



Universidad Politécnica de Madrid

Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos,
Canales y Puertos

Micromecánica computacional de materiales compuestos reforzados con partículas

Tesis doctoral

Javier Segurado Escudero
Ingeniero de Materiales

Madrid, Junio 2004



Departamento de Ciencia de Materiales

Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos,
Canales y Puertos

Universidad Politécnica de Madrid

Micromecánica computacional de materiales compuestos reforzados con partículas

Tesis doctoral

Javier Segurado Escudero
Ingeniero de Materiales

Director de la tesis

Javier LLorca
Dr. Ingeniero de Caminos, Canales y Puertos
Catedrático de Universidad

Madrid, Junio 2004



*A Cristina.
A mis padres Gregorio y Basilisa
y a mis hermanos Juan y Ana.*

Índice general

Agradecimientos	XI
Resumen	XIII
Abstract	XV
Notación	XVII
1. Introducción	1
1.1. Aproximación al problema	1
1.2. Micromecánica de materiales compuestos	2
1.2.1. Modelos de campo medio	3
1.2.2. Extensión al régimen elasto-plástico	10
1.2.3. Teoremas de acotación	13
1.2.4. Modelos de celda unitaria	16
1.2.5. Modelos de celda embebida	22
1.3. Modelos micromecánicos de daño	23
1.3.1. Fractura de partículas	26
1.3.2. Decohesión en la interfase matriz-refuerzo	29
1.3.3. Fractura dúctil de la matriz	34
1.4. Distribución inhomogénea del refuerzo	38
1.5. Objetivos	40
2. Generación de Microestructuras Isótropas	43
2.1. Aspectos estadísticos	44
2.1.1. Centro de masas y momento de inercia	44

2.1.2.	La función de distribución radial	45
2.1.3.	Distancia al vecino más próximo	46
2.2.	Microestructuras estadísticamente homogéneas	46
2.2.1.	Algoritmo de adsorción secuencial aleatoria	47
2.2.2.	Algoritmo modificado de adsorción secuencial aleatoria	47
2.2.3.	Análisis de las microestructuras	51
2.3.	Microestructuras estadísticamente no homogéneas	53
2.3.1.	Algoritmo de generación de la microestructura	54
2.3.2.	Análisis de las microestructuras	57
3.	Técnicas de simulación con elementos finitos	61
3.1.	Discretización	61
3.2.	Condiciones de contorno	64
3.3.	Tipo de elemento y algoritmo de cálculo	65
3.4.	Elemento finito de intercara	67
3.4.1.	Definición del problema global	67
3.4.2.	Formulación del elemento	69
3.4.3.	Validación del elemento	72
3.5.	Técnica alternativa de control	74
4.	Simulación del comportamiento elasto-plástico	77
4.1.	Determinación de las constantes elásticas	77
4.1.1.	Selección del volumen representativo	78
4.1.2.	Resultados y discusión	80
4.2.	Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos	88
4.2.1.	Selección del volumen representativo y discretización	89
4.2.2.	Resultados y discusión	91
4.3.	Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos	103
4.3.1.	Selección del volumen representativo y discretización	104
4.3.2.	Resultados y discusión	104
4.3.3.	Estimación de la fractura del refuerzo	111
5.	Simulación del daño	117
5.1.	Decohesión de la intercara	117

Índice general

5.1.1. Implementación del modelo de fisura cohesiva	118
5.1.2. Volumen representativo y discretización	122
5.1.3. Resultados y discusión	123
5.2. Fractura de las partículas	133
5.2.1. Volumen representativo, discretización y control	134
5.2.2. Resultados y discusión	135
5.3. Daño en la matriz	139
5.3.1. Modelos numéricos	139
5.3.2. Resultados y discusión	141
6. Validación experimental	153
6.1. Selección y fabricación del material	153
6.2. Comportamiento mecánico de las fases	156
6.2.1. Partículas de WC	156
6.2.2. Matriz de aluminio	159
6.3. Estudio de la microestructura	161
6.4. Comportamiento mecánico del material compuesto	163
6.4.1. Micromecanismos de fractura	165
6.5. Modelización	171
6.5.1. Modelización	172
7. Conclusiones y trabajo futuro	177
7.1. Conclusiones	177
7.2. Trabajo futuro	179
A. Funciones de forma	181
Bibliografía	197

Agradecimientos

Primero deseo expresar mi agradecimiento a mi director de tesis, el profesor D. Javier LLorca, por la acertada y eficiente dirección de la investigación desarrollada, así como por las ideas, consejos, y todas las enseñanzas que ha sabido transmitirme en este tiempo.

A todos los miembros del departamento de Ciencia de Materiales de la E.T.S. de Ingenieros de Caminos de la U.P.M., por su disponibilidad y ayuda. Quisiera agradecer especialmente a Carlos González su disposición, amistad y la continua ayuda prestada durante el desarrollo de la tesis, tanto en temas teóricos y numéricos como su ayuda en el trabajo experimental. A David Cendón y Javier Gómez por ayudarme con problemas surgidos en la programación del elemento de intercara y el control numérico de los cálculos. A Francisco Gálvez por sus continuas ayudas informáticas. A Jaime Planas por sus valiosos consejos en diversos temas numéricos. A Antonia Martín por su ayuda con el microscopio electrónico. A Pedro Poza por su amistad y consejos. También quisiera agradecer a mis compañeros becarios de doctorado Gustavo, Fran, Alicia y Marina, así como a José Miguel Atienza por su amistad y apoyo en este tiempo y a Marina agradecerle especialmente su paciencia y buen humor como compañera de despacho estos últimos años. Y finalmente al profesor D. Manuel Elices por acogerme para realizar la tesis en este prestigioso departamento.

Quisiera agradecer también a Arnaud Weck de la Universidad de Mc Master en Hamilton (ON), Canadá, por su ayuda dentro y fuera de la universidad durante mi estancia en Canadá. Así mismo quisiera manifestar mi gratitud al profesor David Wilkinson por prestarme la oportunidad de la estancia de doctorado en Canadá. Al profesor José Luis Pérez Castellanos y a Jorge Zahr por permitirme lanzar cálculos en el ordenador de su departamento durante el último mes de tesis. Por último, quisiera extender también mi agradecimiento al profesor Helmut Böhm de la Universidad Técnica de Viena por introducirme en el mundo de la simulación micromecánica y darme una base de partida para esta tesis.

Agradecimientos

Al ministerio de Educación, Cultura y Deporte por la concesión de la beca de formación de profesorado universitario que me ha permitido sobrevivir estos 4 años, al ministerio de Ciencia y Tecnología y a la comunidad de Madrid que han financiado parte de las investigaciones a través de los proyectos de investigación MAT2000-153 y 07N/12/2002, respectivamente.

Finalmente me gustaría agradecer a Cristina por su apoyo, cariño y paciencia durante este tiempo. A mis padres y hermanos por sus consejos, ánimo y cariño. A mis amigos de aquí y de allá por su amistad.

Resumen

La capacidad de cálculo actual de los ordenadores digitales permite resolver problemas que antes solo podían abordarse mediante grandes simplificaciones. Esta tesis doctoral presenta una contribución en esta línea al relacionar el comportamiento mecánico de los materiales compuestos con su estructura a nivel microscópico. La investigación partió de una representación de la microestructura de los materiales compuestos reforzados con partículas a partir de volúmenes representativos tridimensionales, denominados celdas multipartícula, que estaban formados por distribuciones aleatorias de esferas cuyas posiciones se generaron mediante diferentes algoritmos desarrollados a este efecto. Las celdas se discretizaron y analizaron mediante el método de los elementos finitos y el comportamiento mecánico del material compuesto se determinó promediando los resultados de varias dispersiones diferentes por cada microestructura simulada.

Las simulaciones numéricas permitieron obtener en primer lugar una solución *exacta* de un problema clásico en Mecánica de Sólidos: las constantes elásticas de una distribución aleatoria y estadísticamente homogénea de esferas rígidas o huecos esféricos embebidos en una matriz continua. Este resultado permitió evaluar la precisión de los principales modelos analíticos desarrollados durante los últimos cuarenta años y se llegó a la conclusión de que los mejores resultados se logran con la aproximación de tercer orden de Torquato.

La simulación numérica de las celdas multipartícula también proporcionó una solución cercana a la exacta para el comportamiento elasto-plástico de un material compuesto formado por una distribución aleatoria y estadísticamente homogénea de esferas elásticas dispersas en una matriz elasto-plástica. Los resultados de las simulaciones numéricas se compararon con las soluciones obtenidas a partir de los modelos de campo medio secantes — que incluyen la deformación plástica de la matriz a partir de la teoría de la plasticidad en deformaciones totales — y se demostró que estos modelos proporcionan mejores resultados cuando utilizan como tensión de referencia para determinar la deformación plástica

de la matriz la tensión equivalente calculada a partir de momento de segundo orden del tensor de tensiones en la matriz. Sin embargo, los modelos de campo medio no son capaces de reproducir adecuadamente la localización de la deformación en la matriz que aparece al comienzo de la deformación plástica. El análisis de los microcampos de tensiones en la matriz proporcionados por las simulaciones de celdas multipartícula señaló el origen de esta limitación e indicó la líneas a seguir para desarrollar nuevas aproximaciones que incluyan el efecto de la localización.

Las nuevas técnicas de simulación también permitieron abordar de manera rigurosa el efecto de la distribución espacial de las partículas de refuerzo en las propiedades mecánicas de los materiales compuestos. Se generaron microestructuras inhomogéneas donde las partículas de refuerzo estaban concentradas en regiones esféricas con una fracción volumétrica local superior al valor medio. Los resultados numéricos mostraron que la inhomogeneidad en la distribución del refuerzo sólo incrementaba ligeramente la rigidez del material compuesto a nivel global, aunque las distribuciones de tensiones presentaban grandes diferencias a nivel local: los valores máximos de la tensión y la deformación en ambas fases eran mucho más elevados en lo materiales con microestructura inhomogénea.

La evidencia experimental ha demostrado que la rotura de los materiales compuestos es precedida por tres mecanismos de daño: fractura de las partículas de refuerzo, de la intercara matriz/refuerzo y de la matriz. Los dos primeros mecanismos se introdujeron en las simulaciones mediante un elemento finito de intercara cuyo comportamiento mecánico venía dictado por una ley cohesiva mientras que la fractura dúctil de la matriz se incluyó a través del modelo de Gurson. Los resultados numéricos reprodujeron con precisión los patrones de daño observados experimentalmente, y mostraron que la presencia de estos mecanismos de daño reduce sensiblemente la capacidad de endurecimiento por deformación de los materiales compuestos. Esta reducción fue mucho más acusada en las microestructuras inhomogéneas donde el daño se inició rápidamente en las regiones con una fracción volumétrica de refuerzo muy elevada como consecuencia de las concentraciones de tensiones generadas durante la deformación, y las microestructuras inhomogéneas presentaron valores mucho menores de la tensión de rotura y la ductilidad. Finalmente, las simulaciones numéricas se validaron experimentalmente comparando con los resultados obtenidos sobre un material compuesto “modelo” fabricado para esta investigación, y donde el mecanismo de daño dominante era la decohesión entre la matriz de aluminio y las esferas de refuerzo de WC.

Abstract

With the capacity of present-day digital computers, problems can be solved that were formerly approached only with great simplifications. This thesis advances the trend, relating the mechanical behavior of composite materials to their microstructure. The microstructure of particle reinforced composites is represented here by three-dimensional volumes, known as multiparticle cells, made up from a random distribution of spheres whose positions were generated from algorithms developed for this purpose. The cells were discretised and analysed by the finite element method, and the mechanical behavior of the composite was obtained by averaging the results provided by several dispersions for each microstructure.

The numerical simulations provided an *exact* solution of a classical problem in solid mechanics: the elastic constants of a statistically homogeneous random distribution of rigid spheres and spherical voids embedded in a continuous matrix. This allowed an evaluation of the accuracy of the most important analytical models developed over the last forty years, and showed that the best results are obtained with the Torquato third order approximation.

The simulation of the multiparticle cells also provided useful data of the elastoplastic behavior of a composite made of elastic spheres embedded in an elasto-plastic matrix. The results of the simulations were compared with those from mean-field secant models — which include the plastic deformation of the matrix by using the theory of total deformation plasticity— and it was found that these models provide better results when they use as the reference stress of the plastic strain in the matrix the equivalent stress computed from the second order moment of the stress tensor in the matrix. However, the mean-field models do not reproduce accurately the strain localisation in the matrix which appears at the onset of plasticity. The analysis of the stress microfields in the matrix provided by the simulations of the multiparticle cells indicated the cause of this limitation and the way to develop new approaches that would include the effect of the localisation.

Numerical simulations also allowed a measurement of the effect of the spatial distribution of the reinforcement particles on the mechanical properties of composites. Inhomogeneous microstructures were generated with the particles concentrated on spherical regions with a local volume fraction above the average. The numerical results showed that the inhomogeneity of the reinforcement distribution hardly increased the stiffness of the composite at global level, whereas at the local level the differences were considerable, the maximum stress and strain in both phases being much higher in the materials with an inhomogeneous microstructure.

Experimental data show that the breakage of composite materials is preceded by three damage mechanisms: breakage of the reinforcement particles, of the interface matrix-particles, and finally in the matrix. The first two of these mechanisms were introduced in the simulations by an interface finite element with the mechanical behavior dictated by a cohesive law. The ductile fracture of the matrix was included by the use of the Gurson model. The numerical results accurately reproduced the patterns of damage observed experimentally, and showed that the presence of these damage mechanisms reduces perceptibly the hardening capacity of composite materials. This reduction was much higher in the inhomogeneous microstructures where the damage began quickly in regions with a very high reinforcement volume fraction as consequence of the stress concentrations generated in the course of deformation, and these inhomogeneous microstructures showed much lower strength and ductility. Finally, the numerical simulations were validated experimentally by comparing them with the results of a composite material modeled for this investigation, and which the dominant damage mechanism was the decohesion between the aluminum matrix and the reinforcement WC spheres.

Notación

A lo largo de la tesis se utilizará la notación tensorial que se detalla a continuación

a	Vector, componentes a_i
α	Tensor de segundo orden, componentes α_{ij}
A	Tensor de cuarto orden, componentes A_{ijkl}
I	Tensor identidad
\mathbf{A}^T	Tensor transpuesto
ab	Producto escalar, $(\mathbf{ab}) = a_i b_i$
$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$	Producto vectorial
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{ij} = a_i b_j$
$\alpha \mathbf{a}$	$(\alpha \mathbf{a})_i = \alpha_{ij} a_j$
$\mathbf{A} \alpha$	$(\mathbf{A} \alpha)_{ij} = A_{ijkl} \alpha_{kl}$
$\alpha \beta$	$(\alpha \beta)_{ij} = \alpha_{ik} \beta_{kj}$
$\alpha : \beta$	$(\alpha \beta) = \alpha_{ij} \beta_{ij}$
\mathbf{AB}	$(\mathbf{AB})_{ijkl} = A_{ijmn} B_{mnkl}$
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	$(\mathbf{A} : \mathbf{B}) = A_{ijkl} B_{ijkl}$
$\alpha \otimes \beta$	$(\alpha \otimes \beta)_{ijkl} = \alpha_{ij} \beta_{kl}$

Las principales variables usadas a lo largo del texto en el orden en que aparecen en este se detallán en el siguiente listado

- $\bar{\cdot}$: Media volumétrica
- $\boldsymbol{\sigma}_p$: Tensor de tensiones en la fase p
- $\boldsymbol{\epsilon}_p$: Tensor de deformaciones en la fase p
- $\boldsymbol{\sigma}$: Tensor de tensiones efectivo del material compuesto
- V_p : Volumen de la fase p en el compuesto
- ξ : Fracción volumetrica de inclusiones
- \mathbf{A}_p : Tensor de concentración de deformación de la fase p
- \mathbf{B}_p : Tensor de concentración de tensión de la fase p

- \mathbf{L}_p : Tensor elástico de rigidez de la fase p
- \mathbf{M}_p : Tensor elástico de flexibilidad de la fase p
- \mathbf{L} : Tensor elástico de rigidez efectivo del material compuesto
- \mathbf{M} : Tensor elástico de flexibilidad efectivo del material compuesto
- E_p, ν_p : Módulo elástico y coeficiente de poisson de la fase p
- K_p, G_p : Módulo de compresibilidad y de elasticidad transversal

- $\boldsymbol{\epsilon}_T$: Tensor de deformación libre de una región aislada
- $\boldsymbol{\epsilon}_c$: Tensor de deformación de equilibrio de una región embebida en un medio
- \mathbf{S}_i : Tensor de Eshelby de una inclusión i
- \mathbf{A}_p^{dil} : Tensor de concentración de deformación diluido de la fase p
- \mathbf{A}_p^{mt} : Tensor de concentración de deformación de Mori-Tanaka de la fase p
- \mathbf{A}_p^{sc} : Tensor de concentración de deformación autoconsistente de la fase p

- $\mathbf{A}_p^{tan}, \mathbf{B}_p^{tan}$: Tensores de concentración tangentes de la fase p
- \mathbf{M}_m^s : Tensor de flexibilidad secante de la matriz
- \mathbf{M}^s : Tensor de flexibilidad secante efectivo del material compuesto
- G_m^s : Módulo de elasticidad transversal secante de la matriz
- $\hat{\sigma}_m^{eq}$: Tensión equivalente, calculada a partir del tensor de tensiones medio
- $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$: Tensión equivalente calculada a partir de la media del momento de segundo orden de la tensión

Notación

- $\mathcal{I}^{(p)}$: Función indicador de la fase p
 $S_n^{(p)}$: Función de probabilidad de n – puntos de la fase p
 ζ, η : Parámetros microestructurales para límites de orden superior
- \mathbf{x} : Vector de posición
 \mathbf{u} : Vector desplazamiento
- F : Probabilidad de fractura
 $n(\sigma)$ y $n(\boldsymbol{\sigma})$: Funciones de concentración de defectos escalar y vectorial
 V_0, σ_0, m : Volúmen característico, tensión característica y módulo de Weibull
 $\sigma^I, \sigma^{II}, \sigma^{III}$: Tensiones principales
- Δu_n : Apertura de grieta en dirección normal
 Δu_t : Apertura de grieta en dirección tangencial
 Δu_c : Apertura normal de grieta máxima que transmite tensiones
 t_n : Tensión cohesiva normal a la grieta
 t_t : Tensión cohesiva tangencial a la grieta
 t_c : Máxima tensión transmitida por la grieta
 γ : Relación entre rigidez tangencial y normal
 Γ_{in} : Energía de fractura de la intercara
 K_n : Rigidez inicial de la intercara (MPa/m)
 λ : Apertura generalizada de grieta
- $\bar{\sigma}$: Tensión de plastificación
 Φ : Potencial plástico del modelo de Gurson
 f, f^* : Fracción volumétrica de huecos en modelo de Gurson y Gurson-Tveergard-Needleman respectivamente
 f_c : Fracción volumétrica de huecos para comienzo de coalescencia
 f_{nuc}, f_{crec} : Fracción volumétrica de huecos por nucleación y crecimiento
 f_n : Fracción volumétrica de partículas que nuclean huecos
 q_1, q_2 : Constantes del modelo de Gurson modificado por Tveergard

- $\bar{x}^{(\Omega)}$: Centro de masas de una región Ω del material
 \mathbf{I} : Momento de inercia de las partículas en el volumen representativo
 $g(r)$: Función de distribución radial
 $K(r)$: Numero de centros en una esfera de radio r
 d_λ : Distancia al vecino más proximo
 $s(d_\lambda)$: Desviación estandar de la distancia al vecino más proximo
- s_1 : Distancia mínima entre centros de dos esferas dividida entre 2
 s_2 : Distancia mínima entre esferas y caras de la celda
 s_c : Factor de compresión en AASAM
 \mathbf{h} : Vector de periodicidad
 $\mathbf{x}_N^{(i)}$: Vector posición de la partícula i en la iteración N
 L_N : Longitud del lado de la celda en la iteración N
 ξ_N : Fracción volumétrica de esferas en la iteración N
 s_c^* : Distancia de movimiento de partículas
 \mathbf{u} : Vector de dirección de desplazamiento de partícula
- R_{cl} : Radio de la regiones que contienen los *clusters*
 r_{cl} : Radio de los *clusters*
 ξ_{cl} : Fracción volumétrica de los *clusters*
 \mathbf{X}_i : Vector de posición del centro del *cluster* i
 n_{cl} : Número de esferas por cluster
- \mathbf{f}_{int} : Vector global de fuerzas nodales internas
 K : Matriz de rigidez tangente global
 \mathbf{f}_N^{el} : Fuerzas nodales internas en elemento de intercara
 \mathbf{K}^{el} : Matriz de rigidez tangente del elemento de intercara
 \mathbf{x}_N : Vector de coordenadas nodales en configuración inicial
 \mathbf{d}_N : Vector de desplazamientos nodales
 $\Delta \mathbf{u}_N$: Vector de desplazamientos relativo de pares de nodos
 $\Delta \mathbf{u}$: Vector de apertura de grieta
 ξ, η : Coordenadas naturales de elemento

Notación

ϕ_i :	Función de forma del nodo i
Φ :	Matriz interpolación de aperturas
\mathbf{x}_N^R :	Vector de coordenadas nodales en configuración deformada
$\hat{n}, \hat{t}_1, \hat{t}_2$:	Vectores normales y tangenciales al elemento
\mathbf{R} :	Matriz de paso del sistema de referencia global al local
\mathbf{t}_{loc} :	Vector de tensión cohesiva en coordenadas locales
$\Delta \mathbf{u}_{loc}$:	Vector de apertura de grieta en coord. locales
J :	Jacobiano de transformación de coordenadas
ω_j :	Peso del punto de Gauss j
\mathbf{C}_{loc} :	Matriz constitutiva tangente
E_i :	Rigidez inicial relativa de una intercara (MPa)
λ^* :	Máxima apertura generalizada de una intercara

CAPÍTULO 1

Introducción

1.1. Aproximación al problema

La tecnología actual necesita disponer de materiales con una combinación de propiedades superior a la que proporcionan los materiales convencionales, como se ha puesto de manifiesto con frecuencia en la industria aeronáutica y aeroespacial, del automóvil o en la industria deportiva. Esta necesidad ha sido cubierta en buena parte con el desarrollo de los materiales compuestos que permiten diseñar “a priori” nuevos materiales con un conjunto de propiedades específicas que se ajustan a los requerimientos técnicos.

La idea de combinar distintos materiales para lograr propiedades diferentes está presente en la misma naturaleza. Por ejemplo, la madera es un material compuesto de fibras de celulosa embebidas en una matriz de lignina y los huesos de los mamíferos están formados por una matriz porosa mineral reforzada con fibras de colágeno. El concepto de material compuesto tampoco es nuevo desde el punto de vista tecnológico. Así, los ladrillos de adobe no son más que una matriz de arcilla cocida reforzada con fibras de paja y se han usado desde hace más de 5000 años. El hormigón es también otro material compuesto que se utiliza desde la época de los romanos y que —en volumen— es el que tiene más importancia en la actualidad. Sin embargo, la industria de los materiales compuestos es nueva y ha nacido y crecido rápidamente en los últimos cuarenta años como consecuencia de la fabricación de fibras de alto módulo y resistencia mecánica.

Los materiales compuestos están formados por dos o más fases con propiedades diferentes separadas por las respectivas interfases. La fase continua se denomina matriz, y refuerzo

la fase embebida en ella. Los materiales compuestos pueden clasificarse en tres tipos según la composición de la matriz: poliméricos, metálicos y cerámicos. Atendiendo a la geometría del refuerzo, podemos dividirlos en dos grupos: con refuerzo continuo (fibras largas) y con refuerzo discontinuo (fibras cortas, whiskers o partículas).

Los materiales compuestos reforzados con fibras largas suelen proporcionar las mejores propiedades mecánicas a la vez que presentan un comportamiento fuertemente anisótropo y necesitan de tecnologías de fabricación sofisticadas, lo que influye negativamente en el coste. Por contra, los materiales reforzados con partículas y fibras cortas suelen dar lugar a un aumento de las propiedades más moderado aunque su comportamiento es cuasi-isótropo. Además, la posibilidad de utilizar técnicas de fabricación semejantes a las empleadas en los materiales convencionales permite reducir notablemente su coste. Esta tesis doctoral se centrará exclusivamente en este último tipo de materiales.

Las propiedades mecánicas de un material compuesto dependen de las propiedades mecánicas de cada fase y de las interfases, así como de su fracción volumétrica, geometría y distribución espacial en el seno del compuesto. Además, las propiedades óptimas se ven muy a menudo limitadas por la aparición de fenómenos de daño en el material compuesto como la rotura de los refuerzos y de la matriz o la decohesión a lo largo de las interfases. La predicción de las propiedades del material compuesto a partir de aquellas de sus componentes y de su geometría no es una tarea trivial y requiere desarrollar modelos micromecánicos de comportamiento que permitan conocer la relación entre la microestructura del material y su comportamiento macroscópico incluyendo los efectos del daño. Este tipo de modelos permiten entender mejor los mecanismos de deformación y rotura de los materiales actuales, y proceder al diseño de nuevos materiales compuestos con una microestructura óptima para la aplicación deseada.

1.2. Micromecánica de materiales compuestos

El objetivo principal de la micromecánica de materiales compuestos (y, en general, de cualquier material inhomogéneo) es determinar las propiedades macroscópicas o efectivas (flexibilidad, resistencia mecánica, coeficiente de expansión térmica, etc . . .) a partir de las propiedades de las fases y de su distribución espacial dentro del material.

La relación entre la microestructura y las propiedades efectivas se puede establecer estudiando la primera a diferentes longitudes de escala. Existe un nivel nanométrico donde

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

el estudio del comportamiento se realiza teniendo en cuenta las interacciones atómicas, el movimiento de dislocaciones, la generación de vacantes, etc. A nivel micrométrico, las diferentes fases del compuesto pueden considerarse como medios continuos y aplicar las ecuaciones de la mecánica de medios continuos para analizar su comportamiento. Este análisis es el más adecuado para los materiales compuestos, donde el tamaño habitual de las partículas y fibras de refuerzo suele encontrarse en el rango de las micras a centenares de micras.

Los objetivos que se persiguen con los modelos micromecánicos de materiales compuestos son varios. La aplicación más directa tiene como resultado la obtención de las propiedades mecánicas macroscópicas a partir de la microestructura. Además, los modelos micromecánicos proporcionan ecuaciones constitutivas con base física que pueden utilizarse para simular el comportamiento de elementos estructurales fabricados con esos materiales. Por último, estas técnicas también permiten analizar fenómenos locales como la iniciación y acumulación de daño en las fases del material compuesto durante la deformación.

El estudio micromecánico de los materiales compuesto presenta gran complejidad y para abordarlo es preciso hacer diversas aproximaciones. Los métodos micromecánicos se pueden dividir en cuatro grupos atendiendo al tipo de aproximación subyacente

- Modelos de campo medio
- Teoremas de acotación
- Modelos de celda unitaria
- Modelos de celda embebida

A continuación se revisan brevemente las hipótesis y los resultados principales de estos métodos para el caso particular de materiales bifásicos formados por una matriz continua reforzada con una dispersión de inclusiones o partículas.

1.2.1. Modelos de campo medio

Los modelos de campo medio suponen que los campos de tensiones y deformaciones dentro de cada fase se pueden representar por sus medias volumétricas, $\bar{\sigma}_m$ y $\bar{\epsilon}_m$ para la matriz y $\bar{\sigma}_i$ y $\bar{\epsilon}_i$ para las inclusiones de refuerzo o partículas. Si V_m es el volumen ocupado

por la matriz en el material compuesto y V_i es el volumen ocupado por las inclusiones, las medias volumétricas se pueden calcular como,

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m &= \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \boldsymbol{\sigma}_m(\mathbf{x}) dV & \text{y} & & \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_m &= \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \boldsymbol{\epsilon}_m(\mathbf{x}) dV \\ \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i &= \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \boldsymbol{\sigma}_i(\mathbf{x}) dV & \text{y} & & \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_i &= \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \boldsymbol{\epsilon}_i(\mathbf{x}) dV\end{aligned}\quad (1.1)$$

donde $V_m + V_i = V$ es el volumen representativo del material compuesto que se estudia, y el vector \mathbf{x} indica la posición de un punto material en el interior de la fase correspondiente.

Si la matriz y las inclusiones de refuerzo se comportan como sólidos elásticos, la relación entre las tensiones y las deformaciones medias en cada una de las fases se puede escribir de acuerdo con

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m = \mathbf{L}_m \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_m \quad \text{y} \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i = \mathbf{L}_i \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_i \quad (1.2)$$

donde \mathbf{L}_m y \mathbf{L}_i son los tensores de rigidez elásticos de cada fase y $\mathbf{M}_m = \mathbf{L}_m^{-1}$ y $\mathbf{M}_i = \mathbf{L}_i^{-1}$ los correspondientes tensores de flexibilidad.

Las tensiones y deformaciones medias en el material compuesto, $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ y $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}$, (denominadas efectivas) se obtienen integrando las tensiones y deformaciones medias en cada una de las fases dentro del volumen representativo. Esta operación se denomina homogeneización y se expresa como

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = (1 - \xi) \bar{\boldsymbol{\sigma}}_m + \xi \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i \quad \text{y} \quad \bar{\boldsymbol{\epsilon}} = (1 - \xi) \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_m + \xi \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_i \quad (1.3)$$

donde ξ es la fracción volumétrica de las inclusiones en el material compuesto. Las tensiones y deformaciones efectivas se relacionan con las tensiones y deformaciones medias en cada fase a través de los correspondientes tensores de concentración de la deformación (\mathbf{A}_i y \mathbf{A}_m) y de la tensión (\mathbf{B}_i y \mathbf{B}_m) según

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m &= \mathbf{B}_m \bar{\boldsymbol{\sigma}} & \text{y} & & \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_m &= \mathbf{A}_m \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \\ \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i &= \mathbf{B}_i \bar{\boldsymbol{\sigma}} & \text{y} & & \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_i &= \mathbf{A}_i \bar{\boldsymbol{\epsilon}}\end{aligned}\quad (1.4)$$

que, evidentemente, deben satisfacer las relaciones

$$(1 - \xi) \mathbf{A}_m + \xi \mathbf{A}_i = \mathbf{I} \quad \text{y} \quad (1 - \xi) \mathbf{B}_m + \xi \mathbf{B}_i = \mathbf{I} \quad (1.5)$$

donde \mathbf{I} es el tensor unitario de cuarto orden. Las constantes elásticas efectivas quedan determinadas en el momento en el que se conoce uno de los cuatro tensores de concentración

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

y teniendo en cuenta las ecuaciones 1.2-1.5 se llega a

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_m + \xi (\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m) \mathbf{A}_i \quad \text{y} \quad \mathbf{M} = \mathbf{M}_m + \xi (\mathbf{M}_i - \mathbf{M}_m) \mathbf{B}_i \quad (1.6)$$

donde \mathbf{L} es el tensor de rigidez del material compuesto y $\mathbf{M} = \mathbf{L}^{-1}$ el correspondiente tensor de flexibilidad. El problema elástico se reduce por tanto a calcular cuanto vale uno de los cuatro tensores de concentración en función de la microestructura del volumen representativo del material compuesto.

Modelo de Eshelby

Los tensores de concentración de la deformación y de la tensión son función de la fracción volumétrica, de la forma y de las ecuaciones constitutivas de las fases, y se pueden calcular siguiendo distintas aproximaciones. La mayor parte de ellas se apoyan en el trabajo pionero de Eshelby (1957) sobre el comportamiento de una inclusión elástica de forma elipsoidal embebida en un medio elástico e indefinido.

Para resolver este problema, Eshelby estudió el comportamiento de un material homogéneo donde una región elipsoidal cambia de forma espontáneamente al sufrir una deformación uniforme generando tensiones en el resto del material y en sí misma. Si denominamos ϵ_T a la deformación uniforme de la región elipsoidal si estuviera aislada, la deformación de equilibrio ϵ_c de esta región embebida en el sólido es uniforme y está relacionada con ϵ_T según

$$\epsilon_c = \mathbf{S}_i \epsilon_T \quad (1.7)$$

donde \mathbf{S}_i es el tensor de Eshelby para la inclusión elipsoidal. Además, la tensión en la inclusión se puede obtener directamente aplicando la ley de Hooke como

$$\sigma_i = \mathbf{L}_m (\epsilon_c - \epsilon_T) = \mathbf{L}_m (\mathbf{S}_i - \mathbf{I}) \epsilon_T \quad (1.8)$$

El tensor de Eshelby \mathbf{S}_i solo depende de la geometría de la inclusión y de las constantes elásticas de la matriz y existen expresiones analíticas para sus componentes para muchos casos de interés (elipsoides, fibras largas, discos ...).

La importancia del resultado anterior radica en que puede usarse para obtener el tensor de concentración de la deformación de una inclusión elipsoidal embebida en un medio infinito de propiedades diferentes mediante el concepto de la *inclusión elástica equivalente*. Si el conjunto inclusión/matriz se encuentra sometido a una deformación efectiva $\bar{\epsilon}$, la deformación en la inclusión puede calcularse sustituyendo la inclusión real por otra ficticia de

propiedades iguales al medio, tal y como se ha descrito anteriormente. La inclusión ficticia sufre una deformación libre de tensión ϵ_T tal que los campos de tensión y deformación de ambas inclusiones (ficticia y real) dentro de la matriz sean iguales. De acuerdo con la Figura 1.1, la deformación y la tensión en la inclusión ficticia vienen dadas por

$$\epsilon^{fic} = \bar{\epsilon} + \epsilon_c \quad \text{y} \quad \sigma^{fic} = \mathbf{L}_m(\epsilon_c + \bar{\epsilon} - \epsilon_T) \quad (1.9)$$

y como la deformación y tensión en la inclusión real tienen que ser iguales a las correspondientes de la inclusión ficticia, se cumple

$$\epsilon^{real} = \bar{\epsilon} + \epsilon_c \quad \text{y} \quad \sigma^{real} = \mathbf{L}_i(\epsilon_c + \bar{\epsilon} - \epsilon_T) \quad (1.10)$$

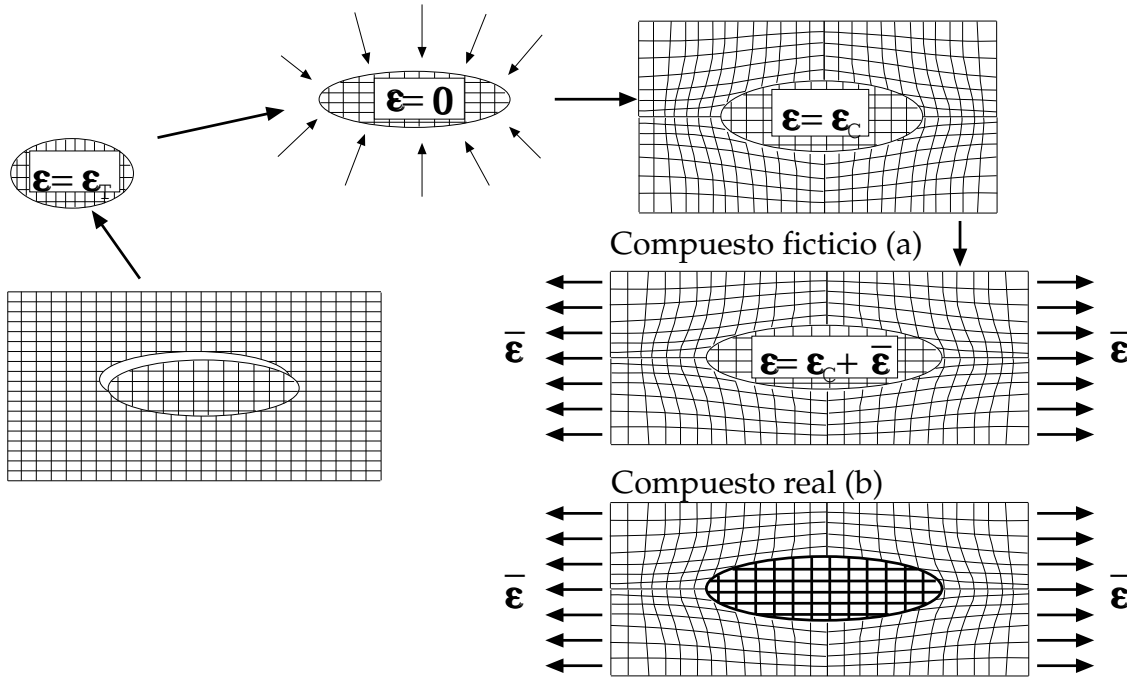


Figura 1.1: Esquema del método de la inclusión elástica equivalente para calcular el tensor de concentración de la deformación, \mathbf{A}_i^{dil}

Igualando las tensiones en las ecuaciones 1.9 y 1.10, se calcula la deformación libre ϵ_T que hay que imponer sobre la inclusión ficticia

$$\epsilon_T = [(\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m) + \mathbf{L}_m]^{-1} (\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m) \bar{\epsilon} \quad (1.11)$$

y combinando las ecuaciones 1.9 y 1.11 se obtiene el tensor de concentración de la deformación para la inclusión, \mathbf{A}_i^{dil}

$$\epsilon_i = \bar{\epsilon} + \epsilon_c = \bar{\epsilon} + \mathbf{S}_i \epsilon_T = [\mathbf{I} + \mathbf{S}_i \mathbf{L}_m^{-1} (\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m)]^{-1} \bar{\epsilon} = \mathbf{A}_i^{dil} \bar{\epsilon} \quad (1.12)$$

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

donde el superíndice *dil* indica que esta expresión sólo es exacta cuando se trata de una inclusión aislada en un medio infinito. El tensor de concentración de la deformación \mathbf{A}_i^{dil} no tiene en cuenta las interacciones entre las diferentes partículas dentro del material compuesto y solo puede usarse para obtener las propiedades de materiales compuestos cuando la fracción volumétrica del refuerzo es pequeña (en la práctica, inferior al 10%). En estas condiciones, la expresión del tensor de rigidez efectivo del material compuesto se obtiene substituyendo 1.12 en 1.6

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_m + \xi(\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m) [\mathbf{I} + \mathbf{S}_i \mathbf{L}_m^{-1}(\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m)]^{-1} \quad (1.13)$$

Existen distintos métodos basados en el modelo de Eshelby para calcular las propiedades efectivas de un compuesto cuando la fracción volumétrica de inclusiones es finita. Entre ellos destacan los modelos de Mori-Tanaka y los modelos autoconsistentes.

