si el cuerpo o al menos su energía cinética logra interactuar con la superficie terrestre entonces queda el vestigio de su llegada: un cráter de impacto. Casi todos los cráteres son erosionados, enterrados por sedimentos o deformados por tectonismo. Se han descubierto muy pocos cráteres de un diámetro superior a 150 km, por ejemplo: Vredefort, Sudbury y Chicxulub. El último es objeto de estudio de este trabajo de investigación. El Cráter de Chicxulub está clasificado como una cuenca multi-anillo de un diámetro aproximado de 180 km (Morgan *et al.*, 2002) cubierto por una secuencia carbonatada de 1 km de profundidad, con la ventaja de que no ha sido erosionado o deformado (Pilkington *et al.*, 1994). El centro de impacto se encuentra en el Puerto de Chicxulub, situado en la parte noroeste de Yucatán, México. Esta zona ha sido estudiada con una amplia tecnología desde 1940 con mediciones gravimétricas realizadas en campañas de exploración por la compañía mexicana petrolera, PEMEX, hasta la adquisición de líneas sísmicas marinas, en 2005, con el patrocinio de NSF (Nacional Science Foundation) y NERC (Natural Environment Research Council), en trabajo conjunto con la Universidad de Austin, USA, la Universidad de Cambridge, UK y la UNAM, México (Morgan *et al.*, 2005).

En 1996, ‘‘British Institution Reflection Profiling Syndicate’’ (BIRPS) adquirió 4 perfiles sísmicos marinos, al norte de la Península de Yucatán, con una longitud total de 647 km. Dos líneas son oblícuas al radio del cráter pero colineales (Chicx-A0 y Chicx-A1) y otras 2 tienen dirección radial (Chicx-B y Chicx-C). Esta información permitió visualizar, por primera vez, la estructura y dimensiones de la cuenca y sus múltiples anillos, terrazas y las secuencias carbonatadas del Terciario y Cretácico junto con la brecha en flancos. La información sísmica se adquirió y acondicionó, con el objeto de hacer estudios estructurales. Los datos procesados son de baja resolución y no permiten una interpretación litológica en la zona central del impacto. Diferentes investigadores desarrollaron modelos de velocidad, densidad, magnéticos y gravimétricos. Sin embargo, hasta el momento no se ha logrado determinar la distribución de la roca ígnea de fusión por impacto (término definido por Lounejeva, 2001). En inglés, *melt*. Adelante lo llamaremos ‘‘roca de fusión’’, brechas, bloques carbonatados y la geometría del levantamiento central. En nuestra investigación se usó la tecnología de atributos sísmicos: Fase Instantánea, Amplitud Envolvente Instantánea, Frecuencia Instantánea y Similaridad Instantánea, en

las líneas Chicx-A0 y Chicx-A1. Estos atributos convencionales son aplicados en el medio de la exploración, ya que describen el carácter de la onda, es decir, nos permite conocer la energía, fase y frecuencia dominante de la señal en cada instante. Cualquier estudio geofísico llega a ser robusto al ser complementado con el análisis de multi-atributos sísmicos o de traza compleja (Taner *et al.*, 1979, 1995). El atributo de Envolvente de Amplitud es un buen indicador de zonas con cambios de impedancia, el atributo de Fase es un correlator natural de eventos, el atributo de Frecuencia muestra la respuesta espectral de la roca (inclusive, es un buen indicador de zonas con fallamiento y fracturamiento) y el atributo de Similaridad identifica ambientes de depósito similares, de este modo se pueden reconocer unidades litológicas semejantes. La caracterización geofísica debida a los atributos sísmicos es posible por el análisis de traza compleja. En este análisis, la traza sísmica e imaginaria son proyecciones de la traza compleja, ésta es una función del espacio complejo y, por ende, una señal que contiene toda la información de la onda sísmica que ha sido perturbada cuando atraviesa un medio geológico heterogéneo.

En este contexto, los atributos sísmicos llegan a ser un instrumento para ser aplicado en los datos sísmicos de Chicxulub, principalmente, porque la litología en la parte central del cráter no ha sido delimitada; los datos de velocidad, densidad, gravedad y magnéticos no logran distinguir entre una zona rica en roca de fusión y otra rica en brecha alogénica o basamento rico en cuarzo o roca calcárea (fragmentada), debido a que los valores de impedancia (el producto de la densidad y velocidad, Vp) son similares en todo el cráter transitorio y partes externas. Además, toda la roca que construye al cráter transitorio y sus flancos está fracturada y fragmentada por alto grado de fallamiento, debido al metamorfismo de choque (Brittan *et al.*, 1999 and Morgan *et al.*, 2002) y el enfriamiento súbito de la roca de fusión por el agua superficial (Lounejeva *et al.*, 2002).

En este trabajo, los atributos generaron imágenes a color de todo el cráter, la información conjunta de los atributos permitió visualizar algunas características principales de éste y prometen establecer patrones asociados a características geofísicas y/o geológicas (Taner *et al.*, 1979, 1995; Sheriff, 1991; and Brown, 1996) en un estudio con mayor detalle y en un futuro inmediato.

En este artículo se presentan resultados preliminares de los 4 atributos, con el propósito de mostrar la funcionalidad y potencialidad de esta tecnología en la investigación de la distribución litológica y estructural al interior del cráter transitorio de Chicxulub. Asimismo, sugerimos la pertinencia de considerar los atributos sísmicos para el estudio de la información adquirida en la campaña marina de 2005 (Morgan *et al.*, 2005).

ATRIBUTOS SÍSMICOS

Desde la mitad de la década de los 70´s, esta tecnología ha avanzado rápidamente en el cálculo de diferentes clases de atributos. Actualmente, los atributos sísmicos han adquirido un papel fundamental para la industria petrolera en distintas aplicaciones como: predicción, caracterización y monitoreo de los yacimientos de hidrocarburos.

Se han desarrollado cientos de atributos. Para hacer un uso eficiente de ellos se han propuesto diferentes categorías (Brown, 2001; Chen, 1997; and Taner, 1995). Por ejemplo: Taner clasificó los atributos de diferentes formas, una de ellas en 2 clases: los Atributos Geométricos y los Atributos Físicos (Taner, 2001). Brown clasificó los atributos de 2 maneras: Pre-apilado y Pos-apilado, proponiendo 4 categorías para los datos

Pos-apilados: Tiempo, Amplitud, Frecuencia y Atenuación (Brown, 2001). Los Atributos Pre-apilados son recomendados para estudios avanzados y que tienen como propósito características en detalle, pero no son recomendables para estudios iniciales porque requieren grandes cantidades de cálculo y tiempo de proceso. Los Atributos Pos-apilados son sugeridos para analizar grandes cantidades de datos en una investigación inicial, donde los datos pueden estar apilados y/o migrados, ésta es la característica principal de nuestros datos sísmicos (Chicx-A y Chicx-A1). Las 2 líneas están apiladas y migradas en tiempo con un tratamiento para disminuir el ruido y reverberaciones. La fase es mínima y con amplitud real recuperada. De este manera, nuestros datos tienen la calidad suficiente (lea Sección IV.2.2) para aplicar los atributos sísmicos y poder hacer un análisis interpretativo confiable de las características físicas y geológicas del Cráter de Chicxulub.

Los atributos sísmicos tienen su periodo inicial con el Análisis de Traza Compleja. Éste se ocupó para estudiar los datos de Chicxulub y tiene la premisa de considerar la onda sísmica, atravesando un medio geológico, como un fasor (vector rotatorio al eje del tiempo) en el espacio (3 dimensiones) con una variable compleja (Fig. a1) (ver Apéndice A). La función Amplitud, Fase y Frecuencia del fasor, respecto del tiempo, son los atributos instantáneos elementales y a partir de éllos se construyen muchos otros que se conocen actualmente (ver Apéndice A).

La Envolvente de Amplitud representa la energía de la onda sísmica que se transmite a través de diferentes medios geológicos. De esta manera, la amplitud aumenta o disminuye si atraviesa una interfase o un grupo de interfases con diferentes impedancias acústicas (dependiendo el ancho de banda de la onda). Por ejemplo, si la onda proviene de un medio de alta velocidad e ingresa a un medio de baja velocidad, entonces la amplitud tendrá un aumento respecto del medio anterior. En un escenario opuesto, si la onda proviene de un medio de baja velocidad y entra a un medio de alta velocidad, la amplitud disminuirá. Los fenómenos de difracción, dispersión y superposición influyen frecuentemente en los valores de la amplitud de onda. Una onda sísmica que se propaga en un banco de sal o en una zona fragmentada o con fallamiento se observa como una zona de baja energía sin reflectores brillantes.

El Atributo de Envolvente de Amplitud es calculado muestra por muestra, varía entre cero y el máximo valor de amplitud de la traza. Este es un atributo físico y puede ser usado como un discriminador efectivo para las siguientes características (Taner *et al.*, 1995):

- √ Contraste de impedancia acústica.
- √ Eventos brillantes.
- √ Posibles acumulaciones de gas.
- √ Límites de secuencias.
- √ Efectos de capas delgadas.
- √ Inconformidades.
- √ Cambios de litología.
- √ Cambios en ambientes de depósito.
- √ Cambios laterales que indican fallamiento
- √ Correlación espacial con porosidad y otras variaciones litológicas

El Atributo de Fase es independiente de la amplitud y enfatiza la continuidad de eventos, especialmente cuando el índice señal-ruido es alto. Es un valor asociado con un punto de la traza sísmica en el tiempo y, por lo tanto, es completamente diferente de la fase como una función de la frecuencia. La fase correspondiente a cada pico, valle, etc.,

de la traza real se le asigna un color, así que cualquier fase se puede identificar traza por traza (Taner *et al.*, 1979). Este atributo también es catalogado como un atributo físico y se puede usar como un discriminador para clasificaciones de formas geométricas (Taner *et al.*, 2001):

- √ Es indicador de continuidad lateral.
- √ Señala la componente de fase de la propagación.
- √ Puede ser usado para calcular la velocidad de fase.
- √ No tiene información de amplitud, por lo tanto, todos los eventos están representados.
- √ Muestra discontinuidades.
- √ Fallas.
- √ Angularidades.
- √ Eventos con diferentes actitudes de echado.
- √ Límites de secuencias.
- √ Visualización detallada de las configuraciones de estratificación.
- √ Utilizado en el cómputo de los atributos de frecuencia instantánea y aceleración.

El índice de cambio de fase (ángulo entre el fasor y el plano formado por el eje del tiempo y la traza sísmica (Fig. a1, Apéndice A)) respecto del tiempo, es el Atributo de Frecuencia. El índice es asociado con un punto en el tiempo (como el Atributo de Fase), Taner *et al.*, 1977. A pesar de que este atributo, en ocasiones, es inestable porque genera valores negativos o excedentes para el rango de frecuencias de la señal sísmica debido a que el fasor gira en contra sentido o su amplitud es muy pequeña (White, 1991). La mayoría de los eventos reflectivos, desplegados con este atributo, son el conjugado de reflexiones individuales provenientes de reflectores muy cercanos uno del otro y con contrastes de impedancia constantes. De este modo, los eventos reflectivos producen patrones de frecuencia que caracterizan o correlacionan los reflectores. El patrón de frecuencias puede cambiar, debido a que el carácter del conjugado de reflexiones cambia gradualmente con el grosor y la litología.

La frecuencia es un atributo físico que relaciona la propagación de la onda con el ambiente de depósito y puede ser (Taner *et al.*, 1995):

- √ Un correlator del carácter sísmico en dirección lateral.
- √ Un indicador de las orillas de capas delgadas con baja impedancia.
- √ Un indicador de hidrocarburo por medio de anomalías de baja frecuencia.
- √ Este efecto es algunas veces acentuado por la falta de consolidación, debido al contenido de aceite en poros.
- √ Indicador de zonas de fracturamiento, éstas pueden aparecer como zonas de baja frecuencia.
- √ Un indicador de zonas de reflexión caótica debido a difracciones.
- √ Indicador del grosor de la capa. Altas frecuencias pueden indicar interfases abruptas y estratificación delgada con esquistos. Bajas frecuencias pueden indicar estratificación delgada rica en arenas.
- √ Un indicador del cociente arenas-esquistos en un ambiente clástico.

Los atributos de *Similaridad* son una de las herramientas más importantes en el procesado y no proviene del Análisis de Traza Compleja. Esta herramienta está clasificada por M. Taner como un atributo geométrico. *Similaridad* es un buen indicador de la similitud de estratificación, así también como de su discontinuidad (Taner *et al.*, 1995). Este atributo es una medida de la energía coherente entre un número de trazas respecto la energía total en las trazas. Con una escala apropiada los coeficientes varían entre cero y uno. Las trazas completamente disímiles arrojan valores de cero y las trazas similares presentan valores cercanos a uno. Por lo tanto, esta herramienta cuantifica características que directamente ayudan en el reconocimiento de patrones de depósito y litología involucrada. Los valores cercanos a cero están representados con el color rojo, seguido por el color verde y finaliza con el azul obscuro, este último representando las trazas con mayor similaridad en su energía coherente (Taner *et al.*, 1995).

DATOS

Los datos sísmicos se adquieren y procesan de acuerdo con las características de la zona de estudio y el tipo de información que se desea obtener. Por ejemplo, si queremos hacer una interpretación estructural los datos pueden ser procesados con una ondícula mínima y aplicando una ganancia a la amplitud para resaltar las superficies estructurales. Sin embargo, si el propósito es medir propiedades de fluido, roca y estratigrafía se recomienda que los datos tengan fase cero, recuperación de la amplitud real y migración (Chambers *et al.*, 2002). Los datos Chicx-A y Chicx-A1 (Figs. 1 y 2) que se usaron en este trabajo de investigación son datos sísmicos 2D marinos apilados, migrados en tiempo, filtrados con fase mínima y recuperación de amplitud real (Snyder[1] *et al.*, 1999). A pesar de que no se cumple con todos los requisitos, nuestros datos pueden ser estudiados a través de los atributos con la certeza de un análisis interpretativo confiable.

Estas 2 líneas sísmicas marinas tienen una longitud promedio de 160 km colineales; forman un perfil oblícuo al cráter y son paralelas a la línea de costa yucateca 26 km al norte del Puerto de Chicxulub (Figs. 1 y 2).

Figura 1.- La figura representa una ventana geográfica de la parte norte de la Península de Yucatán. Las líneas gruesas son las 4 líneas sísmicas adquiridas por ICDP. Las 2 líneas segmentadas son perfiles sísmicos adquiridos por PEMEX en 1992. Los puntos negros muestran la posición de algunos pozos que hasta el momento se han perforado. El asterisco es el centro del Cráter de Chicxulub. El recuadro inferior enmarca la zona geográfica en un mapa de la republica mexicana (figura 1 modificada de Brittan et al., 1999).

Figura 2.- Línea sísmica A. Datos originales apilados y migrados. Las zonas de color blanco se han interpretado como difusas, Morgan et al. (1999). Parte izquierda de la imagen es dirección oeste y la parte derecha el este geográfico.

DISCUSIÓN

Sin conocer los modelos previos de Chicxulub, las imágenes de los atributos ilustran características importantes de la estructura de impacto (Figs. 2, 3, 4, 5 y 6). Por ejemplo, el Atributo de Similaridad enseña el relleno del cráter con color azul obscuro (Fig. 6). El atributo de fase muestra cómo se pierde la continuidad de los reflectores del Cretácico precisamente en la zona de impacto que fue casi por completo metamorfizada por las condiciones de presión y temperatura (Fig. 3).

Figura 3.- Atributo de fase instantánea para la línea A. Este atributo muestra de un mismo color (en fase) la continuidad de los eventos. Parte izquierda de la imagen es dirección oeste y la parte derecha el este geográfico.

Ahora bien, para poder interpretar mejor las anomalías de atributos es necesario calibrar con datos de pozos exploratorios. De acuerdo con los registros de pozo existen, por lo menos, 4 principales unidades litológicas: carbonatos del Terciario, brechas de impacto, roca fundida tipo Andesita y carbonatos del Cretácico. En dicho orden se encuentran en la columna litológica. Los pozos exploratorios Chicxulub 1 y Yucatán 6 se encuentran cercados por el primer anillo montañoso ~35 km respecto del centro de impacto, PA (Kring *et al.*, 2004). La secuencia litológica de dichos pozos presenta Carbonatos del Terciario, brecha rica en cuarzo (proveniente del basamento) y roca fundida rica en cuarzo (Hildebrand *et al.*, 1991). Mientras que los pozos perforados más allá de la orilla del cráter ~90 km como Yucatán 2 y Yucatán 5A revelan una secuencia formada por carbonatos del Terciario, brechas ricas en carbonato y roca calcárea del Cretácico (Rebolledo-Vieyra *et al.*, 2000). Con esta referencia litológica y las anomalías de los 4 atributos se puede identificar con relativa facilidad las 4 unidades litológicas antes mencionadas y presentar una distribución preliminar de la roca de impacto, pre y pos-impacto sobre un corte oblícuo al cráter.

TERCIARIO

Iniciaremos con la roca pos-impacto, roca carbonatada del Terciario, se puede identificar fácilmente por la continuidad de sus horizontes con el atributo de fase (Fig. 3), o bien, con un color azul obscuro (alta coherencia lateral) con el atributo de Similaridad (Fig. 6). El atributo de frecuencia es singular porque indica que los estratos más someros y poco consolidados responden con frecuencias bajas (rojo) mientras que en la parte más profunda la respuesta es con un mayor contenido espectral (amarillo y azul) (Fig, 5). El atributo de amplitud no presenta anomalías interesantes en el relleno del cráter (Fig. 4).

Figura 4.- Atributo instantáneo de envolvente de amplitud. El atributo es un buen indicador de contrastes de impedancia. Los horizontes azules señalan el límite K-T dentro de la cuenca y, posiblemente, la brecha tipo suevita. Parte izquierda de la imagen es dirección oeste y la parte derecha el este geográfico.

BRECHAS DE IMPACTO

Existen múltiples tipos de brechas y se distinguen de acuerdo con su composición, en este espacio sólo hablaremos de 2 principales: Brecha rica en carbonato (Brecha tipo Bunte) y brecha rica en cuarzo (Brecha tipo Suevita), Rebolledo-Vieyra *et al.*, 2000; and Ward *et al.*, 1995. La brecha rica en carbonato se encuentra regularmente en al exterior del cráter. Los 4 atributos la distinguen. El atributo de fase presenta una señal difusa que contrasta con la continuidad de los carbonatos de Terciario y Cretácico (Fig. 3). El atributo de amplitud presenta anomalías medias (blanco) en los flancos del cráter a un intervalo de tiempo entre 0.1 y 0.5 segundos (Fig. 4). La respuesta espectral está compuesta de frecuencias medias y altas (amarillo y azul) (Fig. 5). Por último, el atributo de similaridad responde con valores medios de color verde y se distingue de los carbonatos cima y base (Fig. 6).

Figura 5.- Atributo instantáneo de frecuencia en la línea A. El color rojo representa frecuencias bajas. La parte central tiene diferente respuesta espectral que las partes externas; en los flancos se identifican frecuencias menores (rojo) que el interior (azul). Parte izquierda de la imagen es dirección oeste y la parte derecha el este geográfico.

Figura 6.- Atributo instantáneo de similaridad en la línea A. El color azul representa alta similitud en el relleno del cráter: roca carbonatada del Terciario. Parte izquierda de la imagen es dirección oeste y la parte derecha el este geográfico.

La brecha rica en cuarzo se encuentra en la base de la cuenca de acuerdo con datos de pozo (Lounejeva, 2001; and Schuraytz *et al.*, 1994). El atributo de amplitud presenta un fuerte contrate litológico en un tiempo correspondiente al piso del cráter (Fig. 4). Por ello, es posible que esta brecha contraste con los carbonatos del Cretácico y la roca fundida tipo Andesita (Hildebrand *et al.*, 1991; and Christeson *et al.*, 1999). Este contraste también se manifiesta con el atributo de frecuencia que presenta valores medios (amarillo) (Fig. 5). Estas 2 anomalías son consistentes con registros en gravimetría y magnetrometría que ponen en duda una distribución volumétrica regular de esta brecha alrededor del primer anillo (Brittan *et al.*, 1999) (Figs. 4 y 5).

ROCA FUNDIDA TIPO ANDESITA

Esta roca es el resultado de la fundición del basamento rico en cuarzo ~ 30 km de profundidad (López-Ramos *et al.*, 1975). Situada debajo de una secuencia carbonatada Cretácica de aproximadamente 4 km de profundidad (Ewing *et al.*, 1960). Los 4 atributos señalan un contraste total en el cráter transitorio, CT, respecto del exterior. Por ejemplo, con el atributo de fase, la señal es difusa debajo del piso del cráter, la continuidad de los eventos del Cretácico se pierde (Fig. 3). El atributo de frecuencia muestra frecuencias medias y altas (amarillo y azul) en el interior del cráter transitorio respecto del exterior que predominantemente está iluminado con frecuencias medias y bajas (amarillo y rojo) (Fig. 5). En tanto, Similaridad responde ante la presencia de la roca fundida con valores medios (verde), así como la brecha que encuentra en los flancos y a tiempos más someros (Fig. 6), 0.1 y 0.5 segs.

CARBONATOS DEL CRETÁCICO

Esta secuencia es apreciable con facilidad en su geometría con el atributo de fase (Fig. 3). Inclusive se puede reconocer que la parte oeste cercana al cráter tuvo un acuñamiento, A (Fig. 3), no así en el otro flanco donde los reflectores son casi horizontales. En la zona de transición lateral entre la secuencia Cretácica y el cráter transitorio. Se puede apreciar la pérdida de reflectividad en tramos que puede estar asociado a la zona de fallamiento (~ 90km) provocada por el segundo anillo del cráter, anillo interior, A1. Los otros 3 atributos no responden con mucha efectividad ante la secuencia carbonatada, sólo ante la base de la misma que se ha reportado (Snyder[2] y Hobbs, 1999), está compuesto por la interestratificación de anhidritas y carbonatos (Figs. 4, 5 y 6), por ello es altamente reflectiva. Estos horizontes fueron desplazados como grandes bloques hacia el interior de la cuenca de roca fundida, cráter transitorio, durante la dinámica de craterismo (Morgan *et al.*, 2000). El arreglo final de estos bloques, que no fueron metamorfizados, tiene una forma escalonada denominada ''Terrazas'' (Collins *et al.*, 2008), Te (Figs. 3, 4, 5 y 6). En las imágenes de atributos las terrazas se curvearon cuando se aumentó la escala para reducir las imágenes y se alcanzara apreciar el cráter completo.

CONCLUSIONES

Contrastar preliminarmente la información de los 4 atributos permitió distinguir las siguientes características en el cráter:

1.- El atributo de Similaridad permitió identificar en forma inmediata el relleno del cráter (Terciario) y distinguirlo de la roca de impacto.
2.- El piso del cráter se logró identificar con el atributo de amplitud y, posiblemente está compuesto de brecha rica en cuarzo, tipo Suevita.
3.- El volumen de brecha tipo Suevita no se distribuye con regularidad entorno al centro de impacto.
4.- La secuencia Cretácica presenta un gran acuñamiento en el flanco oeste, debido a las fallas de los anillos. En comparación con la parte este los horizontes sólo fueron altamente fracturados.
5.- Dentro del cráter transitorio, la roca fundida, basamento y carbonato tienen la impedancia acústica de orden similar y es complicado distinguir dichas litologías. A pesar de esto, la presencia de la roca fundida se pudo reconocer entre las Terrazas en intervalo de tiempo entre 1.5 y 3.5 seg. Inclusive la roca se encuentra en un tiempo mayor.
6.- El levantamiento central dentro del cráter transitorio no se logra visualizar con los atributos. Es probable que las líneas no toquen dicha estructura y, en consecuencia, esté un poco al sur.
7.- La aplicación de atributos sísmicos es una herramienta confiable para identificar unidades y contacto entre unidades litológicas de impacto en el cráter transitorio aunque exista poca reflectividad sísmica.

AGRADECIMIENTO

Especial agradecimiento al Instituto Mexicano del Petróleo por facilitarme su tecnología a través del Proyecto de Desarrollo D.00263 “Tecnologías Sísmicas para la Detección y Cuantificación de los Hidrocarburos en Yacimientos Clásticos de Baja Permeabilidad”.

REFERENCIAS

Brown, A.R. (1996). Interpretation of Three-Dimensional Seismic Data, Fourth Edition, *AAPG. Memoir*, vol. 42, p. 424.

Brown, A.R. (2001). Understanding Seismic Attributes, Geophysics, vol. 66, num. 1, pp. 47-48.

Brittan, J.; Morgan, J.; Warner, M. and Marin, L. (1999). Near-Surface Seismic Expression of the Chicxulub Impact Crater.

Chambers, R. L. and Yarus, J.M. (2002). Quantitative Use of Seismic Attributes for Reservoir Characterization, CSEG Recorder, pp. 14, 15, 17, 20, 21 y 25.

Chen, Q., and Sidney, S. (1997). Seismic Attribute Technology for Reservoir Forecasting and Monitoring, The Leading Edge, pp. 16, 05, 445, 447-448, 450, 453 and 456.

Christeson, G.L.; Buffler, R,T, and Nakamura, Y. (1999). Upper Crustal Structure of the Chicxulub Impact Crater from Wide-Angle Ocean Bottom Seismograph Data, Geological Society of America Special Paper 339, pp. 291-298.

Collins, G.S.; Morgan, J.; Barton, P.; Christeson, G.; Gulick, S.; Urrutia, J.; Warner, M. and Wunnemann, K. (2008). Dynamic Modeling Suggests Terrace Zone Asymmetry in the Chicxulub Crater is Caused by Target Heterogeneity, vol. 270, issues 3-4, pp. 221-230.

Ewing, J.; Antoine, J. and Ewing, M. (1960). Geophysical Measurements in the Western Caribbean Sea and in the Gulf of Mexico, Journal of Geophysical Research, vol. 65, pp. 4087-4126.