Modelo de Mori-Tanaka

El modelo de Mori y Tanaka (1973) fue reformulado por Benveniste (1987) en el contexto de los tensores de concentración de la deformación. De acuerdo con Benveniste, el tensor de concentración de la deformación \mathbf{A}_i^{mt} de la inclusión puede calcularse por interpolación entre los correspondientes tensores de concentración para el caso diluido \mathbf{A}_i^{dil} y para $\xi \rightarrow 1$ ($\mathbf{A}_i \approx \mathbf{I}$). La interpolación más simple tiene la forma

$$\mathbf{A}_i^{mt} = \mathbf{A}_i^{dil} [(1 - \xi)\mathbf{I} + \xi \mathbf{A}_i^{dil}]^{-1} \quad (1.14)$$

y las propiedades elásticas efectivas se obtienen de forma directa introduciendo esta expresión para el tensor de concentración de deformación en la ecuación 1.6 según

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_m \xi + (\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m) \left[\mathbf{A}_i^{dil} [(1 - \xi)\mathbf{I} + \xi \mathbf{A}_i^{dil}]^{-1} \right] \quad (1.15)$$

Modelo autoconsistente clásico

Otra familia importante de estimadores de las propiedades efectivas de los materiales inhomogéneos está formada por los esquemas autoconsistentes. En este tipo de modelos, el tensor de concentración de la deformación se calcula suponiendo que la inclusión está embebida en el material efectivo cuyas propiedades no son conocidas *a priori* y que son precisamente la solución del problema.

El modelo autoconsistente clásico (Kröner, 1958) estudia el problema formado por una sola inclusión embebida en el medio efectivo. El tensor de concentración de la deformación para la inclusión (\mathbf{A}_i^{sc}) se obtiene directamente de la solución diluida de Eshelby, ecuación 1.12, sustituyendo el tensor de rigidez de la matriz, \mathbf{L}_m por el correspondiente al medio efectivo \mathbf{L} , de acuerdo con

$$\mathbf{A}_i^{sc} = [\mathbf{I} + \mathbf{S}_i \mathbf{L}^{-1}(\mathbf{L}_i - \mathbf{L})]^{-1} \quad (1.16)$$

donde el tensor de Eshelby depende ahora de la forma de la inclusión y de las constantes elásticas del medio efectivo. El tensor de concentración de la ecuación 1.16 se sustituye en la expresión 1.6 y la ecuación no lineal resultante

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_m + \xi (\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m) [\mathbf{I} + \mathbf{S}_i \mathbf{L}^{-1}(\mathbf{L}_i - \mathbf{L})]^{-1} \quad (1.17)$$

se resuelve de forma iterativa para calcular las constantes elásticas efectivas del material compuesto. Este modelo es particularmente adecuado para materiales multifásicos donde las diversas fases se encuentran dispersas sin que exista una matriz continua propiamente dicha, como los sólidos policristalinos.

Modelo autoconsistente generalizado

El modelo autoconsistente generalizado fue desarrollado por Christensen y Lo (1979) para calcular las constantes elásticas de un material compuesto reforzado con inclusiones esféricas o fibras alineadas. Las esferas tienen diferentes tamaños y están rodeadas de una corona de matriz de manera que la relación entre el radio de la inclusión y el espesor de la corona es constante y viene impuesta por la fracción volumétrica de refuerzo dentro del material compuesto. Un material compuesto de este tipo puede llenar todo el espacio si la distribución de los radios de las esferas se elige adecuadamente, Fig. 1.2, y sus constantes elásticas se pueden calcular a partir del modelo simplificado dibujado en la Fig. 1.3. El material compuesto se representa por una inclusión esférica rodeada por un anillo de matriz (manteniendo la relación apropiada entre el radio de la esfera y el espesor del anillo) que a su vez está embebida en un medio efectivo, elástico, isótropo e indefinido, que representa al resto del material compuesto y cuyas constantes elásticas son precisamente la solución del problema. Christensen y Lo resolvieron el problema elástico para este material compuesto de tres fases bajo dos sollicitaciones de carga diferentes (compresión hidrostática y cortadura simple) y los valores del módulo de compresibilidad K y del módulo de elasticidad

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

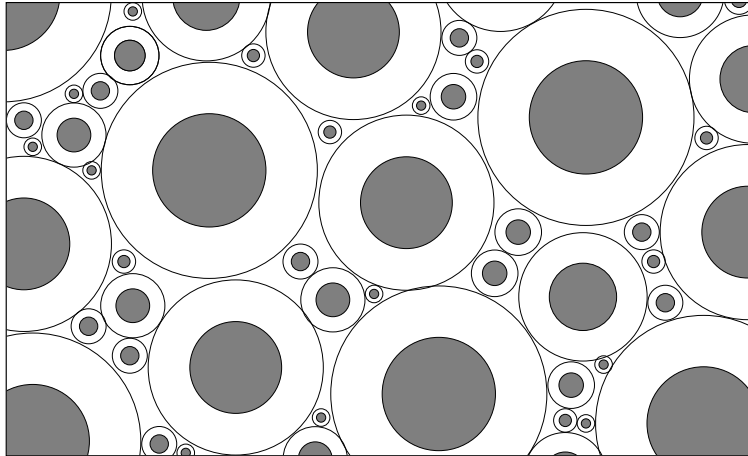


Figura 1.2: Geometría del material compuesto según el modelo autoconsistente generalizado

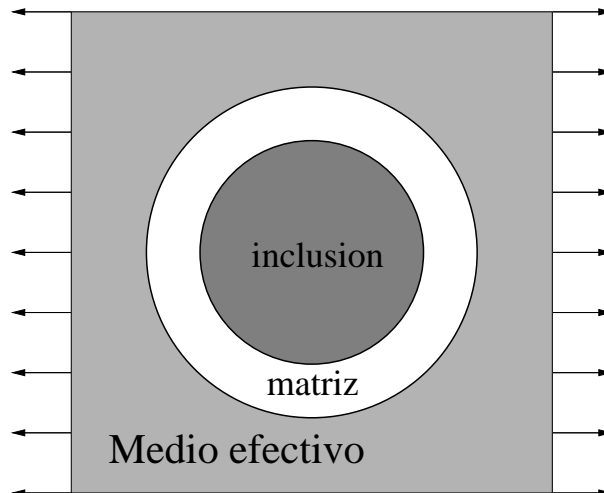


Figura 1.3: Idealización del material compuesto de acuerdo con el modelo autoconsistente generalizado

transversal G del material compuesto vienen expresadas por,

$$K = K_m + \frac{\xi(K_i - K_m)}{1 + (1 - \xi)\frac{K_i - K_m}{K_m} + \frac{4}{3G_m}} \quad (1.18)$$

$$A \left[\frac{G}{G_m} \right]^2 + 2B \left[\frac{G}{G_m} \right] + C = 0$$

donde K_i y G_i son las constantes elásticas de la inclusión, K_m y G_m las correspondientes a la matriz y A, B, y C son tres constantes que dependen de las constantes elásticas de

la matriz y de las esferas y de sus respectivas fracciones volumétricas. Sus expresiones se pueden encontrar en Christensen y Lo (1979)

Es conveniente señalar que el método autoconsistente generalizado no es un método de campo medio propiamente dicho porque no se apoya en las medias volumétricas de las tensiones y deformaciones en cada fase. Este método permite obtener mejores aproximaciones que el modelo de Mori-Tanaka para las constantes elásticas de materiales compuestos con una topología inclusión-matriz incluso cuando todas las esferas de refuerzo tienen el mismo radio (Christensen, 1990).

1.2.2. Extensión al régimen elasto-plástico

Los métodos de campo medio descritos anteriormente pueden extenderse de forma sencilla a materiales que presentan una o más fases con comportamiento elasto-plástico. Existen dos formas de enfocar el problema. La primera se apoya en la teoría de la plasticidad en deformaciones totales (modelos secantes) que simulan la deformación a partir de la teoría de la elasticidad no lineal. Estos modelos sólo son exactos si las componentes del tensor de tensiones aumentan de forma proporcional y dan lugar a resultados erróneos en presencia de descargas. La otra aproximación al problema se basa en la formulación incremental de la teoría de la plasticidad (modelos tangentes). Esta formulación permite estudiar caminos de carga no proporcionales y descargas parciales en alguna fase o en todo el material compuesto.

Aproximaciones tangentes

La extrapolación de los métodos de campo medio al régimen elasto-plástico utilizando la formulación incremental es sencilla desde el punto de vista teórico. Se parte de una situación conocida de las tensiones y deformaciones en cada fase y en el medio efectivo. Los incrementos de deformación $d\bar{\epsilon}_i$ y de tensión $d\bar{\sigma}_i$ para la fase i durante el siguiente incremento de deformación se calculan como

$$d\bar{\epsilon}_i = \mathbf{A}_i^{tan} d\bar{\epsilon} \quad \text{y} \quad d\bar{\sigma}_i = \mathbf{B}_i^{tan} d\bar{\sigma} \quad (1.19)$$

siendo $d\bar{\epsilon}$ y $d\bar{\sigma}$ los incrementos de deformación y tensión efectivos y \mathbf{A}_i^{tan} y \mathbf{B}_i^{tan} los tensores de concentración tangentes para la fase i . El tensor de rigidez tangente del material polifásico se puede evaluar usando cualquiera de los modelos de campo medio a partir de

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

las propiedades tangentes y de los tensores de deformación tangentes en cada fase. Los tensores de concentración tangentes se calculan en general de forma numérica debido a la estructura anisótropa del tensor de rigidez tangente de la matriz.

La versión incremental del método autoconsistente para materiales compuestos fue desarrollada por Hill (1965) y con base a este trabajo seminal han aparecido diversos modelos de campo medio tangentes para sólidos policristalinos (Hutchinson, 1970) y materiales bifásicos (Corbin y Wilkinson, 1994; González y LLorca, 2000; Pettermann et al., 1999).

Las aproximaciones tangentes permiten simular cualquier tipo de sollicitación y pueden ser empleadas como ecuaciones constitutivas del material compuesto en un programa de elementos finitos (Pettermann et al., 1999). Sin embargo, el método tangente proporciona una respuesta muy rígida para el material compuesto (Gilormini, 1995; Ponte-Castañeda y Suquet, 1998). Cuando se utiliza una aproximación isótropa para el tensor de rigidez tangente (Ponte-Castañeda, 1991) los resultados de los modelos tangentes son mucho mejores (González y LLorca, 2000; Chaboche y Kanouté, 2003), pero su validez queda restringida a caminos de carga proporcionales.

Aproximaciones secantes

La deformación no lineal de la matriz en las aproximaciones secantes se introduce a través de la teoría de la plasticidad en deformaciones totales. En este marco, las medias volumétricas de la tensión y la deformación en la matriz, $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_m$ y $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_m$, están relacionadas entre sí a través del correspondiente tensor de flexibilidad secante, \mathbf{M}_m^s , según

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_m = \mathbf{M}_m^s \bar{\boldsymbol{\sigma}}_m \quad \text{donde} \quad \mathbf{M}_m^s = \frac{1}{3K_m} \mathbf{J} + \frac{1}{2G_m^s} \mathbf{K} \quad (1.20)$$

siendo $J_{ijkh} = \delta_{ij}\delta_{kh}/3$ y $K_{ijkh} = 0.5(\delta_{ik}\delta_{jh} + \delta_{ih}\delta_{jk}) - J_{ijkh}$ las proyecciones volumétrica y desviadora respectivamente, y K_m y G_m^s el módulo de compresibilidad y módulo de elasticidad transversal secante, respectivamente, de la matriz. Evidentemente G_m^s varía durante la deformación, porque la ecuación constitutiva de la matriz no es lineal. El método secante clásico considera que G_m^s es función de la tensión equivalente de Von Mises en la matriz, $\hat{\sigma}_m^{eq}$, que se puede calcular a partir de la media volumétrica del tensor de tensiones en la matriz de acuerdo con

$$\hat{\sigma}_m^{eq} = \left[\frac{3}{2} (\mathbf{K} \bar{\boldsymbol{\sigma}}_m) (\mathbf{K} \bar{\boldsymbol{\sigma}}_m) \right]^{1/2} \quad (1.21)$$

La aproximación secante supone que la deformación y la tensión efectivas del material compuesto están relacionadas de la forma

$$\bar{\epsilon} = \mathbf{M}^s(\hat{\sigma}_m^{eq})\bar{\sigma} \quad (1.22)$$

donde \mathbf{M}^s el tensor de flexibilidad efectivo secante. Este tensor se obtiene como función de las propiedades secantes de las fases y la fracción volumétrica de refuerzo según

$$\mathbf{M}^s = \mathbf{M}^s(\mathbf{M}_m^s, \mathbf{M}_i, \xi) \quad (1.23)$$

donde esta ecuación representa a cualquiera de los modelos de campo medio disponibles para calcular las constantes elásticas del medio efectivo (Mori-Tanaka, autoconsistente, ...) a partir de las constantes elásticas secantes de la matriz y de las partículas.

La relación entre las medias volumétricas de las tensiones en ambas fases y la tensión efectiva $\bar{\sigma}$ viene dada por los tensores de concentración de tensiones \mathbf{B}_m o \mathbf{B}_i que pueden expresarse en función de \mathbf{M}^s como (Ponte-Castañeda y Suquet, 1998)

$$\sigma_m = \mathbf{B}_m \sigma \quad \text{donde} \quad \mathbf{B}_m = \frac{1}{1-\xi} [(\mathbf{M}_m^s - \mathbf{M}_i)^{-1}(\mathbf{M}^s - \mathbf{M}_i)] \quad (1.24a)$$

$$\sigma_i = \mathbf{B}_i \sigma \quad \text{donde} \quad \mathbf{B}_i = \frac{1}{\xi} [(\mathbf{M}_i - \mathbf{M}_m^s)^{-1}(\mathbf{M}^s - \mathbf{M}_m^s)] \quad (1.24b)$$

y las ecuaciones 1.20-1.24 forman un sistema de ecuaciones no lineal en $\hat{\sigma}_m^{eq}$ que se resuelve para cada valor de la tensión efectiva. Más detalles sobre los métodos secantes clásicos pueden encontrarse en Berveiller y Zaoui (1979), Tandon y Weng (1988) y González et al. (2004).

La representación del campo de tensiones y deformaciones en la matriz a partir de su media volumétrica no es muy adecuada en régimen elasto-plástico porque no captura bien la localización de la deformación en la matriz junto a las partículas de refuerzo. Por ello, Suquet (1997) desarrolló una modificación del método secante para calcular las propiedades efectivas del material compuesto en régimen elasto-plástico. En este método secante modificado, el campo de tensiones en la fase no lineal se representa mediante la media volumétrica de su momento de segundo orden dado por $\overline{\sigma_m \otimes \sigma_m}$ en lugar de la media volumétrica $\bar{\sigma}_m$. La tensión equivalente en la matriz, $\hat{\sigma}_m^{eq}$, se calcula en este caso de acuerdo con

$$\hat{\sigma}_m^{eq} = \left[\frac{3}{2} \mathbf{K} : (\overline{\sigma_m \otimes \sigma_m}) \right]^{1/2} \quad (1.25)$$

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

y la respuesta efectiva del material compuesto se obtiene a partir de este nuevo valor $\hat{\sigma}_m^{eq}$ siguiendo los mismo pasos que en el método secante clásico. La implementación de esta tensión equivalente en el esquema de cálculo iterativo del método secante es muy sencilla gracias a los resultados de Kreher (1990) y Buryachenko (1996) que demostraron que $\hat{\sigma}_m^{eq}$ se puede calcular directamente a partir del tensor de elasticidad secante mediante

$$\hat{\sigma}_m^{eq} = \left\{ \frac{3}{1 - \xi} \left[\bar{\sigma} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \frac{1}{G_m}} \bar{\sigma} \right] \right\}^{1/2} \quad (1.26)$$

Es necesario señalar que el método secante modificado de Suquet es equivalente al modelo variacional desarrollado por Ponte-Castañeda (1991) donde la respuesta efectiva del material compuesto se obtiene a partir de las propiedades variacionales de un potencial elástico.

Se suele considerar que el método secante modificado proporciona en general mejores resultados para el comportamiento efectivo del material compuesto que el método secante clásico. Sin embargo, hasta el momento no existe un estudio sistemático de la precisión de los diferentes métodos de campo medio en plasticidad ya que no se dispone de una solución exacta que sirva de referencia.

1.2.3. Teoremas de acotación

A partir de los teoremas variacionales es posible establecer unas cotas superior e inferior para las propiedades del medio efectivo. Estas cotas son importantes por su valor intrínseco y como herramientas para evaluar la validez de otros métodos de homogeneización.

Límites de Hill

Las cotas más simples que se pueden obtener vienen expresadas por los modelos de isodeformación de Voigt (1889) y de isotensión de Reuss (1929). Estas cotas se conocen como los límites de Hill y se expresan como

$$[\xi \mathbf{M}_i + (1 - \xi) \mathbf{M}_m]^{-1} \leq \mathbf{L} \leq \xi \mathbf{L}_i + (1 - \xi) \mathbf{L}_m \quad (1.27)$$

Estos límites de *un punto* son independientes de la distribución espacial y de la forma de las fases. Aunque son universales y muy fáciles de calcular tienen poco valor predictivo por que son demasiado amplios.

Límites de Hashin-Shtrikman

Hashin y Shtrikman (1963) obtuvieron unos límites mucho más estrechos mediante una formulación variacional basada en el principio de mínima energía potencial. Estos límites (denominados de *dos puntos*) fueron calculados para materiales bifásicos con una microestructura estadísticamente isótropa (donde la probabilidad de encontrar dos puntos pertenecientes a una misma fase es idéntica en cualquier dirección). Los límites para el modulo de compresibilidad K y del módulo de elasticidad transversal G , vienen dados por las siguientes expresiones en el caso de $G_i > G_m$

$$\begin{aligned} \bar{K} - \frac{\xi(1-\xi)(K_i - K_m)^2}{\tilde{K} + \frac{4G_m}{3}} \leq K \leq \bar{K} - \frac{\xi(1-\xi)(K_i - K_m)^2}{\tilde{K} + \frac{4G_i}{3}} \\ \bar{G} - \frac{\xi(1-\xi)(G_i - G_m)^2}{\tilde{G} + \frac{G_m}{6} \left(\frac{9K_m + 8G_m}{K_m + 2G_m} \right)} \leq G \leq \bar{G} - \frac{\xi(1-\xi)(G_i - G_m)^2}{\tilde{G} + \frac{G_i}{6} \left(\frac{9K_i + 8G_i}{K_i + 2G_i} \right)} \end{aligned} \quad (1.28)$$

donde K_i y G_i son las constantes elásticas de la inclusión, K_m y G_m las correspondientes a la matriz y \bar{c} y \tilde{c} para una constante c cualquiera se definen como

$$\bar{c} = (1 - \xi)c_m + \xi c_i \quad \tilde{c} = \xi c_m + (1 - \xi)c_i \quad (1.29)$$

Los límites de Hashin-Shtrikman son los mejores que se pueden obtener cuando la única información disponible es la fracción volumétrica y la distribución isótropa del refuerzo. Se debe señalar que las expresiones del límite inferior de Hashin-Shtrikman coinciden con las obtenidas mediante el modelo de Mori-Tanaka en el caso de un material compuesto reforzado con partículas esféricas.

Límites de tres puntos

Una acotación más precisa de las constantes elásticas se puede obtener si se dispone de información sobre la distribución espacial de la matriz y las inclusiones dentro del material compuesto. Estos límites, denominados de *tres-puntos*, dependen de dos parámetros estadísticos, ζ y η , que contienen información sobre la distribución de las fases en el material compuesto. Estos parámetros se calculan a partir de las *funciones de correlación o de probabilidad de n-puntos*. En un material compuesto con dos o mas fases i , se define la *función de probabilidad de n-puntos* de la fase i , $S_n^{(i)}$, como la probabilidad de que n puntos

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

de la microestructura con coordenadas aleatorias $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$, se encuentren todos en la fase i (Torquato, 2000). Si la *función indicador* de la fase i se define como

$$\mathcal{I}^{(i)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{si } \mathbf{x} \in V^{(i)} \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (1.30)$$

siendo $V^{(i)}$ la zona del espacio ocupada por la fase i , la función de probabilidad de n -puntos de la fase i , $S_n^{(i)}$, viene expresada como

$$S_n^{(i)} = \mathcal{P}\{\mathcal{I}^{(i)}(\mathbf{x}_1) = 1, \mathcal{I}^{(i)}(\mathbf{x}_2) = 1, \dots, \mathcal{I}^{(i)}(\mathbf{x}_n) = 1\} \quad (1.31)$$

En un medio estadísticamente homogéneo, no existe un origen privilegiado para \mathbf{x} y la función de probabilidad de un punto $S_1^{(i)}$ es la probabilidad de que un punto cualquiera se encuentre en la fase i , es decir, la fracción volumétrica de la fase i . Si el medio es además estadísticamente isótropo, las funciones de probabilidad que describen la microestructura son invariantes bajo rotaciones y las funciones de n -puntos dependerán solo de las distancias entre los puntos,

$$S_2^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = S_2^{(i)}(x_{12}) \quad (1.32)$$

$$S_3^{(i)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = S_3^{(i)}(x_{12}, x_{13}, x_{23}) \quad (1.33)$$

donde $x_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$. Los parámetros ζ y η se derivan a partir de las funciones de probabilidad de tres-puntos mediante integración en todo el espacio de 1.33 (Torquato, 1998).

El cálculo de ζ y η para una microestructura dada es una tarea complicada y solo existen soluciones analíticas para algunos casos particulares, siendo en general necesario recurrir a soluciones numéricas (Torquato, 1991). Para una dispersión aleatoria y estadísticamente homogénea e isótropa de esferas monodispersas e impenetrables, ζ y η fueron calculadas por Miller y Torquato (1990) y Torquato et al. (1987).

Beran y Molyneux (1966) y McCoy (1970) derivaron los límites de *tres – puntos* para K y G , respectivamente, en materiales bifásicos mediante el principio de mínima energía potencial y el desarrollo en series de potencias hasta tercer orden de los campos de tensiones y deformaciones en el material. Posteriormente, Milton y Phan-Thien (1982) mejoraron los límites de McCoy para el módulo de elasticidad transversal. Las expresiones de los límites de *tres-puntos* como función de los parámetros ζ y η pueden encontrarse en Beran y Molyneux (1966) y Milton y Phan-Thien (1982).

Estimaciones de tercer orden de Torquato

La información estadística acerca de la distribución de las fases en el medio homogéneo fue utilizada por Torquato (1998) para realizar una estimación precisa de las propiedades elásticas efectivas de materiales bifásicos truncando en el término de tercer orden una expansión en serie de funciones del tensor de rigidez efectivo. Estas expresiones dependen de los parámetros microestructurales ζ y η definidos anteriormente y son los mejores resultados analíticos disponibles para calcular las constantes elásticas de una matriz elástica reforzada con partículas elásticas. La forma de estas expresiones es

$$\frac{K}{K_m} = \frac{1 + \frac{4G_m}{3K_m}\kappa\xi - \frac{10G_m}{3(K_m + 2G_m)}\kappa\mu(1 - \xi)\zeta_2}{1 - \kappa\xi - \frac{10G_m}{2(K_m + 2G_m)}\kappa\mu(1 - \xi)\zeta_2} \quad (1.34)$$

y

$$\frac{G}{G_m} = \frac{1 + \frac{9K_m + 8G_m}{6(K_m + 2G_m)}\mu\xi - \frac{2\kappa\mu G_m}{3(K_m + 2G_m)}(1 - \xi)\zeta_2 - \frac{\mu^2}{6} \left\{ \left[\frac{3K_m + G_m}{K_m + 2G_m} \right]^2 (1 - \xi)\eta_2 + 5G_m \left[\frac{2K_m + 3G_m}{(K_m + 2G_m)^2} \right] (1 - \xi)\zeta_2 \right\}}{1 - \mu\xi - \frac{2\kappa\eta G_m}{3(K_m + 2G_m)}(1 - \xi)\zeta_2 - \frac{\mu^2}{6} \left\{ \left[\frac{3K_m + G_m}{K_m + 2G_m} \right]^2 (1 - \xi)\eta_2 + 5G_m \left[\frac{2K_m + 3G_m}{(K_m + 2G_m)^2} \right] (1 - \xi)\zeta_2 \right\}} \quad (1.35)$$

donde κ y μ vienen dadas por

$$\kappa = \frac{3(K_i - K_m)}{3K_i + 4G_m} \quad ; \quad \mu = \frac{G_i - G_m}{G_i + G_m \left[\frac{9K_m + 8G_m}{6(K_m + 2G_m)} \right]}$$

La aproximación de tercer orden de Torquato es el único modelo de campo medio que se apoya en una información detallada de la distribución espacial de las fases en la microestructura y tiene la ventaja de que puede aplicarse a cualquier tipo de material compuesto sin más que conocer los correspondientes valores de ζ y η .

1.2.4. Modelos de celda unitaria

Los modelos de campo medio calculan las propiedades efectivas suponiendo que los campos de tensiones y deformaciones en cada fase se pueden representar por sus valores

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

medios. Esta aproximación impide conocer las magnitudes locales de las tensiones y deformaciones, que son críticas —por ejemplo— cuando se quieren estudiar fenómenos de daño que dependen de los valores extremos de los microcampos en cada fase. Esta limitación llevó a la introducción de otros modelos que resuelvan de forma detallada los microcampos de tensión y deformación en el material compuesto además de calcular sus propiedades efectivas. Este tipo de modelos se apoyan en la resolución numérica de un problema termo-elasto-plástico en un dominio con unas condiciones de contorno determinadas.

Los modelos de celda unitaria permiten relacionar el comportamiento macroscópico y microscópico de materiales compuestos suponiendo que la microestructura es periódica. En estas condiciones, la microestructura del material se puede representar mediante una celda unitaria con condiciones de contorno periódicas cuya respuesta a una determinada sollicitación (tracción, compresión, etc) se resuelve mediante técnicas numéricas. La celda unitaria puede ser bidimensional o tridimensional y normalmente contiene una o dos partículas que representan una distribución regular de las partículas de refuerzo dentro de la matriz formando una estructura sencilla (cúbica simple, cúbica centrada en las caras o en el cuerpo, hexagonal, etc)

La resolución numérica del comportamiento mecánico de las celdas unitarias se ha abordado con diferentes técnicas. Aboudi (1997) utilizó aproximaciones analíticas simples para calcular los campos de tensiones y deformaciones para distribuciones de partículas o fibras situadas en los vértices de una red cúbica, dando lugar al denominado *método de las celdas*. Otros ejemplos analíticos son el método de los campos transformados (Dvorak, 1992) que combina los modelos de campo medio con aproximaciones analíticas. Sin embargo, el comportamiento mecánico de la celda unitaria se calcula normalmente utilizando técnicas numéricas estándar, como diferencias finitas, el método de los elementos de contorno y, sobretodo, el método de los elementos finitos.

Entre los modelos de celdas unitarias más importantes cabe destacar los siguientes

Modelo axilsimétrico

El modelo de celda unitaria más utilizado para representar materiales compuestos reforzados por partículas o fibras cortas fue desarrollado por Christman et al. (1989) y LLorca et al. (1991). La idea básica es sustituir la celda unitaria correspondiente a un ordenamiento hexagonal por otra con la misma sección transversal y forma cilíndrica, Fig. 1.4. Las celdas axilsimétricas así definidas no son celdas unitarias propiamente dichas por que

no llenan por completo el espacio como las hexagonales, pero permiten simular el comportamiento de un material compuesto mediante un modelo bidimensional axisimétrico (cuyo eje de revolución es el eje del cilindro), reduciendo considerablemente el coste computacional. La simetría del problema obliga a que las partículas de refuerzo tengan forma de revolución, pudiéndose estudiar esferas, elipsoides y fibras cortas orientadas en la dirección del eje z .

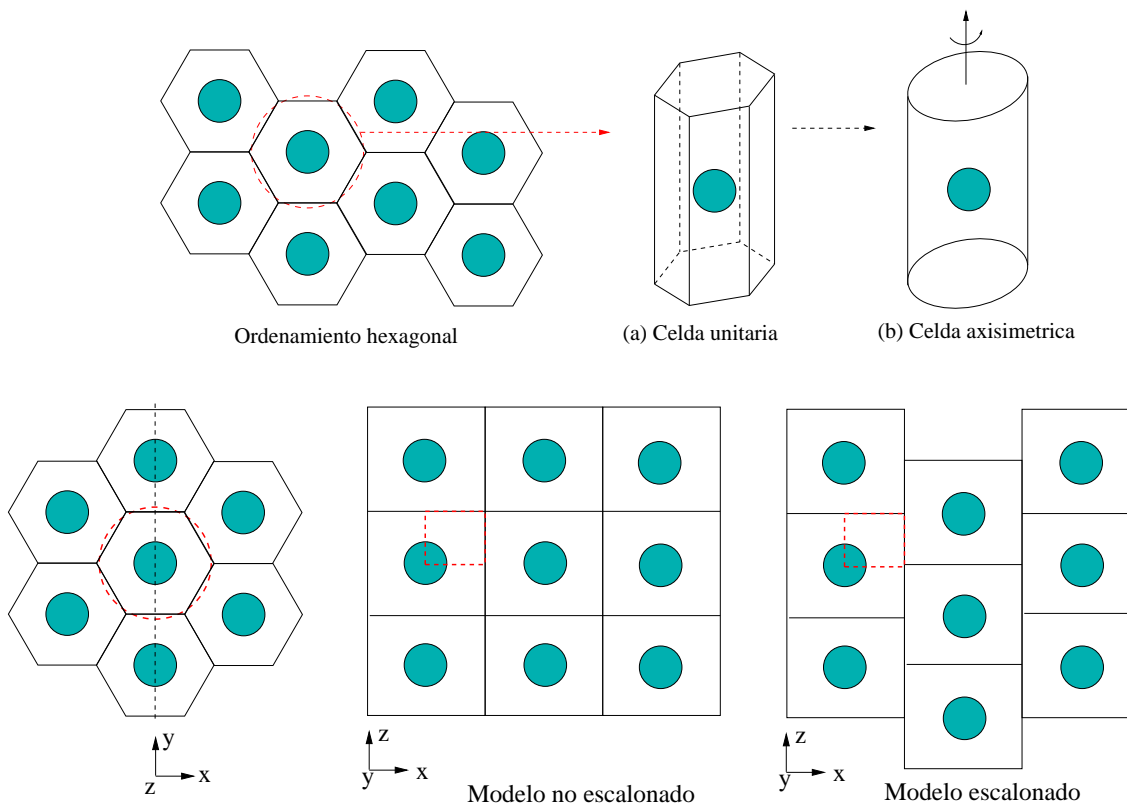


Figura 1.4: Arriba: Ordenamiento hexagonal de partículas. (a) Celda unitaria hexagonal en 3D; (b) Aproximación cilíndrica. Abajo: disposiciones escalonadas y no escalonadas de partículas en la dirección z

Se pueden considerar dos tipos de ordenamientos diferentes dentro de los modelos axisimétricos atendiendo a la disposición de las partículas a lo largo del eje de los cilindros: escalonados y no escalonados, como se muestra en la parte inferior de la Fig. 1.4. Ambos modelos se representan por la misma celda unitaria pero variando las condiciones de contorno. Los planos de simetría del material coinciden con los lados de la celda unitaria en el modelo no escalonado (Fig. 1.5) y las condiciones de contorno sobre éstos son simétricas,

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

de acuerdo con

$$u_2(\mathbf{x}_S) = 0 \quad u_1(\mathbf{x}_W) = 0 \quad u_2(\mathbf{x}_N) = u_2(4) \quad u_1(\mathbf{x}_E) = u_1(2) \quad (1.36)$$

donde u_i es el desplazamiento en la dirección i , y los vectores \mathbf{x}_E , \mathbf{x}_W , \mathbf{x}_N y \mathbf{x}_S representan las caras E , W , N y S , respectivamente. La deformación de la celda se controla mediante los desplazamientos de los vértices 2 y 4, a los que están ligados los desplazamientos de todos los demás puntos del contorno.

Para representar la disposición escalonada de partículas se utilizan condiciones de contorno antisimétricas, expresadas como

$$u_2(\mathbf{x}_S) = 0 \quad u_1(\mathbf{x}_W) = 0 \quad u_2(\mathbf{x}_N) = u_2(4) \quad u_i(\mathbf{x}_{E,l}) + u_i(\mathbf{x}_{E,u}) = 2u_i(P) \quad (1.37)$$

donde P es el punto de pivote, y los vectores $\mathbf{x}_{E,l}$ y $\mathbf{x}_{E,u}$ representan dos puntos simétricos cualesquiera con respecto a P en la cara E (Fig. 1.5).

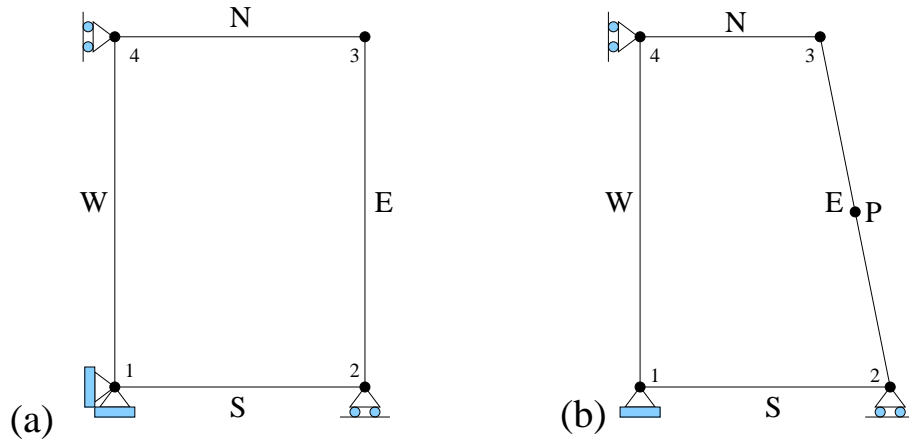


Figura 1.5: Esquema de las condiciones de contorno simétricas y antisimétricas

Las solicitaciones de la celda unitaria se imponen a través de los valores $u_2(4)$ y $u_1(2)$ en el caso simétrico y $u_2(4)$ y $u_1(P)$ en el modelo antisimétrico. Así, por ejemplo, el comportamiento en tracción uniaxial se logra con $u_2(4) = \epsilon L$ siendo ϵ la deformación aplicada y L la longitud de la celda unitaria. Evidentemente, los modelos axilsimétricos están limitados a estados de deformación cilíndricos.

Modelos periódicos tridimensionales

La simulación del comportamiento de materiales reforzados con partículas sin simetría de revolución (cubos, elipsoides no alineados, ...) o bien sometidos a solicitaciones no

cilíndricas no puede hacerse mediante la aproximación de celdas axilsimétricas. En estos casos se emplean celdas unitarias tridimensionales que representan un material compuesto donde las partículas están distribuidas regularmente en el espacio utilizando las condiciones de contorno apropiadas (simétricas y antisimétricas). Las ordenaciones más típicas corresponden a redes cúbicas simples, cúbicas centrada en el cuerpo y cúbicas centrada en las caras (Hom y McMeeking, 1991).

La ordenación cúbica simple (Fig. 1.6) es la más sencilla de las disposiciones anteriores pero muestra una marcada anisotropía y las propiedades elásticas resultantes pueden no cumplir los límites de Hashin-Shtrikman para una dispersión isótropa. En consecuencia el comportamiento de los materiales compuestos con una distribución aleatoria e isótropa de partículas se suele simular utilizando distribuciones cúbicas centradas en el cuerpo y en las caras (Weissenbeck, 1994; Segurado et al., 2002b).

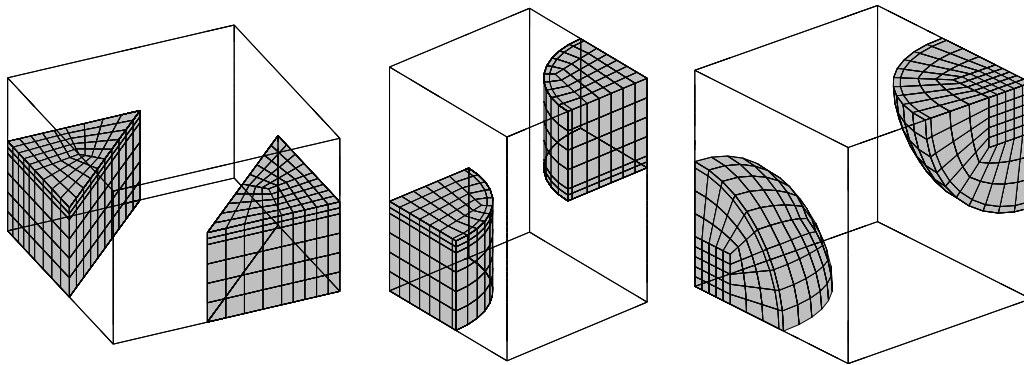


Figura 1.6: Celdas unitarias para una disposición cúbica simple de partículas de refuerzo con formas de prismas, cilindros y esferas (Weissenbeck, 1994)

Modelos multipartícula

Recientemente han comenzado a utilizarse celdas unitarias que contienen varias partículas distribuidas de forma aleatoria para simular el comportamiento de materiales compuestos. La mayor parte de estos estudios están realizados en dos dimensiones, y entre ellos cabe destacar el modelo de los elementos finitos de Voronoi (Ghosh y Moorthy, 1997). Esta técnica permite reducir de forma drástica el número de grados de libertad frente a un análisis estándar por elementos finitos usando un tipo especial de elementos que se corresponden geoméricamente con los polígonos generados en la teselación de Voronoi de un plano que

1.2 Micromecánica de materiales compuestos

contiene una dispersión de inclusiones elípticas (Fig. 1.7). Enriqueciendo las funciones de forma de los elementos es posible lograr que los campos de tensiones en la inclusión y en la matriz, calculados a partir de los desplazamientos de su contorno, se aproximen bien a los valores reales.

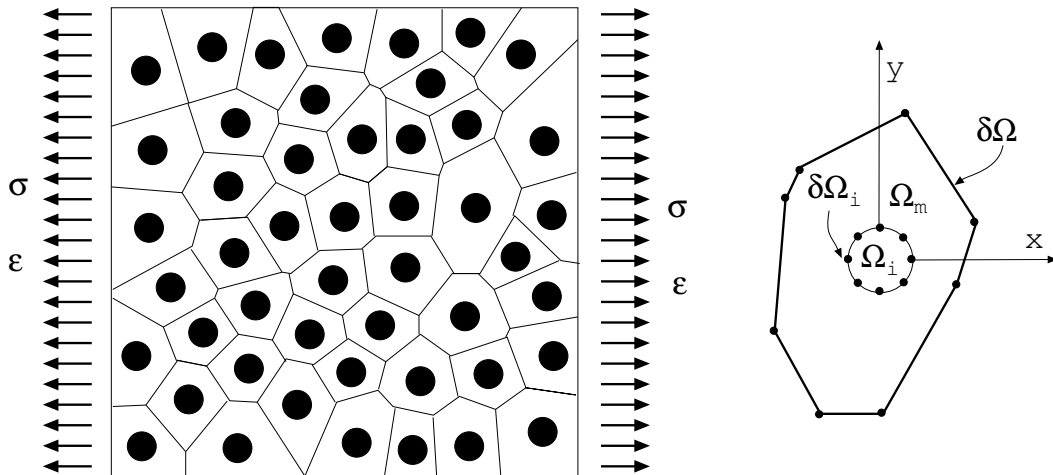


Figura 1.7: Malla de elementos finitos de Voronoi

La técnica permite incluir en el modelo un elevado número de partículas con un coste computacional reducido, pero los resultados obtenidos están limitados a dos dimensiones y los intentos de generalizar el método a tres dimensiones no han sido fructíferos. Posteriores desarrollos de esta técnica han introducido nuevas funciones de forma que permiten estudiar fenómenos de daño durante la deformación como fractura del refuerzo (Ghosh y Moorthy, 1998) y la decohesión entre la matriz y las partículas (Ghosh et al., 2000), siempre en el campo bidimensional.