Hildebrand, A.R.; Penfield, G.T.; Kring, D.A.; Pilkington, M.; Camargo, Z.A.; Jacobsen, S.B. and Boynton, W.V. (1991). Chicxulub Crater: A Possible Cretaceous-Tertiary Boundary Impact Crater on the Yucatán Península, México, Geology, vol. 19, pp. 867-871.

Kring, D.; Hörz, F.; Zurcher, L., and Urrutia-Fucugauchi, J. (2004). Impact Lithologies and Their Emplacement in the Chicxulub Impact Crater: Initial Results from the Chicxulub Scientific Drilling Project, Yaxcopoil, México, Meteoritic and Planetary Science, vol. 39, num. 6, pp. 879-897.

Lopez-Ramos, E. (1975). Geological Summary of the Yucatán Península. In Nairm, A.E.M. y Stehli, V. (Eds.) The Ocean Basins and Margins, vol. 3: The Gulf of Mexico and the Caribbean, pp. 257-282. Plenum, New York.

Lounejeva Baturina Elena, Tesis Maestría en Ciencias de la Tierra, UNAM, Instituto de Geología, 2001.

Lounejeva, E.; Ostroumov, M., and Sánchez-Rubio, G. (2002). Micro-Raman and Optical Identification of Coesite in Suevite from Chicxulub, Geophysical Society of America, Special paper 356, pp. 47-54.

Lounejeva, E.; Ostroumov, M., and Sanchez-Rubio, G. (2000). Polimorfos de Alta Presión de Sílice en las Impactitas de Chicxulub, México: Resultados de Espectrometría Raman: *Revista Mexicana de Ciencias Geológicas*, vol. 17, num. 2, pp.138-142.

Morgan, J., and Warner, M. (1999). Morphology of the Chicxulub Impact: Peak-Ring Crater or Multi-Ring Basin, Geological Society of America Special Paper 339, pp. 281-290.

Morgan, J.; Warner, M.; Collins, G.S.; Melosh, J. and Christeson, G. (2000). Peak Ring Formation in Large Impact Craters: Geophysical Constraints from Chicxulub, Earth and Planetary Science Letters 183, pp. 347-354.

Morgan, J.; Christeson, G. and Zelt, C. (2002). Testing the Resolution of a 3D Velocity Tomogram Across the Chicxulub Crater. Tectonophysics, 355, pp. 215-226.

Morgan, J.; Warner, M.R.; Urrutia-Fucugauchi, J.; Gulick, S.; Christeson, G.L.; Barton, P.; Rebolledo-Vierya, M.; and Melosh, J. (2005). Chicxulub Crater Seismic Survey Prepares Way for Future Drilling. EOS Transactions, vol. 86. American Geophysical Union, pp. 325-328.

Pilkington, M.; Hildebrand, A.R. and Ortiz, C.A. (1994). Gravity and Magnetic Modeling and Structure of the Chicxulub Crater, México, J. Geophys. Res., pp. 99, 13, 147-13, 162.

Rebolledo-Vieyra, M.; Urrutia-Fucugauchi, J.; Marin, L.E.; Trejo-García, A.; Sharpton, V.L., and Soler-Arechalde, A.M., UNAM Scientific shallow-drilling Program of the Chicxulub Impact Crater, Geology Review, vol. 42, pp. 928-940.

Sheriff, R. E. and Geldart, L.P. (1991). Exploración Sismológica, vols. I y II: Procesamiento e Interpretación de Datos, Editorial Limusa.

Schuraytz, B.C.; Sharpton, V.L. and Marin, L.E. (1994). Petrology of Impact-Melt Rocks at the Chicxulub Multiring Basin, Yucatán, México, Geology, vol. 22, pp. 868-872.

Snyder[1], D.B. and Hobbs, R.W. (1999). Ringed Structural Zones with Deep Roots Formed by the Chicxulub Impact, Journal of Geophysical Research, v.ol 104, num. B5, pp. 10743-10755.

Snyder[2], D.B. and Hobbs, R.W. (1999). Deep Seismic Reflection Profiles Across the Chicxulub Crater, Geological Society of America Special Paper 339, pp. 263-268.

Taner, M.T., and Sheriff, R.E. (1977). Application of Amplitude, Frequency and Other Attributes to Stratigraphic and Hydrocarbon Determination: in Applications to Hydrocarbon Exploration, C.E. Payton, Ed., *AAPG Memoir* 26: Tulsa, Am. Assn. Petroleum Geologists, pp. 301-327.

Taner, M. T., F. Koehler, and R. E. Sheriff, Complex seismic trace analysis, Geophysics, 44, 6, 1041-1063, 1979.

Taner, M.; Schuelke, J.S.; O' Doherty, R., and Baysal, E. (1995). Seismic Attributes Revisited: Society of Exploration Geophysicists Expanded Abstracts, pp. 1104-1106.

Taner, M.T. (2001). Seismic Attributes: Canadian Society of Exploration Geophysicists Recorder, vol. 26, num. 7, pp. 48-50, 52-56.

Ward, W.C.; Keller, S.W., and Adatte T. (1995). Yucatan Subsurface Stratigraphy: Implications and Constraints for the Chicxulub Impact: Geology, vol. 23, pp. 10, 873-876.

White, R.E., 1991. Properties of Instantaneous Seismic Attributes, The Leading Edge, vol. 7, pp. 26-32.

APÉNDICE "A"

ANÁLISIS DE TRAZA COMPLEJA Y LOS ATRIBUTOS INSTANTÁNEOS DE AMPLITUD, FASE Y FRECUENCIA

El Análisis de Traza Compleja considera un frente de ondas (perturbada en su amplitud fase y frecuencia cuando atraviesa un medio estratificado) como una traza compleja $F[t, f(t), f^*(t)]$. Esta traza es la sucesión de puntos representados por un fasor $F[t, f(t), f^*(t)]$ (vector que gira entorno al eje del tiempo), en un espacio complejo de 3 dimensiones (2 dimensiones son reales y 1 compleja), que está en función del tiempo, t; la traza real, $f(t)$ y la traza compleja, $f^*(t)$.

*Figura a1.- La función Traza Compleja es un fasor que gira entorno al eje del tiempo, t. La traza imaginaria f *(t) y la traza real f(t) son proyecciones de la Traza Compleja. Figura modificada de Taner et al., 1979.*

La traza compleja o analítica es:

$$\overline{F}\left(t, f(t), f^*(t)\right) = \hat{x}\,t + \hat{y}\,f(t) + \hat{z}\,jf^*(t) \qquad (1)$$

x, y, z	=	Vectores unitarios-ortogonales.
j	=	Unidad compleja.
t	=	Tiempo.
$f(t)$	=	Traza sísmica
$f^*(t)$	=	Transformada de Hilbert de $f(t)$.

La traza real es la traza sísmica, $f(t)$:

La traza real es la traza sísmica, *f(t)*:

$$f(t) = A(t)\cos\theta(t) \tag{2}$$

La traza imaginaria o cuadratura, *f * (t)*, es la Transformada de Hilbert de la traza real, *f (t)*:

$$f^*(t) = A(t)sen\,\theta(t) \tag{3}$$

El Análisis de Traza Compleja, con el propósito de simplificar la caracterización del fasor *F* [*t, f (t), f * (t)*] , propone lo siguiente:

1.- La traza real e imaginaria sean modeladas matemáticamente como una sucesión continua de ondas senoidales y estén determinadas por el producto de 2 funciones dependientes del tiempo (pero linealmente independientes entre ellas): la Amplitud y la Fase θ (*t*).
2.- Determinar la amplitud A *(t)* y fase θ *(t)* de la Traza Compleja y no del fasor; cortando (ortogonalmente) el eje del tiempo con planos *z vs y* . De este manera, traslada el sistema de referencia al tiempo donde quiere calcular el valor de *f(t)* y *f*(t)* (Fig. a2).

De acuerdo con las 2 propuestas anteriores sustituimos las ecuaciones 2 y 3 en 1 y obtenemos una función *F* [*f(t), f* (t)*] conocida [*f(t)* y *f*(t)* están determinadas] que nos permite calcular la amplitud y fase de la Traza Compleja para todo tiempo.

$$F\left(f(t), f^*(t)\right) = f(t) + jf^*(t) = A(t)\cos\theta(t) + jA(t)sen\theta(t) = F\left(A(t), \theta(t)\right) \tag{4}$$

Figura a2.- A(t) es la longitud de la proyección del fasor F [t, f (t), f (t)] en el plano z vs y, en el tiempo t. La amplitud A(t) se descompone por 2 elementos: La traza real (sísmica) f(t) y la traza imaginaria f*(t) (Transformada de Hilbert de f(t)).*

De acuerdo con la figura a2 la amplitud de la función envolvente de la traza compleja es la magnitud o norma de la proyección del vector en el plano *z vs y*, este plano es ortogonal al eje del tiempo, en el tiempo *t* que se desea conocer el valor de la amplitud de la envolvente.

$$\left|\bar{F}\left(f(t),f^{*}(t)\right)\right| = A(t) = \sqrt{f(t)^{2} + f^{*}(t)^{2}} \qquad (7)$$

La igualdad derecha de esta expresión se conoce como el Atributo Instantáneo de Envolvente de Amplitud.

De igual forma, la función ángulo, $\alpha(t)$, entre el vector proyección de la traza compleja en el plano *z vs y* , *F* [*f(t)*, *f* (t)*] , con el vector unitario ''*y*'', de acuerdo con la figura a2 es (por definición) la tangente inversa de la razón entre la traza imaginaria y la traza real.

$$\theta(t) = \tan^{-1}\left(f^{*}(t) \big/ f(t) \right) \qquad (10)$$

La igualdad derecha de esta expresión se conoce como el Atributo Instantáneo de Fase.

Ahora, la derivada de la función fase con respecto del tiempo:

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = w(t) \qquad (III.1.11)$$

se conoce como el Atributo Instantáneo de Frecuencia.

Para evitar las discontinuidades de la función fase cada 2π, es necesario calcular la frecuencia instantánea como la derivada respecto del tiempo de la función arco-tangente:

$$w(t) = \frac{d \arctan\left[f^{*}(t) \big/ f(t) \right]}{d(t)} = \frac{\left[f(t)\dfrac{df(t)^{*}}{dt} - f^{*}(t)\dfrac{df(t)}{dt} \right]}{\left[f^{2}(t) + g^{2}(t) \right]} \qquad (III.1.12)$$

El Análisis de Traza Compleja logra calcular los atributos sísmicos *A(t)*, *q(t)* y *w(t)* porque conoce la función *f(t)* y *f*(t)* [Transformada de Hilbert de *f(t)*].

MODELADO DISCRETO DE PARTÍCULAS PARA SIMULAR FÍSICA DE ROCAS

RAÚL DEL VALLE GARCÍA[1]

RESUMEN

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

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

[1] Instituto Mexicano del Petróleo. Coordinación de Geofísica de Exploración.

INTRODUCCIÓN

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

Mientras que la física ha ayudado a entender, en el ámbito fundamental, las propiedades eléctricas y ópticas de la materia, no se puede decir lo mismo sobre las propiedades mecánicas. Se ha observado, por ejemplo, que las estimaciones de la resistencia teórica de un cristal son inexactas hasta por 2 órdenes de magnitud a las producidas por mediciones en laboratorio (Gordon, 1976; y Marder y Fineberg, 1996). La razón de esta discrepancia no es conocida totalmente, pero existen indicios de que la resistencia mecánica es consecuencia del tamaño del defecto más grande que existe en el material, y no de las fuerzas de cohesión entre átomos. Muchas de las propiedades mecánicas de los materiales son dominadas por la presencia de defectos más que por la interacción atómica. Además, existen otras causas. Los mecanismos de fractura y deformación plástica, que sufre un material debido a la aplicación de esfuerzos, son procesos irreversibles que generan cierto grado de desequilibrio (lejos de su estado de reposo), dificultando el desarrollo de soluciones analíticas plausibles. Sólo en años recientes, la combinación de experimentos con el uso de las supercomputadoras, el uso de fundamentos de la física estadística, la simulación molecular y los métodos de retícula han propiciado renovado interés de la comunidad científica y tecnológica en el tema de las propiedades mecánicas y dinámicas de los materiales, tanto artificiales como naturales (rocas).