El uso de modelos multipartícula en tres dimensiones ha sido muy limitado hasta este momento debido a la complejidad asociada a la generación y discretización de los modelos así como a los requerimientos computacionales necesarios para resolver el problema mecánico en un volumen representativo tridimensional. Drugan y Willis (1996) y Drugan (2000) demostraron, sin embargo, que el tamaño mínimo del volumen representativo es sorprendentemente pequeño en sentido estadístico, siendo suficiente incluir unas pocas partículas para calcular las propiedades elásticas efectivas del material con un error muy pequeño.

Apoyándose en estos resultados, Gusev (1997) realizó una simulación numérica para calcular las constantes elásticas de un material compuesto reforzado con un 25% de esferas elásticas. El volumen representativo se discretizó usando tetraedros lineales y se impusieron

condiciones de contorno periódicas. El problema se resolvió usando un código propio de elementos finitos con un algoritmo de cálculo iterativo de gradiente conjugado para resolver el sistema de ecuaciones. Los resultados confirmaron los estudios previos de Drugan y Willis (1996), y demostraron la posibilidad de abordar un análisis termo-elástico de materiales compuestos reforzados con partículas mediante esta técnica. Más recientemente, Böhm y Han (2001) emplearon un código estándar de elementos finitos para analizar el comportamiento elasto-plástico de un material reforzado con un 20 % de esferas mediante un volumen representativo con 20 partículas.

En paralelo, Moulinec y Suquet (1998) propusieron un método alternativo al método de elementos finitos para resolver el problema mecánico en volúmenes representativos tridimensionales y que está basado en la transformada rápida de Fourier. Frente al método de elementos finitos, esta aproximación no requiere discretizar el volumen representativo porque el problema se resuelve en una serie de puntos distribuidos de forma homogénea (Michel et al., 1999). Sin embargo este método no es convergente si las fases tienen un gran contraste de propiedades o si las matrices de rigidez no están bien condicionadas, impidiendo su aplicación en régimen elasto-plástico o en presencia de daño.

Con la excepción de los trabajos expuestos, el uso de modelos de celdas unitarias multipartícula en tres dimensiones es un terreno novedoso e inexplorado. No existe una solución elástica que abarque todo el rango de fracciones volumétricas y que sirva como solución de referencia para evaluar los distintos modelos analíticos que se han desarrollado a lo largo de los últimos 40 años. Además, esta metodología se puede extender fácilmente al régimen plástico e incluir la influencia de los distintos mecanismos de daño. Finalmente, los modelos multipartícula permiten explorar el efecto de la distribución espacial de las partículas de refuerzo sobre el comportamiento mecánico de los materiales compuestos, un campo prácticamente desconocido en la literatura sobre la micromecánica de materiales compuestos.

1.2.5. Modelos de celda embebida

Los modelos de celda embebida tienen como objeto analizar los micromecanismos de deformación, y en su caso de daño (Wulf et al., 1996) en materiales heterogéneos, pero —a diferencia de los modelos de celda unitaria— no pretenden determinar la respuesta del material efectivo. Estos modelos parten de un núcleo donde se representa de forma

1.3 Modelos micromecánicos de daño

detallada la microestructura real del material compuesto, embebido en una región externa que representa al material efectivo, Fig. 1.8. Las condiciones de contorno se aplican sobre la región externa, lo que permite eliminar alguna de las dificultades asociadas a las celdas unitarias multipartícula, como la exigencia de periodicidad en la geometría y en las condiciones de contorno. La ecuación constitutiva de la región externa debe ser elegida adecuadamente para evitar errores en la acomodación de tensiones entre ambas zonas del modelo. La solución del problema mecánico suele calcularse de forma numérica mediante el método de elementos finitos.

En la literatura pueden encontrarse tres estrategias básicas para aplicar los modelos de celda embebida (Böhm, 2000). La primera consiste en modelizar el núcleo y la región externa como medios heterogéneos pero con una discretización mucho más fina del primero (Sautter et al., 1993). Esta aproximación tiene un alto coste computacional. Una segunda posibilidad es representar la región externa como un medio homogéneo cuyas propiedades están proporcionadas por cualquiera de los métodos de homogeneización (Mori-Tanaka, autoconsistente). Esta posibilidad es menos exigente desde el punto de vista computacional, aunque la transición entre las dos regiones resulta más problemática. Finalmente, se puede usar un medio externo homogéneo con propiedades no conocidas a priori y que se obtienen iterativamente siguiendo una estrategia semejante a la del método autoconsistente (Chen et al., 1994). Evidentemente, este esquema presenta serias dificultades en el campo elástico-plástico.

1.3. Modelos micromecánicos de daño

La diferencia de rigidez entre la matriz y las partículas de refuerzo genera concentraciones de tensiones en torno al refuerzo que llevan a la nucleación de daño a nivel microscópico, limitando la resistencia real del compuesto a valores inferiores a los ideales. La evidencia experimental ha mostrado que los mecanismos de daño en materiales compuestos reforzados con partículas son principalmente tres (LLorca, 2004): la rotura del refuerzo, la decohesión de la intercara entre la matriz y el refuerzo y la rotura de la matriz.

El mecanismo dominante de nucleación de daño a temperatura ambiente en materiales compuestos de matriz metálica reforzados con partículas cerámicas (normalmente Al_2O_3 y SiC con fracciones volumétricas entre 10 % y 20 %) suele ser la fractura del refuerzo. El daño en este tipo de materiales se ha analizado por microscopía óptica y electrónica (Lloyd, 1991;

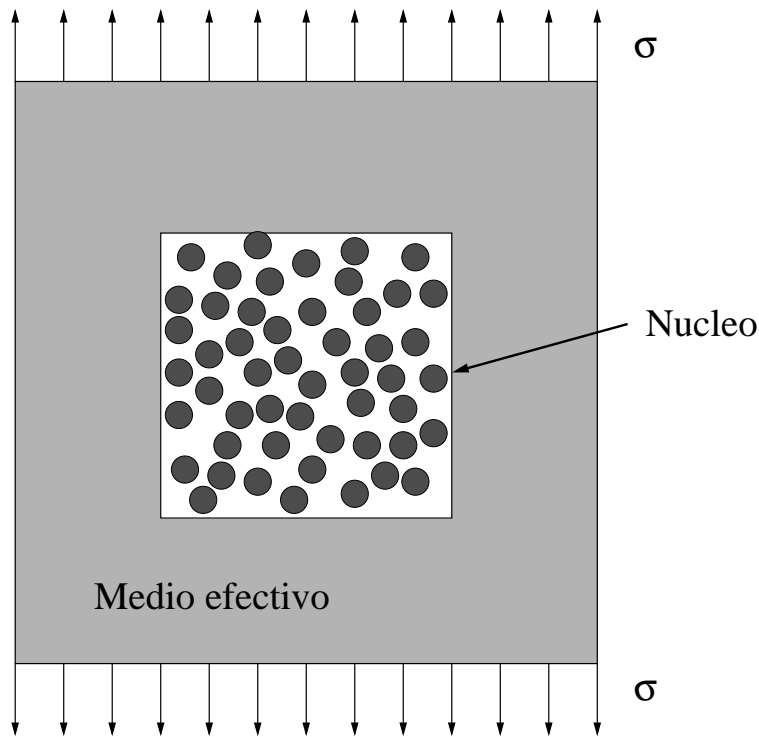


Figura 1.8: Esquema de un modelo de celda embebida

LLorca et al., 1993; Poza y LLorca, 1999) y mediante tomografía tridimensional de rayos X (Babout et al., 2003; Gammage, 2002). La fractura frágil del refuerzo es consecuencia de la transferencia de carga de la matriz a las partículas durante la deformación y la rotura de estas últimas se produce normalmente por una grieta perpendicular a la dirección de carga (Fig 1.9).

La nucleación del daño por decohesión de la intercara entre la matriz y las partículas también se ha observado en materiales compuestos de matriz metálica reforzados con partículas, particularmente cuando la resistencia mecánica de la matriz es limitada o los materiales se deforman a alta temperatura (Whitehouse y Clyne, 1993; Babout et al., 2001). En general, los polos de las partículas en la dirección de carga son lugares privilegiados para la decohesión (Fig. 1.9). Los resultados experimentales también indican que el número de partículas decohesionadas aumenta cuando las partículas empleadas tienen forma irregular y ángulos vivos.

La aparición de fractura del refuerzo o decohesión de la intercara como principal mecanismo de daño depende de la resistencia mecánica del refuerzo y de la intercara. Downes y King (1991) observaron una transición en el mecanismo principal de daño de la decohesión

1.3 Modelos micromecánicos de daño

(partículas de refuerzo pequeñas con resistencia alta) a la fractura del refuerzo (partículas de mayor tamaño con menor resistencia). Otros factores, como la temperatura, favorecen el daño por decohesión al reducir la resistencia mecánica de la matriz, que no puede transferir carga suficiente para inducir la fractura de las partículas (Poza y LLorca, 1996).

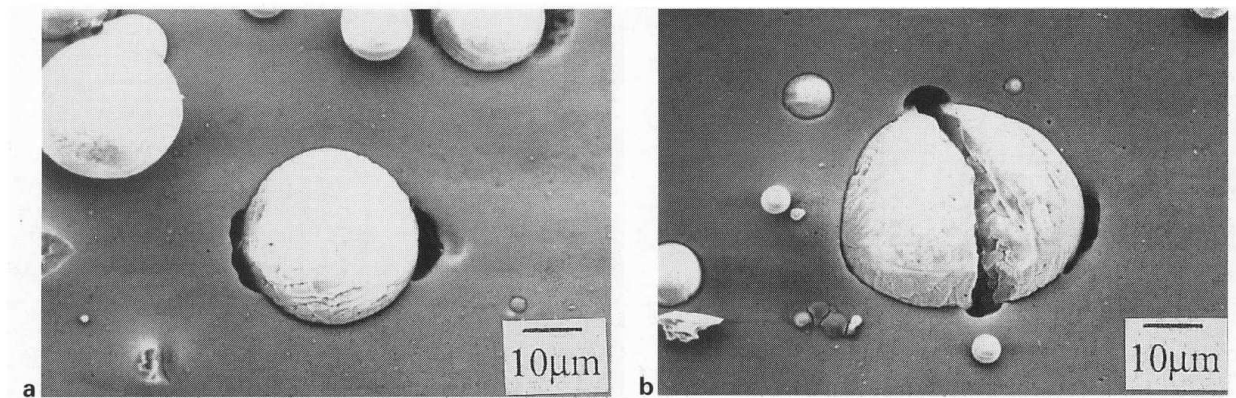


Figura 1.9: Daño en un aleación de Al 6061 reforzada con partículas esféricas de Al_2O_3 . Carga aplicada en dirección horizontal. (a) decohesión; (b) rotura de partículas. (Kane-take et al., 1995)

La nucleación de daño en materiales compuestos de matriz metálica comienza con el inicio de la deformación plástica de la matriz y se prolonga durante todo el proceso de deformación. Experimentalmente se ha observado que la fracción de partículas rotas y decohesionadas aumenta de forma aproximadamente lineal con la deformación plástica aplicada (Whitehouse y Clyne, 1993; Poza y LLorca, 1996; Babout et al., 2001).

Los mecanismos de daño observados en compuestos de matriz polimérica reforzados con partículas rígidas son esencialmente los mismos: decohesión de la intercara polímero/partícula y fractura de las partículas (Moloney et al., 1987), y la prevalencia de uno u otro fenómeno viene dictada por la relación entre la resistencia de la intercara y del refuerzo. La fractura del refuerzo se favorece mediante el uso de agentes ligantes como el silano mientras que la adición de sustancias desmoldeantes favorece la decohesión.

La fractura final de los materiales compuestos de matriz metálica reforzados por partículas se produce por coalescencia a través de la matriz de los huecos nucleados alrededor de las partículas de refuerzo. Los diferentes modos de fractura que aparecen han sido observados experimentalmente mediante en análisis de las superficies de fractura (LLorca y Poza, 1994). Si la matriz metálica está libre de inclusiones, dispersoides y precipitados,

la coalescencia se produce por la localización de la deformación plástica entre los huecos de la matriz. Por el contrario, la presencia de segundas fases dispersas en la matriz da lugar a un mecanismo de rotura controlada por nucleación, crecimiento y coalescencia de microhuecos. La superficie de fractura resultante presenta dos o más poblaciones de huecos de tamaño diferente: los huecos de mayor diámetro generados alrededor de las partículas de refuerzo están unidos por los microhuecos generados alrededor de por las segundas fases dispersas en la matriz. En el caso de materiales compuestos de matriz polimérica la rotura de la matriz se produce por cortante.

1.3.1. Fractura de partículas

La fractura de las partículas de refuerzo frágiles dentro de los materiales compuestos se puede estudiar mediante el modelo de Weibull (Weibull, 1951), revisado de forma detallada en Bažant y Planas (1998), que se basa en la hipótesis del eslabón más débil. Si una cadena formada por N eslabones iguales está sometida a una tensión σ , la probabilidad de rotura de la cadena, F , viene dada por

$$F = 1 - [1 - P(\sigma)][1 - P(\sigma)] \dots [1 - P(\sigma)] = [1 - P(\sigma)]^N \approx 1 - e^{-NP(\sigma)} \quad (1.38)$$

donde $P(\sigma)$ es la probabilidad de fractura de un eslabón al estar sometido a una tensión σ . Generalizando la expresión para un cuerpo de volumen V , la probabilidad de fallo de dicho volumen cuando está sometido a una tensión homogénea σ es

$$F = 1 - e^{-n(\sigma)V} \quad (1.39)$$

donde $n(\sigma)$ es la función de concentración de defectos, que representa el numero de defectos por unidad de volumen con una *resistencia* menor que σ . Weibull introdujo una forma analítica para la función $n(\sigma)$ que —en su forma más simple— se expresa como

$$n(\sigma) = \frac{1}{V_0} \left\langle \frac{\sigma}{\sigma_0} \right\rangle^m \quad (1.40)$$

donde σ_0 , V_0 y m son la tensión característica, el volumen característico y el módulo de Weibull respectivamente, y $\langle \rangle$ denota la parte positiva del argumento. La probabilidad de fallo de un cuerpo de volumen V cuando está sometido a una tensión homogénea σ se obtiene sustituyendo 1.40 en 1.39 según

$$F = 1 - \exp \left\{ -\frac{V}{V_0} \left\langle \frac{\sigma}{\sigma_0} \right\rangle^m \right\} \quad (1.41)$$

1.3 Modelos micromecánicos de daño

El modulo de Weibull m es un parámetro que indica la uniformidad del tamaño de los defectos en un material. Así, todos los defectos que producen la rotura de las partículas son iguales cuando $m \rightarrow \infty$ y ésta se produce siempre para $\sigma = \sigma_0$. Por el contrario, valores pequeños de m indican que la distribución del tamaño de los defectos es muy amplia, y la tensión de rotura presenta mucha dispersión. La resistencia característica σ_0 es la tensión para la que la probabilidad de fractura de un volumen V_0 es $1 - 1/e \approx 0.63$.

La extensión de este resultado a un cuerpo con un estado tensional uniaxial y no homogéneo se puede hacer dividiendo el cuerpo en N volúmenes V_j cada uno sometido a una tensión uniforme σ_j . Aplicando la ley del eslabón más débil,

$$F = 1 - \prod_{j=1}^N \exp \{-n(\sigma_j)V_j\} = 1 - \exp \left\{ \sum_{j=1}^N -n(\sigma_j)V_j \right\} \quad (1.42)$$

e introduciendo la función de concentración de defectos de Weibull de la ecuación 1.40 se obtiene

$$F = 1 - \exp \left\{ \sum_{j=1}^N -\frac{V_j}{V_0} \left\langle \frac{\sigma_j}{\sigma_0} \right\rangle^m \right\} \quad (1.43)$$

Cuando el sólido está sometido a un estado de tensión multiaxial expresado por el tensor $\boldsymbol{\sigma}$, la función concentración de defectos será $n(\boldsymbol{\sigma})$, y dependerá solo de las tensiones principales σ^I , σ^{II} y σ^{III} . Freudenthal (1968) proporcionó una expresión simple para sólidos isótropos de la forma

$$n(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{V_0 \sigma_0^m} [\langle \sigma^I \rangle^m + \langle \sigma^{II} \rangle^m + \langle \sigma^{III} \rangle^m] \quad (1.44)$$

que tiene en cuenta el hecho obvio de que la probabilidad de fractura aumenta si un volumen está sometido a un estado biaxial o triaxial. La probabilidad de fractura de un sólido de volumen V se calcula sustituyendo $n(\boldsymbol{\sigma})$ en la ecuación 1.42.

El modelo de Weibull se ha usado ampliamente para caracterizar la resistencia de materiales cerámicos y fue introducido por Wallin et al. (1987) para estudiar la fractura de partículas cerámicas embebidas en matrices dúctiles, considerando que las partículas están sometidas a una tensión homogénea. Varios estudios experimentales han verificado la aplicabilidad del modelo de Weibull para la fractura de partículas cerámicas embebidas en una matriz metálica mediante técnicas de microscopía cuantitativa (Mochida et al., 1991; LLorca et al., 1993; LLorca, 1995) y más recientemente mediante el uso de tomografía por rayos X durante el ensayo mecánico (Gammage, 2002). Los valores encontrados para el

módulo de Weibull son pequeños, en el intervalo $3 < m < 6$, y la dispersión en la resistencia de las partículas cerámicas se debe a la gran diferencia en la forma, esbeltez y orientación de las mismas así como a su distribución espacial dentro de la matriz. Evidentemente, las técnicas experimentales empleadas no permiten aislar la influencia de cada uno de estos factores y las distribuciones de Weibull obtenidas no representan realmente una propiedad del material cerámico del refuerzo. Así, los parámetros de Weibull obtenidos para las partículas de un material compuesto no pueden emplearse directamente para otro material compuesto si las partículas están distribuidas de forma diferente en la matriz.

El modelo de Weibull combinado con modelos de campo medio y/o elementos finitos se ha usado en repetidas ocasiones para obtener las curvas tensión-deformación o las ecuaciones constitutivas de materiales compuestos reforzados con partículas considerando la fractura de éstas. El primer modelo de este tipo fue propuesto por Kiser et al. (1996), González y LLorca (1996) y LLorca y González (1998) que calcularon la curva tensión-deformación en tracción de un material compuesto formado por dos fases (Fig. 1.10). La primera estaba formada por las partículas de refuerzo embebidas en la matriz, y en la segunda las partículas estaban fracturadas por una grieta perpendicular a la dirección de tracción. Las ecuaciones constitutivas de cada fase se obtuvieron mediante los métodos de celda unitaria, y el comportamiento del material compuesto se calculó a partir de las propiedades de ambas utilizando la hipótesis de isodeformación combinada con el modelo de Weibull para determinar en cada instante la fracción de partículas rotas. Maire et al. (1997) relajaron la hipótesis de isodeformación y calcularon la interacción entre las fases intactas y dañadas mediante un modelo autoconsistente tangente y unidimensional. Estevez et al. (1999) extendieron esta formulación a tres dimensiones basándose en una aproximación secante del método autoconsistente que no tenía en cuenta la redistribución de las tensiones por la fractura del refuerzo. Finalmente, González y LLorca (2000) desarrollaron un modelo de campo medio tangente (en tres dimensiones) basado en el método autoconsistente para obtener el comportamiento efectivo con daño de un material reforzado con partículas. El modelo supone una distribución aleatoria y homogénea del refuerzo y emplea la distribución de Weibull como criterio de fractura de partículas para obtener así la fracción de refuerzo rota durante la deformación.

Ghosh y Moorthy (1998) también realizaron una aproximación al problema del daño progresivo por rotura del refuerzo a partir del modelo de elementos finitos de Voronoi. La fractura del refuerzo se calculó enriqueciendo las funciones de forma de los elementos

1.3 Modelos micromecánicos de daño

finitos para reproducir los campos tensionales en las proximidades de una grieta en el refuerzo y se utilizó el modelo de Weibull como criterio de fractura del refuerzo. Su análisis demostró la enorme influencia de la distribución no homogénea del refuerzo en la iniciación y acumulación del daño en el material compuesto pero, lamentablemente, estaba limitado a dos dimensiones (tensión o deformación plana).

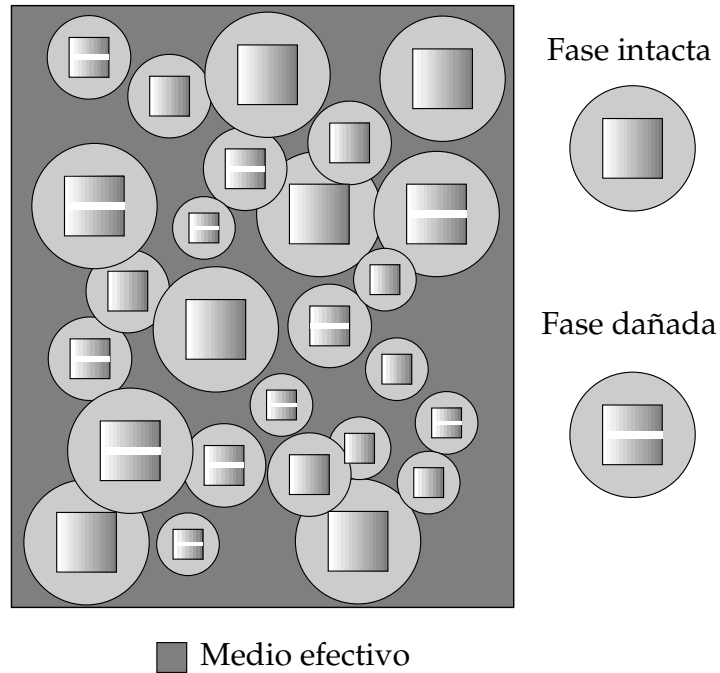


Figura 1.10: Representación del material compuesto con daño por fractura de las partículas (González y LLorca, 2000)

1.3.2. Decohesión en la interfase matriz-refuerzo

El proceso de fallo por decohesión de la intercara entre la matriz y las partículas de refuerzo comprende la nucleación de una grieta en la intercara (normalmente a partir de un defecto inicial) y su propagación a lo largo de ésta. La primera aproximación rigurosa a este problema en el campo de la micromecánica fue propuesta por Needleman (1987). La nucleación y el crecimiento de la grieta se analizó mediante un modelo de fisura cohesiva bidimensional que simula la intercara como una discontinuidad capaz de transmitir tensiones normales y tangenciales. Estas tensiones se obtienen a partir de un potencial elástico que depende del desplazamiento relativo entre dos puntos de la intercara inicialmente en

contacto (pertenecientes a la matriz y al refuerzo) en dirección normal (Δu_n) y tangencial (Δu_t). Partiendo de consideraciones sobre la energía de enlace de los átomos en la intercara, Needleman (1987) propuso para el potencial elástico una expresión de la forma

$$\begin{aligned} \phi(\Delta u_n, \Delta u_t) = & \frac{27}{4} t_c \Delta u_c \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \right)^2 \left[1 - \frac{4}{3} \left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \right)^2 \right] \right. \\ & \left. + \frac{\gamma}{2} \left(\frac{\Delta u_t}{\Delta u_c} \right)^2 \left[1 - 2 \left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \right) + \left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \right)^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.45)$$

donde Δu_c es el valor crítico de la apertura normal de la fisura para el cual deja de transmitir tensiones, t_c la máxima tensión que puede transmitir la intercara cuando los desplazamientos relativos tangenciales son nulos y γ un coeficiente que relaciona la rigidez de la intercara en dirección tangencial y normal. Su valor suele tomarse igual a 1 cuando la decohesión está dominada por la apertura en dirección normal, aunque su influencia en la fractura de la intercara es pequeña. Las tensiones transmitidas a través de la grieta cohesiva se calculan derivando el potencial elástico

$$t_n = -\frac{\partial \phi}{\partial \Delta u_n} \quad t_t = -\frac{\partial \phi}{\partial \Delta u_t}, \quad \text{si } \Delta u_n \leq \Delta u_c \quad (1.46)$$

$$t_n = 0 \quad t_t = 0, \quad \text{si } \Delta u_n > \Delta u_c \quad (1.47)$$

y la variación de la tensión normal en función de la apertura normal de la grieta se ha dibujado en la Fig. 1.11 cuando $\Delta u_t = 0$. La energía de fractura de la intercara Γ_{in} viene dada por el área bajo la curva $t_n - \Delta u_n$ y es independiente del camino de carga ya que las tensiones se derivan de un potencial elástico. Su magnitud viene expresada por

$$\Gamma_{in} = \phi(\Delta u_c) = \frac{9}{16} t_c \Delta u_c \quad (1.48)$$

Este modelo micromecánico define el comportamiento en fractura de la intercara a partir de dos parámetros: la resistencia normal t_c y la energía de fractura Γ_{in} porque la apertura crítica, Δu_c está determinada unívocamente en función de los otros dos. Este modelo fue posteriormente modificado por Tvergaard (1990) para incluir la rotura de la intercara debido a una apertura tangencial pura. Así mismo, Tvergaard (1990) introdujo un parámetro de daño que permite simular las descargas elásticas de intercarras parcialmente dañadas.

Una limitación del modelo de Needleman (1987) se encuentra en que la pendiente inicial de la curva $t_n - \Delta u_n$ no es infinita e introduce una flexibilidad inicial ficticia entre los nodos

1.3 Modelos micromecánicos de daño

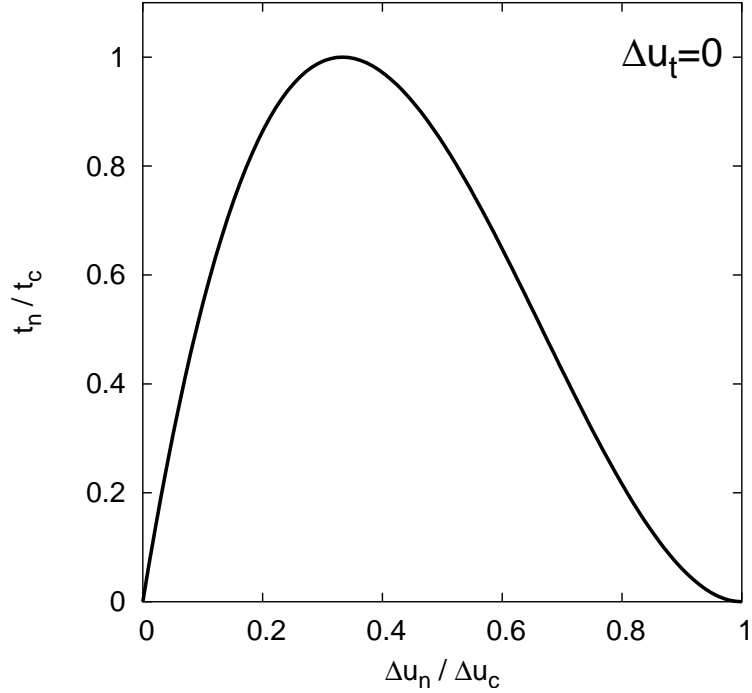


Figura 1.11: Tensión normal t_n transmitida a través de la intercara en función de la apertura normal de la fisura Δu_n cuando la apertura tangencial es cero.

que forman la intercara. Esta flexibilidad añadida puede modificar la respuesta del material compuesto y dar lugar a graves errores en la evaluación de las tensiones en la matriz y en el refuerzo. El valor de la flexibilidad inicial en el modelo de Needleman es función de las propiedades de la intercara según

$$K_n = \frac{27}{4} t_c^2 \Delta u_c \quad (1.49)$$

Antes de usar este modelo debe comprobarse que la rigidez inicial no modifica sustancialmente la rigidez de la estructura ni los campos de tensiones.

Tvergaard y Hutchinson (1993) formularon otro modelo cohesivo para la decohesión de la intercara entre dos fases que considera los efectos de la apertura normal y tangencial en la fractura de dicha intercara y que incluye como parámetro la rigidez inicial para evitar los problemas señalados más arriba. Sea λ la apertura generalizada de la grieta definida como

$$\lambda = \sqrt{\left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_{cn}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta u_t}{\Delta u_{ct}}\right)^2} \quad (1.50)$$

donde Δu_{cn} y Δu_{ct} son las correspondientes aperturas críticas en dirección normal y tangencial. Las tensiones transmitidas por la fisura cohesiva proceden de un potencial $\phi(\Delta u_n, \Delta u_t)$ que puede escribirse como

$$\Phi(\Delta u_n, \Delta u_t) = \Delta u_{cn} \int_0^\lambda \sigma(\lambda') d\lambda' \quad (1.51)$$

donde $\sigma(\lambda)$ es una función que representa la tensión normal transmitida por la fisura cohesiva en función de la apertura generalizada cuando el desplazamiento tangencial relativo entre los labios de la grieta es nulo.

Las componentes normal y tangencial de la tensión transmitida por la intercara se obtienen derivando dicho potencial y vienen dadas por

$$t_n = \frac{\partial \phi}{\partial \Delta u_n} = \frac{\sigma(\lambda)}{\lambda} \frac{\Delta u_n}{\Delta u_{cn}}, \quad t_t = \frac{\partial \phi}{\partial \Delta u_t} = \frac{\sigma(\lambda)}{\lambda} \frac{\Delta u_t}{\Delta u_{ct}} \frac{\Delta u_{cn}}{\Delta u_{ct}} \quad (1.52)$$

Tvergaard y Hutchinson (1993) propusieron para $\sigma(\lambda)$ una relación trapezoidal (Fig. 1.12) donde la energía de fractura Γ_{in} se calcula como

$$\Gamma_{in} = \frac{1}{2} t_c \Delta u_{cn} (1 - \lambda_1 + \lambda_2) \quad (1.53)$$

El modelo cohesivo de Tveergard y Hutchinson puede simplificarse eliminando la meseta de la curva trapezoidal de la Fig. 1.12 y los parámetros del modelo se reducen entonces a la máxima tensión normal que puede transmitir la intercara, t_c , la relación entre las aperturas críticas tangenciales y normales, $\Delta u_{cn}/\Delta u_{ct}$, la energía de fractura de la intercara Γ_{in} y la rigidez inicial de la fisura cohesiva, t_c/λ_1 . La apertura normal crítica, Δu_{cn} , viene fijada por los valores de la energía de fractura y la máxima tensión normal que puede soportar la intercara. La rigidez inicial de la intercara no influye en la energía de fractura y su valor mínimo se elige de modo que no distorsione los campos de tensiones alrededor de la intercara ni aumente la flexibilidad de la estructura. El límite superior de la rigidez viene impuesto por consideraciones numéricas.

El modelo constitutivo de Needleman se usó para analizar la decohesión entre la matriz y las inclusiones en el contexto de los modelos de celdas unitarias axilsimétricas. Needleman (1987) estudió la decohesión entre una matriz elasto-visco-plástica y las partículas esféricas de refuerzo y Nutt y Needleman (1987) aplicaron el modelo a una matriz reforzada con whiskers. Estos estudios analizaron la influencia de los parámetros microestructurales en los patrones de decohesión de la intercara (Fig. 1.13) pero no pudieron obtener el comportamiento efectivo del material porque las condiciones de contorno periódicas imponen

1.3 Modelos micromecánicos de daño

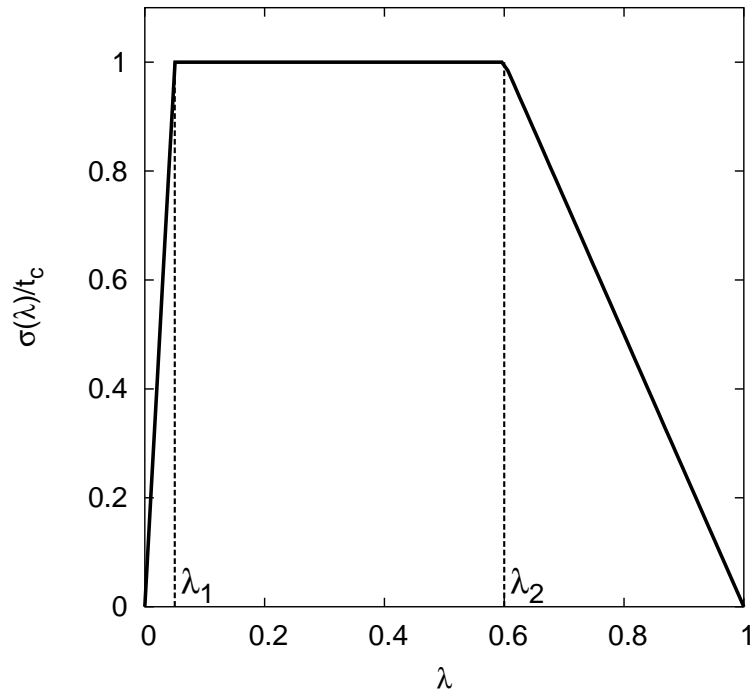


Figura 1.12: Tensión normal transmitida por la fisura cohesiva en función de la apertura generalizada λ cuando el desplazamiento tangencial relativo es nulo (Tvergaard y Hutchinson, 1993)

que la decohesión se produzca simultáneamente en todas las partículas. Recientemente, Thomson et al. (1998) emplearon este modelo para calcular el efecto de la distribución espacial del refuerzo en la decohesión de partículas esféricas. Las celdas unitarias tridimensionales utilizadas (Fig. 1.14) representaban materiales con distribuciones regulares de las partículas en la matriz y el efecto de la distribución espacial en los patrones de decohesión esferas-matriz se estudió variando las distancias y los ángulos entre las dos partículas de la celda.

El modelo de fisura cohesiva de Tvergaard y Hutchinson (1993) fue desarrollado para estudiar de la influencia de la plasticidad en la decohesión en modo mixto en intercaras metal-cerámica y recientemente se ha empleado para estudiar (siempre en el contexto de modelos axilsimétricos) la influencia de las tensiones residuales en la decohesión de fibras cortas en un compuesto de matriz metálica (Tvergaard, 2003). Hasta el momento, no se ha publicado en la literatura ningún estudio que combine los modelos de decohesión expuestos con celdas multipartícula tridimensionales para obtener el comportamiento efectivo del

material con daño.

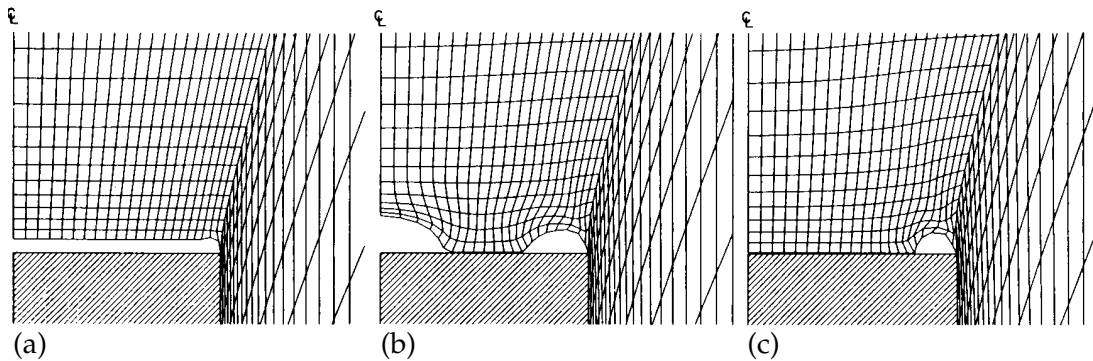


Figura 1.13: Patrones de decohesión de la intercara entre matriz y refuerzo usando el modelo de Needleman para diferentes relaciones entre la tensión de rotura de la intercara t_c y la tensión de plastificación de la matriz metálica σ_y (a) $t_c/\sigma_y=3.0$, (b) $t_c/\sigma_y=5.0$ y (c) $t_c/\sigma_y=6.0$ (Nutt y Needleman, 1987).

1.3.3. Fractura dúctil de la matriz

La fractura final en los materiales compuestos reforzados por partículas siempre se produce a través de la matriz, que es la única fase continua. Ese proceso de rotura tiene lugar mediante mecanismos muy diferentes como la rotura por cortante (en matrices poliméricas), la fractura de los bordes de grano o la nucleación, crecimiento y coalescencia de huecos (en matrices metálicas). La limitada ductilidad y energía de fractura de las matrices poliméricas hace que su rotura suela seguir rápidamente al daño en las partículas de refuerzo o en la intercara. Por contra, las matrices metálicas dúctiles pueden acumular una gran cantidad de energía antes de la rotura y la modelización de estos micromecanismos de fractura dúctil es crítica para entender la rotura de los materiales compuestos.

La rotura dúctil de la matriz comienza por la generación de cavidades debido a la fractura de las partículas o por decohesión de la intercara, que crecen con la deformación plástica (Fig. 1.9). Si se supone que estas cavidades están suficientemente alejadas unas de otras para despreciar las interacciones entre sus campos locales de tensión y deformación, su crecimiento se puede calcular estudiando el comportamiento de un hueco aislado en una matriz indefinida (Rice y Tracey, 1969). Si se desprecia el endurecimiento por deformación de la matriz, es posible determinar la evolución de la forma de un hueco esférico sometido a un campo remoto de deformación infinitesimal de componentes $d\epsilon_1$, $d\epsilon_2$ y $d\epsilon_3$ en las tres

1.3 Modelos micromecánicos de daño

direcciones principales bajo carga proporcional. La variación infinitesimal del radio en los tres ejes principales dR_i puede expresarse como

$$\frac{dR_i}{R} = A d\epsilon_i + D \sqrt{\frac{2}{3}} d\epsilon_i \epsilon_j \quad (1.54)$$

donde R es el radio del hueco, A una constante numérica comprendida entre $5/3$ y 2 y que depende del nivel de tensiones hidrostáticas y D un parámetro que es función de la tensión hidrostática, del límite elástico y de la relación entre las componentes del incremento de deformaciones (Rice y Tracey, 1969). El modelo de Rice y Tracey permite calcular la evolución del tamaño de las cavidades pero no indica ninguna condición crítica para su coalescencia. Brown y Embury (1973) postularon que la coalescencia entre dos huecos se produce cuando su diámetro es igual a la distancia que los separa. En ese momento desaparece la constricción lateral entre los huecos y el fallo se produce de forma espontánea por la rotura por cortante del ligamento entre los huecos. Whitehouse y Clyne (1993) propusieron otro modelo para materiales compuestos reforzados con partículas donde se supone que los huecos en la matriz crecen a partir de partículas decohesionadas hasta un valor crítico para el cual se produce la coalescencia. Siguiendo la filosofía del modelo de Brown y Embury (1973), la concentración crítica de huecos depende de su disposición geométrica.