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

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

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

HISTORIA

En sus famosos *diálogos sobre 2 nuevas ciencias*, Galileo (1635) se pregunta qué es lo que mantiene sujeto a un sólido y que lo desbarata (lo fractura o lo fragmenta). Con esto, de cierta manera Galileo se convierte en el primer científico que estudia la física del material condensado y la ingeniería de materiales. No obstante que ambas disciplinas son casi independientes entre sí, existen algunos aspectos en cada una de ellas que se mantienen relacionados. En particular los conceptos de micro-mecánica, por el lado de ingeniería de materiales, y la teoría de percolación, por el lado de la física teórica, están relacionados en gran medida. Por ejemplo, ambas disciplinas concluyen en lo particular que las propiedades mecánicas de un material están determinadas por el comportamiento colectivo de los defectos internos en dicho material (poros, grietas, dislocaciones) y no por las fuerzas de enlace de las moléculas que lo constituyen. Por lo que el comportamiento de un sólo defecto es irrelevante. Aún con una cantidad colosal de estudios de laboratorio y de trabajos teóricos, no se tiene una visión clara de cómo predecir fenómenos de fracturamiento. La razón puede ser evidente si se toma en cuenta que las fracturas y la deformación plástica en un material tienen comportamiento no lineal y no local. Más aún, estos fenómenos son irreversibles y fuera de equilibrio, por lo que no pueden ser tratados por medio de conceptos clásicos de física del estado sólido. Una alternativa es utilizar conceptos a partir de modelos discretos, atomísticos o mesoscópicos.

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

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

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

Una versión simplificada del modelo de percolación elástica es el Modelo de Born (1956). Dicho modelo, el cual es una forma discreta de la Ecuación de Navier ha sido ampliamente utilizado para modelado dinámica de fracturas (Martín *et al.* 2000). Este modelo fue aplicado recientemente por Del Valle-García & Sánchez-Sesma (2002) para simular el efecto de la porosidad en la propagación de ondas, tanto en velocidad como en atenuación extrínseca de la señal, debido a la difracción de energía (véase Apéndice E). El Modelo Arquetípico de Percolación Elástica, que incluye doblamiento de enlaces, es especialmente poderoso para simular fracturamiento y propagación de onda en materiales con desorden microscópico. Se pueden simular rocas con heterogeneidad y anisotropía locales, tanto en sus constantes elásticas como en su relación de Poisson. Esto ha permitido simular la propagación de ondas de Rayleigh con buena precisión (Del Valle-García & Sánchez-Sesma, 2003), así como procesos de hidrofracturamiento, incluyendo su emisión acústica.

OBJETIVO

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

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

SINÓPSIS

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

CAPÍTULO 1

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

DOMINIO MICROSCÓPICO Y MACROSCÓPICO

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

La dinámica de fractura es afectada, de una u otra manera, por todas las escalas. Por lo que cualquier teoría surgente deberá forzosamente incluir todos los efectos observables para poder ser considerada completa. Algo que pareciese imposible con las herramientas teóricas y conocimientos actuales sobre el tema, por lo cual para hacer más tratable el problema se requiere reducirlo y separarlo en 2 grandes vertientes, una microscópica y otra macroscópica.

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

En la vertiente microscópica de fractura se toma en cuenta la escala más pequeña y la fractura se considera una alteración de la retícula atómica que forma el material. Aproximaciones analíticas a este problema se conocen como *Teorías de Retícula* ("Lattice Theory"). A esta escala, las fuerzas entre los átomos son importantes y generalmente se utilizan potenciales de interacción para calcular las fuerzas resultantes. Es una tarea titánica resolver analíticamente el movimiento y desplazamiento de partículas, por lo que se recurre a técnicas computacionales a través de simulaciones de dinámica molecular. Estas simulaciones, a menudo, utilizan potenciales de interacción muy idealizados para ayudar en la eficiencia de los cálculos, pero existen también otros tipos de simulaciones basadas en métodos híbridos. La simulación molecular ha sido muy exitosa en reproducir muchas características cualitativas y cuantitativas de dinámica de fracturas observadas en laboratorio.

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

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

ELEMENTOS TEÓRICOS

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

ECUACIONES DE MOVIMIENTO

Para obtener las ecuaciones de movimiento para el vector desplazamiento **u**, de un cuerpo homogéneo, isótropo, linealmente elástico, se utilizan las ecuaciones de equilibrio, las relaciones cinemáticas, la Ley de Hooke y el término inercial (véase Ziegler, 1991). Esto da como resultado la célebre Ecuación Dinámica de Navier:

$$(\lambda+\mu)\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u})+\mu\nabla^2\mathbf{u}+\mathbf{f}=\rho\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2} \tag{1.1}$$

donde: λ, μ son las constantes de Lamé y ρ es densidad.

Si consideramos la Descomposición de Helmholtz del vector desplazamiento (Ewing *et al.,* 1957):

$$\mathbf{u}=\nabla\Phi+\nabla\times\mathbf{\Psi}\equiv\text{grad}\,\Phi+\text{curl}\,\mathbf{\Psi} \tag{1.2}$$

y sustituyendo esta ecuación en la ecuación (1.1) se obtiene una ecuación de onda escalar para el potencial irrotacional Φ y una ecuación de onda para el potencial vectorial Ψ:

$$c_L^2\nabla^2\Phi=\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}\ ;\ \nabla\times(\nabla\Phi)\equiv\text{curl}\,\text{grad}\,\Phi \tag{1.3}$$

y:

$$c_T^2 \nabla^2 \mathbf{\Psi} = \frac{\partial^2 \mathbf{\Psi}}{\partial t^2} \; ; \; (\nabla \cdot \mathbf{\Psi}) \equiv \mathrm{div}\mathbf{\Psi} = 0 \tag{1.4}$$

La ecuación escalar (1.3) es la ecuación de onda longitudinal con velocidad de propagación C_L y la ecuación vectorial (1.4) es la ecuación de onda transversal con velocidad de propagación C_T. Bajo condiciones adiabáticas, los potenciales Φ y Ψ son sistemas de propagación de onda en un sólido propagándose independientemente entre sí. No obstante, estos sistemas se acoplan cuando se encuentra una interfase o una superficie libre. Se puede demostrar también utilizando la Descomposición de Helmholtz, la existencia de una onda superficial no dispersiva que viaja a lo largo de la superficie libre (libre de tracción). Esta es la Onda de Rayleigh con velocidad C_R.

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

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + (1 - 2\nu)\nabla^2 \mathbf{u} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \tag{1.5}$$

TEORÍA DE GRIFFITH

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

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

La ley de separación de fuerzas interatómicas puede ser aproximada por una función que exhibe 3 propiedades:

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

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

$$\sigma(u)=\left(\frac{E\gamma}{b}\right)^{\frac{1}{2}}\sin\left[\left(\frac{Eb}{\gamma}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{u}{b}\right)\right] \tag{1.6}$$

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

$$\sigma_{teórica}=\left(\frac{E\gamma}{b}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1.7}$$

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

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

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

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

Para un material frágil elástico se tiene:

$$\frac{dW}{dA} - \frac{dU}{dA} = \gamma \tag{1.8}$$

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

Griffith consideró el problema de una fractura en un cuerpo infinito sujeto a una carga de tensión perpendicular a dicha fractura previamente investigado por Inglis (véase Fig. 1.5), por lo que sólo se necesita calcular el cambio neto de energía de deformación elástica. Un hecho interesante fue que a partir de este desarrollo Bueckner (1958) observó que la energía de deformación debida a una fractura finita es igual a la mitad del trabajo realizado por los esfuerzos actuando en las caras de dicha fractura. La apertura de la cara de la fractura, para el problema de Griffith, se obtiene de la solución de Westergaard (1939) para la aproximación de esfuerzo plano:

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

$$v = \frac{2\sigma}{E}\left(a^2 - u^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1.9}$$

donde: σ es el esfuerzo aplicado. Las coordenadas se toman al centro de la fractura de radio *a*. Consecuentemente, para una fractura interna, el trabajo se realiza en 4 diferentes segmentos de superficie. Esto da como resultado (véase Apéndice de Maugin, 1992), partiendo de la expresión anterior:

$$W - U = 4B\int_0^a \tfrac{1}{2}\sigma v(x)dx = \frac{\pi a^2 \sigma^2 B}{E} \tag{1.10}$$

Tomando la ecuación (1.8) se tiene:

$$\sigma_f = \left(\frac{2}{\pi}\frac{E\gamma}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1.11}$$

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

Para condiciones de deformación plana, el factor *E* que aparece en la ecuación anterior se debe reemplazar por $E/(1-v^2)$. De aquí se puede observar la influencia de la geometría de la fractura en el campo de esfuerzos y por lo tanto, se deduce que la forma de la ecuación sólo cambia por un factor constante para diferentes condiciones geométricas de fractura. Irwin (1960) utilizó esta deducción para generalizar el problema de dinámica de fracturas.

La resistencia teórica de la ecuación (1.6) se combina con la ecuación (1.10) del esfuerzo de fractura σ_f para obtener la relación:

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_{teórica}} \approx \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1.12}$$

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

DINÁMICA DE FRACTURAS

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

Supóngase una grieta de longitud l como se ilustra en la figura 1.5. Dicha grieta, en principio disminuye la energía potencial del sistema. Suponiendo además que hay una área de influencia alrededor de la fisura para la acción de relajación de energía de forma circular con radio $l/2$ y partiendo de la ecuación (1.8) se deduce que la energía potencial se reduce por un factor proporcional a $l^2/4$, esto da (Gross, 1995):

$$E_p = -C_p l^2 + 2\gamma l \tag{1.13}$$

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

$$E_c = C_c v^2 l^2 \tag{1.14}$$

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

$$E_{total} = 2\gamma l + C_c v^2 l^2 - C_p l^2 = 2\gamma l + l^2\left(C_c v^2 - C_p\right) \tag{1.15}$$

Esta expresión es válida para velocidades relativamente pequeñas a la velocidad del sonido en el material. Para calcular la expresión que predice la velocidad de fracturamiento considere la ecuación (1.13) que nos indica que al iniciarse el movimiento de fractura cierta cantidad de energía potencial se convierte en energía cinética. Al inicio de la grieta, $v = 0$, por lo que $E_{total} = E_p$, es constante. Esto implica $\partial E_{total}/\partial l = 0$, lo cual nos da para una longitud de fractura inicial l_0:

$$\gamma = l_0 C_p \tag{1.16}$$

Esta expresión nos da a γ, la energía de superficie, en función de l_0 , y es claro que $E_{total} = C_p l_0$, por lo que la ecuación (1.15) se puede escribir como:

$$C_p l_0^2 = 2C_p l_0 l + C_c v^2 l^2 - C_p l^2 = 2C_p l_0 l + l^2 \left(C_c v^2 - C_p\right) \tag{1.17}$$

Resolviendo para v se tiene:

$$v = \left(1 - \frac{l_0}{l}\right)\sqrt{\frac{C_p}{C_c}} \tag{1.18}$$

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

$$V_{fractura} = c_R\left(1 - \frac{l_0}{l}\right) \tag{1.19}$$

El argumento anterior se puede interpretar como que la energía de liberación aumenta proporcional a l^2, mientras que la energía de superficie libre es proporcional a l. Paulatinamente al movimiento de fractura, la cantidad de energía consumida es insignificante en comparación a la cantidad de energía de superficie. Esto es como si la fractura viajara en una superficie libre, tal como es el caso de las ondas de superficie de Rayleigh. Por lo tanto, se argumenta que la velocidad terminal de fractual $V_{fmáx}$ es igual a c_R. La Velocidad de Rayleigh es bastante menor a la velocidad del sonido en el sólido, por lo que la ecuación (1.15) es válida.

Analizando velocidades de fractura, Yoffe (1951) encontró que existe una velocidad crítica de fractura con una valor cercano a 0.6 c_R, en la cual la dirección de máximo esfuerzo no está directamente en la punta de la grieta, sino que existen 2 lóbulos de concentración de energía simétricos, bifurcándose a un ángulo alrededor de 30° en la dirección del avance de la fractura. Estos lóbulos de concentración de energía que generan deformación plástica formarán 2 fracturas eventuales o en su caso, la fractura original se desviará a una de las direcciones de bifurcación. Ciertamente, para un medio desordenado este fenómeno crea un sistema de fracturas múltiples observándose bellas configuraciones fractales (Louis *et al.*, 1986; and Louis & Guinea, 1987). No es claro el porqué de las bifurcaciones, pero esta *transición de fase* es observada fielmente en muchos eventos de fractura en materiales. Entender exactamente los mecanismos que generan este fenómeno de disipación de energía es uno de los grandes retos de la ciencia y tecnología contemporáneas.

CAPÍTULO 2
TEORÍA DE PERCOLACIÓN ELÁSTICA

MODELO DE PERCOLACIÓN ELÁSTICA

El modelo se construye de un término de fuerzas centrales y otro asociado a fuerzas de doblamiento o de cambio de ángulo. Esto lo hace invariante en translación y en rotación. La energía elástica del modelo con fuerzas de doblamiento general se expresa como:

$$H = \frac{\alpha}{2}\sum_{<ij>}\left[(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)\cdot \mathbf{r}_{ij}\right]^2 e_{ij} + \frac{\beta}{2}\sum_{<jik>}(\delta\boldsymbol{\theta}_{jik})^2 e_{ij}e_{ik} \tag{2.1}$$

donde: α y β son las constantes de fuerza central y de doblamiento, respectivamente. El símbolo $<jik>$ indica que la suma es sobre todos los triples donde los enlaces *j-i* e *i-k* forman un ángulo, cuyo vértice está en *i*. Indudablemente, el segundo término de la ecuación (2.1) es la contribución de fuerzas de doblamiento. La forma precisa de $\delta\Phi_{jik}$ depende que tanto detalle se quiera incluir en el modelo. Si no se permite que los enlaces se doblen paralelos entre sí (enlaces co-lineales), entonces se tiene que $\delta\Phi_{jik}$ es:

$$\delta\boldsymbol{\theta}_{jik} = (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)\cdot \mathbf{r}_{ik} + (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k)\cdot \mathbf{r}_{ij} \tag{2.2}$$

Este modelo es conocido como el Modelo General de Kirkwood-Keating (KK). Kirkwood (1939) lo utilizó para estudiar vibraciones de moléculas, mientras que Keating (1966a, b) estudia las propiedades elásticas del diamante. Estos modelos son fundamentales en la física del estado sólido.

Todos los términos de las ecuaciones de movimiento, es decir, de $\partial H/\partial \mathbf{u}_i = 0$, en la ecuación (2.1) pueden ser expresados por operadores de diferencias, por lo que al utilizar la expansión en series de Taylor esos operadores se pueden expresar en términos de derivadas parciales de la función continua $\mathbf{u}_i\,(x, y, z)$. Esto nos permite, suponiendo que las longitudes de onda de las deformaciones son mucho más grandes que la longitud del elemento típico de la retícula (constante de retícula), que todas las derivadas, excepto las de segundo orden en $\mathbf{u}_i$ sean descartadas. En el límite continuo (Sahimi, 1998) se obtiene la ecuación siguiente:

$$(c_{11} - c_{12} - 2c_{44})\sum_j \frac{\partial^2 \mathbf{u}_j}{\partial x_j^2}\mathbf{r}_j + c_{44}\left[2\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u}) - \nabla\times(\nabla\times\mathbf{u})\right] + c_{12}\nabla(\nabla\cdot\mathbf{u}) = 0 \tag{2.3}$$

donde: $u_j = u_x, u_y, u_z$, $x_j = x, y, z$ y $\mathbf{r}_j$ son vectores unitarios en las 3 correspondientes direcciones. Aquí, las constantes elásticas del tensor son $c_{11}=\alpha/l$, $c_{12}=0$ y $c_{14}=4\beta/l$. La constante de la retícula es l, α y β son las constantes de fuerza central y de doblamiento, respectivamente. La ecuación anterior es invariante en rotación.

EL MODELO GRANULAR

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

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle} e_{ij}\left\{\alpha\left[\mathbf{u}_{ij}\cdot\mathbf{r}_{ij}\right]^2 + \beta\left\{\mathbf{r}_{ij}\times\left[\mathbf{r}_{ij}\times\mathbf{u}_{ij}\right] + R\left(\varphi_i+\varphi_j\right)\mathbf{z}\times\mathbf{r}_{ij}\right\}^2 + \gamma\left(\varphi_i+\varphi_j\right)^2\right\} \tag{2.4}$$

donde $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$, R es el radio del disco, γ es la constante de fuerza asociada a la torsión necesaria cuando 2 discos rotan entre sí, $\mathbf{z}$ es un vector unitario normal al plano de los discos. La figura 2.1 esquematiza el significado físico de las constantes α, β y γ .

Figura 2.1.- El significado físico-geométrico de las 3 constantes elásticas del modelo granular

CAPÍTULO 3
MODELOS DE RETÍCULA

MODELO FUNDAMENTAL

Originalmente, el modelo discreto de partículas fue postulado a partir de conceptos de dinámica molecular con interacciones de alcance corto consistentes de partículas. Tal es el caso del potencial de interacciones de Lennard-Jones, el cual puede ser especializado a sólidos elásticos. Las partículas representan secciones de material o granos de roca con interacciones elásticas entre ellas. Se pueden, por ejemplo, construir las ecuaciones de onda elásticas (véase Apéndice A), lo cual muestra las relaciones fundamentales entre un medio continuo y un medio discreto representado por partículas y enlaces (resortes). Este procedimiento general permite simular, con relativa facilidad, el comportamiento no lineal de sólidos discontinuos como es el caso de materiales naturales como las rocas. Las partículas son ligadas por medio de enlaces que tienen cierto comportamiento específico. En el Apéndice B se deriva un modelo discreto de las ecuaciones elásticas, donde se demuestra que la Ecuación de Navier dinámica (ecuación 1.1 y B1) se puede representar discretamente por una ecuación particular de la expresión generalizada de percolación elástica (véanse las ecuaciones 2.4, B20 y B25). Si los enlaces tienen comportamiento elástico lineal (fracturamiento frágil), implicaría que cada par de partículas tiene un umbral de longitud l_R que al rebasarse el enlace se rompería. La fuerza normal en una partícula i debido a una partícula j está dado por:

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

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

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

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

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

$$\mathbf{F}_{ij}^{(i)} = 2k_i\left(l_{ij}^{(i)} - \frac{d_i}{2}\right)\mathbf{r}_{ij} \tag{3.3}$$

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

$$\mathbf{F}_{ij}^{(j)} = 2k_j\left(l_{ij}^{(j)} - \frac{d_j}{2}\right)\mathbf{r}_{ij}$$

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

$$\frac{\mathbf{F}_{ij}}{k_{ij}} = \frac{\mathbf{F}_{ij}^{(i)}}{2k_i} + \frac{\mathbf{F}_{ij}^{(j)}}{2k_j}$$

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

Resolviendo para k_{ij} tenemos la relación siguiente:

$$k_{ij} = \frac{2k_i k_j}{k_i + k_j}$$

Reiterando un enlace entre 2 partículas se rompe si excede su umbral de separación. Esto es, $\mathbf{F}_{ij}=0$ para $l_{ij}>l_R$, o lo que es lo mismo, $k_{ij}=0$.

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

$$\mathbf{F}_i^{\nu} = \nu\, \mathbf{v}_i \tag{3.7}$$

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

ESCALAMIENTO

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

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

$$M_i = \rho \frac{\sqrt{3}}{2} d_i^2 \ \text{kg} \tag{3.8}$$

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

$$M_i = \rho \frac{\sqrt{2}}{2} d_i^3 \ \text{kg} \tag{3.9}$$

Supóngase los siguientes valores $d_{máx} = L_0 = 20$ m, ρ 3,000 kg·m^{-2} y velocidad de propagación volumétrica de $V_p = 3{,}000\sqrt{3}$ m·s^{-1}, entonces la constante k para 2 dimensiones es:

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

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

$$\Delta t = \varepsilon \frac{L_0}{V_{\max}} \ \text{s} \tag{3.11}$$

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

PROCEDIMIENTO GENERAL

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

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

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

Si tomamos el modelo discreto de partículas general, es decir, el modelo en 3 dimensiones, la energía elástica U_{EL} se representa generalmente por 3 potenciales. Un potencial de fuerza central de 2 cuerpos (*FC*), un potencial de doblamiento de 3 cuerpos (*D*) y un potencial de torsión de 4 cuerpos (*T*). Por lo que:

$$U_{EL} = U_{FC} + U_D + U_T \tag{3.12}$$

Es claro entonces que se deben incluir 3 criterios de rompimiento de enlaces, uno para cada potencial. Es decir, uno para fuerzas centrales (estiramiento o compresión), otro para doblamiento del enlace, y un tercero para torsión del enlace. Para modelos bidimensionales la ecuación anterior es sólo:

$$U_{EL} = U_{FC} + U_D \tag{3.13}$$

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

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

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

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

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

$$\alpha_{ij} = \frac{A_{ij}E_{ij}}{\left|\mathbf{r}_{ij}(0)\right|} \tag{3.15}$$

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

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

$$\Delta\theta_{ijk}(n+1) \equiv \Delta\theta_{ijk}^{ij}(n+1) + \Delta\theta_{ijk}^{ik}(n+1) \tag{3.16}$$

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

$$U_D(n+1) = \frac{1}{2}\sum_{<ijk>}\beta_{ijk}\theta_{ijk}^2(n+1) = \frac{1}{2}\sum_{<ijk>}\beta_{ijk}\left[\Delta\theta_{ijk}^{ij}(n+1) + \Delta\theta_{ijk}^{ik}(n+1) + \theta_{ijk}(n)\right]^2 \tag{3.17}$$

donde la suma es sobre todos las tripletas $< ijk >$ como en la figura 3.2. β_{ijk} es la constante de fuerza (de doblamiento) de 3 cuerpos en los nodos *i*, *j* y *k*. Para cambios pequeños de ángulo de $\Delta\theta_{ijk}(n+1)$ hay una relación con las componentes de desplazamiento $\Delta u_{ij}^{ijk}(n+1)$ y $\Delta u_{ik}^{ijk}(n+1)$ en el plano definido por las partículas *i*, *j* y *k*, en la dirección ortogonal a $\mathbf{r}_{ij}(n)$ y $\mathbf{r}_{ik}(n)$, respectivamente. De aquí, las componentes de desplazamiento $\Delta u^{ijk}(n+1)$ y $\Delta u^{ijk}(n+1)$ en el plano *ijk* son:

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

y:

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

Para deformaciones pequeñas, la siguiente aproximación también se aplica:

$$\Delta\theta_{ijk}(n+1) \approx \tan[\Delta\theta_{ijk}^{ij}(n+1)] + \tan[\Delta\theta_{ijk}^{ik}(n+1)] = \frac{\Delta u_{ij}^{ijk}(n+1)}{\left|\mathbf{r}_{ij}(n)\right|} + \frac{\Delta u_{ik}^{ijk}(n+1)}{\left|\mathbf{r}_{ik}(n)\right|} \tag{3.20}$$

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

$$\Delta\theta_{ijk}^{ij}(n+1) = \Delta\mathbf{u}_{ij}(n+1)\cdot\mathbf{D}_j \tag{3.21}$$

y:

$$\Delta\theta_{ijk}^{ik}(n+1) = \Delta\mathbf{u}_{ik}(n+1)\cdot\mathbf{D}_k \tag{3.22}$$

donde:

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

y:

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

Figura 3.2.- Potencial de 3 cuerpos de doblamiento

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

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

donde I_{ij} es el momento inercial de la barra. Nótese que las constantes de fuerza central α_{ij} y de doblamiento β_{ijk} son las misma que en la ecuación (2.1), pero son distintas para cada enlace, por lo que el modelo de percolación elástica con fuerzas de doblamiento es el procedimiento general:

$$H = U_{EL} = U_{FC} + U_D \tag{3.26}$$

$$H = \frac{1}{2}\sum_{<i\ j>} \alpha_{ij}\left[\left(\boldsymbol{\theta}_i - \mathbf{u}_j\right)\bullet \mathbf{r}_{i\ j}\right]^2 e_{ij} + \frac{1}{2}\sum_{<ijk>} \beta_{ijk}(\delta_{\ ijk})^2 e_{ij} e_{ik} \tag{3.27}$$

La figura 3.3 esquematiza el modelo discreto estándar de partículas en una retícula regular triangular con fuerzas centrales y de doblamiento. Esto es lo mínimo que deberá contener un modelo bidimensional de retícula para representar correctamente un material elástico.

Figura 3.3.- Potencial de 2 cuerpos (fuerza central) y de 3 cuerpos (fuerza de doblamiento)

Existe una generalidad analítica del modelo discreto de partículas que es conocida como la *elasticidad micropolar* (véase Eringen, 1968; y Nowacki, 1970), la cual es definida para el modelo de resorte en el Apéndice C. Los modelos micropolares tienen su origen de la física del estado sólido. El modelo general micro-mecánico, que se puede obtener de la teoría micropolar, se presenta en el Apéndice D. Ahí se deriva el modelo de Kirkwood (1939) que permite, a partir de las fuerzas centrales y de doblamiento, modelar materiales con diferente valor local de la relación de Poisson, así como anisotropía. De la misma manera se puede construir el Modelo de Keating (1966a) para permitir relación de Poisson variable en la propagación de ondas elásticas (Del Valle *et al.*, 2003).

CAPÍTULO 4

APLICACIONES

FRACTURAS

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

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

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

NOCIONES BÁSICAS DE ELASTICIDAD EN ROCAS FRACTURADAS

DESCRIPCIÓN FENOMENOLÓGICA

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

$$\sigma = \frac{F}{\omega^2} = E\frac{\Delta \ell}{\ell} = -\frac{E}{\nu}\frac{\Delta\omega}{\omega} \tag{4.1}$$

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

El régimen lineal es llamado régimen elástico, el cual es válido hasta una fuerza F_n. Arriba de esta fuerza se observan desviaciones no lineales, mientras la fuerza sea menor a la fuerza llamada de Punto de Cesación ("Yield Point") F_y , el comportamiento es

reversible, es decir, la forma del cuerpo regresa a su estado original si se le quita la fuerza aplicada. Después de F_y el comportamiento es plástico, por lo que el sistema se deforma permanentemente y tendrá una elongación finita d llamada "dilatación" formando una histéresis en materiales idealmente plásticos.