La única descripción unificada del proceso de nucleación, crecimiento y coalescencia de huecos fue realizada por Gurson (1977). Este modelo describe el comportamiento de la matriz mediante un potencial plástico que depende de la fracción volumétrica de huecos en la matriz, f , y que viene dado por la siguiente expresión

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}}{\bar{\sigma}} + 2f \cosh\left(\frac{3\sigma_h}{2\bar{\sigma}}\right) - f^2 - 1 = 0 \quad (1.55)$$

donde $\bar{\sigma}$ es la tensión de plastificación de la matriz, σ_h la tensión hidrostática y σ_{eq} la tensión equivalente de Von Mises. El modelo recupera la superficie de plastificación de Von Mises cuando $f=0$ y postula la reducción progresiva en la tensión de plastificación al aumentar la fracción volumétrica de huecos en la matriz. Posteriormente, Tvergaard (1981,1982) modificó esta ecuación para ajustar la respuesta del modelo a los resultados numéricos que se obtuvieron de la simulación de una distribución periódica de huecos. La nueva forma adoptada fue

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}}{\bar{\sigma}} + 2q_1 f \cosh\left(\frac{3\sigma_h}{2\bar{\sigma}}\right) - q_1^2 f^2 - 1 = 0 \quad (1.56)$$

donde $q_1=1.5$. Según este modelo, la coalescencia de los huecos de la matriz se produce para una fracción volumétrica de poros $f_f = 1/q_1 = 0.67$, que es un valor demasiado alto de acuerdo con las observaciones experimentales. Por ello, Tvergaard y Needleman (1984) introdujeron una nueva modificación al modelo llegando al denominado modelo de Gurson-Tvergaard-Needleman o GTN. La fracción volumétrica de poros f en el modelo GTN se sustituyó por una función $f^*(f)$ definida como

$$\begin{aligned} f^* &= f, & \text{si} & \quad f \leq f_c \\ f^* &= f_c + K(f - f_c), & \text{si} & \quad f > f_c \end{aligned} \quad (1.57)$$

donde K es una constante elegida de forma que $f^* = 1/q_1$ cuando $f = f_f$. Para materiales metálicos, el comienzo de la coalescencia suele producirse para fracciones volumétricas de huecos $f_c = 0.10-0.15$ y el material pierde totalmente su capacidad de transferencia de carga para $f_f = 0.25$.

El modelo GTN asume que la evolución de la fracción volumétrica de huecos durante la deformación resulta de la nucleación de nuevos poros y del crecimiento de los ya existentes según

$$df = df_{nuc} + df_{crec} \quad (1.58)$$

donde la nucleación de huecos está gobernada por la deformación plástica de la matriz metálica y su ley de evolución se expresa mediante una distribución normal

$$df_{nuc} = \frac{f_n}{s_n \sqrt{2\pi}} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_n}{s_n} \right)^2 \right] d\bar{\epsilon} \quad (1.59)$$

donde f_n es la fracción de partículas (segundas fases, inclusiones, ...) que nuclean nuevos huecos, ϵ_n es la deformación plástica media para la nucleación de huecos y s_n es la desviación típica de la deformación plástica para nuclear huecos.

El crecimiento de los huecos ya existentes se obtiene directamente al considerar que la deformación plástica de la matriz se realiza sin cambio de volumen y la deformación plástica volumétrica resultante del potencial plástico de Gurson es debida al crecimiento de los huecos

$$df_{crec} = (1 - f) \frac{\text{tr}(d\bar{\epsilon})}{3} \quad (1.60)$$

siendo $d\bar{\epsilon}$ el incremento de deformación plástica equivalente.

Otro modelo de daño similar para materiales dúctiles fue desarrollado por Rousselier (1987). Este modelo también modifica la superficie de fluencia de Von Mises introduciendo

1.3 Modelos micromecánicos de daño

un parámetro escalar de daño, f , la fracción volumétrica de poros, de acuerdo con

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}}{1-f} - \bar{\sigma} + \sigma_1 f D \exp\left(\frac{\sigma_h}{1-f}\right) = 0 \quad (1.61)$$

donde D y σ_1 son parámetros del material y $\bar{\sigma}$ la tensión de plastificación de la matriz. El modelo presenta algunas diferencias con el modelo GTN: predice un crecimiento del daño en caso de cortante puro y trata de forma diferente la influencia del endurecimiento por deformación en el crecimiento del daño.

Ambos modelos de daño tienen algunos inconvenientes a la hora de su implementación como modelos constitutivos, debidas principalmente a la dependencia del resultado con el tamaño de la discretización. Esta falta de objetividad es típica en ecuaciones constitutivas con ablandamiento y pueden evitarse mediante una formulación no local (Resuch et al., 2003). Estos modelos no locales eliminan la dependencia de la solución con la malla pero introducen una *longitud característica* cuyo sentido físico y determinación experimental son problemáticas.

El estudio de la fractura dúctil de la matriz en materiales compuestos de matriz metálica se ha basado mayoritariamente en el modelo GTN. LLorca et al. (1991) simulaban la curva tensión-deformación hasta rotura de una matriz de aluminio reforzada con partículas de SiC para diferentes fracciones volumétricas. El estudio se realizó usando modelos de celda unitaria axilsimétricos y permitió evaluar el efecto de la forma de las partículas de refuerzo en la ductilidad del material compuesto. La distribución de la porosidad obtenida en LLorca et al. (1991) para un material compuesto reforzado con cilindros fue más acusada que la obtenida para un material reforzado con esferas y en ambos casos se observó como el daño se localizaba en las zonas de mayor concentración de tensiones.

Posteriormente, Geni y Kikuchi (1998) incorporaron el efecto de la distribución inhomogénea del refuerzo al estudio de la fractura dúctil de la matriz mediante el uso del modelo GTN. Para ello, estudiaron el comportamiento de una red tridimensional de celdas homogéneas, cada una representando un material compuesto con una fracción volumétrica distinta. El comportamiento de cada celda se obtuvo mediante el cálculo de modelos axilsimétricos bidimensionales en los que el daño en la matriz se modelizó mediante un modelo GTN. La distribución homogénea del refuerzo en la matriz y el empleo de partículas de refuerzo con factores de forma cercanos a 1 aumentaron de manera importante la deformación de rotura del material compuesto (Geni y Kikuchi, 1998).

1.4. Distribución inhomogénea del refuerzo

Existe una amplia evidencia experimental de que la distribución espacial de las partículas de refuerzo dentro del material compuesto influye de manera determinante en muchas de sus propiedades como el límite elástico (Conlon y Wilkinson, 2001), el inicio del daño (Li et al., 1999; Poza y Llorca, 1996), la ductilidad (Murphy et al., 1998), la tenacidad de fractura (Tao y Boyd, 1993), etc. La distribución inhomogénea del refuerzo en la matriz se caracteriza por la presencia de *clusters* o zonas de la matriz donde la fracción volumétrica de partículas es muy superior al valor medio. La aparición de estas regiones en un material compuesto se debe a múltiples razones. En los compuestos de matriz metálica producidos por colada se generan como consecuencia de la interacción de las partículas con las dendritas de matriz que crecen en la fase líquida durante la solidificación del material. La microestructuras de los materiales compuestos fabricados por pulvimetalurgia es en general más homogénea pero pueden aparecer agregaciones de partículas por efectos electrostáticos asociados a las superficies de las partículas o por una reordenación de las partículas de refuerzo como consecuencia de la diferencia de los tamaños entre las partícula de la matriz y del refuerzo (Prasad et al., 2002).

Un análisis del efecto de los *clusters* en el comportamiento mecánico de los materiales compuestos tiene que hacerse a partir de modelizaciones micromecánicas. En la literatura pueden encontrarse tres estrategias de abordar este problema. La primera (Corbin y Wilkinson, 1994; Geni y Kikuchi, 1998; Llorca y González, 1998) considera que el material compuesto está formado por una red tridimensional de celdas, cada una representando una región con diferente fracción volumétrica de partículas. La ecuación constitutiva de cada celda se obtiene siguiendo las estrategias clásicas (modelos de campo medio o de celda unitaria) y el comportamiento efectivo se obtiene promediando el comportamiento de todas las celdas. Esta simplificación de la distribución inhomogénea del refuerzo no resuelve los campos locales de tensión y deformación ya que sustituye los *clusters* en el material por materiales homogéneos con alta fracción volumétrica de refuerzo. La segunda estrategia consiste en modelizar numéricamente una microestructura simplificada del material inhomogéneo (Thomson et al., 1998, 2003). La microestructura se simplifica mediante celdas unitarias tridimensionales que representan una distribución regular de las partículas en la matriz (Fig. 1.14). En estos estudios, el efecto de la distribución inhomogénea del refuerzo se estudia modificando las distancias entre las dos partículas que forman la celda

1.4 Distribución inhomogénea del refuerzo

con condiciones de contorno simétricas. Este tipo de aproximaciones resultan muy útiles para el estudio local del efecto de los *clusters* (incluyendo el daño), pero no proporciona una buena predicción para el comportamiento efectivo de las diferentes microestructuras al emplear una distribución regular del refuerzo. La última estrategia se ha basado en simular de forma detallada la microestructura del material en 2 dimensiones y resolver el problema mecánico usando el método de elementos finitos (Boselli et al., 2001; Borbély et al., 2001) o el método de elementos finitos de Voronoi (Ghosh y Moorthy, 1998). Esta aproximación proporciona resultados valiosos sobre los patrones y el comienzo del daño en microestructuras inhomogéneas, pero su validez está limitada a 2 dimensiones, y su extrapolación a 3 dimensiones es incierta. Hasta el momento no existe ningún estudio sobre el efecto de la distribución inhomogénea del refuerzo sobre las propiedades mecánicas en 3 dimensiones que se apoye en una descripción detallada de la microestructura.

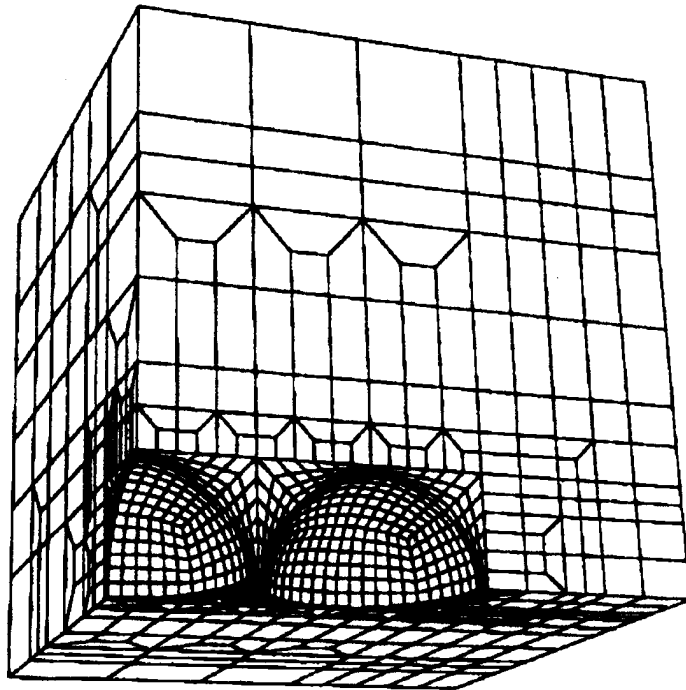


Figura 1.14: Modelo de celda unitaria para el estudio del efecto de la presencia de clusters en la microestructura (Thomson et al., 2003)

1.5. Objetivos

El desarrollo de modelos que permitan relacionar la microestructura con las propiedades macroscópicas es crítico para obtener materiales compuestos con propiedades óptimas. Existe una evidencia experimental de que muchas propiedades mecánicas de los materiales compuestos reforzados por partículas no solo dependen de la fracción volumétrica y de las propiedades de las fases sino de su distribución espacial y del desarrollo de fenómenos de daño en las distintas fases y en la intercara.

La simulación del comportamiento de estos materiales se ha realizado hasta ahora usando dos herramientas principales: los modelos de campo medio y los modelos de celda unitaria. Los primeros —que han sido muy útiles para obtener ecuaciones constitutivas en régimen elástico— no son adecuados para estudiar el daño (porque están basados en los valores medios de los campos en cada fase, mientras que el daño está regido por los valores máximos) ni el efecto de la distribución inhomogénea del refuerzo (ya que la mayoría parten de la hipótesis de ergodicidad en la distribución del refuerzo en la matriz). Los segundos, que permiten conocer los campos locales de tensiones y deformaciones, están limitados a microestructuras periódicas lo que impide estudiar la localización del daño.

El objetivo de la tesis es desarrollar una nueva aproximación basada en el análisis numérico de celdas multipartícula tridimensionales que permita estudiar de forma adecuada el efecto de la distribución espacial del refuerzo (homogénea vs. inhomogénea) y del daño en las propiedades mecánicas de materiales compuestos reforzados con partículas. El estudio se ha limitado a partículas de forma esférica.

Desarrollo de la tesis

El desarrollo de la tesis está dividido en siete capítulos. El capítulo 1 ofrece una revisión del estado del arte en la modelización micromecánica de materiales compuestos reforzados con partículas y en el análisis de los fenómenos de daño en estos materiales. En el capítulo 2 se estudian las microestructuras típicas de estos compuestos y se desarrollan algoritmos para la generación numérica de microestructuras equivalentes. En el capítulo 3 se presentan las técnicas numéricas desarrolladas para la realización de las simulaciones. El estudio numérico del comportamiento mecánico de materiales compuestos reforzados con esferas se presenta en los capítulos 4 y 5. El capítulo 4 hace un estudio del comportamiento en régimen elástico y elasto-plástico, mientras que el capítulo 5 presenta los resultados de la

1.5 Objetivos

modelización micromecánica del daño en forma de fractura del refuerzo, decohesión entre las partícula y la matriz y rotura dúctil de la matriz. El capítulo 6 expone la fabricación y ensayo de un material compuesto reforzado con partículas esféricas y la simulación de alguno de estos ensayos mediante los modelos desarrollados. Por último, las conclusiones y el trabajo futuro se detallan en el capítulo 7.

ca

CAPÍTULO 2

Generación de Microestructuras Isótropas

El comportamiento mecánico de los materiales compuestos reforzados con partículas depende en buena medida de los detalles de su microestructura. La disposición de las fases en un material compuesto puede variar enormemente a nivel local y el estudio de las propiedades efectivas debe hacerse sobre un volumen del material suficientemente grande de modo que sus propiedades sean iguales a las de todo el volumen. El mínimo volumen que verifica esta condición se conoce con el nombre de *volumen representativo* e idealmente puede definirse como el mínimo volumen que es estadísticamente representativo de la microestructura del material. Las propiedades mecánicas del volumen total se obtienen analizando el comportamiento de un volumen representativo que sea estadísticamente equivalente.

En la primera parte de este capítulo se presentan las diversas funciones que permiten describir de forma estadística la disposición de las partículas dentro de la microestructura del material compuesto. A continuación se introducen dos tipos de microestructuras típicas para los materiales compuestos reforzados con partículas. La primera corresponde a una distribución aleatoria, estadísticamente isótropa y homogénea de las partículas de refuerzo dentro de la matriz y la segunda a una distribución estadísticamente isótropa, aleatoria e inhomogénea. Se ha desarrollado y verificado un algoritmo numérico capaz de generar volúmenes representativos para ambas microestructuras. Estos volúmenes representativos se usarán posteriormente para simular el comportamiento mecánico del material compuesto

mediante el método de elementos finitos.

Los volúmenes representativos elegidos son cubos de lado L con N esferas en su interior, que representan a toda la microestructura mediante translaciones en las tres direcciones de los ejes coordenados. El tamaño mínimo del volumen representativo depende del tipo de microestructura representada y de las ecuaciones constitutivas de las fases. Por esta razón, se fijará más adelante al estudiar el comportamiento efectivo de cada tipo de material compuesto en función de las propiedades de las fases y de la microestructura.

2.1. Aspectos estadísticos

La microestructura de los materiales compuestos reforzados con partículas está caracterizadas por la aleatoriedad (o quasi-aleatoriedad) de la posición de las partículas dentro de la matriz. Sin embargo, las microestructuras aleatorias no son todas iguales desde el punto de vista estadístico y pueden clasificarse en función de dos factores: la homogeneidad y la isotropía.

La microestructura de un material compuesto se considera *estadísticamente homogénea* cuando la probabilidad de encontrar una partícula es constante en todo el volumen, lo que es equivalente a afirmar que la fracción volumétrica de partículas a nivel local es igual en todo el espacio. Una microestructura se dice que es *estadísticamente isótropa* si la probabilidad de encontrar partículas es igual en todas las direcciones del espacio.

Desde el punto de vista cuantitativo, la distribución de las partículas en el espacio se caracteriza mediante ciertas funciones estadísticas de las posiciones de las partículas, que se introducen a continuación.

2.1.1. Centro de masas y momento de inercia

Sea una distribución aleatoria de partículas en un volumen V y sea Ω una subregión de V suficientemente grande (con relación al diámetro d de las partículas). El centro de masas de dicha subregión $\bar{\mathbf{x}}^{(\Omega)}$ se define como

$$\bar{\mathbf{x}}^{(\Omega)} = \frac{1}{V^{(\Omega)}} \int_{V^{(\Omega)}} \mathcal{I}^{(p)} \mathbf{x} \, dV \quad (2.1)$$

donde $\mathcal{I}^{(p)}$ es la función indicador de la fase p definida en la ecuación 1.30 y \mathbf{x} el vector de posición de un punto dentro del volumen. Una distribución de partículas será estadísticamente inhomogénea si existe un tamaño de subregión $V^{(\Omega)}$ tal que la posición del centro

2.1 Aspectos estadísticos

de masas en subregiones de dicho tamaño es muy diferente al centro geométrico de esas regiones.

La isotropía de una distribución de partículas en un volumen V se puede estudiar mediante el tensor del momento de inercia medio de las partículas en dicha región, \mathbf{I} , que viene dado por

$$I_{ii} = \int_V \mathcal{I}^{(p)} \sqrt{x_j^2 + x_k^2} dV \quad \text{para } i = 1, 3; j \neq k \neq i \quad (2.2)$$

donde I_{ii} es el momento de inercia respecto a la dirección i y x_j es la componente j del vector de posición \mathbf{x} de un punto del volumen. Valores diferentes de los momentos principales de inercia en el volumen V indican la presencia de direcciones privilegiadas en la microestructura.

2.1.2. La función de distribución radial

La aleatoriedad y homogeneidad de una distribución isótropa de esferas se puede estudiar mediante la función de distribución radial, $g(r)$, definida para un volumen V que tiene en su centro una esfera como (Pyrz, 1994)

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N} \frac{dK(r)}{dr} \quad (2.3)$$

donde $K(r)$ es el número de centros de esfera situados a una distancia menor que r del centro de la esfera situada en el origen, y N el número total de esferas dentro del volumen V . Esta función proporciona información acerca de la frecuencia de las distancias entre partículas. La función $g(r)$ es suave en distribuciones estadísticamente homogéneas y presenta máximos y mínimos en las distribuciones inhomogéneas. Un máximo indica que existe un número elevado de partículas situadas a la misma distancia y es un resultado típico de las distribuciones periódicas (no aleatorias), donde las partículas se encuentran a distancias fijas.

No existen expresiones analíticas generales para la función $g(r)$ salvo en casos especiales como una distribución bidimensional estadísticamente isótropa y aleatoria de discos del mismo radio. En tres dimensiones sólo existen aproximaciones analíticas a la solución verdadera, Percus y Yevvick (1958), o bien aproximaciones numéricas obtenidas mediante simulaciones en el ordenador.

2.1.3. Distancia al vecino más próximo

La tendencia a la agregación de las partículas y, en consecuencia, el grado de homogeneidad se puede estudiar a partir del valor medio y de la desviación estándar de la distancia a la partícula más cercana d_λ , definida como

$$d_\lambda = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \min\{\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(l)}\| \text{ para } i \neq l\} \quad (2.4)$$

Los valores de d_λ para distribuciones ergódicas aleatorias e isótropas de esferas idénticas están acotados entre un límite inferior $d_\lambda \geq d$ que representa a la microestructura donde cada partícula está en contacto con —al menos— otra y un límite superior dado por (Torquato, 2000)

$$d_\lambda \leq \left(1 + \frac{1}{32^3(-\ln(1-\xi))}\right) d \quad (2.5)$$

Para distribuciones de esferas de diámetro d y con la misma fracción volumétrica ξ , valores de d_λ cercanos a d indican una alta frecuencia de partículas en contacto (más homogeneidad) y valores grandes de d_λ indican mayor cercanía al caso estadísticamente homogéneo. La desviación estándar de d_λ , $s(d_\lambda)$ proporciona también información sobre la distribución de las esferas en el material. Así, para un mismo valor de ξ y d_λ , la homogeneidad de la microestructura aumenta con $s(d_\lambda)$.

2.2. Microestructuras estadísticamente homogéneas

Una distribución aleatoria, estadísticamente isótropa y homogénea de esferas en la matriz es la microestructura más sencilla para un material compuesto reforzado con partículas. Los volúmenes representativos de este tipo de microestructuras se han generado mediante el algoritmo de adsorción secuencial aleatoria que se ha modificado para poder alcanzar una fracción volumétrica de esferas mayor dentro del volumen representativo. Las microestructuras obtenidas por este método se estudiarán con las funciones estadísticas presentadas más arriba, para verificar la validez de los algoritmos y comprobar la isotropía, aleatoriedad y homogeneidad de las microestructuras.

2.2 Microestructuras estadísticamente homogéneas

2.2.1. Algoritmo de adsorción secuencial aleatoria

El algoritmo de adsorción secuencial aleatoria, AASA, es el método más intuitivo y sencillo para generar distribuciones aleatorias, estadísticamente homogéneas e isotrópicas de partículas (Widom, 1966). Es un método de no-equilibrio, ya que las partículas no pueden moverse una vez que se han colocado en la microestructura y las distribuciones resultantes no pueden alcanzar la máxima fracción volumétrica de partículas (0.64 para esferas monodispersas). En este método, las coordenadas de los centros de las esferas $\mathbf{x}^{(i)}$ de radio $r^{(i)}$ se generan de manera secuencial y aleatoria mediante el método de Monte-Carlo dentro de un volumen V , de forma cúbica por simplicidad. Los radios de las partículas pueden ser constantes o seguir una distribución estadística dada. Una nueva partícula i es aceptada si no se superpone a ninguna de las $i - 1$ partículas generadas previamente. Matemáticamente esta condición se comprueba para esferas mediante la condición

$$\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\| \geq r^{(i)} + r^{(j)} \quad \text{con } j = 1, \dots, i - 1 \quad (2.6)$$

El proceso de generación termina cuando se alcanza la fracción volumétrica de esferas deseada dentro del recinto V . Este método para generar distribuciones de partículas aleatorias, isotrópicas y homogéneas presenta varias limitaciones,

- Cuando el radio de las esferas es constante no es posible alcanzar fracciones volumétricas altas (el límite teórico es 0.38 aunque en la práctica es difícil superar 0.35)
- El algoritmo de generación es poco eficiente desde el punto de vista computacional porque el número de comprobaciones de la condición 2.6 crece rápidamente con el número de partículas

Para paliar estas limitaciones y adaptar el método a nuestro problema, se ha desarrollado un nuevo algoritmo basado en el AASA que se detalla a continuación.

2.2.2. Algoritmo modificado de adsorción secuencial aleatoria

El AASA se ha modificado para alcanzar fracciones volumétricas más cercanas al límite teórico de 0.64. También se han introducido condiciones de periodicidad para la distribución de las partículas junto a las superficies externas del volumen considerado para evitar

distorsiones de la fracción volumétrica en estas regiones. Por último, se han introducido algunas restricciones adicionales a las coordenadas de los centros de las partículas para poder generar mallas de elementos finitos sin elementos distorsionados. La microestructura completa del material consistirá en una repetición periódica del volumen representativo cúbico en las tres direcciones del espacio.

El nuevo algoritmo comienza generando una microestructura con el AASA en un volumen cúbico V_0 , de forma que la fracción volumétrica inicial, ξ_0 , sea aceptable para esferas monodispersas (es decir, inferior a 0.35). La posición de cada nueva partícula i se genera de forma secuencial y es aceptada si cumple dos condiciones: que no intersekte a las partículas generadas previamente (incluyendo las que se encuentran en los cubos adyacentes) y que sus bordes no estén demasiado cerca de las superficies del cubo. En el caso de esferas monodispersas estas condiciones se pueden expresar como

- La distancia entre la partícula i y todas las partículas generadas previamente $j = 1, \dots, i-1$ tiene que ser mayor a un cierto valor mínimo s_1 . Además, si una partícula i corta cualquiera de las caras del cubo, esta condición también debe comprobarse para las partículas cercanas a la cara opuesta de cubo porque la estructura es periódica. Matemáticamente estas condiciones se expresan como

$$\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)} + \mathbf{h}\| \geq 2s_1, \quad (2.7)$$

donde $\mathbf{h} = (h, k, l)$ y h, k y l pueden tener los valores de $0, L$ o $-L$, dando lugar a 27 condiciones que se deben verificar por cada par de partículas. s_1 debe ser superior r para una distribución de esferas idénticas y se tomó $s_1=1.035r$ para lograr una buena discretización por elementos finitos en el ligamento entre dos esferas.

- La discretización por elementos finitos también exige que la superficie de las esferas no se encuentre demasiado cerca de las superficies laterales del cubo. Esta condición se expresa como

$$\begin{aligned} |x_k^{(i)} - r| &\geq s_2; & k = 1, 3, \\ |x_k^{(i)} + r - L| &\geq s_2; & k = 1, 3, \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde $s_2=0.1r$.

El AASA permite generar una dispersión aleatoria, homogénea e isótropa de esferas teniendo en cuenta las condiciones de periodicidad y que se puede discretizar por elementos

2.2 Microestructuras estadísticamente homogéneas

finitos sin elementos distorsionados siempre que la fracción volumétrica sea inferior a 0.3. Para fracciones volumétricas mayores es necesario realizar un proceso iterativo de *compresión* del cubo de volumen V_0 hasta alcanzar la fracción volumétrica deseada ξ . Asumiendo que las coordenadas de la partícula i -ésima tras el paso de compresión $N - 1$ vienen dadas por $\mathbf{x}_{N-1}^{(i)}$, y que verifican las condiciones expresadas por las ecuaciones 2.7 y 2.8, las nuevas coordenadas del centro de las esferas se calculan como

$$\mathbf{x}_N^{(i)} = \mathbf{x}_{N-1}^{(i)} s_c, \quad (2.9)$$

y la nueva longitud de los lados del cubo viene dada por

$$L_N = s_c L_{N-1} \quad (2.10)$$

donde $s_c \leq 1$ es un factor de compresión seleccionado por el usuario. Tras la compresión se comprueba si las nuevas posiciones de los centros de las esferas verifican las condiciones 2.7 y 2.8. En caso afirmativo la fracción volumétrica de esferas se habrá incrementado hasta

$$\xi_N = \xi_{N-1} \frac{L_{N-1}^3}{L_N^3} = \frac{\xi_{N-1}}{s_c^3}, \quad (2.11)$$

y el proceso iterativo se repite hasta alcanzar el valor de ξ deseado. No obstante, la compresión suele dar lugar al solapamiento entre las esferas y es necesario modificar su distribución espacial. Si i y j son dos esferas que no cumplen la condición 2.7 tras la compresión, la partícula i se traslada en una dirección aleatoria dada por \mathbf{u} ($\|\mathbf{u}\| = 1$) que cumple la condición

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_N^{(i)} - \mathbf{x}_N^{(j)}) \leq 0, \quad (2.12)$$

con lo que la nueva posición del centro de la esfera i será

$$\mathbf{x}_N^{(i)} = \mathbf{x}_N^{(i)} + s_c^* r \mathbf{u}, \quad (2.13)$$

donde s_c^* es otra constante elegida por el usuario de forma que mejore la probabilidad de un movimiento satisfactorio. La nueva posición de los centros de las partículas —dada por 2.13— es válida si verifica las desigualdades 2.7 y 2.8. En caso contrario, la partícula retorna a su posición original y se mueve en otra dirección aleatoria. La distribución N -ésima de partículas se acepta cuando todas las esferas cumplen las condiciones 2.7 y 2.8, y se procede a una nueva compresión.

Capítulo 2. Generación de Microestructuras Isótropas

Desde el punto de vista práctico, s_c^* se modifica cada cierto número de intentos para reducir la distancia de cada movimiento y asegurar la convergencia. Además, se incluye un algoritmo de retorno de la distribución de partículas N -ésima a la distribución $N - 1$ cuando ha habido demasiados intentos de mover una partícula sin alcanzar una distribución satisfactoria; en este caso, todas las posiciones de los centros pasan de $\mathbf{x}_N^{(i)}$ a $\mathbf{x}_{N-1}^{(i)}$ y se incrementa s_c para reducir compresión del volumen y facilitar la acomodación de las partículas dentro de éste.

Este algoritmo es directamente aplicable a otro tipo de partículas (elipsoides, cubos o cilindros), sin más que utilizar la ecuaciones adecuadas para calcular la intersección entre las superficies de las partículas.

Un ejemplo de un volumen representativo cúbico con 30 esferas y $\xi=0.25$ se ha dibujado en la figura 2.1.

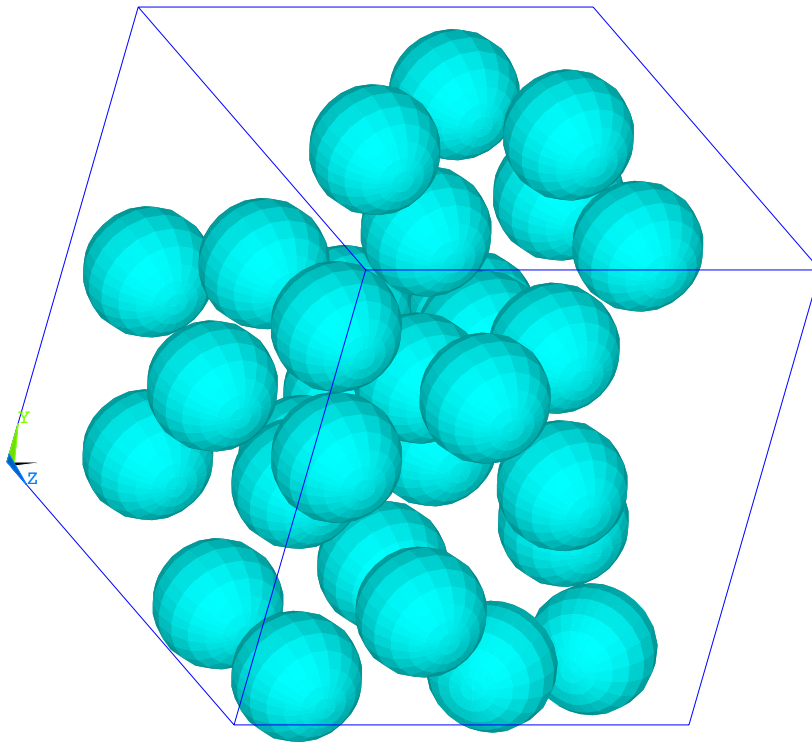


Figura 2.1: Celda cúbica con un 25 % de partículas esféricas distribuidas aleatoriamente (30 esferas)

El algoritmo se modificó ligeramente para generar volúmenes representativos con un gran número de partículas, que permitieron evaluar con precisión los parámetros estadísticos de cada microestructura. Para ello, el volumen se subdividió en celdas cúbicas iguales

2.2 Microestructuras estadísticamente homogéneas

y con lados iguales o mayores al radio de las esferas. A cada subcelda se le asignó un registro con las partículas con centro dentro de ella o en alguna de las 26 celdas contiguas y la comprobación de las desigualdades 2.7 y 2.8 para una partícula sólo se realizó con aquellas partículas cuyo centro se encontraba en una de las 26 celdas contiguas, reduciendo drásticamente el número de comprobaciones cuando el número de partículas era muy grande.

2.2.3. Análisis de las microestructuras

El nuevo algoritmo desarrollado (AASAM) manipula la distribución de partículas generada aleatoriamente para alcanzar fracciones volumétricas elevadas y cabe preguntarse si las distribuciones de esferas generadas cumplen las condiciones de homogeneidad e isotropía. Para ésto, se generaron cien distribuciones diferentes con 30 esferas cada una y fracciones volumétricas comprendidas entre 0.1 y 0.5 para tener un número aceptable de microestructuras que permitiera obtener una información estadísticamente representativa para cada fracción volumétrica. La homogeneidad se evaluó calculando las coordenadas del centro de masas de las esferas y la isotropía a partir de los momentos de inercia con respecto a tres ejes perpendiculares con origen en el centro de la celda.

El centro de masas de las esferas se ha calculado para las celdas completas y para subceldas de arista $L/2$ y en ambos casos la posición del centro de masas era muy cercana al centro geométrico de las regiones consideradas, en consonancia con la homogeneidad de las distribuciones. El valor medio de la posición de los centros de masas de las celdas completas para cada fracción volumétrica se ha representado en la Fig. 2.2 junto con su desviación estándar, y se puede apreciar que la media coincide con el centro geométrico de la celda, como cabría de esperar para una distribución homogénea. La desviación estándar disminuye a medida que aumenta la fracción volumétrica debido al menor espacio libre entre las esferas.

El valor de los tres momentos de inercia principales de cada distribución se ha calculado integrando de forma numérica la ecuación 2.2 con respecto a tres ejes perpendiculares con origen en el centro de las celdas. No se han observado diferencias entre los momentos de inercia con respecto a los diferentes ejes. Los tres momentos de inercia se promediaron para las cien distribuciones por cada fracción volumétrica y el valor medio se representó en la Fig. 2.3 junto al momento de inercia con respecto a un eje que pasa por el centro y es paralelo a

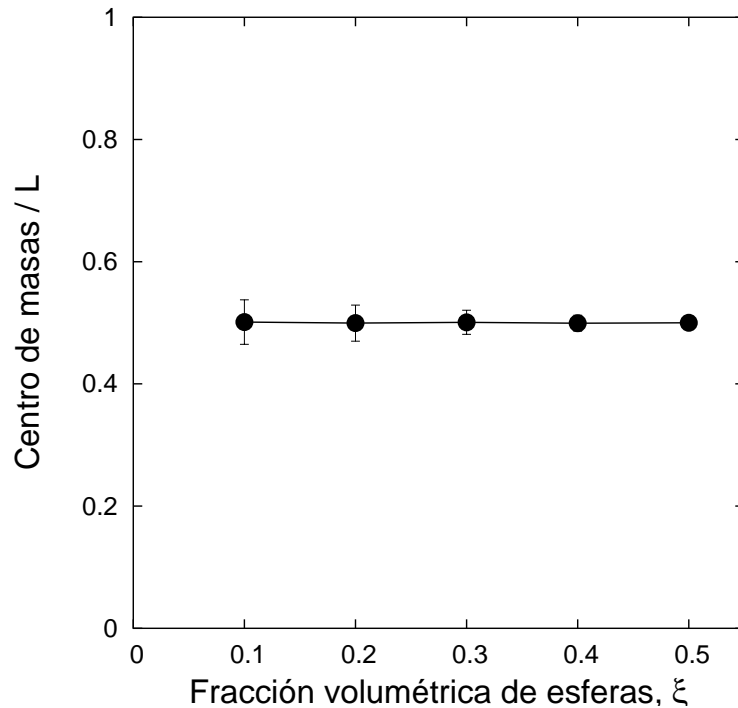


Figura 2.2: Media y desviación estándar de la posición del centro de masas para 100 distribuciones de 30 partículas generadas con el AASAM

una cara para un cubo homogéneo de lado L y de masa igual a la de todas las esferas, que es igual a $\xi^2/6$. La desviación estándar del momento de inercia de la distribución de esferas es siempre muy pequeña, lo que implica que varía muy poco en los diferentes ejes y celdas debido a la isotropía de las distribuciones. Además, el valor medio es muy semejante al momento de inercia de un material homogéneo de igual masa, siendo la máxima diferencia entre ambos valores inferior al 2%.

Por último se ha estudiado la forma de la función de distribución radial $g(r)$ para distribuciones de 30 esferas y 500 esferas y una fracción volumétrica $\xi = 0.5$ generadas con el AASAM y se ha comparado con el valor teórico de la función $g(r)$ para una distribución tridimensional aleatoria y estadísticamente homogénea e isótropa de esferas en equilibrio obtenido usando la aproximación de Percus y Yevvick (1958). Los resultados se han dibujado en la Fig. 2.4. La función $g(r)$ para las celdas de 30 partículas se ajusta perfectamente al resultado teórico de la distribución, a pesar de la presencia de pequeños picos inducidos por el reducido número de partículas, indicando que las microestructuras generadas con el AASAM representan realmente a materiales con microestructuras alea-

2.3 Microestructuras estadísticamente no homogéneas

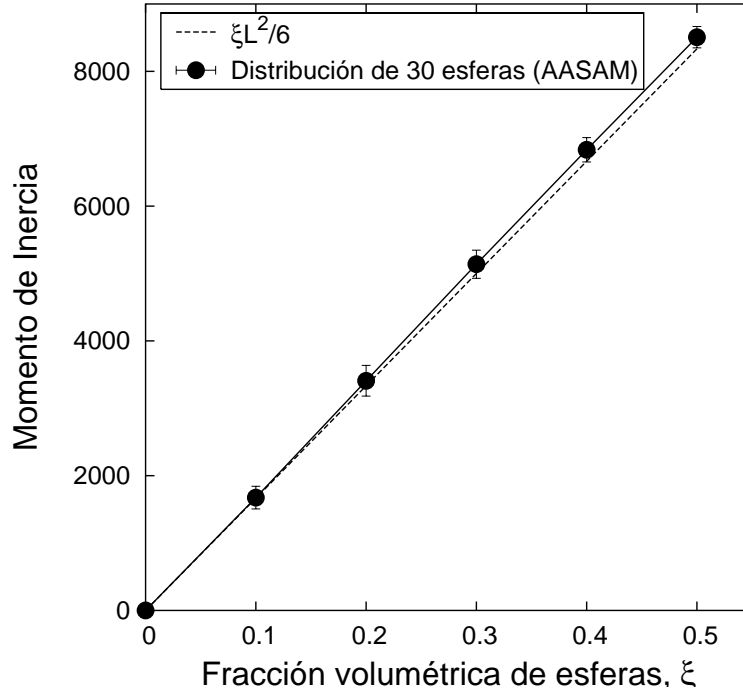


Figura 2.3: Valor medio y desviación estándar del momento de inercia respecto de un eje con origen en el centro geométrico para 100 distribuciones de 30 partículas generadas con el AASAM y para un cubo homogéneo de igual masa

torias y estadísticamente homogéneas e isotrópicas de esferas idénticas. La forma general de la función $g(r)$ es independiente del número de partículas en la celda (30 ó 500) usado aunque los volúmenes representativos mayores dan lugar a curvas más suaves al promediar los resultados sobre un mayor número de partículas.