En la literatura, 3 familias de materiales han sido estudiadas casi independientemente: los metales, los polímeros y las rocas. Las rocas, nuestro interés principal, abarcan las cerámicas, los concretos, las placas tectónicas, el vidrio, arcillas, etc. Las rocas, a temperaturas y presiones superficiales, experimentan en general fracturamiento frágil; en contraste con metales y polímeros que fracturan usualmente en el régimen dúctil (plástico). No obstante, por ejemplo; un mármol, a presión y temperatura ambiente, experimenta fracturamiento frágil, mientras que a gran presión y temperatura, propias de un yacimiento profundo, el mármol muy probablemente experimente fracturamiento dúctil. Siendo, entonces evidente que las tramas o patrones de fracturamiento en una roca sean muy distintos dependiendo de su constitución física-química (estructura porosa y fluidos en las rocas) y de su dependencia ambiental (presión y temperatura). Transiciones entre dúctil-frágil son todavía más difíciles de caracterizar. Existen a su vez varios tipos de "inductores de fracturas", es decir, no sólo por cargas externas en el material, sino también por otros agentes como son, por ejemplo; por corrosión u otros fenómenos químicos y termodinámicos.

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

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

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

MODELADO DE FRACTURAMIENTO EN UNA RETÍCULA

Un desarrollo numérico tratable del modelado de fracturamiento es discretizar las ecuaciones continuas correspondientes (Louis *et al.*, 1986; Louis y Guinea, 1987; y Meakin *et al.*, 1989). En este caso, el medio se representa como un grupo de puntos en una malla. Sólo leyes locales, como son los momentos y los balances de fuerzas, son consideradas y en su implantación se utilizan sólo los puntos vecinos. Matemáticamente, la solución de la ecuación del campo desplazamiento (vectorial) se realiza de un grupo de ecuaciones lineales acopladas.

Evidentemente, estos métodos no pretenden describir a la naturaleza desde el punto de vista atómico, como sería el caso de técnicas de dinámica molecular, sino a mayores escalas donde el medio es descrito por campos vectoriales continuos. El comportamiento del sólido se reproducirá bien, si las constantes del material (fenomenológicas),

tales como el módulo elástico, umbral o Punto de Cesación ("Yield Point"), y operador de relajación, son propiamente consideradas en las ecuaciones de movimiento. El rompimiento de resortes en la retícula no es una consecuencia natural, sino tiene que ser establecida una "regla" en el modelo de rompimiento.

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

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

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

El algoritmo para cada iteración se puede resumir en 5 pasos:

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

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

ECUACIONES Y SUS CONDICIONES DE FRONTERA

El problema de una red eléctrica es muy similar al de una red elástica de fracturamiento, con la salvedad de que el campo de desplazamiento *u* es vectorial. Como se mencionó anteriormente, existen 2 alternativas de descripción, las ecuaciones de Lamé y las de Cosserat. Por otro lado, existen varios tipos de discretización posibles, éstos son: a) el modelo de fuerza central, b) el modelo de enlace-doblado y c) el modelo de viga.

En el modelo de fuerza central cada enlace se comporta como un resorte elástico, el cual puede rotar libremente alrededor del sitio al cual pertenece (ver Fig. 3.3).

El modelo de enlace-doblado es similar al de fuerza central, pero utiliza un resorte entre enlaces para reforzar los ángulos entre 2 enlaces. Ambos modelos pueden describir el Modelo de Elasticidad de Cosserat a grandes escalas, no obstante estos modelos se utilizan generalmente para modelos elásticos de Lamé. El modelo de viga es una discretización de las ecuaciones de Cosserat. En 2 dimensiones se tienen 3 grados continuos de libertad en cada sitio *i*: las coordenadas x_i, γ_i y $z_i = l\,\varphi_i$, donde $\varphi \in [-\pi\text{-}\pi]$ es el ángulo de rotación y *l* es el espaciamiento de la retícula, el cual usualmente es la unidad. Sitios cercanos vecinos son conectados por una "viga", de tal manera que enlace un sitio *i* formando un ángulo φ_i con respecto a la retícula no deformada.

A cada viga se le asigna una sección transversal finita *A*, de tal manera que aparte de una fuerza de tracción *f* a lo largo de su eje, exista un esfuerzo transversal *s* y momentos m_i y m_j. En 2 dimensiones esto se puede calcular como:

$$
\begin{aligned}
f &= a\,(x_i - x_j) \\
s &= b\,\left(y_i - y_j + \frac{1}{2}(z_i + z_j)\right) \\
m_i &= cb\,(z_i - z_j) + \frac{\mathrm{b}}{2}\left(y_i - y_j + \frac{z_i}{3} + \frac{z_j}{3}\right)
\end{aligned}
\tag{4.3}
$$

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

Para obtener 3 ecuaciones discretizadas para cada sitio se impugna que la suma de las componentes horizontal y vertical de las fuerzas, y la suma de los momentos sean cero en cada sitio.

REGLA DE ROMPIMIENTO

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

A escalas mesoscópicas se puede describir a los modelos por su dependencia espacial local de densidad, módulos elásticos o intensidad, por lo que se escoge una distribución de probabilidad. Dicha distribución debe contener información acerca del grado de desorden del modelo, de tal suerte que al tener diversas distribuciones se puedan cuantificar sus efectos. En el contexto de modelos de retícula cada enlace se caracteriza por una ley constitutiva, la cual en el más simple de los casos es lineal hasta un umbral de rompimiento.

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

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

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

DISCRETIZACIÓN Y NORMALIZACIÓN DE MODELOS

A continuación se describe la discretización de la Ecuación de Navier para un sitio o nodo *i*. La ecuación (1.5) se puede escribir como:

$$(\lambda+\mu)\partial_i(\sum_j \partial_j u_j)+\mu(\sum_j \partial_j^2)u_i = \rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}$$

ó

$$(\lambda+\mu)u_{j,ji}+\mu\, u_{i,jj} = \rho\ddot{u}_i \tag{4.4}$$

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

$$4u(l,m)-u(l+1,m)-u(l-1,m)-u(l+1,m+1)-u(l-1,m-1)$$
$$+2v(l,m)-v(l+1,m+1)-v(l-1,m-1)=\rho\frac{\partial^2 u(l,m)}{\partial t^2} \tag{4.5}$$

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

$$\rho \frac{\partial^2 u(l,m,t)}{\partial t^2} \rightarrow \rho \frac{[u(t-1)+u(t-2)+2u(t)]}{(\Delta t)^2} \tag{4.6}$$

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

$$F = \alpha \frac{\partial u(l,m)}{\partial t} + \rho \frac{\partial^2 u(l,m)}{\partial t^2} = -k_{l,m}u(l,m) - k_{l-1,m-1}u(l-1,m-1) - k_{l-1,m}u(l-1,m) - k_{l,m-1}u(l,m-1) - k_{l,m+1}u(l,m+1) - k_{l+1,m-1}u(l+1,m-1) - k_{l+1,m}u(l+1,m) \tag{4.7}$$

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

a).- La relación de Poisson, por ejemplo, $\nu = 0.25$
b).- La densidad, por ejemplo, $\rho = 3.0\ \mathrm{g/cm^3}$.
c).- El Módulo de Young, por ejemplo, $\rho = 3.0\ \mathrm{g/cm^3}$.

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

$$V_p = \sqrt{\frac{E}{\rho}\frac{1-\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)}} = 5.29\ \mathrm{Km/s} \tag{4.8}$$

$$V_p = \sqrt{\frac{E}{\rho}\frac{1-\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)}} = 5.29\ \mathrm{Km/s} \tag{4.9}$$

Para calcular la constante de elasticidad *k* se tiene la fuerza aplicada *F* en el nodo *i* que se obtiene de:

$$F = 2k(l - l_o)\cos\theta \tag{4.10}$$

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

$$k \approx \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{F}{l - l_o} \tag{4.11}$$

Nótese que el Módulo de Young es:

$$E = 7 \text{ x } 10^{11} \ \frac{\text{dinas}}{\text{cm}^2} = \frac{esfuerzo}{deformación}$$

(ver Fig. 4.5), por lo que para una cara determinada se tiene una fuerza aplicada de $F = 7 \text{ x } 10^7$ dinas con 10^4 partículas, cada una con $7 \text{ x } 10^3$ dinas de fuerza. Aquí se suponen deformaciones pequeñas del orden de $\approx 10^{-4}$ cm. Por lo tanto, se tiene una deformación de:

$$deformación = (l - l_o) = \frac{\sqrt{3}}{2} \text{ x } 10^{-4} \text{ x } 10^{-2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \text{ x } 10^{-6} \text{ cm.} \tag{4.12}$$

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

$$k = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \text{ x } 10^6 \cdot 7 \text{ x } 10^3 = 4.67 \text{ x } 10^9 \text{ dinas/cm} \tag{4.13}$$

El valor obtenido de *k* de la ecuación (4.13) es normalizado, de tal manera que en el modelo la onda compresional viaja una distancia *l* por unidad de tiempo. Este mismo razonamiento nos ayuda a determinar cuánta fuerza se debe aplicar a cada partícula en la frontera del modelo para aplicar esfuerzo confinado en el material.

FRACTURAMIENTO DINÁMICO Y RESPUESTA SÍSMICA

Como se mencionó anteriormente, los procesos de fracturamiento tienen diferentes patrones, sean estos procesos mecánicos (fuerzas aplicadas) u otros procesos físico-químicos. En particular, nos interesan los procesos de fracturamiento mecánico en rocas. Como ejemplo, véase la figura 4.1 donde se simula en una retícula de 2,000 x 2,000 nodos, a la cual se le aplicó esfuerzo cortante en los lados del modelo (condiciones de frontera). Nótese la dirección preferencial de las fracturas que es debido a la configuración de los esfuerzos transversales aplicados. Este modelo representa una roca fracturada con anisotropía inducida por esfuerzo.

Otra simulación es la figura 4.2 que muestra la simulación con una retícula de 2,000 x 2,000 nodos, la cual presenta un experimento de hidrofracturamiento inducido en el centro del modelo donde se tiene un pozo inyector de fluido o propante.

Si en algún lado del modelo se colocasen geófonos, se pueden obtener datos sísmicos sintéticos como en las figuras 4.3. Nótese el área de influencia plástica (que rompe o deforma algunos enlaces) alrededor de la fractura principal.

Figura 4.1.- Simulación de un modelo fracturado por medio de un esfuerzo cortante.

Figura 4.2.- Un modelo de 2,000 x 2,000 nodos simulando hidrofracturamiento. El estado de esfuerzo es idéntico en ambas direcciones, horizontal y vertical, respectivamente.

Figura 4.3.- Emisión acústica (microsísmica) proveniente de una simulación de fracturamiento de roca

El análisis de los datos sintéticos obtenidos (respuesta sísmica) fue sólo preliminar. Se trató de determinar aquellos eventos importantes en los datos (ver Fig. 4.4) y su correlación con las fracturas generadas en el modelo.

Figura 4.4.- Ejemplo de la emisión acústica (traza sísmica) mostrando los tiempos de eventos provenientes de incipientes microgrietas.

También se analizó el contenido de frecuencias y la forma de onda de los datos. Por ejemplo, en la figura 4.5 se observa la densidad espectral de trazas sísmicas de geófonos colocados en diferentes puntos del modelo. Para hidrofracturamiento, se observó que un geófono colocado enfrente de la propagación de la fractura tenía más altas frecuencias que un geófono colocado a un lado. Este es el célebre efecto de Doppler. Situación similar sucede si una onda mecánica atraviesa una zona fracturada. La velocidad y el contenido frecuencial se reducen si la propagación de onda es transversal al sistema de fracturas, mientras que se mantiene si la propagación es aproximadamente paralela a las fracturas. Este es un efecto de anisotropía del medio y promete ser clave para desarrollar una metodología de análisis para la detección de fracturas y para la determinación de esfuerzos en las rocas y, por ende, una idea indirecta del tensor de permeabilidad en los yacimientos.

Figura 4.5.- El efecto Doppler característico observado en los experimentos

INTEGRACIÓN DE LAS ECUACIONES DE MOVIMIENTO

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

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

$$\mathbf{F}_i^T(t) = \mathbf{F}_i^{FC} + \mathbf{F}_i^D = \sum_{<i\ j>} \alpha_{ij}\left[\left(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j\right)\bullet \mathbf{r}_{ij}\right]e_{ij} + \sum_{<i\,jk>} \beta_{ijk}(\delta_{ijk})e_{ij}e_{ik} \tag{4.14}$$

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

$$\mathbf{a}_i(t) = \frac{\mathbf{F}_i^T(t)}{m_i} \tag{4.15}$$

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

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

$$\mathbf{v}(t + \tfrac{1}{2}\Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{a}(t) \tag{4.16}$$

Subsecuentemente, se obtiene la velocidad al siguiente intervalo:

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t + \tfrac{1}{2}\Delta t) + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{a}(t + \Delta t) \tag{4.17}$$

y la posición:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \Delta t\,\mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t^2}{2}\mathbf{a}(t) \tag{4.18}$$

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

$$U_T(t) = U_C + U_P = \frac{1}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N} m_i \mathbf{v}_i(t)^2 + \alpha_i \mathbf{r}(t)^2\right) \tag{4.19}$$

donde N es el número de partículas del sistema.

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

En la figura 4.6 se muestra un experimento de hidrofracturamiento utilizando una retícula con enlaces que tienen descripción central y de doblamiento. El modelo es esforzado por medio de un desplazamiento 2 veces mayor en la dirección horizontal que en la vertical. El material es aleatoriamente desordenado por un $\pm 5\%$ del valor del Módulo de Young macroscópico $E = 70\ (\mathrm{GPa})$, el esfuerzo de rompimiento fue aproximadamente de $59\ (\mathrm{MPa})$. Obsérvese además varias bifurcaciones en la evolución de las fracturas. Esto se debe a que la fractura alcanzó su máxima velocidad de propagación (aproximadamente 0.6 la velocidad de Rayleigh del material), por lo que se vuelve inestable y genera ramificaciones para reiniciar estabilidad dinámica.

Figura 4.6.- Evolución temporal de un experimento de hidrofracturamiento. Cerca de 130,000 partículas fueron utilizadas (360 x 360).

Las fracturas se propagan en la dirección preferentemente perpendicular al eje principal de mínimo esfuerzo. En este contexto, las fracturas están íntimamente relacionadas a la anisotropía inducida por esfuerzo. La figura 4.7 presenta una simulación de hidrofracturamiento donde los esfuerzos aplicados son iguales en todas las caras del modelo, por lo que los patrones de fracturamiento son relativamente uniformes en todas direcciones, sin embargo, la figura 4.8 presenta un ejemplo donde se aplicó mayor esfuerzo en la dirección horizontal que en la vertical (anisotropía inducida). Los patrones de fracturamiento tienen una dirección preferencial muy bien definida. La tabla 4.1 presenta valores típicos utilizados en las simulaciones de hidrofracturamiento.

Figura 4.7.- Secuencia en tiempo (película) de una simulación de hidrofracturamiento. El estado de esfuerzo es idéntico en ambas direcciones, horizontal y vertical. No hay indicios de anisotropía inducida.

Figura 4.8.- Secuencia en tiempo (película) de una simulación de hidrofracturamiento. El estado de esfuerzo es 2 veces mayor en la dirección horizontal que en la vertical. Aquí, la anisotropía inducida por esfuerzo es evidente.

TABLA 4.1

PARÁMETROS DEL MODELO

MÓDULO DE YOUNG, *E*	**7 x 10^{11} dinas/cm² = 70**
Densidad, ρ	3 g/cm^3
Relación de Poisson, ν	0.25
Velocidad compresional, V_p	5.3 km/s
Velocidad transversal, V_s	3.1 km/s
Presión Hidráulica, P_H	3.8 x 10^8 dinas/cm^3 = 38 MPa
Longitud del enlace l	10^{-4} cm
Umbral en extensión del enlace	0.5% > l
Umbral del ángulo	5% $\pm\ \theta_0$
Umbral en compresión del enlace	5% < l
Módulo Volumétrico K	4.67x10^{11} dinas/cm^2 = 46.7 GPa
Módulo de Corte μ	2.8x10^{11} dinas/cm^2 = 28 GPa
Intervalo de tiempo Δt	5x10^{-10} s

COMPARACIÓN CON SOLUCIONES CLÁSICAS

Para verificar la exactitud de los modelos de retícula para reproducir fenómenos de física de roca, se realizó una comparación con la solución analítica propuesta por Garvin (1956) de una fuente lineal para producir ondas de Rayleigh en la superficie libre de un semi-espacio perfectamente homogéneo e isótropo (Del Valle *et al.*, 2003). Se demostró

que el modelo de retícula es suficientemente preciso para modelar propagación de ondas en medios elásticos. Como complemento a dicho trabajo véase la figura 4.9a que muestra la energía inyectada al sistema y que es el cuadrático de la fuente de Ricker utilizada para excitar el sistema, mientras que la figura 4.9b demuestra la estabilidad numérica de la solución. La figura 4.10 ilustra el campo de desplazamiento vertical y horizontal para un modelo homogéneo utilizando una retícula de 500,000 de partículas con espaciamiento de 10 m con una velocidad compresional de 6,000 m/s y Relación de Poisson de 0.25. La fuente utilizada tiene una frecuencia central de 15 Hz. Nuestros resultados son idénticos a los producidos por Toomey & Bean (2000) que a su vez compararon con soluciones clásicas de diferencias finitas.

Figura 4.9.- a) Energía inyectada al sistema para cada intervalo de tiempo. b) Energía total U_T, mostrando estabilidad numérica durante la simulación.

Figura 4.10.- a) Instantáneas de la componente vertical (a) y de la horizontal (b) del campo de desplazamiento para un modelo homogéneo.

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

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

$$W(t,\omega)=\int_{-\infty}^{\infty} s(t+\frac{\tau}{2})s^{*}(t-\frac{\tau}{2})e^{-i\omega\tau}d\tau \tag{4.20}$$

donde *t* es el tiempo, $\omega = 2\pi f$ es la frecuencia angular y * denota el conjugado complejo.

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

$$f_i(t)\equiv\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\omega W(t,\omega)d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty}W(t,\omega)d\omega} \tag{4.21}$$

la cual es utilizada coloquialmente como atributo sísmico.

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

$$Q^{-1}=\frac{MC\left\{\ln\left[W(t_2,\omega)\right]\right\}/MC\left\{\ln\left[W(t_1,\omega)\right]\right\}}{-2\pi\ \omega(t_2-t_1)} \tag{4.22}$$

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

Otro experimento, por ejemplo, es la figura 4.11 que muestra la propagación de ondas elásticas en un medio con diferente cantidad de porosidad que incluye una superficie libre. Se observa que una de las claras e importantes ventajas de los modelos de retícula es la facilidad con que se pueden incorporar automáticamente, porosidad o cualquier tipo de inclusiones en los modelos. Finalmente, la figura 4.12 muestra una señal obtenida de la simulación de propagación de ondas en un medio fuertemente desordenado y por lo tanto, con intensa difracción múltiple. La coda tiene un carácter difusivo como algunas teorías lo predicen (e.g. Anderson, 1958; Chandrasekhar, 1960; Ishimaru, 1978; Sheng, 1995; Fehler & Sato, 1998; and Van Rossum & Nieuwenhuizen, 1999).

Figura 4.11.- Difracción de ondas elásticas en un medio conteniendo diferente porcentaje de porosidad. Es clara que la pérdida de energía (atenuación) es mayor a mayor porosidad.

Figura 4.12.- Fuerte difracción múltiple de ondas elásticas en un medio altamente desordenado.

CONCLUSIONES

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

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

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

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

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

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

REFERENCIAS

Achenbach, J.D., 1987. Wave Propagation in Elastic Solids. North-Holland, Amsterdam, 1987.

Aharony, A., 1996. Fractal Growth, en Fractals and Disordered Systems. A. Bunde & S. Havlin (Eds.), pp. 177-199, Springer-Verlag, Berlin.

Allen, M.P. & Tildesley, D.J., 1987. Computer Simulations of Liquids, Oxford University Press, New York.

Anderson, P.W., 1958. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. Phys. Rev. 109, pp. 1492-1505.

Arbabi, S. & Sahimi, M., 1990. On Three-Dimensional Elastic Percolation Network with Bond-Bending Forces. J. Phys. A: Math. Gen. 23, pp. 2211-2216.

Ashurst, W.T. & Hoover, W.G., 1976. Microscopic Fracture in the Two-Dimensional Triangular Lattice. Phys. Rev. B 14, pp. 1465-1473.

Baraniuk, R.G. & Jones, D.L., 1993. A Signal-Dependent Time-Frequency Representation: Optimal kernel design, IEEE Trans. Signal Processing, 41, pp. 1589-1602.

Bardhan, K.K.; Chakrabarti, B.K. & Hansen, A. (Eds.), 1994. Nonlinearity and Breakdown in Soft Condensed Matter. Lecture Notes in Physics 437, Springer, Heidelberg.

Barnes, A.E., 1993. Instantaneous Bandwidth and Dominant Frequency with Applications to Seismic Reflection Data, Geophys. 58, pp. 419-428.

Berglund, K., 1982. Structural Models of Micropolar Media, en Mechanics of Micropolar Media, O. Brulin & R. Hsieh (Eds.), pp. 35-86, World Scientific, Singapore.

Bergman, D.J., 1985. Elastic Moduli Near Percolation: Universal Ratio and Critical Exponent. Phys. Rev. B 31, pp. 1696-1698.

Boal, D.; Seifert, U. & Shillcock, J., 1993. Negative Poisson Ratio in Two-Dimensional Networks Under Tension. Phys. Rev. E 48, pp. 4274-4283.

Born, M., & Huang, K., 1984. Dynamical Theory of Crystal Lattices. Clarendon Press, Oxford, England.

Boudreaux-Bartels, G., 1984. Time-Frequency Signal Processing Algorithms: Analysis and Synthesis Using Wigner Distributions. PhD thesis, Rice University.

Brulin, O., 1982. Linear Micropolar Media, en Mechanics of Micropolar Media, O. Brulin & R. Hsieh (Eds.), pp. 87-145, World Scientific, Singapore.

Bueckner, H.F., 1958. The Propagation of Cracks and the Energy of Elastic Deformation. J. Appl. Mech. 80, pp. 1225-1230.

Chakrabarti, B.K., & Benguigui, L.G., 1997. Statistical Physics of Fracture and Breakdown in Disordered Systems. Clarendon Press, Oxford, England.

Chandrasekhar, S., 1960. Radiative Transfer. Dover, New York.

Chen, J.D., 1985. Pseudo-Scale Viscous Fingering in Porous Media. Phys. Rev. Lett. 55, pp. 1892-1895.

Classen, T.A. & Mecklenbraüker, W.F., 1980. The Wigner Distribution: A Tool for Time-Frequency Signal Analysis, Phillips J. Res. 35, pp. 217-250, 276-300, 372-389, 1067-1072.

Cosserat, E. & Cosserat, F., 1909. Théorie des Corps Déformables. Hermann, Paris.

Cundall, A. & Strack, O., 1979. A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies, Geotechnique 29, pp. 47-65.

Daw, M.S. & Baskes, M.I., 1983. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlementinm Metals. Phys. Rev. Lett. 50, pp. 1285-1288.

Del Valle-García, R. & Sánchez-Sesma, F., 2002. Wave Scattering Effects in Elastic Percolation Models, Mol. Phys. 100, pp. 3167- 3172.

Del Valle-García, R. & Sánchez-Sesma, F., 2003. Rayleigh Waves Modeling Using an Elastic Lattice Model, Geophys. Res. Lett. 30, pp. 1866-1869.

Del Valle-García, R. & Ramírez-Cruz, L., 2002. Spectral Attributes for Attenuation Analysis in a Fractured Carbonate Reservoir, The Leading Edge, October, pp. 1038-1041.

Dulaney, E.N. & Brace, W.F., 1960. Velocity Behavior of a Growing Crack. J. Appl. Phys. 31, pp. 2233-2266.

Duxbury P. M. & Li, Y.S., 1989. Scaling Theory and Fluctuations of the Strength of Composites, en Random Media and Composites, R.V. Kohn & G.W. Milton (Eds.), pp. 115-148, SIAM, Philadelphia.

Eringen, A.C., 1968. Theory of Micropolar Elasticity, en Fracture: An Advanced Treatise 2: Mathematical Fundamentals, H. Liebowitz (Ed.), pp. 621-729, Academic Press, New York.

Eringen, A.C., 1999. Microcontinuum Field Theories: Foundations and Solids. Springer-Verlag, New York.

Eringen, A.C. & Hanson, G.W., 2002. Nonlocal Continuum Field Theories. Springer-Verlag, New York.

Evans, K.E. & Caddock., B.D., 1989. Microporous Materials with Negative Poisson's Ratios. II. Mechanisms and Interpretation. J. Phys. D: Appl. Phys. 22, pp. 1883-1887.

Ewals, H.L. & Wanhill, R.J., 1986. Fracture Mechanics, Edward Arnold, London.

Ewing, W.M.; Jardetzky, W.S. & Press, F., 1957. Elastic Waves in Layered Media, McGraw-Hill, New York.

Fehler, M. & Sato, H., 1998. Seismic Wave Propagation and Scattering in the Heterogeneous Earth, AIP Press, New York.

Fineberg, J. & Marder, M., 1999. Instability in Dynamic Fracture. Phys. Rep. 313, pp. 1-108.

Finnis, M.W. & Sinclair, J.E., 1984. A Simple Empirical N-Body Potential for Transition Metals. Phil. Mag. A 50, pp. 45-55.

Furuberg, L.; Feder, J.; Aharony, A. & Jøssang, T., 1988. Dynamics of Invasion Percolation. Phys. Rev. Lett. 61, pp. 2117-2120.

Freund, L.B., 1990. Dynamic Fracture Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge.

Galileo, G., 1635. Discorsi e Demonstrazione Mathematiche. Leyden, Netherlands.

Garvin, W.W., 1956. Exact Transient Solution of the Buried Line Source Problem. Proc. R. Soc. London, A234, pp. 528-541.