2.3. Microestructuras estadísticamente no homogéneas

Una microestructura estadísticamente no homogénea se caracteriza por la presencia de regiones donde la fracción volumétrica de refuerzo local es superior a la fracción volumétrica media. Estas zonas pueden tener forma más o menos equiaxial o estar distorsionadas en una o dos direcciones si el material ha sufrido tratamientos de extrusión o laminado, respectivamente.

La microestructura inhomogénea más sencilla está formada por una distribución aleatoria e isotrópica de regiones esféricas de radio R_{cl} que representan a los *clusters*. Las partículas

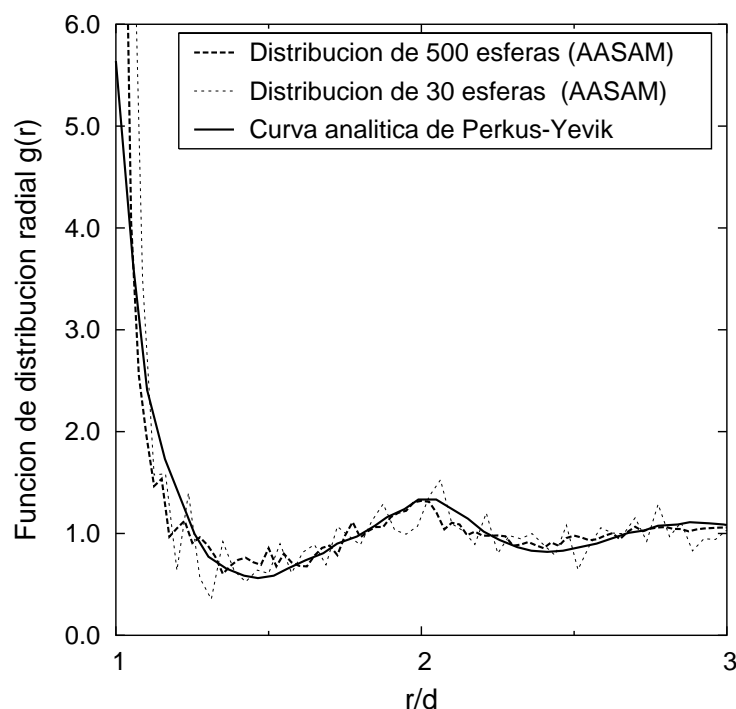


Figura 2.4: Función de distribución radial exacta para una distribución aleatoria, homogénea e isótropa de esferas iguales e impenetrables (Percus y Yevvick, 1958) y los resultados obtenidos con el AASAM para distribuciones de 30 y 500 esferas. $\xi = 0.5$

esféricas de refuerzo se concentran en el interior de estas regiones, dentro de una esfera concéntrica de radio r_{cl} (Fig. 2.5). Los tres parámetros que controlan la microestructura son la fracción volumétrica media, ξ , la fracción volumétrica local en el interior de los *clusters*, ξ_{cl} , y el número de partículas en cada *cluster* n_{cl} . En esta representación, el grado de inhomogeneidad de la microestructura se controla a través de ξ_{cl} . Este tipo de distribución representa bien la microestructura real de muchos materiales compuestos (Murphy et al., 1998; Tao y Boyd, 1993). Las distribuciones de partículas en un volumen representativo cúbico se generaron mediante un algoritmo desarrollado para este efecto y que se describe a continuación

2.3.1. Algoritmo de generación de la microestructura

El algoritmo desarrollado comprende dos fases, la generación de los centros de *cluster* y la dispersión de las partículas en torno a esos centros. El proceso para generar N *clusters* dentro de un volumen representativo, con n_{cl} partículas por *cluster* y fracciones

2.3 Microestructuras estadísticamente no homogéneas

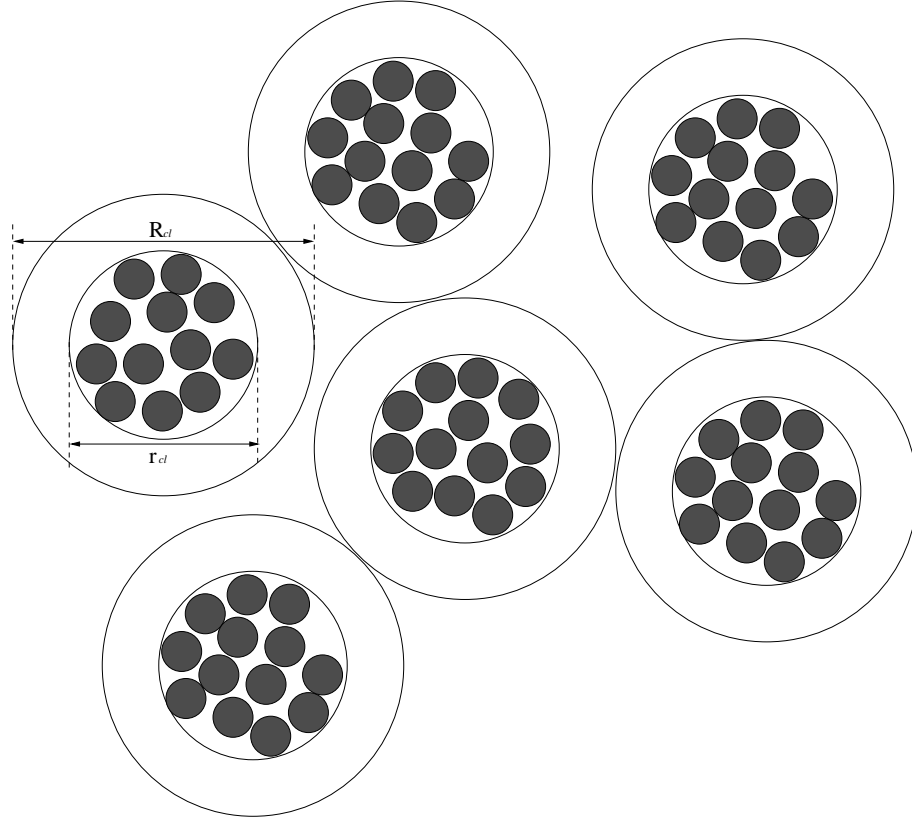


Figura 2.5: Representación bidimensional de la microestructura inhomogénea mostrando las regiones esféricas en el interior de las cuales se aglomeran las partículas esféricas de refuerzo

volumétricas global y local ξ y ξ_{cl} , respectivamente, se esquematiza a continuación

- **Fase I:**

Las coordenadas de los N centros de *cluster*, \mathbf{X}_i se generan de forma aleatoria mediante el algoritmo AASAM descrito más arriba. Estas regiones se consideran como esferas impenetrables de radio fijo R_{cl} , elegido de forma que sus centros estén lo más alejados posible y el volumen ocupado por dichas esferas sea lo mayor posible. La máxima compacidad de una distribución aleatoria de esferas iguales es de 0.64, pero solo es posible alcanzar valores del orden de 0.5-0.6 cuando el número de *clusters* incluido en el volumen representativo está limitado a menos de 10.

- **Fase II**

El diámetro d de las partículas se calcula a partir de la fracción volumétrica media

ξ y del número total de esferas en el volumen representativo (Nn_{cl}) y la fracción volumétrica de refuerzo local viene dada por

$$\xi_{cl} = n_{cl} \left(\frac{d}{2r_{cl}} \right)^3 \quad (2.14)$$

Las posiciones de los centros de las esferas \mathbf{x}_j se generan mediante distintos algoritmos en función del valor de ξ_{cl}

- Para valores de ξ_{cl} reducidos se puede usar el algoritmo clásico de adsorción secuencial aleatoria, AASA, para calcular las coordenadas de las esferas. Las coordenadas del centro de cada partícula j , \mathbf{x}_j , perteneciente al *cluster* i se generan aleatoriamente (en coordenadas esféricas con origen en el centro del *cluster* \mathbf{X}_i) y de forma secuencial. Como las partículas esféricas deben encontrarse dentro de la esfera de radio r_{cl} , \mathbf{x}_j debe cumplir la condición

$$\text{mín} \left\{ |\mathbf{x}_j - (\mathbf{X}_i - \mathbf{h})| + \frac{d}{2} \right\} \leq r_{cl} \quad (2.15)$$

donde \mathbf{h} toma los 27 valores indicados para la ecuación 2.7 porque los *clusters* pueden cortar una cara de la celda cúbica y la microestructura es periódica. Las coordenadas \mathbf{x}_j también deben cumplir las dos condiciones impuestas en el método AASAM y expresadas por las inecuaciones 2.7 y 2.8. En caso contrario, se generan unas nuevas coordenadas para el centro de las partículas hasta que las cumplan. El algoritmo concluye cuando se han generado todos los centros de las partículas del *cluster*.

- Si ξ_{cl} es elevado, el AASA no es capaz de generar los centros de las partículas alrededor del centro de cada *cluster* y fue necesario desarrollar un método iterativo basado en la compresión de los *clusters*. Este nuevo algoritmo comienza generando las posiciones de las partículas dentro de una esfera de tamaño $r_{cl}^0 > r_{cl}$ mediante el método AASA. Las esferas generadas verifican las condiciones impuestas por las inecuaciones 2.7 y 2.8 y la región esférica de radio r_{cl} se comprime paso a paso hasta alcanzar el valor deseado de r_{cl} . Sea \mathbf{x}_j^{k-1} el vector de posición del centro de la partícula j perteneciente al *cluster* i tras $k - 1$ compresiones. La partícula es atraída durante la compresión hacia el centro del *cluster* \mathbf{X}_i y sus nuevas coordenadas vienen expresadas por

$$\mathbf{x}_j^k = \mathbf{x}_j^{k-1} + (1 - s_c)[\text{mín}\{(\mathbf{X}_i + \mathbf{h}) - \mathbf{x}_j^{k-1}\}] \quad (2.16)$$

2.3 Microestructuras estadísticamente no homogéneas

siendo $s_c (< 1)$ el factor de compresión y \mathbf{h} un vector que toma los 27 valores indicados más arriba para tener en cuenta la periodicidad de la microestructura. Si las nuevas posiciones de las esferas satisfacen las condiciones 2.7 y 2.8, la nueva fracción volumétrica se ha incrementado según

$$\xi_{cl}^k = \frac{1}{s_c^3} \xi_{cl}^{k-1} \quad (2.17)$$

y el proceso continúa hasta que se alcance el valor de ξ_{cl} deseado. Por el contrario, si alguna partícula no verifica las condiciones 2.7 y 2.8, se mueve de forma aleatoria dentro de la región del *cluster* (radio r_{cl}^k) hasta que las cumpla. El programa de generación incluye también un algoritmo de retorno a la distribución de partículas previa a la última compresión cuando ha habido demasiados intentos de mover una partícula dentro del *cluster* sin alcanzar una distribución satisfactoria.

Un ejemplo de un volumen representativo generado usando este algoritmo se ha representado en la figura 2.6. La fracción volumétrica media de esferas es de $\xi=0.15$ y la fracción volumétrica local $\xi_{cl} = 0.4$. En la figura puede apreciarse como algunos *clusters* cercanos a las caras del cubo tienen partículas situadas en la cara opuesta debido a la periodicidad impuesta en el algoritmo de generación.

2.3.2. Análisis de las microestructuras

El algoritmo desarrollado para generar microestructuras inhomogéneas lleva a la creación de *clusters* esféricos caracterizados por la fracción volumétrica local de esferas ξ_{cl} y el número de esferas por *cluster*. Estos dos parámetros tienen un claro significado físico y geométrico, pero no contienen suficiente información sobre la distribución espacial de los *clusters* dentro del volumen representativo ni de las esferas dentro del *cluster*. Esta información puede obtenerse a partir del cálculo de alguna de las funciones estadísticas, descritas en la sección 2.1, como la distancia media al vecino más próximo y la función de distribución radial. La determinación precisa de estos parámetros estadísticos necesita promediar los resultados sobre un número alto de volúmenes representativos y para ello se generaron 100 celdas cúbicas, con 1400 esferas cada una (200 *clusters* de 7 partículas). El análisis estadístico se realizó sobre cuatro microestructuras diferentes con la misma fracción volumétrica de esferas $\xi = 0.15$ y distintos grados de inhomogeneidad: la primera

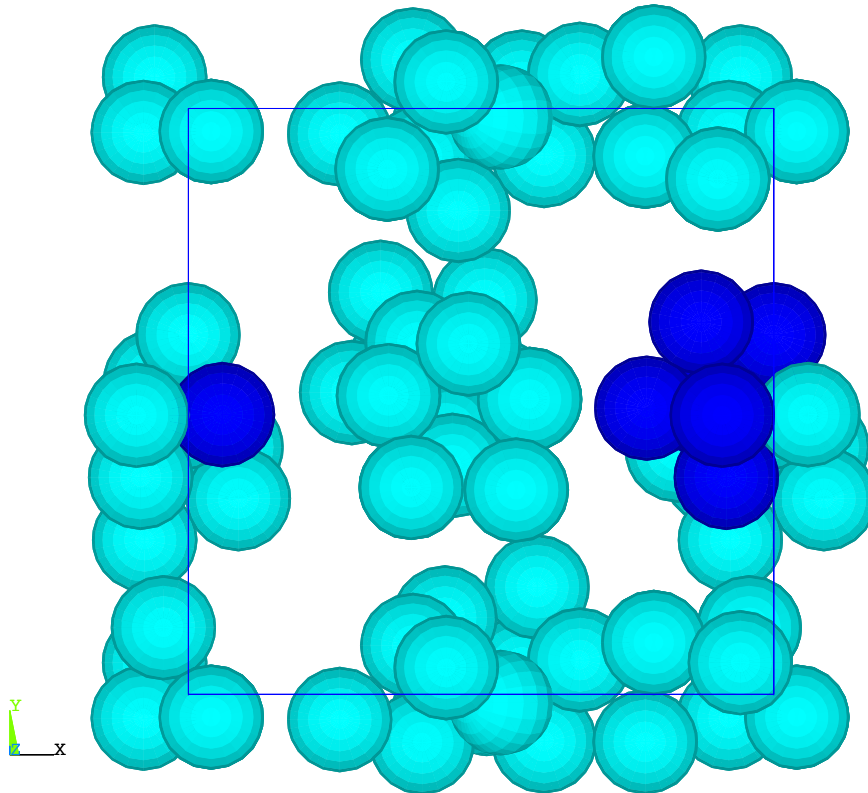


Figura 2.6: Celda cúbica representativa de una microestructura estadísticamente no homogénea. Las fracciones volumétricas global y local son respectivamente $\xi = 0.15$ y $\xi_{cl} = 0.40$ respectivamente. Las partículas de un *cluster* se han representado en gris oscuro para mostrar la periodicidad de la microestructura.

estaba formada por una distribución homogénea ($\xi_{cl} = 0.15$) y las otras tres tenían valores crecientes de inhomogeneidad caracterizados por $\xi_{cl} = 0.2, 0.3$ y 0.4 .

El valor medio de la distancia al vecino más próximo d_λ y su correspondiente desviación estándar se han dibujado en la Fig. 2.7 para estas cuatro microestructuras donde se puede apreciar que d_λ y su desviación estándar disminuyen (para un valor fijo de ξ) conforme la microestructura se hace más inhomogénea y se encuentra siempre entre las líneas horizontales que representan las cotas superior e inferior de d_λ para cualquier dispersión aleatoria e isotrópica de esferas (ecuación 2.5). Algunos autores han medido la desviación estándar de d_λ para distribuciones homogéneas e inhomogéneas de partículas en materiales compuestos a partir de secciones metalográficas (Murphy et al., 1998; Tao y Boyd, 1993). El cociente de esta magnitud para microestructuras homogéneas e inhomogéneas está comprendido entre 3-5 y es muy similar al resultado obtenido cuando las distribuciones con

2.3 Microestructuras estadísticamente no homogéneas

$\xi_{cl} = 0.2$ y 0.3 se comparan con la distribución homogénea. Cuando $\xi_{cl} = 0.4$, d_λ tiende a 1 y su desviación estándar se hace ≈ 0 porque todas las partículas dentro del *cluster* están prácticamente en contacto con al menos otra partícula, indicando que la compacidad de las esferas dentro del *cluster* es muy elevada. Estos resultados ponen manifiesto que las microestructuras generadas con el algoritmo pueden representar materiales compuestos con un grado de inhomogeneidad muy alto.

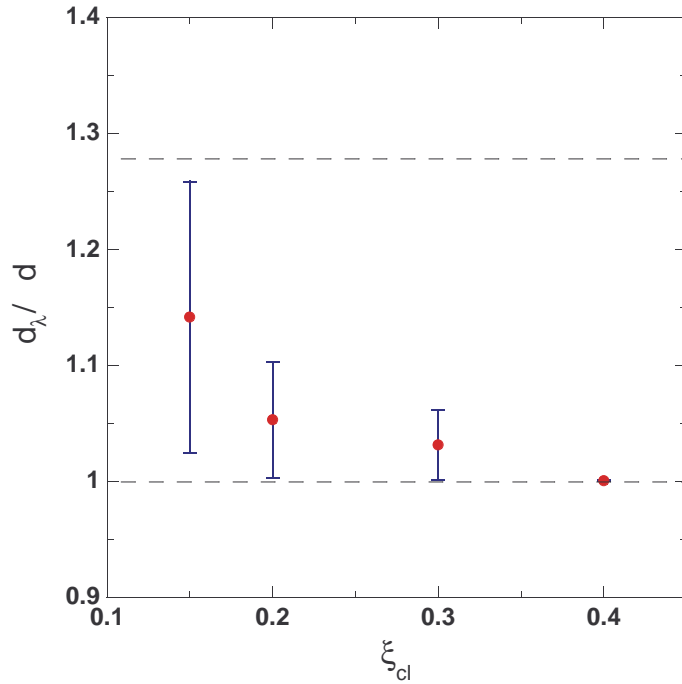


Figura 2.7: Distancia al vecino más próximo (normalizada por el diámetro de las esferas) en función de ξ_{cl} . Los resultados son el promedio obtenido sobre 100 celdas cúbicas con 1400 esferas (200 *clusters* de 7 esferas).

La función de distribución radial, ecuación 2.3, se ha obtenido para cada una de las cuatro microestructuras consideradas promediando los resultados obtenidos para las 100 distribuciones generadas para cada microestructura, y se ha dibujado en la Fig. 2.8. La función $g(r)$ es muy suave en el material homogéneo, indicando que no existen distancias preferentes entre partículas y aparecen máximos y mínimos más marcados conforme aumenta el grado de inhomogeneidad. En particular, la función $g(r)$ presenta dos valles cuya magnitud aumenta con ξ_{cl} . El primer máximo y el subsiguiente valle (cercano a $r = d$) representan la compacidad de las esferas dentro del *cluster*. El número de centros de es-

feras a una distancia $r \approx d$ es muy alto si la compacidad es máxima y $g(r)$ presenta un máximo. Sin embargo, esta compacidad impide acomodar más esferas en las cercanías y aparece un mínimo en la función inmediatamente después que llega a ser 0 para $\xi_{cl} = 0.4$ y que indica la presencia de un anillo libre de partículas alrededor del centro del *cluster*. El segundo valle en la función aparece alrededor de $r = 2R_{cl} - 2d$ y está relacionado con las distancias entre las esferas pertenecientes a diferentes *clusters*. Ese mínimo es muy cercano a cero para $\xi_{cl} = 0.4$, ya que los *clusters* se encuentran prácticamente aislados dentro de la microestructura, mientras que es más suave en los materiales con $\xi_{cl}=0.2$ y 0.3 porque las esferas pertenecientes a diferentes *clusters* están mezcladas. Finalmente, es interesante señalar que $g(r) \rightarrow 1$ para $r > 4d$ con independencia del grado de inhomogeneidad. Esta longitud puede servir de guía a la hora de seleccionar el tamaño de un volumen representativo para estudiar el comportamiento efectivo de un material.

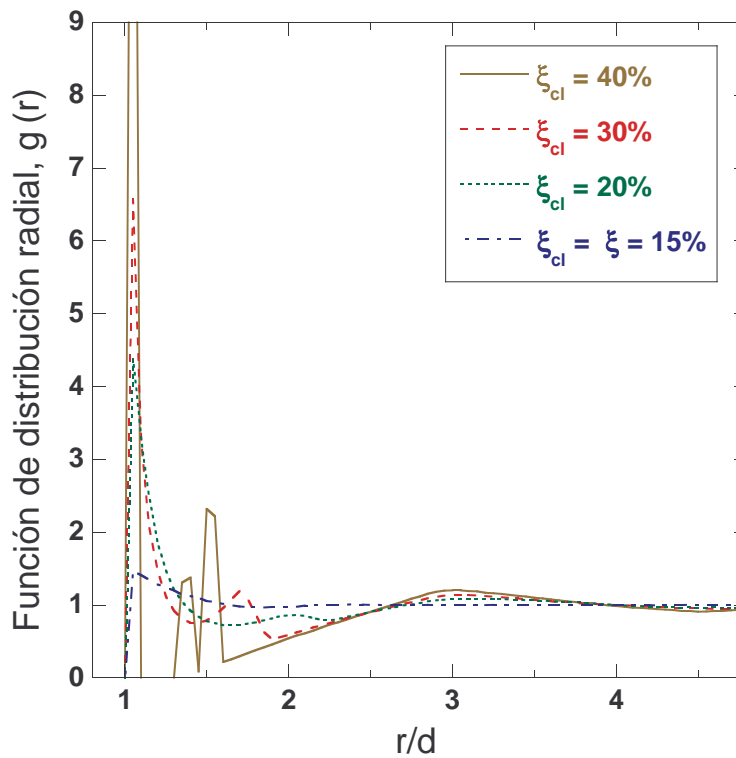


Figura 2.8: Función de distribución radial para materiales con distintos grados de inhomogeneidad. Los valores representados son el promedio de los resultados obtenidos sobre 100 celdas de 1400 esferas para cada material.

CAPÍTULO 3

Técnicas de simulación con elementos finitos

La simulación mediante el método de elementos finitos (MEF) de las celdas unitarias ha motivado el desarrollo de una serie de técnicas para la discretización y cálculo de las microestructuras generadas, que se exponen a continuación

3.1. Discretización

Los algoritmos descritos en el capítulo anterior generan una lista de centros de partículas cuyas coordenadas se encuentran dentro de un cubo de arista L , según la configuración representada en la Fig. 3.1(a). Las partículas que cortaban alguna de las caras del cubo se copiaron a sus posiciones periódicas enfrente de las caras opuestas y se eliminaron las partes de las esferas que quedaban fuera de la celda unidad. Así se obtuvo una celda donde las partículas que cortan las caras, aristas o vértices del cubo están divididas en dos, cuatro u ocho partes, respectivamente, de acuerdo con una configuración espacial periódica de las esferas (Fig. 3.1(b)). Por último, la matriz se generó como un cubo de lado L al que se le sustrajeron las regiones ocupadas por las esferas.

La discretización en elementos finitos de estas geometrías se realizó mediante un mallado no estructurado con ayuda del programa Ansys (2001). Se usaron elementos tetraédricos porque los algoritmos de mallado automático en tres dimensiones para geometrías no regulares sólo permiten este tipo de discretización. Se utilizaron los tetraedros cuadráticos

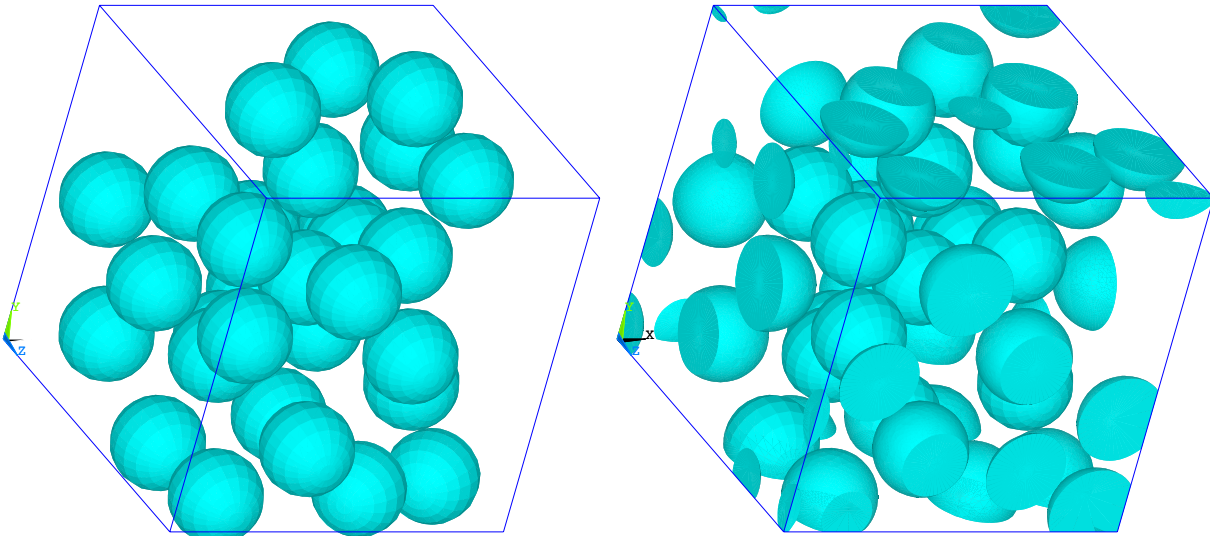


Figura 3.1: Material compuesto con $\xi=0.25$ (a) Distribución de 30 partículas dentro de la celda unitaria. (b) Celda unitaria periódica obtenida a partir de la distribución.

porque los tetraedros lineales dan lugar a un comportamiento demasiado rígido y, además, los tetraedros cuadráticos reproducen muy aproximadamente la forma de las esferas.

Primero se discretizaron tres caras contiguas del cubo con elementos triangulares de seis nodos usando el algoritmo de mallado plano *Riemman space mesher* (Ansys, 2001) y a continuación se copió cada malla en la cara opuesta (Fig. 3.2). Esta operación es necesaria para imponer condiciones de contorno periódicas que necesitan que los nodos situados en caras opuestas tengan las mismas coordenadas.

A continuación se discretizaron los volúmenes de las partículas y de la matriz utilizando como semilla las mallas bidimensionales de las caras (Fig. 3.3) mediante un algoritmo con avance tipo Delaunay. Durante el proceso de discretización de los volúmenes se exigió que hubiera un mínimo de dos elementos entre las superficies de dos partículas para capturar de forma adecuada los gradientes de los campos de tensiones y deformaciones en esas regiones.

Las mallas de elementos finitos contaban con unos 500 elementos por esfera y dieron lugar a un total de 60 000 elementos y 90 000 nodos en los modelos con 30 partículas. Esta discretización fue suficiente para representar de forma precisa la geometría de las esferas (la diferencia entre la fracción volumétrica en el modelo de elementos finitos y el valor real fue inferior al 0.1%). Se evitó la presencia de elementos distorsionados en la discretización que tienden a aparecer para fracciones volumétricas elevadas de esferas y, aunque no se pudieron eliminar completamente, su número nunca superó 5 o 6 en cada modelo. Se

3.1 Discretización

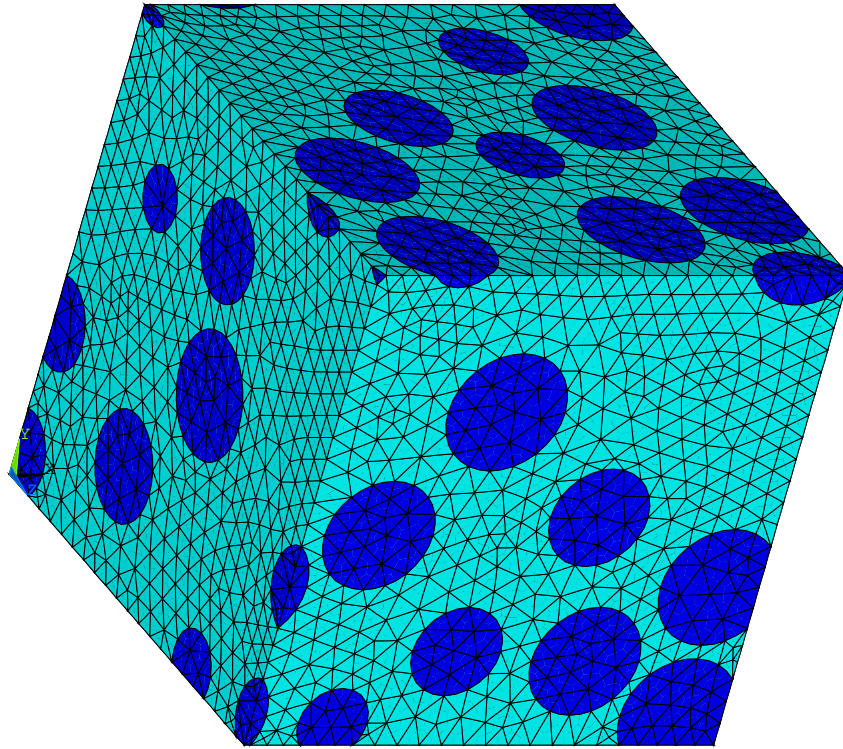


Figura 3.2: Discretización de las caras de una celda unitaria con 30 partículas para un material con $\xi=0.25$

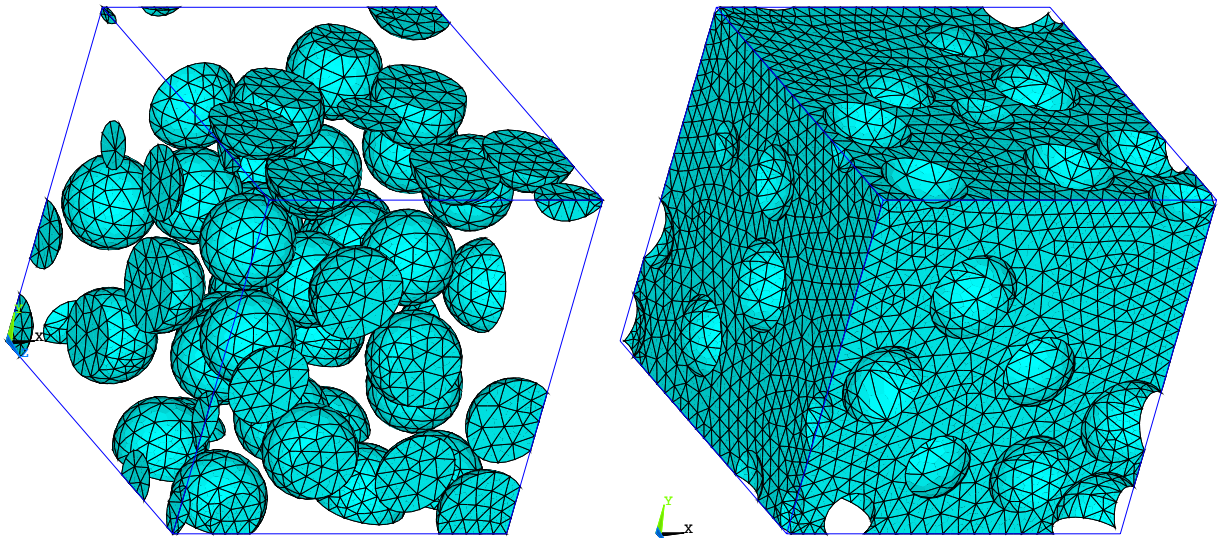


Figura 3.3: Malla tridimensional de la celda unitaria con 30 esferas y $\xi=0.25$. (a) Malla de las esferas de refuerzo. (b) Malla de la matriz.

comprobó que la discretización era suficientemente fina realizando cálculos en régimen elasto-plástico con 100 000 elementos y 150 000 nodos para un modelo con 30 partículas y la máxima fracción volumétrica. Las diferencias encontradas en las propiedades efectivas con las mallas de 90 000 y 150 000 nodos fueron menores al 0.25 % y se optó por usar siempre el modelo más pequeño.

3.2. Condiciones de contorno

El objetivo de los modelos de celda unitaria es la descripción del comportamiento macro y micromecánico de un material compuesto mediante el análisis de un material modelo con microestructura y condiciones de contorno periódicas. Las celdas, junto con las condiciones de contorno aplicadas a ellas, deben rellenar todo el espacio (sin huecos ni superposiciones entre celdas) mediante translaciones en los tres ejes de referencia, tanto en la configuración inicial como durante la deformación. Este propósito puede cumplirse usando tres tipos de condiciones de contorno: imponiendo tracciones homogéneas en las caras, imponiendo desplazamientos homogéneos en las caras o utilizando condiciones de contorno periódicas. El comportamiento efectivo proporcionado por las condiciones de contorno periódicas se encuentra siempre comprendido entre el límite superior que dan las condiciones de contorno en desplazamientos y el límite inferior de las condiciones de contorno en tensiones (Huet, 1990; Hazanov y Huet, 1994), y los tres resultados convergen hacia el comportamiento efectivo real del material cuando el volumen representativo analizado es suficientemente grande (Zohdi, 2002). Por ello, se utilizaron condiciones de contorno periódicas que permiten un resultado más cercano al real para un tamaño dado del volumen representativo aunque computacionalmente son mucho más costosas.

Las condiciones periódicas deben imponer desplazamientos relativos entre caras opuestas que permitan que las celdas vecinas encajen unas con otras durante la deformación (Fig. 3.4). Para ello se relacionaron los desplazamientos en las tres direcciones del espacio de cada par de nodos que ocupan posiciones equivalentes en caras opuestas. Usando la nomenclatura de la figura 3.4, las condiciones de contorno vienen expresadas por

$$\begin{aligned}\mathbf{u}(X_1, X_2, 0) - \mathbf{v}_1 &= \mathbf{u}(X_1, X_2, L) \\ \mathbf{u}(X_1, 0, X_3) - \mathbf{v}_2 &= \mathbf{u}(X_1, L, X_3) \\ \mathbf{u}(0, X_2, X_3) - \mathbf{v}_3 &= \mathbf{u}(L, X_2, X_3)\end{aligned}\tag{3.1}$$

3.3 Tipo de elemento y algoritmo de cálculo

donde \mathbf{u} es el vector de desplazamientos del nodo de coordenadas X_1, X_2, X_3 , 1, 2 y 3 son los nodos maestros de las caras $X_1 = L$, $X_2 = L$ y $X_3 = L$, respectivamente, y $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ y \mathbf{v}_3 son los vectores que indican los desplazamiento relativos entre caras opuestas del cubo. Los

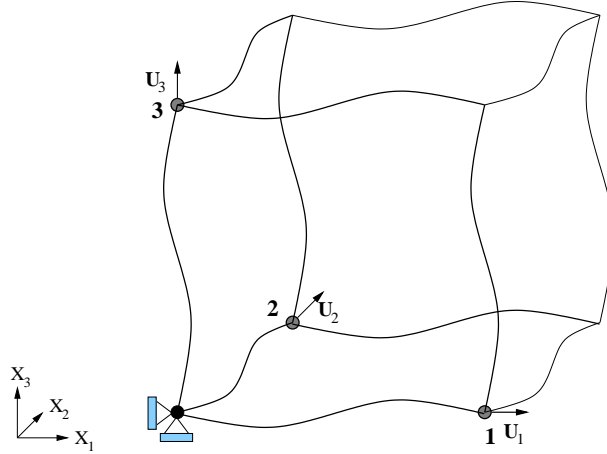


Figura 3.4: Condiciones de contorno periódicas en celdas unitarias tridimensionales

diferentes estados de deformación homogénea se pueden simular con los vectores \mathbf{v}_i . Por ejemplo, un estado de tracción uniaxial ϵ a lo largo del eje X_3 se obtiene con $\mathbf{v}_3 = (0, 0, \epsilon L)$, $\mathbf{v}_1 = (v_1, 0, 0)$, $\mathbf{v}_2 = (0, v_2, 0)$, donde v_1 y v_2 vienen dados a partir de las condiciones,

$$\int_{\Omega} t_1 d\Omega = 0 \quad \text{en } X_1 = L \quad \text{y} \quad \int_{\Omega} t_2 d\Omega = 0 \quad \text{en } X_2 = L, \quad (3.2)$$

y t_1 y t_2 representan las tracciones normales aplicadas sobre las caras de la celda contenidas respectivamente en los planos $X_1 = L$ y $X_2 = L$. De modo similar, la cortadura simple en el plano 1-3, γ_{13} , se obtiene con $\mathbf{v}_3 = (\gamma_{13}L, 0, 0)$, $\mathbf{v}_1 = (0, 0, 0)$, $\mathbf{v}_2 = (0, 0, 0)$. Es necesario señalar que las condiciones de contorno periódicas tienen un alto coste computacional porque la ligadura de muchos grados de libertad en caras opuestas degrada la estructura de banda de la matriz de rigidez, especialmente en problemas tridimensionales.

3.3. Tipo de elemento y algoritmo de cálculo

La discretización de las geometrías representadas debe realizarse con elementos tetraédricos por su extrema complejidad. Los elementos de interpolación lineal se descartaron desde el principio porque es de sobra conocida su excesiva rigidez y se optó por utilizar elementos cuadráticos. Abaqus (2001) proporciona dos tipos de elementos tetraédricos

cuadráticos: el C3D10 y el C3D10M y sus correspondientes versiones híbridas para eliminar el bloqueo volumétrico. El primero es un elemento cuadrático estándar, cuyas funciones de forma pueden encontrarse en Zinkiewicz y Taylor (1989). El segundo es un elemento modificado que cuenta con tres grados de libertad internos más y que se diseñó para mejorar la respuesta en la simulación de problemas de contacto y aliviar ligeramente los problemas de bloqueo volumétrico en plasticidad. La formulación de este elemento es propiedad de Abaqus y ni los manuales ni la compañía proporcionaron ninguna información al respecto.

La elección del elemento se decidió mediante pruebas con un mismo modelo (una partícula embebida en una matriz elasto-plástica con condiciones de contorno simétricas) usando ambos tipos de elementos. Los resultados diferían tanto en la magnitud de las tensiones locales como en el comportamiento global y la diferencia en tensiones alcanzaba un 10 % en la zona plástica de la curva global tensión-deformación del modelo. El elemento C3D10 proporcionaba el comportamiento más rígido y comparando los resultados con los obtenidos sobre una celda axilsimétrica equivalente, se concluyó que el elemento C3D10M proporcionaba una respuesta mucho más exacta para un mismo tamaño de malla. El comportamiento superior del elemento C3D10M no tiene que ver con el bloqueo volumétrico (los resultados con las versiones híbridas de cada elemento no presentaron ninguna diferencia) sino que se debía a la mejor representación de los fuertes gradientes de tensión en las zonas cercanas a las partículas. El elemento modificado tiene 3 grados de libertad más que corresponden al desplazamiento de un nodo auxiliar interno que mejora sensiblemente la interpolación de desplazamientos en las zonas de matriz situadas entre dos partículas donde los gradientes de tensiones y deformaciones son muy acentuados. En consecuencia la discretización de los modelos se realizó con elementos tetraédricos cuadráticos modificados del tipo C3D10M.