Gazis, D.C.; Herman, R. & Wallis, R.F., 1960. Surface Elastic Waves in Cubic Crystals. Phys. Rev. 119, pp. 533-544.

Gordon, J.E., 1976. The New Science of Strong Materials or Why You Don't Fall Through the Floor. Princeton University Press, Princeton, New Jersey.

Gould, P.L., 1994. Introduction to Linear Elasticity. Springer-Verlag, Berlin.

Gould, H. & Tobochnik, J., 1988. An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems, Part 1, Addison-Wesley, Reading.

Griffith, A.A., 1920. The Phenomena of Rupture and Flow in Solids; Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A, 221, pp. 163-198.

Gross, S.P., 1995. Dynamics of Fast Fracture. PhD thesis, University of Texas, Austin.

Haile, J.M., 1992. Molecular Dynamics Simulations: Elementary Methods, John Wiley & Sons, New York.

Hauch, J.A., 1998. Dynamic Fracture in Brittle Materials. PhD thesis, University of Texas, Austin.

Helba, A.; Sahimi, M.; Scriven, L. & Davis, H., 1992. Percolation Theory of Two-Phase Relative Permeability. SPERE, pp. 123-132.

Herrmann, H.J., & S. Roux (Eds.), 1990. Statistical Models for the Fracture of Disordered Media. North-Holland, Amsterdam, Netherlands.

Hoover, W.G., 1991. Computational Statistical Mechanics. Elsevier Science, Amsterdam, Netherlands.

Hoover, W.G.; Ashurst, W.T. & Young, R.J., 1974. Two-Dimensional Computer Studies of Crystal Stability and Fluid Viscosity, J. Chem. Phys. 60, pp. 4043-4047.

Hosken, J. & Kopelman, R., 1976. Percolation and Cluster Distribution I: Cluster Multiple Labeling Technique and Critical Concentration Algorithm. Phys. Rev. B 14, pp. 3438-3445.

Inglis, C.E., 1913. Stresses in a Plate due to the Presence of Cracks and Sharp Corners, Transactions of the Royal Institute of Naval Architectes, 55, pp. 219-241.

Irwin, G.R., 1948. Fracture Dynamics. Fracturing in Metals, ASM Cleveland, pp. 146-166.

Irwin, G.R., 1960. Fracture Mechanics. In Structural Mechanics: Proceedings of the First Symposium on Naval Structural Mechanics, Goodier, J.N. & J.N. Hoff (Eds), Pergamon Press, New York.

Ishimaru, A., 1978. Wave Propagation and Scattering in Random Media, vol. I,II. Academic Press, New York.

Jerauld, G.; Hatfield, J.; Scriven, L. & Davis, H.T., 1984. Percolation and Conduction on Voronoi and Triangular Networks: A Case Study in Topological Disorder. J. Phys. C: Solid State Phys. 17, pp. 1519-1529.

Kanninen, M.F. & Popelar, C.H., 1985. Advanced Fracture Mechanics. Oxford University Press, New York.

Kantor, Y. & Webman, I., 1984. Elastic Properties of Random Percolating Systems. Phys. Rev. Lett. 52, pp. 1891-1894.

Keating, P.N., 1996a. Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure. Phys. Rev. 145, pp. 637-645.

Keating, P.N., 1996b. Relationship Between the Macroscopic and Microscopic Theory of Crystal Elasticity I: Primitive crystals. Phys. Rev. 152, 774-779.

Kirkpatrick, S., 1973. Percolation and conduction. Rev. Mod. Phys. 45, pp. 574-588.

Kirkwood, J.G., 1939. Skeletal Modes of Vibration of Long Chain Molecules. J. Chem. Phys. 7, pp. 506-512.

Kitagawa, H.; Aijara, T. & Kawazoe, Y., 1998. (Eds.). Mesoscopic Dynamics of Fracture: Computational Materials Design. Springer-Verlag, Berlin.

Landau, L.D. & Lifshitz, E.M., 1986. Theory of Elasticity. Course of Theoretical Physics 7. Pergamon Press. Oxford.

Lawn, B.R., 1993. Fracture in Brittle Solids. Cambridge University Press, Cambridge.

Lawn, B.R. & Wilshaw, T.R., 1975. Fracture of Brittle Solids, Cambridge University Press, Cambridge.

Lemieux, M.A.; Breton, P. & Tremblay, A.S., 1985. Unified Approach to Numerical Transfer Matrix Method for Disordered Systems: Applications to Mixed Crystals and to Elasticity Percolation. J. Physique Lett. 46, L1-L7.

Leath, P.L., 1976. Cluster Size and Boundary Distribution Near Percolation Threshold. Phys. Rev. B 14, pp. 5046-5055.

Louis, E.; Guinea, F. & Flores, F., 1986. The Fractal Nature of Fracture, en Fractals in Physics. L. Pietronero & E. Tosatti (Eds.), pp. 177-180, Elsevier, Amsterdam.

Louis, E. & Guinea, F., 1987. The Fractal Nature of Fracture. Europhys. Lett. 3, pp. 871-877.

Malvern, L.E., 1969. Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium. Prentice-Hall, New Jersey.

Marder, M. & Fineberg, J., 1996. How Things Break. Physics Today, pp. 24-29.

Martín, T.; Español, P.; Rubio, M. & Zúñiga, I., 2000. Dynamic Fracture in a Discrete Model of a Brittle Elastic Solid, Phys. Rev. E 61, pp. 6120-6131.

Maugin, G.A., 1992. The Thermomechanics of Plasticity and Fracture, Cambridge Text in Applied Mathematics 6, Cambridge University Press, New York.

McClintock, F. A. & Argon, A.S., 1966. Mechanical Behavior of Materials. Addison-Wesley, New York.

Meakin, P.A., 1987. Simple Model for Elastic Fracture in thin Films. Thin Solid Films 151, 165-190.

Meakin, P.; Li, G.; Sander, L.M.; Louis, E. & Guinea, F., 1989. A Simple Two-Dimensional Model for Crack Propagation, J. Phys. A: Math. Gen. 22, pp. 1393-1403.

Mora, P., 1990. Seismic Modeling Using the Phononic Lattice Solid Method. 60th Ann. Internat. Mtg., Soc. Expl. Geophys., Expanded Abstracts., pp. 23-27.

Mora, P., & Place, D., 1993. A Lattice Solid Model for the Nonlinear Dynamics of Earthquakes, Int. J. Mod. Phys. C 4, pp. 1059-1074.

Mott, N.F., 1948. Brittle Fracture in Mild Steel Plates, Eng. 165, pp. 16-23.

Muskhelishvili, N.I., 1953. Some Basic Problems of the Mathematical Theory of Elasticity. Groningen, Netherlands.

Nakamura, T., & Parks, D.M., 1988. Three-Dimensional Stress Field Near the Crack front of a Thin Elastic Plate. J. Appl. Mech. 55, pp. 805-813.

Nihei, K.; Cook, N. & Johnson, L., 1991. Modelling Elastic Waves in Fractured Rock with the Kirkhoff Method. Proceeding of the 32nd U.S. Symposium on Rock Mechanics, en Rock Mechanics as a Multidisciplinary Science. J. Roegiers (Ed.), pp. 407-413, Balkema, Rotterdam.

Nowacki, W., 1970. Theory of Micropolar Elasticity. Springer-Verlag, New York.

Oda, M.A., 1986. Theory for Coupled Stress and Fluid Flow Analysis in Jointed Rock Masses, en Large Deformations of Solids, Physical Basis and Mathematical Modelling. J. Gittus et al. (Eds.), pp. 349-373, Elsevier, London.

Orowan, E.O., 1950. Fundamentals of Brittle Behavior of Metals, en Fatigue and Fracture of Metals, W.M. Murray (Ed.), pp. 139-158, Wiley, New York.

Ostoja-Starzewski, M.; Sheng, Y. & Alzebdeh, K., 1996. Spring Network Models in Elasticity and Fracture of Composites and Polycrystals, Comput. Mater. Sci. 7, pp. 82-93.

Paterson, L., 1989. Serrated Fracture Growth with Branching. Proceeding of the 29th U.S. on Rock Mechanics, en Key Questions in Rock Mechanics. P. Cundall (Ed.), pp. 351-358, Balkema, Rotterdam.

Place, D. & Mora, P., 2000. Numerical Simulation of Localization Phenomena in a Fault Zone, Pure Appl. Geophys. 157, pp. 1821-1845.

Rafii-Tabar, H., 2000. Modelling the Nanoscale Phenomena in Condensed Matter Physics Via Computer-Based Numerical Simulations, Phys. Rep. 325, pp. 239-310.

Ramírez-Cruz, L.; Del Valle-García, R.; Urrutia-Fucugauchi, J. & Sánchez-Sesma, F., 2003. Estimating the Seismic Attenuation in a Fractured Oil Reservoir in Northeastern Mexico Via Time-Frequency Analysis, Sometido a J. Appl. Geophys.

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

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

Roux, S. & Guyon, E., 1985. Mechanical Percolation a Small Beam Lattice Study. J. Physique Lett. 46, L999-L1004.

Ruffino, E., & Delsanto, P.P., 2000. Scattering of Ultrasonic Waves by Void Inclusions, J. Acoust. Soc. Am. 108(4), pp. 1941-1945.

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

Sahimi, M.. 1998. Non-Linear and Non-Local Transport Process in Heterogeneous Media: form Long-Range Correlated Percolation to Fracture and Materials Breakdown. Phys. Rep. 306, pp. 213-395.

Saltzer, S.D. & Pollard, D.D., 1992. Distinct Element Modelling of Structures Formed in Sedimentary Overburden by Extensional Reactivation of Basement Normal Faults, Tectonics 11, pp. 165-174.

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

Schlick, T., 2002. Molecular Modelling and Simulation: An Interdisciplinary Guide, Springer, New York.

Schwartz, L.; Johnson, D. & Feng, S., 1984. Vibrational Modes in Granular Materials. Phys. Rev. Lett. 52, pp. 831-834.

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

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

Shmuely, M. & Alterman, Z.S., 1973. Crack Propagation Analysis by Finite Differences, Trans. ASME, pp. 902-908.

Sneddon, I.N., 1946. The Distribution of Stress in the Neighborhood of a Crack in an Elastic Solid. Proc. Royal Soc. London 187, pp. 229-260.

Sokolnikoff, S., 1956. Mathematical Theory of Elasticity, McGraw-Hill, New York.

Soll, W.; Ferrand, L. & Celia, M., 1988. An Enhanced Percolation Model for the Capillary Pressure-Saturation Relation, en Computational Methods in Water Resources 1: Modelling Surface and Sub-Surface Flows. M. Celia et al. (Ed.), pp. 165-170, Elsevier, Amsterdam.

Starzak, M.E., 1989. Mathematical Methods in Chemistry and Physics. Plenum Press, New York.

Stockl, H. & Aver, F., 1976. Dynamic Behavior of a Tensile Crack: Finite Difference Simulation of Fracture Experiments. Int. J. Fracture 12, pp. 345-358.

Strang, G. & Fix, G., 1973. An Analysis of the Finite Element Method. Prentice-Hall, New Jersey.

Stroh, A.N.A., 1960. Simple Model of a Propagating Crack, J. Mech. Phys. Solids 8, pp. 119-123.

Takayasu, H.A., 1985. Deterministic Model of Fracture, Prog. Theor. Phys. 74, pp. 1343-1345.

Timoshenko, S.P. & Gooodier, J.N., 1970. Theory of Elasticity, McGraw-Hill, New York.

Toomey, A. & Bean, C.J., 2000. Numerical Simulation of Seismic Waves Using a Discrete Particle Scheme, Geophys. J. Int. 141, pp. 595-604.

Turley, J. & Sines, G., 1971. Anisotropic Behaviour of the Compliance and Stiffness Coefficients for Cubic Materials. J. Phys. D: Appl. Phys. 4, pp. 1731-1736.

Ursenbach, C.P., 2001. Simulation of Elastic Moduli of Porous Media, 71st Ann. Internat. Mtg., Soc. Expl. Geophys., Expanded Abstracts., pp. 1704-1707.

Van Rossum, M. & Nieuwenhuizen, T., 1999. Multiple Scattering of Classical Waves: from Microscopy to Mesoscopy and Diffusion. Rev. Mod. Phys. 71, pp. 313-371.

Verlet, L., 1967. Computer Experiments on Classical Fluids: I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. Phys. Rev. 159, pp. 98-103.

Wang, J., 1989. The Bond-Bending Model in Three Dimensions. J. Phys. A: Math. Gen. 22, L291-L295.

Westergaard, H.M., 1939. Bearing Pressures and Cracks. J. Appl. Mech. 6, pp. 49-53.

Wilkinson, D. & Willemsen, J.F., 1983. Invasion Percolation. J. Phys. A 16, pp. 3365-3373.

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

Yoffe, E.H., 1951. The Moving Griffith Crack. Phil. Mag. 42, pp. 739-750.

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

Ziff, R.M.; Cummings, P.T. & Stell, G., 1984. A New Approach to Invasion Percolation. J. Phys. A 17, pp. 3009-3016.