La selección del algoritmo para invertir la matriz de rigidez es crítica para la velocidad del cálculo debido al gran tamaño de los modelos utilizados. Este problema es más acuciante en las simulaciones no lineales que utilizan el método de Newton-Rapson para obtener la solución de forma incremental, y el número de veces que se invierte la matriz de rigidez tangente crece rápidamente. La solución más efectiva (entre las disponibles en Abaqus) fue un *solver* directo (no iterativo) con paralelización en varios procesadores. La descripción del algoritmo usado se puede encontrar en Abaqus (2001).

Las condiciones de contorno periódicas ralentizan enormemente la inversión de la matriz de rigidez cuando se utiliza un algoritmo de inversión directo al degenerar la estructura de

3.4 Elemento finito de intercara

banda de ésta. Una estrategia para reducir el tiempo de cálculo con este tipo de condiciones de contorno se apoya en el uso de algoritmos de cálculo iterativos de gradiente conjugado (Gusev, 1997) pero no se encuentran implementados en Abaqus. Zohdi y Wriggers (1999) propusieron otro método basado en la descomposición en dominios, que es muy adecuado para problemas extremadamente grandes. En este método se resuelve independientemente (en varios procesadores para mayor eficacia) el problema mecánico para diferentes subregiones. Tras el primer paso, los desplazamientos en las fronteras de las subregiones no serán compatibles y se vuelven a repetir los cálculos imponiendo a los dominios las condiciones de contorno obtenidas de la diferencia de las soluciones en las fronteras comunes de dominios adyacentes. El proceso iterativo termina cuando la diferencia de desplazamientos en las fronteras es menor a una tolerancia dada. La eficacia del método es muy alta y resulta un método prometedor, pero hasta ahora solo ha sido implementado con éxito en el campo elástico.

3.4. Elemento finito de intercara

Se ha programado un nuevo elemento finito para la simulación del daño en forma de fractura de partículas o decohesión en la intercara matriz-partícula mediante el modelo de fisura cohesiva. El elemento de intercara es tridimensional, cuadrático, está formulado en grandes desplazamientos y puede utilizar cualquier ley tracción-separación en la intercara. El elemento se ha implementado para el código de elementos finitos Abaqus mediante la subrutina de usuario UEL programada en fortran.

3.4.1. Definición del problema global

El problema considerado es un cuerpo deformable de volumen V y de superficie externa S_{ext} . El volumen contiene varias superficies cohesivas S_{coh} que podrán abrirse conforme el cuerpo se deforme. En grandes desplazamientos y sin considerar los términos de inercia y las fuerzas de volumen, el principio de los trabajos virtuales para dicho cuerpo puede escribirse

$$\int_V \boldsymbol{\sigma} \nabla^s \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{S_{\text{coh}}} \delta \Delta \mathbf{u}^T \mathbf{t}_{\text{coh}} \, dS_{\text{coh}} = \int_{S_{\text{ext}}} \delta \mathbf{u}^T \mathbf{t}_{\text{ext}} \, dS_{\text{ext}} \quad (3.3)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el tensor de tensiones de Cauchy, \mathbf{u} el campo de desplazamientos y $\Delta \mathbf{u}$ el desplazamiento relativo entre pares de puntos equivalentes en caras opuestas de las superficies

cohesivas (es decir, puntos con las mismas coordenadas en la configuración inicial), y \mathbf{t}_{coh} y \mathbf{t}_{ext} son los vectores de tensión actuando en las superficies cohesivas y en las superficies externas, respectivamente, en la configuración deformada.

El método de elementos finitos proporciona una solución aproximada del campo de desplazamientos en el cuerpo. Esta solución está basada en la discretización del problema en elementos finitos: el volumen V en elementos continuos de volumen y las superficies cohesivas mediante los elementos finitos de intercara. El valor del desplazamiento en cada elemento está interpolado a partir de la solución en los nodos de dicho elemento

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}\mathbf{d}_N; \quad \nabla^s \mathbf{u} = \nabla^s \mathbf{N}\mathbf{d}_N = \mathbf{B}\mathbf{d}_N; \quad \Delta \mathbf{u} = \mathbf{\Phi}\mathbf{d}_N \quad (3.4)$$

donde \mathbf{N} y \mathbf{B} son la matriz de funciones de forma y su derivada, respectivamente, en la configuración deformada de un elemento sólido, \mathbf{d}_N es el vector de desplazamientos nodales en un elemento, y $\mathbf{\Phi}$ es la matriz de interpolación de aperturas en un elemento finito de intercara. Combinando las ecuaciones 3.3 y 3.4 y ensamblando para todos los elementos del modelo se llega a la siguiente expresión

$$\mathbf{A} \int_V \mathbf{B}^T : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\epsilon}) dV + \mathbf{A} \int_{S_{\text{int}}} \mathbf{\Phi}^T \mathbf{t}(\Delta \mathbf{u}) dS_{\text{int}} = \mathbf{A} \int_{S_t} \mathbf{N}^T \mathbf{t}_{\text{ext}} dS_t \quad (3.5)$$

donde \mathbf{A} es el operador de ensamblaje de todos los elementos del modelo, la parte izquierda de la ecuación corresponde a las fuerzas internas (el primer sumando es la contribución de los elementos de volumen y el segundo de las tensiones en las fisuras cohesivas) y la derecha a las externas.

La ecuación de equilibrio 3.5 es una ecuación no lineal e implícita en el vector de desplazamientos nodales global \mathbf{d} que se resuelve mediante un esquema iterativo de Newton-Rapson. El vector de fuerzas nodales internas \mathbf{f}_{int} se desarrolla en serie como función del desplazamiento \mathbf{d} , y su valor para un desplazamiento $\mathbf{d} + \Delta \mathbf{d}$ se expresa como

$$\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{d} + \Delta \mathbf{d}) = \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{d}) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}}{\partial \mathbf{d}} \right| \Delta \mathbf{d} = \mathbf{f}_{\text{int}} + \mathbf{K} \Delta \mathbf{d} \quad (3.6)$$

donde \mathbf{K} es la matriz de rigidez tangente global para un desplazamiento \mathbf{d} .

El esquema de resolución no lineal empleando el esquema de Newton-Rapson debe calcular en cada iteración la contribución de cada elemento al vector de fuerzas internas y su matriz de rigidez tangente. En el caso de un elemento de intercara, el vector de fuerzas

3.4 Elemento finito de intercara

nodales internas \mathbf{f}_N^{el} se obtiene directamente de la ecuación 3.5 y se calcula mediante

$$\mathbf{f}_N^{el} = \int_{el} \mathbf{\Phi}^T \mathbf{t}(\Delta \mathbf{u}) \, dS_{el} \quad (3.7)$$

y la matriz de rigidez tangente para ese elemento viene dada por la derivada de las fuerzas internas respecto de los desplazamientos nodales según

$$\mathbf{K}^{el} = \frac{\partial \mathbf{f}_N^{el}}{\partial \mathbf{d}_N} = \int_{el} \mathbf{\Phi}^T \frac{\partial \mathbf{t}(\Delta \mathbf{u})}{\partial \Delta \mathbf{u}} \mathbf{\Phi} \, dS_{el} \quad (3.8)$$

El elemento de intercara se implementó como una subrutina de usuario dentro del programa Abaqus que proporciona al programa principal el vector de fuerzas internas y la matriz de rigidez tangente para cada elemento de intercara en cada iteración. Su formulación se expone a continuación

3.4.2. Formulación del elemento

El elemento de intercara consiste en dos superficies triangulares cuadráticas (con seis nodos cada una) que conectan las caras de dos tetraedros cuadráticos adyacentes. Se han programado dos versiones del elemento; la primera, denominada *estándar*, es compatible con los elementos isoparamétricos estándar de 10 nodos (C3D10 en Abaqus). La segunda versión del elemento finito, llamada *modificada*, es compatible con los tetraedros compuestos (Thoutireddy et al., 2002) y con los tetraedros modificados de 10 nodos de Abaqus (C3D10M).

Las dos caras triangulares del elemento están superpuestas en la configuración inicial (el espesor es nulo) y se abren con la deformación de los elementos sólidos adyacentes (Fig. 3.5). El desplazamiento relativo entre las caras del elemento genera tensiones normales y tangenciales de acuerdo con la ecuación constitutiva de la fisura cohesiva utilizada. El elemento de intercara tiene 36 grados de libertad. Los desplazamientos nodales en el sistema de coordenadas global vienen dados por el vector columna \mathbf{d}_N , 36×1 , definido como

$$\mathbf{d}_N = \left(d_x^1 \ d_y^1 \ d_z^1 \ d_x^2 \ d_y^2 \ d_z^2 \ \dots \ d_x^{12} \ d_y^{12} \ d_z^{12} \right)^T \quad (3.9)$$

El desplazamiento relativo entre nodos emparejados de las dos superficies del elemento en coordenadas globales viene dado por el vector columna $\Delta \mathbf{u}_N$, 18×1 ,

$$\Delta \mathbf{u}_N = \mathbf{\Phi}_{18 \times 36}^* \mathbf{d}_N = \left(\mathbf{I}_{18 \times 18} \mid -\mathbf{I}_{18 \times 18} \right)_{18 \times 36} \mathbf{d}_N \quad (3.10)$$

donde $\mathbf{I}_{n \times n}$ es la matriz identidad de dimensión $n \times n$.

Sea $\phi_i(\xi, \eta)$ la función de forma del par de nodos i ($i=1,6$), donde ξ y η representan las coordenadas naturales de un punto en el elemento $0 \leq \xi \leq 1$, $0 \leq \eta \leq 1$. El desplazamiento relativo de las caras del elemento en el punto (ξ, η) puede interpolarse en función del desplazamiento relativo entre pares de nodos de acuerdo con

$$\Delta \mathbf{u}(\xi, \eta) = \begin{pmatrix} \Delta u_x(\xi, \eta) \\ \Delta u_y(\xi, \eta) \\ \Delta u_z(\xi, \eta) \end{pmatrix} = \mathbf{\Phi}^{**}(\xi, \eta) \Delta \mathbf{u}_N \quad (3.11)$$

donde $\mathbf{\Phi}^{**}$ es una matriz de dimensiones 3×18 dada por

$$\mathbf{\Phi}^{**}(\xi, \eta) = \left(\phi_1 \mathbf{I}_{3 \times 3} \mid \phi_2 \mathbf{I}_{3 \times 3} \mid \phi_3 \mathbf{I}_{3 \times 3} \mid \phi_4 \mathbf{I}_{3 \times 3} \mid \phi_5 \mathbf{I}_{3 \times 3} \mid \phi_6 \mathbf{I}_{3 \times 3} \right) \quad (3.12)$$

Las funciones de forma $\phi_i(\xi, \eta)$ ($i=1,6$) para el elemento *estándar* y el elemento *modificado* pueden encontrarse en el apéndice A. Las combinación de las ecuaciones 3.10 y 3.11 conduce a

$$\Delta \mathbf{u}(\xi, \eta) = \mathbf{\Phi}^{**} \mathbf{\Phi}^* \mathbf{d}_N = \mathbf{\Phi} \mathbf{d}_N \quad (3.13)$$

donde $\mathbf{\Phi}$ es una matriz de dimensiones 3×36 que permite calcular la apertura relativa de grieta en cualquier punto del elemento de intercara a partir de los desplazamientos nodales.

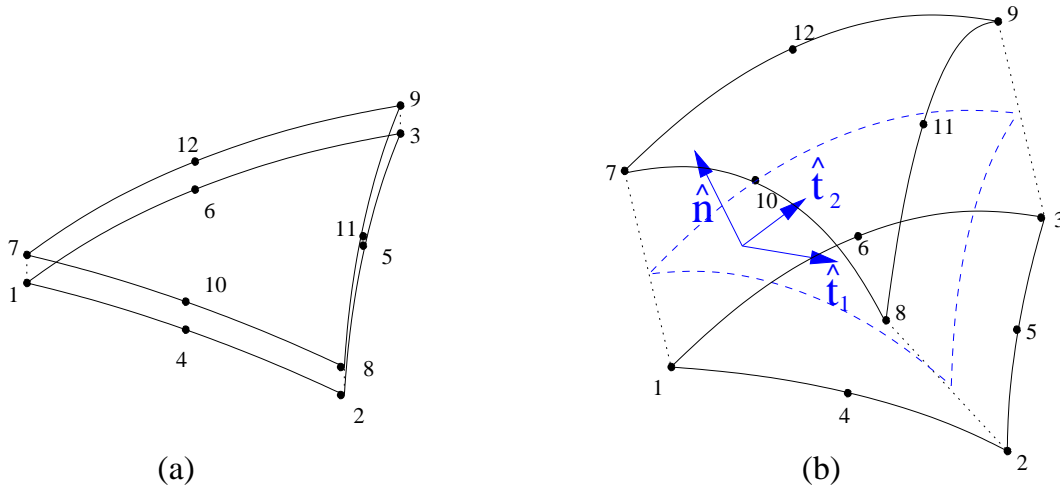


Figura 3.5: Elemento finito de intercara. (a) Configuración inicial con espesor cero. (b) Configuración deformada mostrando la superficie de referencia intermedia.

3.4 Elemento finito de intercara

El sistema de coordenadas local en la configuración deformada se debe definir para calcular las direcciones normales y tangenciales a la grieta en cada instante de la deformación cuando el elemento se formula en grandes desplazamientos. Ortiz y Pandolfi (1999) usaron como superficie de referencia el lugar geométrico definido por los puntos medios de los dos triángulos deformados (Fig. 3.5). Si las coordenadas de los nodos del elemento en la configuración inicial vienen dadas por el vector \mathbf{x}_N 36×1 , la superficie de referencia estará definida por las coordenadas de 6 puntos incluidas en el vector 18×1 \mathbf{x}_N^R que se obtiene por interpolación lineal de las coordenadas de cada par de nodos en la configuración deformada según

$$\mathbf{x}_N^R = \frac{1}{2} \left(\mathbf{I}_{18 \times 18} \mid \mathbf{I}_{18 \times 18} \right) (\mathbf{x}_N + \mathbf{d}_N) \quad (3.14)$$

y las coordenadas de un punto cualquiera de la superficie de referencia, $\mathbf{x}^R(\xi, \eta)$, se calculan a partir de \mathbf{x}_N^R usando las funciones de forma del elemento de la ecuación 3.12, de acuerdo con

$$\mathbf{x}^R(\xi, \eta) = \Phi^{**}(\xi, \eta) \mathbf{x}_N^R \quad (3.15)$$

El sistema de coordenadas local en la configuración deformada (Fig. 3.5) viene dado para cada punto por tres vectores perpendiculares de módulo unitario que se calculan como

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \mathbf{x}^R}{\partial \xi} \times \frac{\partial \mathbf{x}^R}{\partial \eta} \right\|} \left(\frac{\partial \mathbf{x}^R}{\partial \xi} \times \frac{\partial \mathbf{x}^R}{\partial \eta} \right) \quad \hat{\mathbf{t}}_1 = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \mathbf{x}^R}{\partial \xi} \right\|} \frac{\partial \mathbf{x}^R}{\partial \xi} \quad \hat{\mathbf{t}}_2 = \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{t}}_1 \quad (3.16)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector unitario normal a la superficie de referencia y $\hat{\mathbf{t}}_1$ y $\hat{\mathbf{t}}_2$ son dos vectores unitarios perpendiculares entre sí y tangentes a la superficie en dicho punto. La correspondiente matriz de rotación que permite transformar las coordenadas globales en locales y viceversa, $\mathbf{R}_{3 \times 3}$, viene dada por

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{n}}^T \\ \hat{\mathbf{t}}_1^T \\ \hat{\mathbf{t}}_2^T \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Una vez definido el sistema de coordenadas local en función del global se puede calcular el vector de fuerzas nodales y la matriz de rigidez tangente del elemento de intercara en coordenadas globales. Las fuerzas nodales del elemento de intercara, definidas por la ecuación 3.7, vienen dadas por el vector 36×1 , \mathbf{f}_N^{el} , que se obtiene de acuerdo con la siguiente expresión

$$\mathbf{f}_N^{el} = \int_0^1 \int_0^1 \Phi^T \mathbf{R}^T \mathbf{t}_{loc} J d\xi d\eta = \sum_j \omega_j \Phi^T \mathbf{R}^T \mathbf{t}_{loc} J \quad (3.18)$$

donde \mathbf{t}_{loc} es el vector 3×1 que contiene las tres componentes (una normal y dos tangenciales) de la tensión que se genera en la superficie cohesiva en función de los desplazamientos relativos entre las caras del elemento. J es el jacobiano de la transformación entre las coordenadas naturales (ξ, η) y las coordenadas cartesianas de la superficie de referencia del elemento en la configuración deformada

$$J = \sqrt{\left(\frac{D(x, y)}{D(\xi, \eta)}\right)^2 + \left(\frac{D(x, z)}{D(\xi, \eta)}\right)^2 + \left(\frac{D(y, z)}{D(\xi, \eta)}\right)^2} \quad (3.19)$$

y ω_j es el peso del punto de Gauss j al calcular las integrales mediante el método de integración de Gauss. Se implementaron reglas de integración de 3, 7 y 10 puntos en el elemento estándar y se encontró que la regla de tres puntos daba una aproximación suficientemente precisa. En el elemento modificado se usó una regla de integración cuatro puntos, uno por triángulo lineal.

La matriz de rigidez tangente 36×36 para un elemento, \mathbf{K}_{el} , se define como la derivada del vector de fuerzas interno respecto de los desplazamientos nodales (ecuación 3.8) y su expresión es

$$\mathbf{K}^{el} = \int_0^1 \int_0^1 \Phi^T \mathbf{R}^T \mathbf{C}_{\text{loc}} \mathbf{R} \Phi J \, d\xi \, d\eta = \sum_j \omega_j \Phi^T \mathbf{R}^T \mathbf{C}_{\text{loc}} \mathbf{R} \Phi J \quad (3.20)$$

donde \mathbf{C}_{loc} es una matriz 3×3 definida como

$$\mathbf{C}_{\text{loc}} = \frac{\partial \mathbf{t}_{\text{loc}}}{\partial \Delta \mathbf{u}_{\text{loc}}} \quad (3.21)$$

y $\Delta \mathbf{u}_{\text{loc}} = \mathbf{R} \Delta \mathbf{u}$ es el desplazamiento relativo entre las caras del elemento de intercara en coordenadas locales. La formulación del elemento que se ha expuesto está abierta a cualquier forma de ley cohesiva, sin más que definir $\mathbf{t}_{\text{loc}} = \mathbf{t}_{\text{loc}}(\Delta u_n, \Delta u_{t1}, \Delta u_{t2})$.

3.4.3. Validación del elemento

El elemento de intercara se validó comparando con los resultados numéricos de Needleman (1987), que analizó la decohesión en la intercara de una esfera rígida embebida en una matriz elasto-plástica. La simulación original se realizó mediante el análisis de una celda unitaria axilsimétrica con condiciones de contorno simétricas representadas en la Fig. 3.6(a). El radio de la esfera, r_0 , era igual a $0.25R$, y la correspondiente fracción volumétrica de refuerzo en el cilindro era 1.04%. El modelo tridimensional equivalente generado para

3.4 Elemento finito de intercara

validar el elemento de intercara estaba formado por una sección de 30° de la mitad superior del cilindro considerado, Fig. 3.6(b). Se impusieron condiciones de contorno simétricas a las superficies laterales y externa y el volumen se discretizó con tetraedros modificados de 10-nodos (C3D10M).

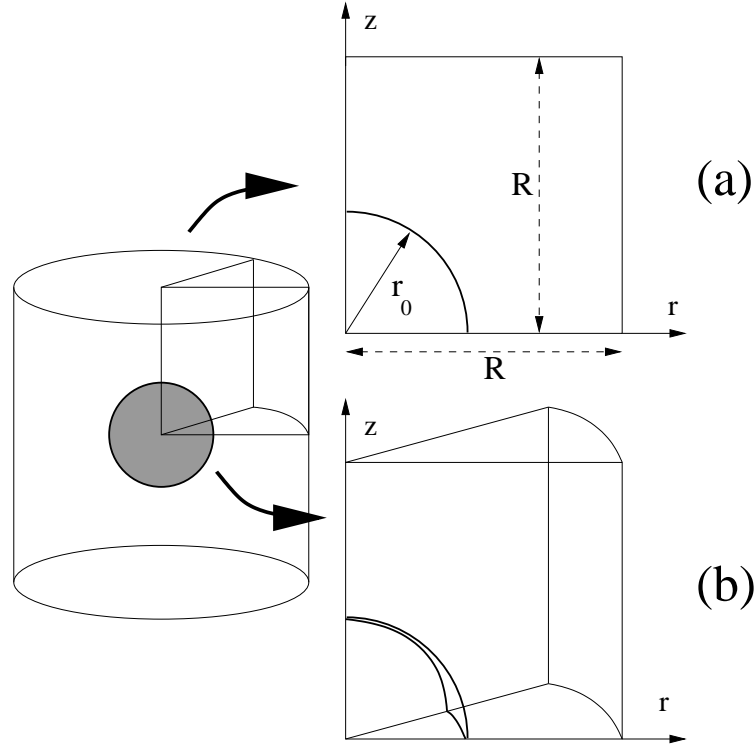


Figura 3.6: Partícula esférica embebida en una celda cilíndrica. (a) Modelo axilsimétrico (Needleman, 1987) (b) Modelo tridimensional equivalente

Las celdas cilíndricas se deformaron aplicando un desplazamiento uniforme a la superficie superior del cilindro en la dirección z ($u_z = v$ en $z = R$) y en la superficie externa en la dirección radial r ($u_r = u$ en $r = R$). Los dos desplazamientos u y v estaban vinculados durante el proceso de carga de acuerdo con

$$\frac{F_r (1 + u/R)}{2F_z (1 + v/R)} = \frac{\sigma_r}{\sigma_z} = \frac{1}{2} \quad (3.22)$$

donde F_r y F_z representaban las fuerzas totales aplicadas, respectivamente, sobre las superficies externa y lateral, y σ_r y σ_z son las correspondientes componentes de la tensión de Cauchy actuando en esas superficies. De este modo, la relación entre las tensiones radiales y longitudinales se mantuvo constante durante todo el proceso de deformación. El cálculo

original se realizó en grandes desplazamientos por lo que el área de las superficies del cilindro varió durante la deformación y la relación entre los desplazamientos aplicados u y v de la ecuación 3.22 se actualizó en cada iteración. Estas condiciones de contorno no lineales se introdujeron en Abaqus mediante una subrutina de usuario MPC programada en fortran que permitió calcular de forma implícita el desplazamiento u en cada iteración en función de las reacciones en las superficies y del valor impuesto al desplazamiento v dentro de un esquema de Newton-Rapson.

La matriz se consideró como un sólido elasto-plástico con endurecimiento isótropo de acuerdo con la teoría incremental de la plasticidad y el criterio de plastificación de Von Mises. Las constantes elásticas de la matriz fueron $E = 200$ GPa y $\nu = 0.30$ y la tensión de plastificación $\bar{\sigma}$ vino expresada en función de la deformación plástica equivalente acumulada $\bar{\epsilon}$ según

$$\bar{\sigma} = \sigma_0 \left(1 + \frac{E}{\sigma_0} \bar{\epsilon} \right)^{0.1} \quad (3.23)$$

donde $\sigma_0 = 400$ MPa. La intercara esfera/matriz se modelizó con los elementos de intercara modificados descritos anteriormente. La relación entre las tensiones (normales y tangenciales) y las aperturas (normales y tangenciales) entre las superficies de la intercara siguió el modelo de Needleman descrito en la sección 1.3.2 con $t_c = 3\sigma_0$, $\gamma = 10$ y $\Delta u_c = 0.01r_0$.

La evolución de la tensión equivalente del material, $\sigma_{eq} = |\sigma_z - \sigma_r|$ en función de la deformación logarítmica en dirección z , $\epsilon_z = \ln(1 + v/R)$ se ha representado en la Fig. 3.7 para el modelo axilsimétrico original y para el modelo tridimensional con los nuevos elementos de intercara. Como puede apreciarse, la solución del modelo tridimensional está prácticamente superpuesta a la calculada con el modelo axilsimétrico.

3.5. Técnica alternativa de control

La nucleación y el crecimiento del daño por la fractura progresiva de los elementos de intercara lleva con frecuencia a la aparición de fenómenos de *snap-back* en la curva fuerza-desplazamiento, caracterizados por una reducción simultanea de la fuerza y del desplazamiento en el punto de aplicación de carga. El cálculo de la curva carga-desplazamiento mediante el esquema clásico de Newton-Rapson no es posible en esta situación cuando se controla en carga o en desplazamiento. Este problema se suele subsanar empleando otro tipo de algoritmos de control más sofisticados como el método de Riks modificado (Crisfield,

3.5 Técnica alternativa de control

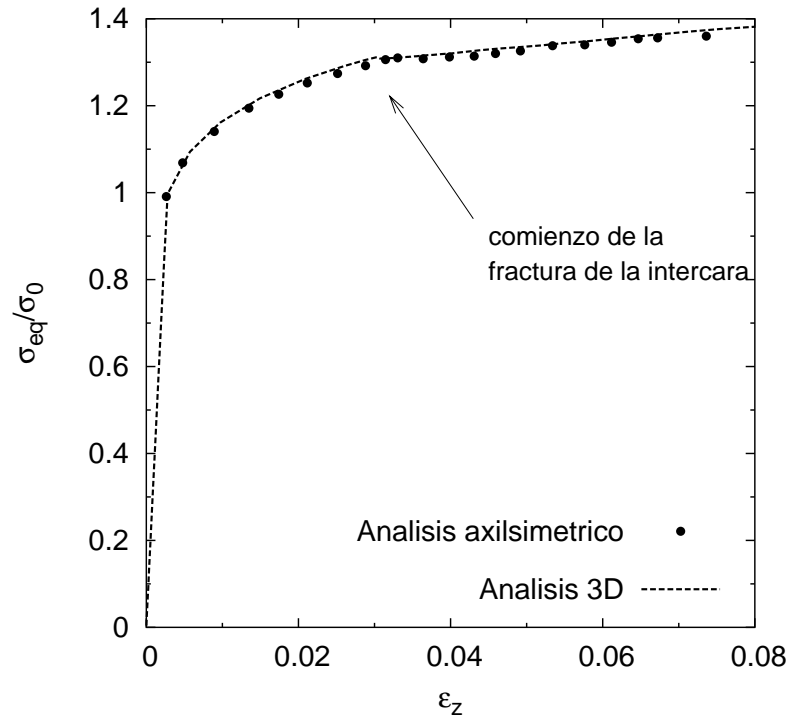


Figura 3.7: Evolución de la tensión equivalente σ_{eq} en función de la deformación aplicada para el problema de la Fig. 3.6. La curva representa los resultados obtenidos mientras que los puntos son los resultados del con el modelo bidimensional axisimétrico (Needleman, 1987).

1986), basado en el control de la longitud de arco e implementado en Abaqus. Sin embargo, este método no siempre converge a la solución correcta particularmente si la curvatura de la curva carga-desplazamiento es muy acusada, como ocurre cuando se genera daño en el material compuesto por la rotura brusca de una o varias partículas de refuerzo.

Otra estrategia de control se apoya en descubrir una variable que crezca de forma monótona durante toda la historia de deformación. La apertura de una grieta sería una buena candidata si solo hubiera una grieta en todo el modelo, pero la generación de múltiples grietas en diferentes zonas del modelo puede ocasionar el cierre de una grieta en algún momento del proceso de deformación por la redistribución de tensiones asociada al daño. Sin embargo, la suma de todas las aperturas relativas de los elementos de intercara respecto a la dirección principal de carga siempre crece durante el proceso de deformación y puede usarse como variable de control del problema.

Sean N_1 y N_2 dos nodos equivalentes y situados en caras opuestas del elemento de

intercara. Si la carga global se aplica en dirección del eje x , el desplazamiento relativo del par de nodos en esa dirección se puede relacionar de forma lineal directa con la carga aplicada en un nodo auxiliar N_c según la ecuación $P_x^{N_c} = d_x^{N_1} - d_x^{N_2}$ mediante un elemento auxiliar que relaciona los desplazamientos de los nodos N_1 , N_2 y N_c y cuya matriz de rigidez viene dada por

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x^{N_1} \\ d_x^{N_2} \\ d_x^{N_c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_x^{N_1} \\ P_x^{N_2} \\ P_x^{N_c} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

De forma similar, si N_L es el nodo en el que se aplica la carga, $P_x(N_L)$ se hace igual al desplazamiento en la dirección x del nodo auxiliar $d_x^{N_c}$ y esta condición se introduce en el modelo por medio de otro elemento auxiliar con la siguiente matriz de rigidez

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_x^{N_L} \\ d_x^{N_c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_x^{N_L} \\ P_x^{N_c} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

El elemento con la matriz de rigidez dada por la ecuación 3.24 se define para cada par de nodos pertenecientes a algún elemento de intercara y las matrices de rigidez correspondientes, junto con la matriz de rigidez de la ecuación 3.25, se ensamblan con el resto de las matrices de rigidez de los elementos del modelo. El análisis se controla aplicando una *fuerza* al nodo N_c cuyo valor es igual a la suma de todas las aperturas relativas de los pares de nodos pertenecientes a elementos de intercara en la dirección x . El desplazamiento resultante para el nodo N_c en esa dirección es precisamente la carga externa que se ha de aplicar al nodo N_L para obtener el equilibrio.

Esta técnica de control permite capturar toda la curva carga desplazamiento de los modelos de celda unitaria multipartícula incluso cuando se produce un *snap-back* muy marcado debido a la fractura repentina de las esferas frágiles dentro de la celda. El inconveniente de esta técnica radica en que rompe la simetría de la matriz de rigidez global, e incrementa de manera importante el tiempo de cálculo al tener que recurrir a algoritmos de cálculo menos eficaces que los desarrollados para matrices simétricas.

CAPÍTULO 4

Simulación del comportamiento elasto-plástico

4.1. Determinación de las constantes elásticas

El objetivo de esta sección es obtener una solución exacta (o muy próxima a ella) de un problema clásico en la mecánica de sólidos: las constantes elásticas de un material compuesto ideal formado por una distribución aleatoria, homogénea e isotrópica de esferas elásticas e isotrópicas dispersas en una matriz elástica e isotrópica. Aparte de la importancia intrínseca de este problema, su solución exacta tiene implicaciones para resolver otros problemas en campos afines como la conducción del calor y la electricidad o la difusión de la humedad (Segurado y LLorca, 2002b). Además, un valor *exacto* de las constantes elásticas de este material compuesto ideal permite determinar la precisión y el rango de validez de los numerosos modelos analíticos (modelo de Mori-Tanaka (Mori y Tanaka, 1973), métodos autoconsistentes (Hill, 1965; Beneviste, 1987), aproximaciones de tercer orden de Torquato (1998), etc . . .) que se han desarrollado en las últimas décadas.

Los trabajos de Drugan y Willis (1996) y Drugan (2000) pusieron de manifiesto que es posible abordar numéricamente este problema porque el tamaño del volumen representativo necesario para calcular las propiedades elásticas de este tipo de materiales con un error pequeño desde el punto de vista estadístico era abordable con la capacidad actual de los ordenadores digitales y algunos resultados numéricos aparecidos posteriormente (Gusev, 1997; Michel et al., 1999) avalaron estos resultados. Sin embargo, no existe hasta el mo-

mento una solución numérica *exacta* que cubra todo el intervalo de fracciones volumétricas y que tiene un gran interés particularmente cuando la matriz y el refuerzo presentan un fuerte contraste en propiedades elásticas. Con este fin, se han calculado numéricamente las constantes elásticas de materiales compuestos reforzados con una fracción volumétrica de hasta $\xi = 0.50$ cuando el contraste entre las propiedades elásticas de cada fase era máximo: una matriz reforzada con esferas rígidas y una matriz con una dispersión de huecos esféricos. También se calcularon las constantes elásticas de un material compuesto real formado por esferas de vidrio embebidas en una resina pota. Los valores numéricos de las constantes elásticas permitieron evaluar la precisión de los modelos analíticos más relevantes en función de la fracción volumétrica del refuerzo y de las propiedades elásticas de las fases.

4.1.1. Selección del volumen representativo

La selección del volumen representativo ideal para calcular las constantes elásticas de un material compuesto exige un compromiso entre dos factores: la precisión deseada y el tiempo de cálculo, y ambas aumentan con el número de esferas incluidas en el volumen. Una estimación razonable del tamaño del volumen representativo se puede obtener a partir de los trabajos de Drugan y Willis (1996) y Drugan (2000), que determinaron la relación entre el error estadístico cometido al evaluar el módulo de elasticidad y el tamaño del volumen representativo en un material compuesto formado por una dispersión aleatoria, homogénea e isotrópica de esferas. El error estadístico para un volumen representativo V ($= L^3$) se define como la diferencia entre las propiedades efectivas reales del material y las obtenidas de promediar el comportamiento efectivo de varias microestructuras diferentes pero del mismo tamaño L^3 . Los resultados más desfavorables se obtuvieron siempre para un volumen de esferas cercano a $\xi = 0.25$ cuando el contraste entre el módulo de elasticidad de la matriz y de las esferas era máximo (cavidades o esferas rígidas dispersas en una matriz elástica). Estos autores concluyeron que el volumen representativo debería tener un tamaño igual o superior a 2 veces el diámetro de la esferas para tener un error inferior al 5% en el módulo de elasticidad mientras que bastaba aumentar el tamaño del volumen representativo hasta 4.5 veces el diámetro de las esferas para reducir el error por debajo del 1% (Fig. 4.1) en el caso más crítico de una matriz elástica reforzada con esferas rígidas.

Estos resultados (corroborados posteriormente por las simulaciones numéricas de Gusev (1997) y Michel et al. (1999)) permitieron establecer que bastaba estudiar un volumen

4.1 Determinación de las constantes elásticas

representativo con 30 esferas. Este volumen representativo proporciona un error (siempre desde el punto de vista estadístico) comprendido entre el 1% y el 5% para $0.3 \leq \xi \leq 0.5$ e inferior al 1% para $\xi \leq 0.3$ (Fig. 4.1).

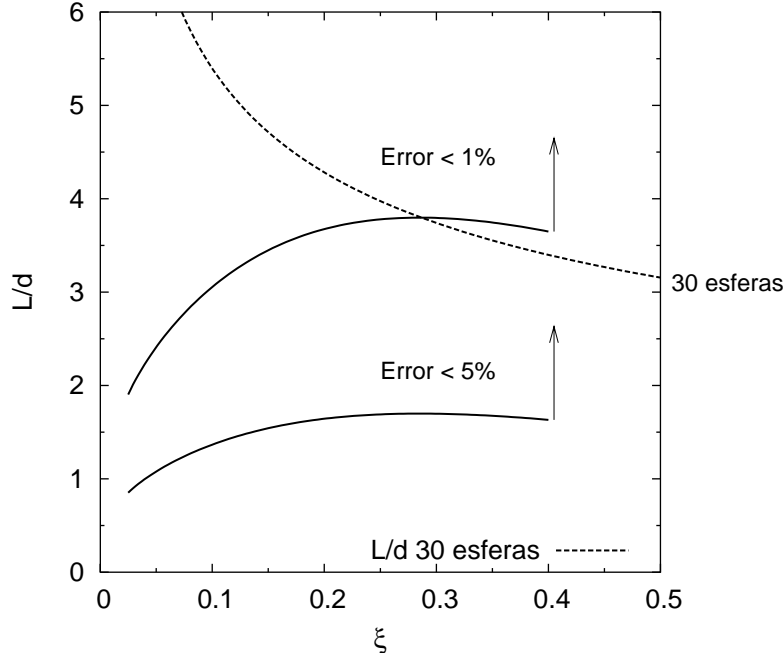


Figura 4.1: Estimaciones del tamaño del volumen representativo mínimo necesario para calcular el módulo elástico de una matriz elástica ($\nu=0.33$) reforzada con esferas rígidas con un error estadístico inferior al 1% y al 5% (Drugan y Willis, 1996; Drugan, 2000). La línea discontinua representa el tamaño del volumen representativo para celdas cúbicas con 30 partículas esféricas. L es el lado de la celda cúbica y d el diámetro de las esferas.

El cálculo de las constantes elásticas para cada material compuesto y fracción volumétrica se obtuvo promediando los resultados obtenidos en 12 simulaciones diferentes tras comprobar que ese número era estadísticamente representativo y que aumentar el número de simulaciones no modificaba sustancialmente los resultados. Estas 12 simulaciones correspondieron a la deformación a lo largo de 3 ejes perpendiculares de 4 celdas unitarias diferentes.

Cada modelo de 30 partículas se discretizó con ≈ 90000 nodos y ≈ 60000 elementos (unos 500 elementos por esfera) tal y como se ha descrito en la sección 3.1. Los cálculos se realizaron en un ordenador Alpha XP1000 con 1 Gb de RAM y la solución llevo aproximadamente una hora para cada caso de carga. Se emplearon elementos tetraédri-

cos cuadráticos del tipo C3D10M (Abaqus, 2001) y los cálculos se realizaron en pequeñas deformaciones.

4.1.2. Resultados y discusión

Para obtener las constantes elásticas de cada material compuesto se generaron varias distribuciones aleatorias y estadísticamente homogéneas e isotrópicas de 30 partículas dentro de una celda cúbica usando los algoritmos presentados en el capítulo 2 para fracciones volumétricas $0.1 \leq \xi \leq 0.5$. Se discretizaron cuatro de estas distribuciones diferentes para cada fracción volumétrica y se simuló su deformación bajo tracción uniaxial y en cortante puro en tres direcciones perpendiculares mediante el método de elementos finitos bajo la hipótesis de pequeñas deformaciones y utilizando condiciones de contorno periódicas. Los análisis aportaron tres valores independientes del módulo elástico E y del módulo de elasticidad transversal G por cada modelo, además de seis valores independientes del coeficiente de Poisson ν . El módulo de elasticidad volumétrico K para cada modelo se obtuvo por superposición de los resultados para los tres casos de tracción uniaxial. Se analizaron tres materiales compuestos distintos: esferas rígidas dispersas en una matriz elástica, huecos esféricos embebidos en una matriz elástica y un material compuesto típico formado por una matriz epoxy reforzada con esferas de vidrio. Los resultados numéricos se compararon con los obtenidos con tres aproximaciones clásicas a este problema: el método de Mori y Tanaka (1973), el método autoconsistente generalizado (Christensen y Lo, 1979) y las estimaciones de tercer orden de Torquato (1998).

Esferas rígidas dispersas en una matriz elástica

El módulo de elasticidad de las esferas para analizar un material reforzado con esferas rígidas se seleccionó realizando simulaciones con diferentes valores de dicho módulo. Las propiedades efectivas del material prácticamente no variaban cuando el módulo de elasticidad de las esferas, E_p , era 1000 veces superior al de la matriz, y se escogió $E_p = 10000E_m$ para las esferas rígidas. El coeficiente de Poisson de las esferas no tiene influencia en el comportamiento efectivo y el coeficiente de Poisson de la matriz, ν_m , fue igual a 0.25. Los valores medios de las constantes elásticas obtenidas a partir de los análisis por elementos finitos de las celdas unitarias de 30 partículas se han representado en la Fig. 4.2 en función de la fracción volumétrica de esferas en el material compuesto. Los módulos elásticos están

4.1 Determinación de las constantes elásticas

normalizados por el correspondiente módulo de la matriz y las barras de error corresponden a la desviación estándar de los 12 resultados numéricos.

El módulo de elasticidad calculado para las diferentes celdas con una misma fracción volumétrica de refuerzo presentó una dispersión muy pequeña: la desviación estándar fue siempre inferior al 1.5 %. Estos resultados están de acuerdo con las predicciones teóricas de Drugan y Willis (1996) y Drugan (2000) que determinaron unos errores máximos del 5 % si $L/d > 2$ y del 1 % si $L/d \geq 4.5$ para cualquier magnitud de las propiedades elásticas de la matriz y del refuerzo. De hecho, la dispersión en las constantes elásticas calculadas para los distintos modelos fue casi imperceptible cuando $\xi \leq 0.3$ (que corresponde a $L/d \geq 3.74$) y todas las simulaciones proporcionaron resultados prácticamente superpuestos. En el caso de los modelos con $\xi \geq 0.3$ sería necesario hacer un mayor número de simulaciones para obtener un valor *exacto* del módulo de elasticidad, pero el promedio de las doce simulaciones en la Fig. 4.2(a) no puede desviarse mucho más del 1 % o 2 % del valor exacto porque la desviación estándar de los cálculos fue muy pequeña (Fig.4.2(a)).

La dispersión de los resultados numéricos para el módulo de elasticidad transversal fue semejante a la observada en el módulo de elasticidad y se redujo significativamente para el módulo de elasticidad volumétrico de acuerdo con las nuevas predicciones teóricas de Drugan (2003). Por último cabe resaltar que la dispersión en el coeficiente de Poisson (Fig. 4.2(d)) fue muy superior, indicando que el volumen representativo necesario para obtener un valor exacto de esta magnitud es mayor que para las demás constantes elásticas porque depende del cociente entre dos deformaciones, ambas de valor muy pequeño, y el error (o la dispersión) resultante es mucho mayor.

Las soluciones numéricas, cercanas a la solución exacta del problema, se han comparado en la Fig. 4.2 con los resultados proporcionados por tres métodos analíticos. Las curvas correspondientes al modelo de Mori-Tanaka vienen identificadas con las iniciales MT, las derivadas del método autoconsistente generalizado con GSC, y la estimación de tercer orden de Torquato mediante TOA. Evidentemente, todos los modelos convergen para $\xi \leq 0.1$ y las discrepancias en el módulo de elasticidad y en el módulo de elasticidad transversal comienzan para $\xi \geq 0.2$ en el modelo de Mori-Tanaka mientras que las demás aproximaciones analíticas se mantienen junto a las solución numérica *exacta*. La aproximación de tercer orden de Torquato siempre proporcionó los mejores resultados y, asumiendo que la media de los resultados numéricos coincidiera con la solución exacta, los máximos errores en el módulo elástico y en el módulo de elasticidad transversal para este modelo y $\xi=0.5$

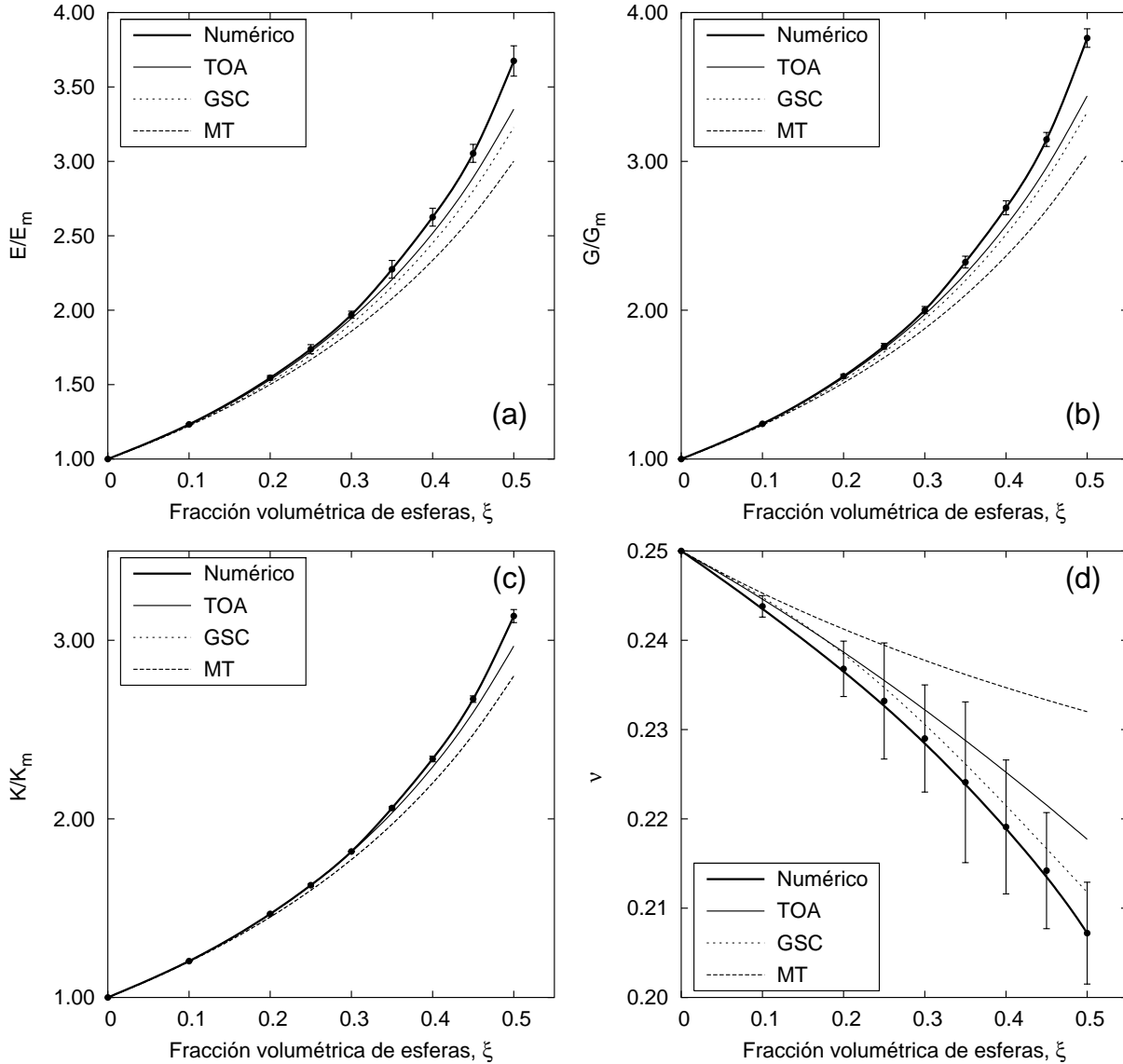


Figura 4.2: Constantes elásticas para una distribución aleatoria, estadísticamente homogénea e isotrópica de esferas rígidas dispersas en una matriz elástica ($\nu_m=0.25$). (a) Módulo de elasticidad, E , (b) Módulo de elasticidad transversal, G , (c) Modulo de elasticidad volumétrico, K , (d) Coeficiente de Poisson, ν . Las barras representan la desviación estándar de 12 simulaciones numéricas para cada fracción volumétrica de refuerzo.

4.1 Determinación de las constantes elásticas

fueron de 8.6 % y 10.2 %, respectivamente. Estos errores aumentarían hasta 12.2 % y 13.0 % cuando se comparan los resultados numéricos con el modelo GSC.

Las predicciones analíticas para el módulo de elasticidad volumétrico, K , fueron mucho más cercanas a la solución numérica que las de los módulos de elasticidad o de elasticidad transversal. Este resultado está de acuerdo con Drugan (2003), que predijo que el volumen representativo mínimo para K es independiente de la fracción volumétrica y , además, el valor de esta constante no depende de una función de probabilidad de dos puntos concreta y solo es necesario incluir la fracción volumétrica como parámetro (como por ejemplo, en los modelos GSC y MT) para proporcionar según estos resultados, una respuesta muy cercana a la *exacta*. La aproximación TOA fue extremadamente precisa y la máxima diferencia para $\xi=0.5$ no excedió el 5.3%. Las predicciones de los modelos GSC y MT para el módulo de elasticidad volumétrico fueron idénticas y la máxima diferencia con el valor medio de las soluciones numéricas fue de 10.7 % para $\xi=0.5$.

Por último, los resultados del modelo GSC para el coeficiente de Poisson fueron más cercanos a la solución numérica que las predicciones del modelo de Torquato aunque ambos modelos siguieron la tendencia general de la curva numérica, mientras que el modelo Mori-Tanaka se desvió bastante.

Cavidades esféricas dispersas en una matriz elástica

Para calcular las constantes elásticas del material poroso, se eliminaron los elementos pertenecientes a las esferas dentro del modelo de elementos finitos. Al igual que en el apartado anterior, se realizaron 12 simulaciones correspondientes a 4 modelos deformados en tracción uniaxial y cortante en 3 direcciones perpendiculares. Los valores medios de las constantes elásticas para una distribución aleatoria, estadísticamente homogénea e isotrópica de huecos esféricos embebidos en una matriz elástica ($\nu_m=0.25$) se han representado en la Fig. 4.3 en función de la fracción volumétrica de huecos, junto con los resultados de las tres aproximaciones analíticas.

La comparación entre las curvas de las Figs. 4.2 y 4.3 lleva a algunas conclusiones inmediatas. En primer lugar, la dispersión de los resultados numéricos para el módulo de elasticidad, el módulo de elasticidad transversal y el módulo de elasticidad volumétrico fue mínima, incluso para $\xi=0.5$. Además, las predicciones de los modelos analíticos se hallaban mucho más cercanas al valor medio de las simulaciones numéricas que en el caso de esferas indeformables. En particular, el módulo de elasticidad y el módulo de elasticidad transversal

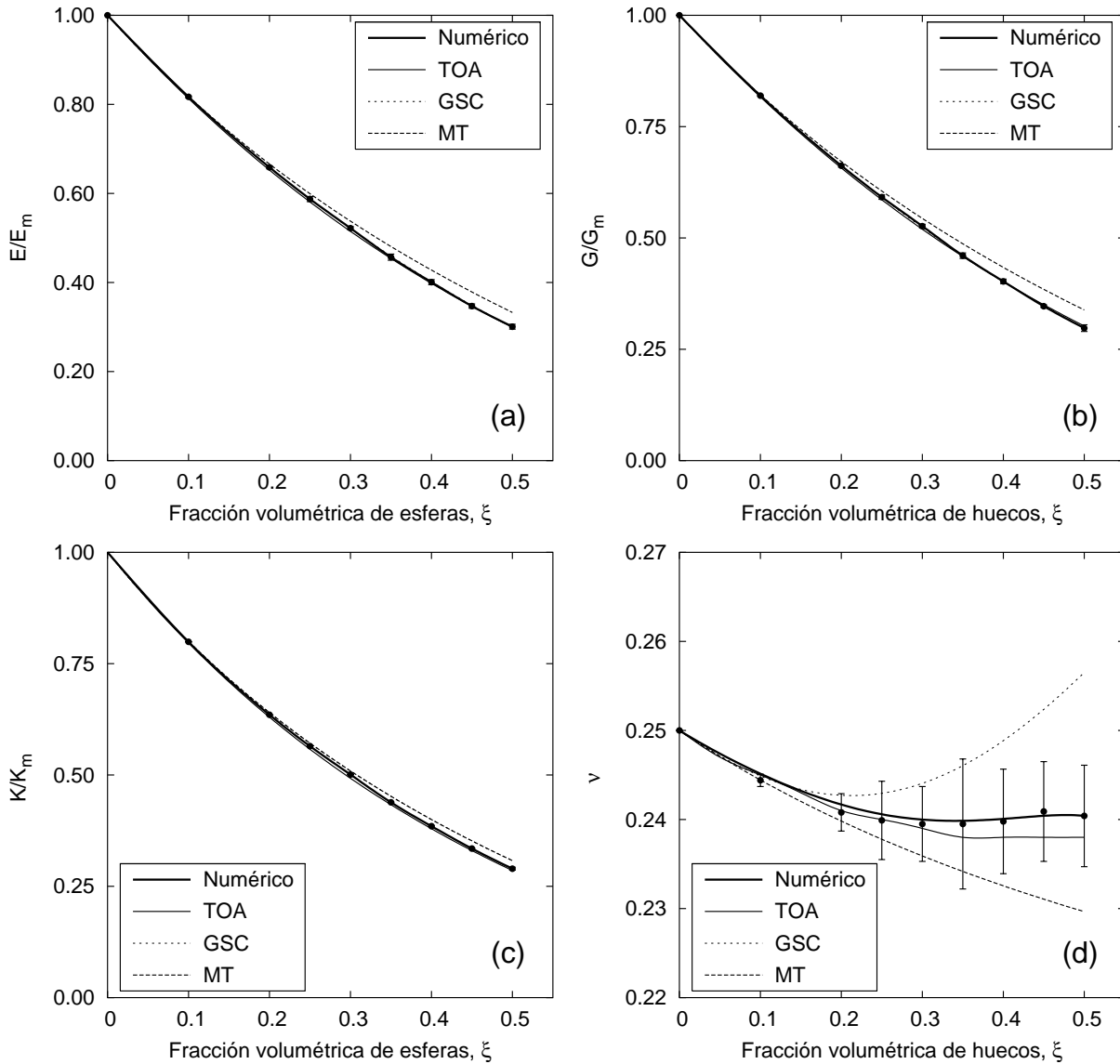


Figura 4.3: Constantes elásticas de una distribución aleatoria, estadísticamente homogénea e isotrópica de huecos esféricos en un matriz elástica ($\nu_m=0.25$). (a) Módulo de elasticidad, E , (b) Módulo de elasticidad transversal, G , (c) Módulo de elasticidad volumétrico, K , (d) Coeficiente de Poisson, ν . Las barras representan la desviación estándar de 12 simulaciones numéricas para cada fracción volumétrica de refuerzo.

4.1 Determinación de las constantes elásticas

de los modelos GSC y TOA estuvieron prácticamente superpuestos a la solución numérica, y los máximos errores del modelo MT para el módulo de elasticidad y de elasticidad transversal sólo alcanzaron el 10.7% y 13.7%, respectivamente. Las predicciones de la aproximación de Torquato para el módulo de elasticidad volumétrico fueron de nuevo indistinguibles del valor medio de los resultados numéricos, mientras que los modelos GSC y MT (que coinciden para este material) mostraron un pequeño error (6.3% para $\xi=0.5$). Por último, la aproximación de Torquato siguió muy de cerca los valores medios del coeficiente de Poisson calculado de forma numérica, mientras que los modelos MT y GSC subestimaron y sobrestimaron, respectivamente, esta magnitud.

Material compuesto epoxy/vidrio

El último grupo de simulaciones se realizó para un material compuesto típico con un alto contraste entre las propiedades elásticas de sus fases: una matriz epoxy ($E_m = 3$ GPa, $\nu_m = 0.38$) reforzada con esferas de vidrio ($E_p = 70$ GPa, $\nu_p = 0.20$). Los valores medios y las correspondientes desviaciones estándar de las simulaciones numéricas se encuentran dibujados en la Fig. 4.4 junto con las predicciones de los modelo analíticos.

Como cabría esperar, la tendencia general fue similar a la dibujada en la Fig. 4.2 para una matriz reforzada con partículas rígidas, pero las discrepancias entre las las soluciones numéricas y analíticas fueron menores. Por ejemplo, las máximas diferencias entre el valor medio de las simulaciones numéricas y el resultado de la aproximación de Torquato para el módulo de elasticidad, el módulo de elasticidad transversal y el módulo de elasticidad volumétrico fueron 6.6%, 7.6% y 2.1%, respectivamente, para $\xi=0.5$. Los resultados del modelo GSC se superpusieron prácticamente a los del modelo de Torquato para E y G . Por último, el modelo de Torquato y la aproximación GSC dieron buenas aproximaciones para el coeficiente de Poisson en todo el rango de fracciones volumétricas estudiado, mientras que el modelo MT sobrestimó su valor.

Ajuste de los resultados numéricos

Con objeto de facilitar su uso, se ha realizado un ajuste por mínimos cuadrados de las constantes elásticas calculadas numéricamente para proporcionar expresiones analíticas en función de la fracción volumétrica para los material con esferas rígidas y con huecos esféricos. Como función de interpolación se ha empleado la ecuación del modelo semiempírico

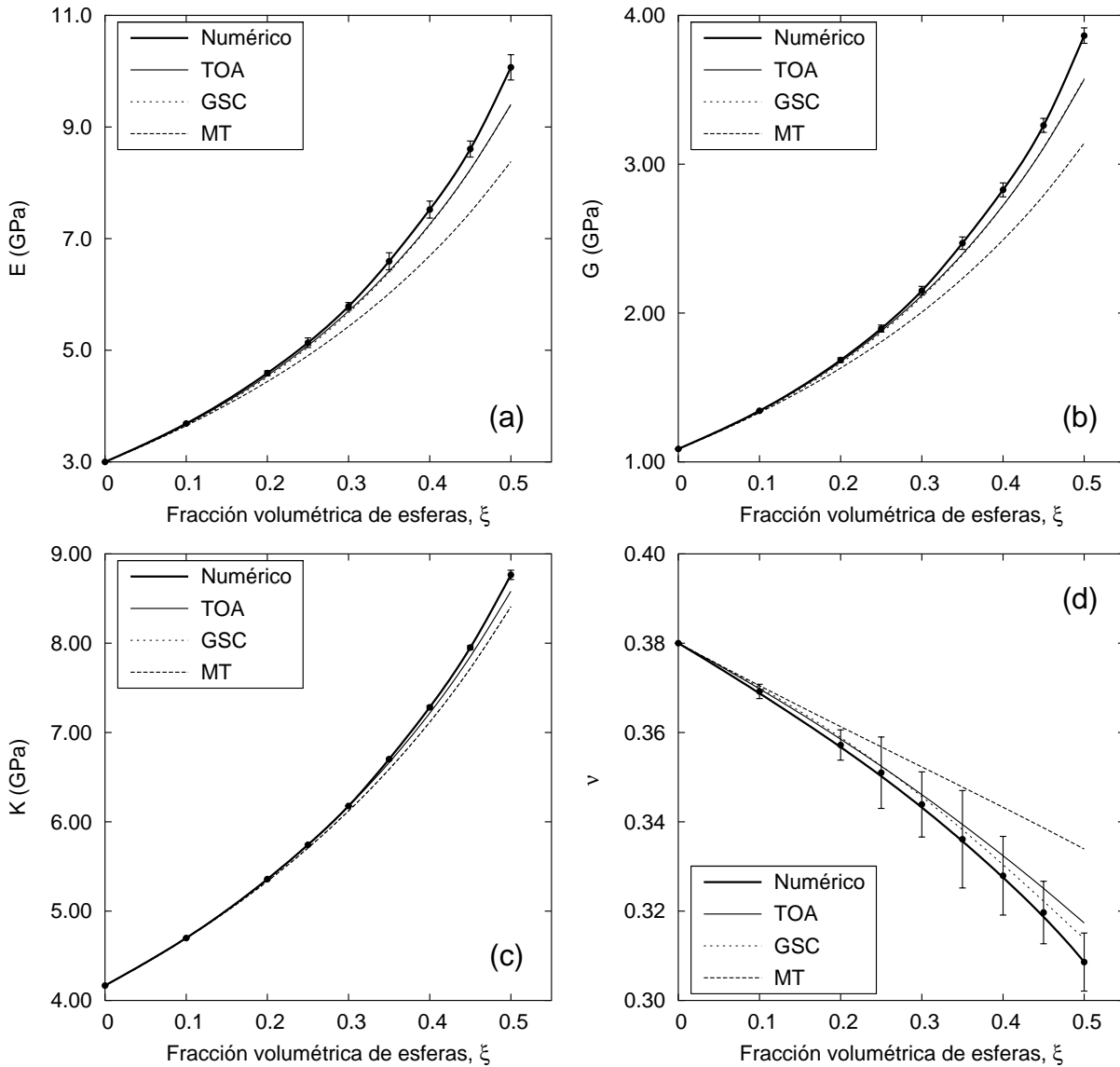


Figura 4.4: Constantes elásticas para una distribución aleatoria y estadísticamente homogénea e isotrópica de esferas de vidrio embebidas en una matriz elástica de epoxy. (a) Módulo de elasticidad, E , (b) Módulo de elasticidad transversal, G , (c) Módulo de elasticidad volumétrico, K , (d) Coeficiente de Poisson, ν . Las barras representan la desviación estándar de 12 simulaciones numéricas para cada fracción volumétrica de refuerzo.

4.1 Determinación de las constantes elásticas

de Halpin y Tsai (1969) que tiene la forma

$$\frac{A}{A_m} = \frac{1 + \mu\eta\xi}{1 - \eta\xi} \quad (4.1)$$

donde A_m es el valor de la constante elástica considerada en la matriz, ξ es la fracción volumétrica de esferas rígidas o huecos esféricos y μ y η son dos parámetros que están relacionados mediante la ecuación

$$\eta = \frac{A_p/A_m - 1}{A_p/A_m + \mu} \quad (4.2)$$

donde A_p es el valor de la constante elástica considerada en el refuerzo.

La derivada en el origen de la función $A(\xi)$, $\frac{\partial A}{\partial \xi}|_{\xi=0}$, puede calcularse de forma exacta para cualquiera de las constantes elásticas a partir del modelo de Eshelby (1957) y derivando la ecuación 1.13 se llega a la expresión

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \xi} = (\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m) [\mathbf{I} + \mathbf{S}_i \mathbf{L}_m^{-1} (\mathbf{L}_i - \mathbf{L}_m)]^{-1} \quad (4.3)$$

que aplicada a los casos de esferas rígidas y huecos esféricos proporciona los siguientes valores

	$\frac{1}{E_m} \frac{\partial E}{\partial \xi}$	$\frac{1}{G_m} \frac{\partial G}{\partial \xi}$	$\frac{1}{K_m} \frac{\partial K}{\partial \xi}$
Esferas rígidas	2.004	2.04	1.8
Huecos esféricos	-2.005	-1.9565	-2.25

Cuadro 4.1: Valores de la derivada en el origen de las constantes elásticas E , G y K en función de la fracción volumétrica ξ obtenidas mediante la expresión 4.3

Derivando la ecuación 4.1 con respecto a ξ e igualando a los valores obtenidos de la ecuación 4.3 se llega a una expresión exacta que relaciona los parámetros η y μ que difiere de la propuesta en el modelo original (Halpin y Tsai, 1969) y se expresa mediante

$$\eta (1 + \mu) = \frac{1}{A_m} \frac{\partial A}{\partial \xi} \quad (4.4)$$

y la función analítica para ajustar los resultados numéricos adquiere la siguiente forma

$$\frac{A}{A_m} = \frac{1 + (\frac{\partial A}{\partial \xi} - \eta)\xi}{1 - \eta\xi} \quad (4.5)$$

donde el parámetro η se determinó mediante un ajuste por mínimos cuadrados de las constantes elásticas calculadas numéricamente. Los valores de η se han recogido en la tabla 4.2 para el material compuesto reforzados con esferas rígidas y en la Tabla 4.3 para el material con huecos esféricos.

	E	G	K
η	1.2523	1.2797	1.1532
R^2	0.99988	0.99988	0.99995

Cuadro 4.2: Coeficiente η del ajuste con la ecuación 4.5 de las constantes elásticas efectivas E , G , K para una matriz elástica ($\nu_m = 0.25$) reforzada con esferas rígidas. También se incluye el coeficiente de correlación del ajuste, R^2

	E	G	K
η	-0.85565	-0.77956	-1.162
R^2	0.99997	0.99998	0.99999

Cuadro 4.3: Coeficiente η del ajuste con la ecuación 4.5 de las constantes elásticas efectivas E , G , K de una matriz elástica ($\nu_m = 0.25$) con huecos esféricos. También se incluye el coeficiente de correlación del ajuste, R^2

Las expresiones analíticas reproducen perfectamente la forma de las curvas numéricas (Fig. 4.5) y los coeficientes de correlación obtenidos fueron siempre muy altos. Estos resultados confirman la validez de la expresión general de Halpin-Tsai para representar la dependencia de las constantes elásticas con la fracción volumétrica en materiales reforzados con esferas cuando se impone una relación entre los parámetros del modelo basada en la solución exacta de la pendiente inicial de la curva $A = A(\xi)$.

4.2. Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

Los modelos de elementos finitos de las celdas multipartícula generados para calcular las constantes elásticas se pueden extender al campo elasto-plástico sin más que modificar la ecuación constitutiva de la matriz. El primer objetivo de estas simulaciones fue estudiar el efecto del endurecimiento por deformación de la matriz en el comportamiento efectivo

4.2 Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

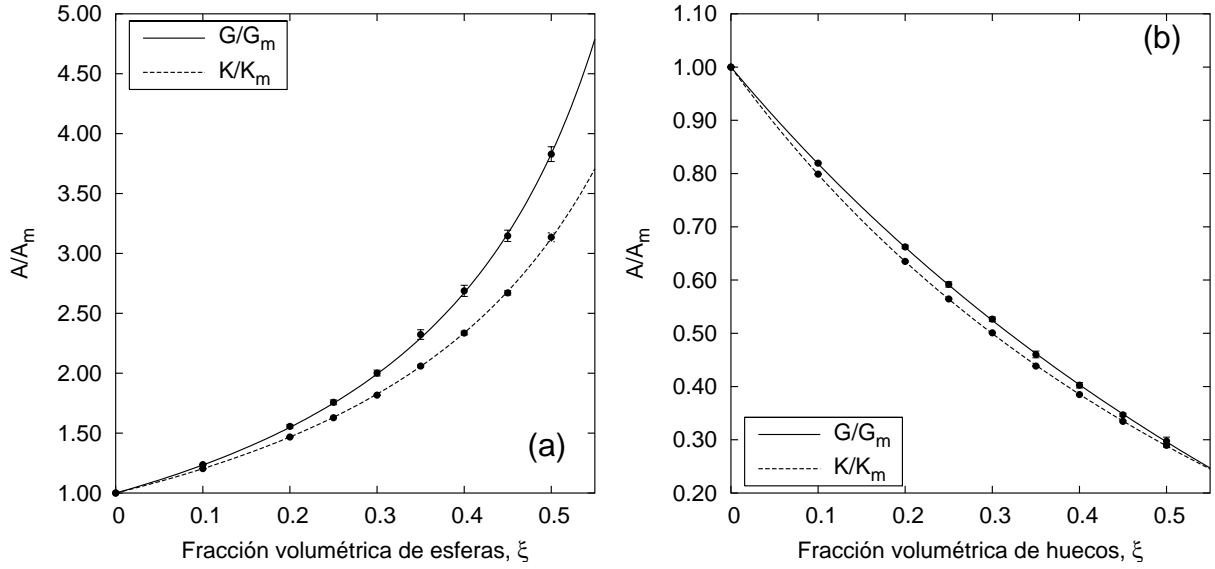


Figura 4.5: Ajuste de las constantes elásticas G/G_m y K/K_m con la deformación volumétrica mediante la ecuación 4.5 junto a los resultados numéricos. (a) Material reforzado con esferas rígidas. (b) Material con huecos esféricos

para simular el comportamiento mecánico de materiales compuestos en régimen elasto-plástico. También se pretendió evaluar la validez de diferentes métodos de campo medio comparando su predicción con la solución *exacta* obtenida como promedio de varias simulaciones numéricas sobre distintas celdas multipartícula. Además, los modelos numéricos tridimensionales multipartícula proporcionaron información sobre los campos de tensiones y deformaciones en ambas fases del material a nivel local que no pueden obtenerse de otra forma y que sirvieron para evaluar las virtudes y los defectos de los métodos de campo medio en régimen no lineal.

El análisis se restringió a un material reforzado con un 25 % de esferas y cuyas constantes elásticas son típicas de una aleación de aluminio reforzada con partículas cerámicas (alúmina o carburo de silicio). El comportamiento plástico de la matriz se varió de manera sistemática para representar aleaciones metálicas con diferente capacidad de endurecimiento por deformación.

4.2.1. Selección del volumen representativo y discretización

A diferencia del campo elástico, en régimen plástico no existe ningún modelo analítico que proporcione *a priori* el tamaño del volumen representativo necesario para determinar

las propiedades efectivas del material compuesto con un error conocido. Böhm y Han (2001), en uno de los pocos trabajos sobre el análisis del comportamiento elasto-plástico con celdas multipartícula, usaron volúmenes representativos con 20 esferas y observaron que la dispersión de las simulaciones numéricas dependía en buena medida del comportamiento plástico de la matriz. La causa de este resultado estaba en la dificultad de representar adecuadamente en los modelos numéricos la localización de la deformación plástica en la matriz alrededor de las partículas de refuerzo, y esta localización aumentaba al disminuir el coeficiente de endurecimiento por deformación de la matriz.

A falta de un estimador del error *a priori*, se decidió usar volúmenes representativos formados por celdas cúbicas con 30 partículas esféricas, promediar los valores obtenidos sobre 12 resultados (4 celdas deformadas en 3 direcciones perpendiculares) y comprobar *a posteriori* si el volumen representativo era adecuado teniendo en cuenta las propiedades de la matriz.

La discretización por elementos finitos del modelo puede ser diferente en régimen plástico frente al régimen elástico para obtener una respuesta suficientemente precisa debido a la localización de la deformación plástica en la matriz. Para decidir el número de elementos y nodos necesarios, se discretizó la misma celda multipartícula con 30 esferas ($\xi = 0.25$) con una malla estándar (90000 nodos) y con otra mucho más fina (250000 nodos) de acuerdo con el límite impuesto por la memoria del ordenador. El coeficiente de endurecimiento por deformación elegido para la matriz fue $n = 0.05$ para estudiar un material con una fuerte tendencia a la localización de la deformación plástica. Las curvas tensión-deformación en tracción uniaxial para ambos modelos se han representado en la Fig. 4.6. La máxima diferencia entre ambas curvas fue inferior al 2% mientras que el tiempo de cálculo aumentó en casi un orden de magnitud para la discretización más fina y se decidió realizar todas las simulaciones con la malla de tamaño estándar. Los cálculos se realizaron en un ordenador Alpha Server ES40 con cuatro procesadores y 4 Gb de memoria. El tiempo medio de cálculo de cada simulación fue de ≈ 6 horas. Se emplearon para la discretización elementos tetraédricos cuadráticos del tipo C3D10M (Abaqus, 2001) y los cálculos se realizaron bajo la hipótesis de pequeñas deformaciones.

4.2 Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

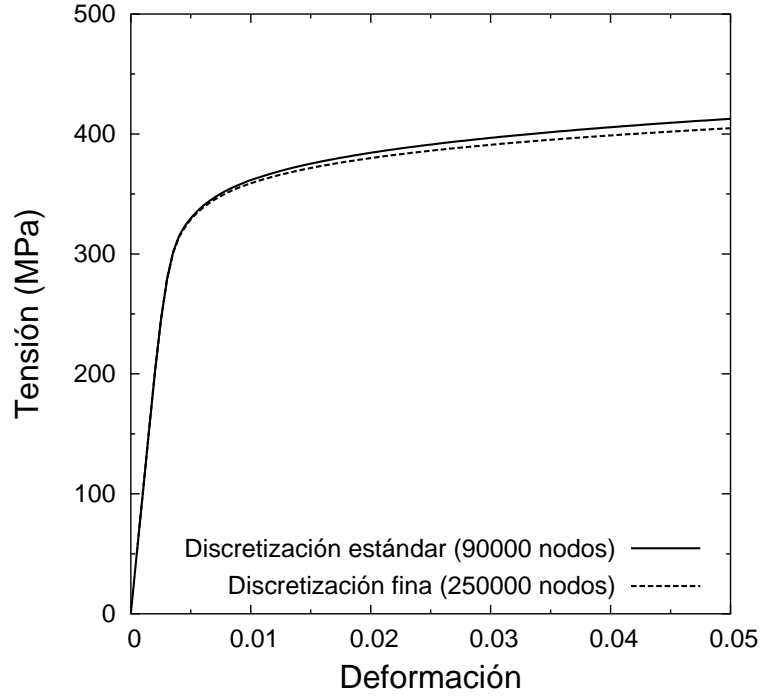


Figura 4.6: Curvas tensión-deformación de un material compuesto en régimen elasto-plástico para una celda partícula con 30 esferas ($\xi=0.25$) en función del número de elemento finitos

4.2.2. Resultados y discusión

El material compuesto analizado estaba formado por una matriz reforzada con esferas isotropas, elásticas y lineales con $K_p = 222.2$ GPa y $G_p = 166.67$ GPa. La matriz se representó como un sólido elasto-plástico con endurecimiento isotropo y cuya superficie de plastificación venía dada por el criterio de Von Mises. Las constantes elásticas de la matriz fueron $K_m = 62.5$ GPa y $G_m = 28.85$ GPa, y la relación entre la tensión de plastificación $\bar{\sigma}$ y la deformación plástica equivalente ϵ_{pl} venía dada por

$$\bar{\sigma} = A(\epsilon_{pl})^n \quad (4.6)$$

donde $A = 400$ MPa y el coeficiente de endurecimiento por deformación n se modificó sistemáticamente en el intervalo de 0 a 0.40 para estudiar matrices con distinta capacidad de endurecimiento por deformación y simular la deformación de materiales con distinto grado de localización de la deformación plástica en la matriz. Estas propiedades elásticas son típicas de una matriz de aluminio reforzada con partículas cerámicas de SiC o Al_2O_3

mientras que la ecuación 4.6 permite introducir un intervalo muy amplio de tensiones de plastificación que pueden representar a diversas aleaciones de aluminio.

La simulación numérica del comportamiento del material compuesto en tracción uniaxial se realizó mediante cálculos sobre cuatro celdas diferentes con la misma fracción volumétrica de esferas $\xi = 0.25$. Cada uno de estos modelos se deformó en 3 direcciones perpendiculares y en total se obtuvieron doce curvas tensión-deformación en tracción uniaxial para cada material y otras doce curvas tensión tangencial-deformación tangencial en cortante simple. Los cálculos se realizaron empleando condiciones de contorno periódicas (sección 3.2) para obtener una respuesta más exacta.

Los resultados de las doce simulaciones para dos materiales compuestos con coeficientes de endurecimiento de la matriz de 0.05 y 0.40 se han representado en las Figs. 4.7(a) y 4.7(b) para la deformación axial y tangencial, respectivamente. Los resultados para dis-

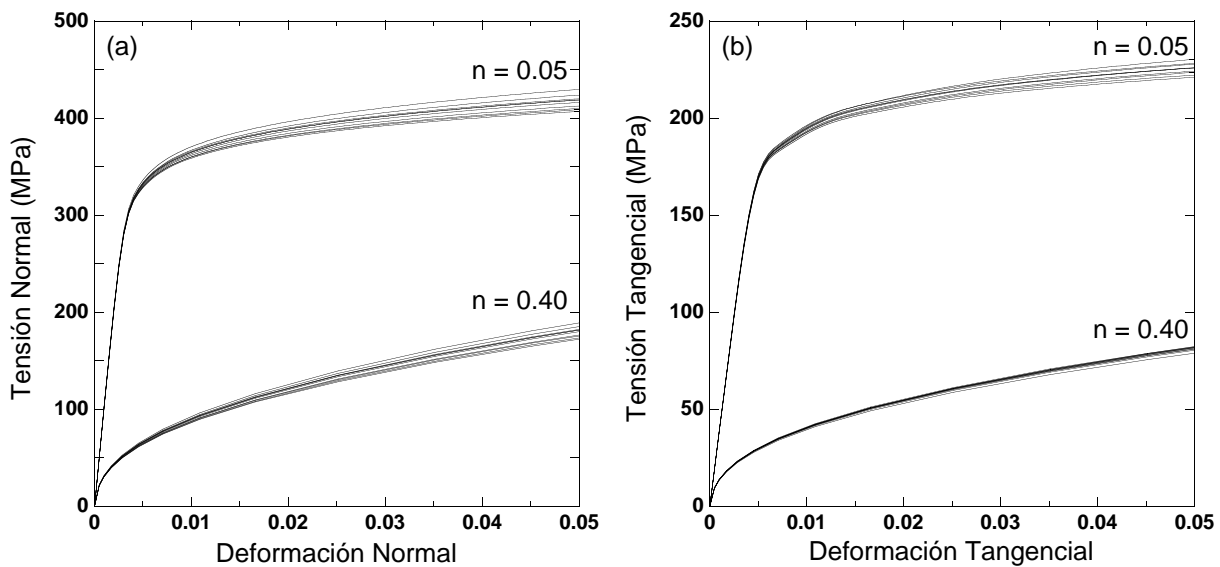


Figura 4.7: Curvas tensión-deformación de doce celdas unitarias por material. Las matrices tienen coeficientes de endurecimiento por deformación n de 0.05 y 0.40. (a) Deformación uniaxial. (b) Deformación cortante

tintas celdas estaban prácticamente superpuestas en la región elástica y al inicio de la deformación plástica, pero divergieron cuando la deformación plástica se hizo dominante. En consecuencia, el volumen representativo no era suficientemente grande para proporcionar una respuesta en régimen plástico independiente de la particular disposición de las esferas en la celda multipartícula. Sin embargo, la máxima diferencia entre las curvas

4.2 Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

tensión-deformación estuvo limitada a 4.9% para $n = 0.05$ y a 9.2% para $n = 0.40$ y las correspondientes desviaciones estándar de la media para las doce simulaciones fueron iguales a 1.5% y 2.7%, respectivamente. En consecuencia, la curva tensión-deformación obtenida promediando las doce simulaciones numéricas ha de ser muy cercana a la solución exacta del problema (la que se obtendría con una celda multipartícula mucho mayor) y puede utilizarse para evaluar la precisión de los modelos de homogeneización en el régimen plástico. Las curvas tensión-deformación promedio de los cálculos numéricos se han representado en la Fig. 4.8 para los distintos materiales compuestos con coeficientes de endurecimiento por deformación de la matriz $n = 0, 0.05, 0.15, 0.25$ y 0.40 en tracción uniaxial (4.8(a)) y cortante simple (4.8(b))

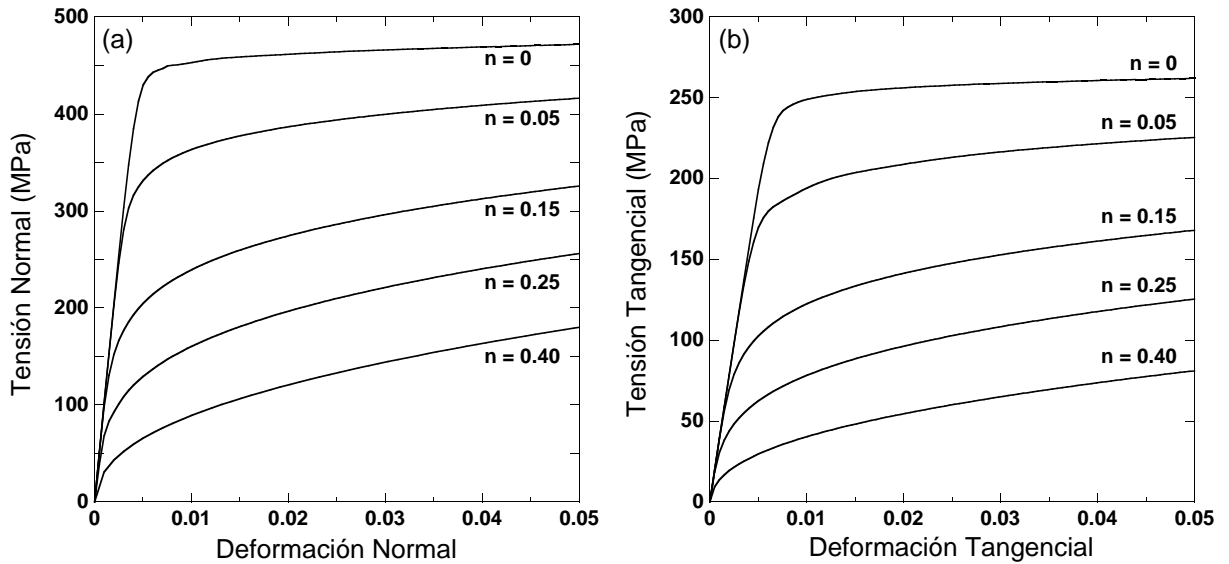


Figura 4.8: Curvas tensión-deformación promedio de las simulaciones numéricas para materiales compuestos reforzados con una dispersión aleatoria, estadísticamente homogénea e isotrópica de esferas elásticas y matrices con coeficientes de endurecimiento por deformación de $n = 0.05 - 0.40$. (a) Tracción uniaxial. (b) Deformación cortante. $\xi = 0.25$

Comparación con modelos secantes

El comportamiento elasto-plástico efectivo de los materiales compuestos reforzados con partículas se ha simulado con frecuencia mediante modelos de campo medio secantes porque permiten una estimación rápida y precisa de la ecuación constitutiva con una base microes-

tructural (sección 1.2.2) y es importante analizar la precisión de este tipo de modelos para aproximar la solución real del problema en función de la capacidad de endurecimiento por deformación de la matriz. Para este fin, es conveniente recordar que cualquier modelo secante de campo medio está basado en los siguientes elementos

- un modelo de homogeneización lineal para calcular el comportamiento secante efectivo del compuesto en función de las propiedades secantes de las fases (Mori-Tanaka, autoconsistente, etc)
- una tensión de referencia en la matriz, necesaria para estimar sus propiedades secantes a lo largo del proceso de deformación del material compuesto.

La combinación seleccionada del modelo de homogeneización y la tensión de referencia influye de forma determinante en la precisión del modelo secante y se implementaron las dos versiones existentes de los métodos secantes: la versión clásica y la versión modificada. El método secante clásico utiliza como tensión de referencia en la matriz la tensión de Von Mises, $\hat{\sigma}_m^{eq}$, obtenida a partir de la media volumétrica del tensor de tensiones, $\bar{\sigma}_m$. La versión modificada utiliza como tensión de referencia la tensión de Von Mises $\hat{\sigma}_m^{eq}$, calculada a partir de la media volumétrica del momento de segundo orden del tensor de tensiones en la matriz, $\overline{\sigma \otimes \sigma}$.

Las dos aproximaciones secantes (clásica y modificada) junto con dos modelos de homogeneización (límite inferior de Hashin-Shtrikman, HS-, y estimación de tercer orden de Torquato, TOA) proporcionaron cuatro predicciones diferentes del comportamiento del material compuesto en régimen elasto-plástico, que se han comparado con los resultados de las simulaciones numéricas en tracción uniaxial y cortante simple en las Figs. 4.9 y 4.10 respectivamente. Las curvas 4.9(a) y 4.10(a) corresponden a una matriz con bajo coeficiente de endurecimiento por deformación que lleva a una rápida localización de la deformación en la matriz tras el comienzo de la plastificación. Por el contrario, las curvas de las Figs. 4.9(b) y 4.10(b) muestran el comportamiento de un material compuesto donde la localización de las deformaciones plásticas está limitada por la gran capacidad de endurecimiento por deformación de la matriz.

Las predicciones de los modelos de homogeneización siguieron siempre el mismo orden: los modelos basados en el método secante clásico proporcionaron una respuesta más rígida que aquellos basados en el método modificado donde la tensión de referencia en la matriz se

4.2 Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

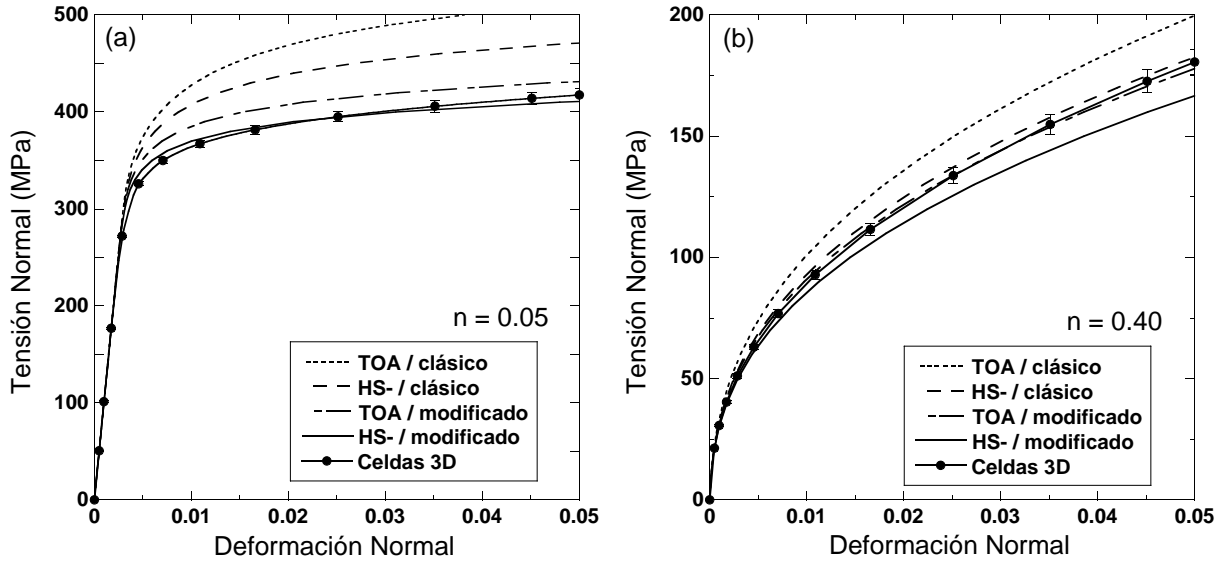


Figura 4.9: Curvas tensión-deformación en tracción calculadas mediante los distintos modelos de homogeneización y las simulaciones numéricas de celdas multipartícula en 3D (a) $n = 0.05$. (b) $n = 40.0$. Las barras de error corresponden a las desviaciones estándar de las doce simulaciones numéricas

calcula a partir de la media volumétrica del momento de segundo orden del tensor de tensiones. Igualmente, los resultados obtenidos a partir del modelo de homogeneización TOA fueron más rígidos que los obtenidos a partir de la aproximación de Hashin-Shtrikman, HS-. Las curvas tensión-deformación *exactas* (obtenidas promediando los resultados numéricos sobre las celdas multipartícula) siempre estuvieron más cercanas a los resultados del método secante modificado. La combinación de este modelo con el método de homogeneización de Torquato proporcionó una estimación muy precisa del comportamiento del material compuesto para matrices con elevada capacidad de endurecimiento por deformación ($n = 0.40$) mientras que las curvas obtenidas combinando el método secante modificado con la aproximación de Hashin-Shtrikman, HS-, resultaron más cercanas a los resultados numéricos cuando $n = 0.05$. El método secante clásico siempre sobrestimó la tensión en el material compuesto, y la diferencia con los resultados numéricos creció al disminuir n . Por último, es necesario señalar que los modelos analíticos tienden a proporcionar una respuesta ligeramente más rígida (con relación a la solución *exacta*) en cortante simple que en tracción uniaxial.

El diferente comportamiento de los modelos de homogeneización puede entenderse mejor gracias al análisis de los campos de tensión a nivel local que proporcionaron las simula-

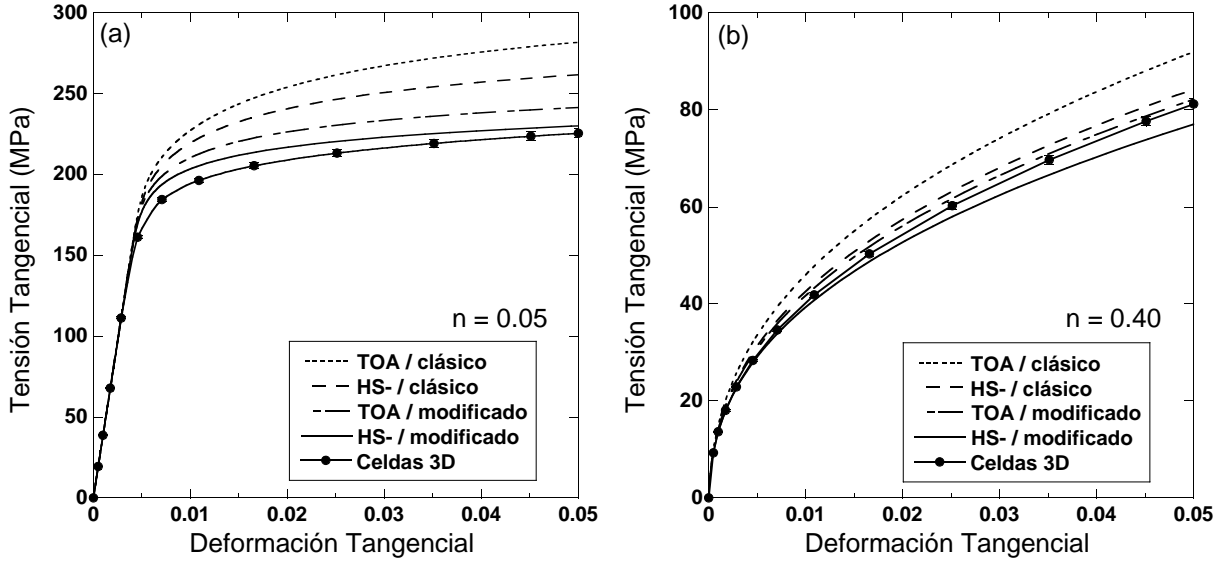


Figura 4.10: Curvas tensión-deformación en cortante simple de los distintos modelos de homogeneización y de las simulaciones con celdas multipartícula en 3D (a) $n = 0.05$. (b) $n = 40.0$. Las barras de error corresponden a las desviaciones estándar de las doce simulaciones numéricas

ciones numéricas. En particular, la media volumétrica del tensor de tensiones en la matriz $\bar{\sigma}_m$, y la media volumétrica del momento de segundo orden del tensor de tensiones en la matriz, $\overline{\sigma \otimes \sigma}$, pueden obtenerse a partir de las simulaciones numéricas según

$$\bar{\sigma}_m = \frac{\sum_i \sigma_i V_i}{\sum_i V_i} \quad \text{y} \quad \overline{\sigma \otimes \sigma} = \frac{\sum_i (\sigma_i \otimes \sigma_i) V_i}{\sum_i V_i} \quad (4.7)$$

donde σ_i y V_i son, respectivamente, el tensor de tensiones y el volumen asociados al punto de Gauss i de cada uno de los elementos finitos pertenecientes a la matriz y las correspondientes tensiones de referencia, $\hat{\sigma}_m^{eq}$ y $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$ definidas en las ecuaciones 1.21 y 1.25, respectivamente, pueden calcularse a partir de estos valores. Junto a estas magnitudes, la media volumétrica de la tensión de Von Mises $\bar{\sigma}_m^{eq}$, también se puede calcular como

$$\bar{\sigma}_m^{eq} = \frac{\sum_i \left[\frac{3}{2} (\mathbf{K} \sigma_i) (\mathbf{K} \sigma_i) \right]^{1/2} V_i}{\sum_i V_i} \quad (4.8)$$

La evolución de estas tres tensiones equivalentes, $\hat{\sigma}_m^{eq}$, $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$ y $\bar{\sigma}_m^{eq}$, en función de la deformación uniaxial aplicada se ha dibujado en la Fig. 4.11 para las simulaciones de la Fig. 4.9. Las

4.2 Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

curvas obtenidas para la deformación en cortante simple fueron idénticas y no se han representado aquí por brevedad.

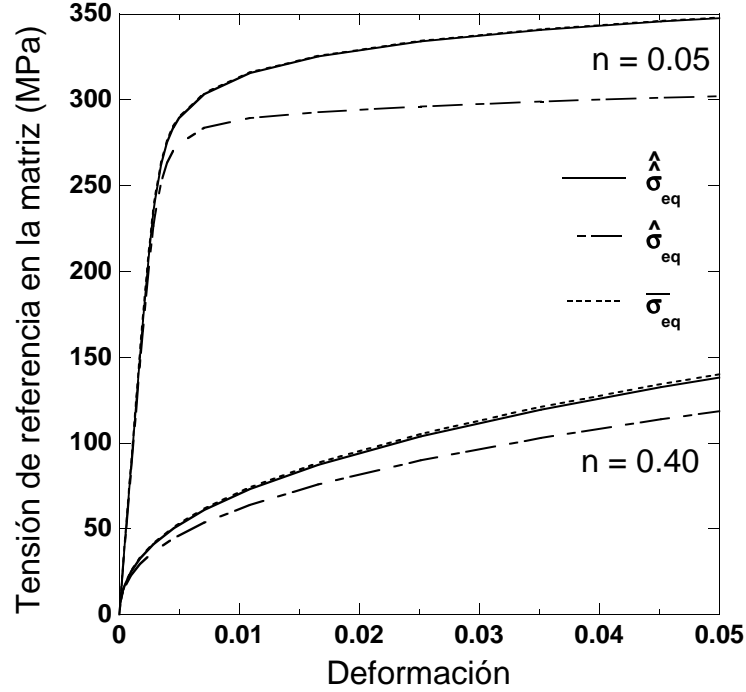


Figura 4.11: Evolución de las tensiones de referencia de la matriz en función de la deformación uniaxial aplicada calculadas a partir de las tensiones en los puntos de Gauss. $\bar{\sigma}_m^{eq}$, ecuación 4.8, es la media volumétrica de la tensión equivalente, $\hat{\sigma}_m^{eq}$, ecuación 1.21, es la tensión de referencia calculada a partir de la media volumétrica del tensor de tensiones, y $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$, ecuación 1.25, es la tensión de referencia calculada a partir de la media volumétrica del momento de segundo orden del tensor de tensiones

El grado de plastificación de la matriz viene controlada por la tensión equivalente de Von Mises y su media volumétrica ($\bar{\sigma}_m^{eq}$) es una buena referencia para conocer el grado de plastificación de la matriz dentro del material compuesto. La tensión de referencia $\hat{\sigma}_m^{eq}$, obtenida a partir del tensor $\bar{\sigma}_m$, es muy inferior a $\bar{\sigma}_m^{eq}$ desde el comienzo de la deformación plástica (Fig. 4.11) y la diferencia entre ambas aumentó al disminuir la capacidad de endurecimiento por deformación de la matriz. En consecuencia, los modelos secantes clásicos, que estiman la deformación plástica de la matriz a partir de $\hat{\sigma}_m^{eq}$, subestiman el nivel de deformación plástica en la matriz y tienden a proporcionar una respuesta más rígida que la solución numérica *exacta*. Por el contrario, la tensión de referencia $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$, obtenida a partir de $\overline{\sigma \otimes \sigma}$, fue siempre muy próxima a $\bar{\sigma}_m^{eq}$ y las aproximaciones secantes modificadas

proporcionan un comportamiento más flexible para el material compuesto y más cercano a la solución real.

Estos resultados demuestran que el método secante modificado introducido independientemente por Ponte-Castañeda (1991) y Suquet (1995) evalúa mejor el comportamiento no lineal de la matriz durante la deformación. Este modelo proporcionó excelentes predicciones de la curva tensión-deformación del material compuesto cuando se combinó con un método de homogeneización lineal muy preciso, como es el modelo de Torquato, siempre que la capacidad de endurecimiento por deformación de la matriz fuera elevada, es decir, que la localización de la deformación esté limitada (Figs. 4.9 y 4.10). Sin embargo, si el coeficiente de endurecimiento por deformación de la matriz era pequeño ($n = 0.05$), la estimación del método secante modificado combinado con la aproximación de Torquato siguió sobrestimando la tensión efectiva en el material compuesto, mientras que los resultados obtenidos con la aproximación de Hashin-Shtrikman fueron más cercanos a la solución numérica *exacta*. En consecuencia, se puede afirmar que la aproximación secante modificada también proporciona una respuesta demasiado rígida cuando la deformación en la matriz se localiza durante el proceso de deformación pero las causas de este fenómeno no se conocen y son importantes para desarrollar nuevos métodos de homogeneización más precisos. El análisis de este problema se abordó comparando la partición de tensiones entre la matriz y el refuerzo predichas por los modelos de campo medio con los resultados numéricos.

La tensión transmitida por la matriz en los modelos de homogeneización viene expresada por la media volumétrica del tensor de tensiones en la matriz, $\bar{\sigma}_m$, que está relacionado con la media volumétrica del tensor de tensiones en el compuesto $\bar{\sigma}$ a través de la ecuación

$$\bar{\sigma}_m = \mathbf{B}_m \bar{\sigma} \quad \text{donde} \quad \mathbf{B}_m = \frac{1}{1 - \xi} [(\mathbf{M}_m^s - \mathbf{M}_i)^{-1}(\mathbf{M}^s - \mathbf{M}_i)] \quad (4.9)$$

Ambos tensores de tensión pueden descomponerse en sus componentes desviadora e hidrostática, que vienen caracterizadas respectivamente por la tensión equivalente (segundo invariante del tensor de tensiones) y por la tensión hidrostática (primer invariante del tensor de tensiones). Los tensores elásticos de las fases, \mathbf{M}_m^s y \mathbf{M}_p , y del material compuesto, \mathbf{M} , pueden también descomponerse de igual modo (ecuación 1.20) siempre que las fases individuales y el material compuesto sean isótropos y que la componente desviadora del tensor de tensiones de la matriz sea colineal con la correspondiente al material compuesto.

4.2 Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

En estas condiciones,

$$\sigma_m^h = b^h \sigma^h \quad \text{con} \quad \sigma_m^h = \frac{1}{3} \text{tr}(\bar{\sigma}_m) \quad \text{y} \quad \sigma^h = \frac{1}{3} \text{tr}(\bar{\sigma}) \quad (4.10)$$

y

$$\sigma_m^{eq} = b^{eq} \sigma^{eq} \quad \text{con} \quad \sigma_m^{eq} = \left[\frac{3}{2} (\mathbf{K} \bar{\sigma}_m) (\mathbf{K} \bar{\sigma}_m) \right]^{1/2} \quad \text{y} \quad \sigma^{eq} = \left[\frac{3}{2} (\mathbf{K} \bar{\sigma}) (\mathbf{K} \bar{\sigma}) \right]^{1/2} \quad (4.11)$$

donde b^h y b^{eq} dependen de la fracción volumétrica y de los correspondientes tensores elásticos de las fases y del material compuesto, e indican la fracción de la tensión hidrostática y de la tensión desviadora soportadas por la matriz. Ambos pueden calcularse para cualquier modelo secante a partir de la ecuación 1.24.

Es importante señalar que σ_m^{eq} expresa la fracción de tensión desviadora que se lleva la matriz dentro del compuesto, mientras que $\hat{\sigma}_m^{eq}$ y $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$ son las tensiones de referencia que usan los modelos de homogeneización para calcular el tensor de rigidez secante de la matriz. σ_m^{eq} coincide con $\hat{\sigma}_m^{eq}$, la tensión de referencia usada en el método secante clásico, pero es diferente de $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$, la tensión de referencia usada en el método secante modificado. Conviene además recordar que los resultados numéricos mostraron que la media volumétrica de la tensión de Von Mises en la matriz $\bar{\sigma}_m$ es muy cercana a $\hat{\hat{\sigma}}_m^{eq}$ pero difiere de $\hat{\sigma}_m^{eq}$.

La evolución de b^{eq} en función de σ^{eq} se ha dibujado en las Figs. 4.12(a) y 4.12(b) para dos materiales compuestos sometidos a tracción uniaxial cuyas matrices tenían coeficientes de endurecimiento por deformación de $n = 0.05$ y 0.40 . Cada figura incluye las predicciones del método secante modificado combinado con las dos aproximaciones lineales (HS- y TOA) junto con los resultados obtenidos a partir de las simulaciones numéricas de las celdas multipartícula. En los modelos de homogeneización, la fracción de la tensión desviadora transmitida por la matriz es constante mientras el material se encuentra en el rango elástico y disminuye rápidamente al comienzo de la deformación plástica. Los valores de b^{eq} para el modelo de Hashin-Shtrikman fueron siempre superiores a los calculados con el modelo de Torquato y esa diferencia en las tensiones desviadoras en la matriz es responsable de la respuesta más flexible del segundo. Cuando la deformación plástica es dominante, la resistencia de la matriz a la deformación plástica es despreciable frente a las partículas elásticas y b^{eq} se aproxima a una asíntota que puede determinarse de forma analítica asumiendo que las esferas de refuerzo se comportan como sólidos rígidos. Este valor asintótico de b^{eq} viene expresado como

$$b^{eq} = \left[1 + \frac{3(1 + \eta)}{2 - 3\eta} \xi \right]^{-1} \quad (4.12)$$

donde η es uno de los parámetros del modelo de Torquato que sirve para caracterizar la distribución espacial de partículas en la matriz (ver sección 1.2.3). El valor asintótico de b^{eq} para el modelo de Hashin-Shtrikman también viene dado por la ecuación 4.12 con $\eta=0$.

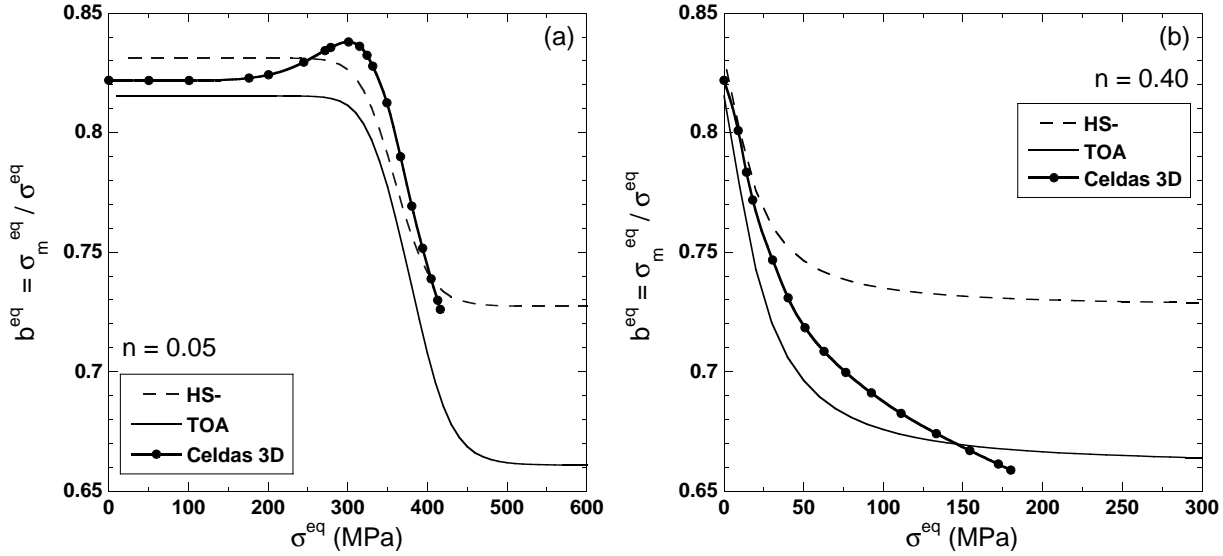


Figura 4.12: Fracción de tensión desviadora soportada por la matriz como función de la tensión desviadora en el compuesto σ^{eq} (a) $n = 0.05$ (b) $n = 0.40$. Las curvas muestran los resultados obtenidos con el método secante modificado combinado con dos modelos lineales de homogeneización (HS- y TOA) y mediante la simulación con celdas multipartícula en 3D.

Los valores de b^{eq} calculados a partir de los modelos numéricos se encuentran entre las predicciones de los modelos de homogeneización cuando la capacidad de endurecimiento por deformación de la matriz es alta, Fig. 4.12(b). La curva obtenida a partir de las simulaciones numéricas decrece de forma monótona con la carga aplicada y se sitúa muy cerca de la curva correspondiente al modelo de Torquato en todo momento. Este resultado está de acuerdo con las curvas tensión-deformación de la Fig.4.9(b) donde la mejor predicción del comportamiento a tracción está proporcionada por este modelo. Sin embargo, cuando la capacidad de endurecimiento por deformación de la matriz es pequeña, Fig. 4.12(a), los valores numéricos de b^{eq} presentan un máximo al comienzo de la deformación plástica que no aparece en los modelos de homogeneización, que siempre predicen una reducción continua en la fracción de tensión desviadora soportada por la matriz con la deformación. Ningún modelo de homogeneización (incluyendo el modelo de Torquato que reproduce de forma

4.2 Deformación elasto-plástica en materiales homogéneos

adecuada el comportamiento del material compuesto en regímenes elástico y totalmente plástico) es capaz de simular ese máximo y, en consecuencia, siempre tienden a sobrestimar la tensión en el material compuesto durante la transición elasto-plástica.

El origen de un máximo en la fracción de tensión desviadora soportada por la matriz para matrices con bajo endurecimiento por deformación se estudió a partir de nuevas simulaciones numéricas con una matriz sin capacidad de endurecimiento por deformación ($n = 0$). La fracción de las tensión desviadora transmitida por las regiones elásticas y plásticas de la matriz se ha representado en la Fig. 4.13 en función de la tensión equivalente del compuesto σ^{eq} junto con la fracción volumétrica de matriz que ha comenzado a deformarse plásticamente. La figura muestra que el material compuesto se comporta realmente como un material de tres fases desde el comienzo de la plastificación: esferas elásticas e islas de matriz que se deforman plásticamente y que están dispersas en un esqueleto continuo de matriz elástica. Esta representación espacial de las fases en el material compuesto es muy diferente a la asumida por los modelos de homogeneización que solo consideran las esferas elásticas y la matriz plástica pero que no tienen en cuenta la existencia de una zona continua de matriz que aun no ha comenzado a deformarse plásticamente y, en consecuencia, no logran capturar algunos de los mecanismos principales de deformación. En concreto, la tensión desviadora soportada por las zonas plastificadas de la matriz es muy superior que la soportada por las regiones elásticas y el progresivo aumento del volumen de matriz que ha plastificado da lugar a la aparición de un máximo en b^{eq} cerca del límite de percolación de las zonas plásticas de la matriz. A partir de este punto el material vuelve a comportarse como un material bifásico normal formado por esferas elásticas embebidas en una matriz que se deforma plásticamente y los modelos de homogeneización son capaces de simular adecuadamente su comportamiento. Sin embargo, la modelización de la transición elasto-plástica necesita el desarrollo de modelos que tengan en cuenta la presencia de las tres fases con propiedades muy diferentes y cuyo volumen (matriz elástica y plástica) cambia rápidamente con la deformación.

Por último, es interesante comentar las diferencias entre los resultados de tracción uniaxial y de cortante simple. La relación entre los resultados de los métodos de homogeneización en el caso de deformación cortante y los obtenidos mediante las correspondientes simulaciones numéricas (Fig. 4.10) siguió la misma línea que en el caso de tracción uniaxial. Sin embargo, los modelos de homogeneización siempre sobrestimaron más la tensión de plastificación respecto de las simulaciones numéricas en el caso de deformación cortante.

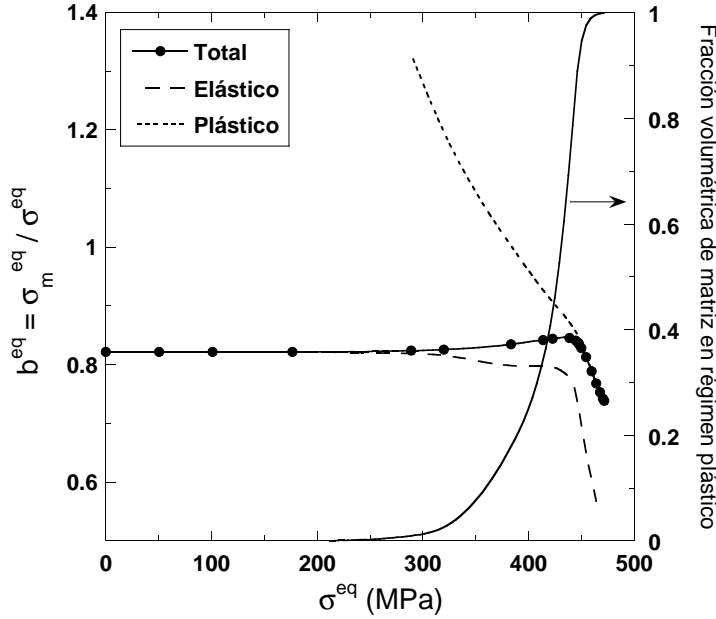


Figura 4.13: Fracción de la tensión desviadora soportada por las regiones elásticas y plásticas de la matriz en función de la tensión equivalente en el material compuesto, σ^{eq} , para una matriz sin endurecimiento por deformación. También se ha representado la evolución de la fracción volumétrica de matriz en régimen plástico

Los valores de b^{eq} que predijeron los modelos de homogeneización (Fig.4.12) son iguales en tracción uniaxial que en cortante y estas diferencias en la tensión de plastificación tienen que deberse al efecto de la tensión hidrostática. La fracción de tensión hidrostática soportada por la matriz b^h se ha dibujado en las Figs. 4.14(a) y 4.14(b) en función de la tensión hidrostática en el material compuesto, σ_h , para un material compuesto sometido a tracción uniaxial y coeficientes de endurecimiento por deformación de la matriz $n = 0.05$ y 0.40 , respectivamente. Cada figura incluye los resultados del método secante modificado con sus dos modelos de homogeneización lineal junto a los obtenidos aplicando la ecuación 4.10 a los valores proporcionados por el análisis numérico de las celdas multipartícula. Los modelos de campo medio predicen el crecimiento continuo de b^h con la deformación y convergen rápidamente a 1 tras la aparición de la plasticidad en el material. Las simulaciones numéricas mostraron, sin embargo, que la fracción de tensión hidrostática soportada por la matriz crecía más rápidamente con la deformación y era ligeramente superior (entre un 5%-6%) a la obtenida por los modelos de homogeneización. Este aumento de la tensión hidrostática en la matriz elevó ligeramente la tensión axial necesaria para producir

4.3 Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

la plastificación del material compuesto en tracción uniaxial. Por el contrario, esta contribución no apareció para la deformación en cortante, donde la componente hidrostática es despreciable.

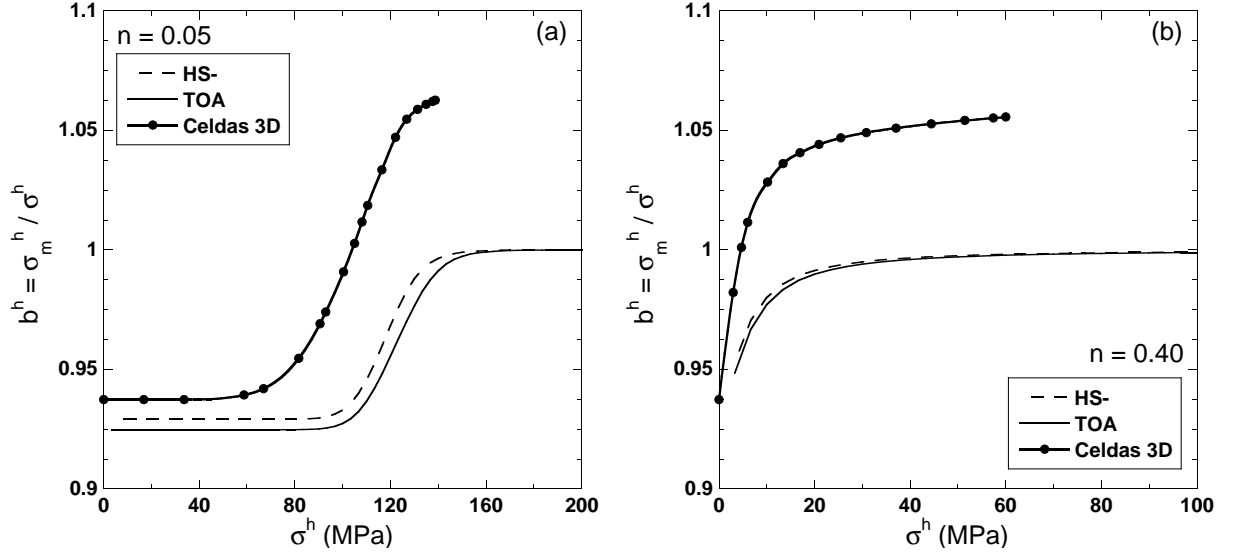


Figura 4.14: Fracción de tensión hidrostática soportada por la matriz, b^h como función de la tensión hidrostática en el material compuesto σ^h (a) $n=0.05$ (b) $n=40$. Las curvas muestran los resultados obtenidos con el método secante combinado con los dos modelos lineales de homogeneización (HS- y TOA) y mediante la simulación numérica de celdas multipartícula en 3D.

4.3. Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

El estudio de la influencia de distribución inhomogénea del refuerzo en el comportamiento mecánico se ha analizado simulando la deformación de una microestructura simple pero representativa de la distribución espacial de las partículas en los materiales compuestos. La microestructura idealizada está formada por una dispersión aleatoria de regiones esféricas con una fracción volumétrica de refuerzo muy alta (Fig. 2.5). El grado de inhomogeneidad de la microestructura se puede cuantificar a partir de la fracción volumétrica de refuerzo dentro de esas regiones esféricas y las simulaciones numéricas han permitido dilucidar el efecto de la inhomogeneidad a nivel macroscópico (comportamiento efectivo

del compuesto) y microscópico (campos de tensión y deformación locales en las partículas y matriz). Estos microcampos se utilizarán para evaluar como influye la distribución inhomogénea del refuerzo en la nucleación del daño por fractura del refuerzo en materiales compuestos.

4.3.1. Selección del volumen representativo y discretización

El tamaño del volumen representativo necesario para simular con un error acotado la deformación de materiales compuestos con microestructura inhomogénea es desconocido. Una estimación podría hacerse idealizando el material inhomogéneo como un material compuesto formado por una matriz continua reforzada con esferas de material compuesto con una alta fracción volumétrica de refuerzo que representan a los *clusters* o agregados de partículas en la microestructura inhomogénea. En estas condiciones, el contraste entre las propiedades de la matriz y de las esferas de material compuesto es inferior al que existe entre la matriz y las partículas de refuerzo y sólo es necesario incluir 7 regiones esféricas en el volumen representativo para lograr un error estadístico inferior al 5% para las constantes elásticas (Drugan y Willis, 1996; Drugan, 2000). Además, el número de partículas necesarias para obtener una dispersión aleatoria y representativa dentro de cada *cluster* sería muy parecido y se ha estimado un volumen representativo formado por 7 *clusters*, cada uno con 7 partículas esféricas en su interior. La validez del volumen representativo elegido se verificó *a posteriori* analizando la dispersión de los resultados obtenidos con distintas celdas, como se hizo para los materiales homogéneos en régimen elasto-plástico.

La discretización de las celdas unitarias fue equivalente a la usada para los materiales homogéneos (unos 500 elementos por esfera), y las mallas generadas para las microestructuras inhomogéneas alcanzaron 150000 nodos y 100000 elementos. Se aseguró que siempre hubiera un mínimo de 2 elementos entre esferas contiguas, particularmente entre las esferas de los *clusters*. Los cálculos se realizaron en un ordenador Alpha Server ES40 con cuatro procesadores y 4 Gb de memoria y el tiempo medio por cálculo para cada modelo alcanzó unas 24 horas.

4.3.2. Resultados y discusión

Se han estudiado cuatro materiales compuestos con una fracción volumétrica de refuerzo $\xi = 0.15$ y microestructuras diferentes: una estadísticamente homogénea y tres

4.3 Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

inhomogéneas, donde la fracción volumétrica de las partículas de refuerzo en los *clusters* se varió sistemáticamente según $\xi_{cl} = 0.20, 0.30$ y 0.40 . Las celdas cúbicas correspondientes a 3 de estas microestructuras se han representado en la Fig. 4.15. La celda con $\xi_{cl} = 0.40$ tiene el grado de inhomogeneidad máximo para este tipo de microestructura (sección 2.3). Para cada material se generaron cuatro celdas cúbicas diferentes con microgeometría periódica. El volumen representativo para el material homogéneo contenía 30 esferas, mientras que las celdas de los materiales con microestructura inhomogénea incluyeron 49 esferas (7 *clusters* de 7 esferas cada uno).

El comportamiento de los materiales compuestos se ha analizado con frecuencia a partir de una distribución regular de partículas en el espacio y, para estimar las ventajas y las limitaciones de esta aproximación se realizaron también simulaciones para una distribución de esferas regular cúbica centrada en el cuerpo (BCC) con simetría ortótropa y deformada en la dirección $[1\ 0\ 0]$. Este modelo regular presenta el comportamiento más próximo a un material isótropo entre todos los modelos que parten de una distribución regular de esferas (Böhm, 2000).

Las propiedades elásticas de la matriz y las partículas fueron iguales a las empleadas en la sección anterior ($K_p = 222.2$ GPa y $G_p = 166.67$ GPa para las partículas y $K_m = 62.5$ GPa y $G_m = 28.85$ GPa para la matriz). La matriz se modelizó como un sólido elasto-plástico siguiendo el criterio de plastificación de Von Mises y con endurecimiento isótropo. La evolución de la tensión de plastificación con la deformación plástica equivalente siguió de nuevo la expresión 4.6 con $A = 400$ MPa y $n = 0.15$.

Comportamiento efectivo

El comportamiento a tracción uniaxial de cada celda unitaria se simuló en tres direcciones perpendiculares y las 12 curvas tensión-deformación correspondientes al material compuesto con $\xi_{cl}=0.40$ se han dibujado en la Fig. 4.16(a). Las curvas están prácticamente superpuestas en la región elástica y mostraron poca dispersión durante la deformación plástica. La máxima diferencia entre dos curvas fue inferior al 4% para una deformación aplicada de 0.05 y la desviación estándar estuvo siempre por debajo del 1.3%. La dispersión fue menor para $\xi_{cl} = 0.2$ y 0.3 y se puede concluir que el volumen representativo elegido tenía un tamaño suficiente y que la curva tensión-deformación promedio de las 12 simulaciones realizadas para cada microestructura es representativa del comportamiento real del material compuesto.

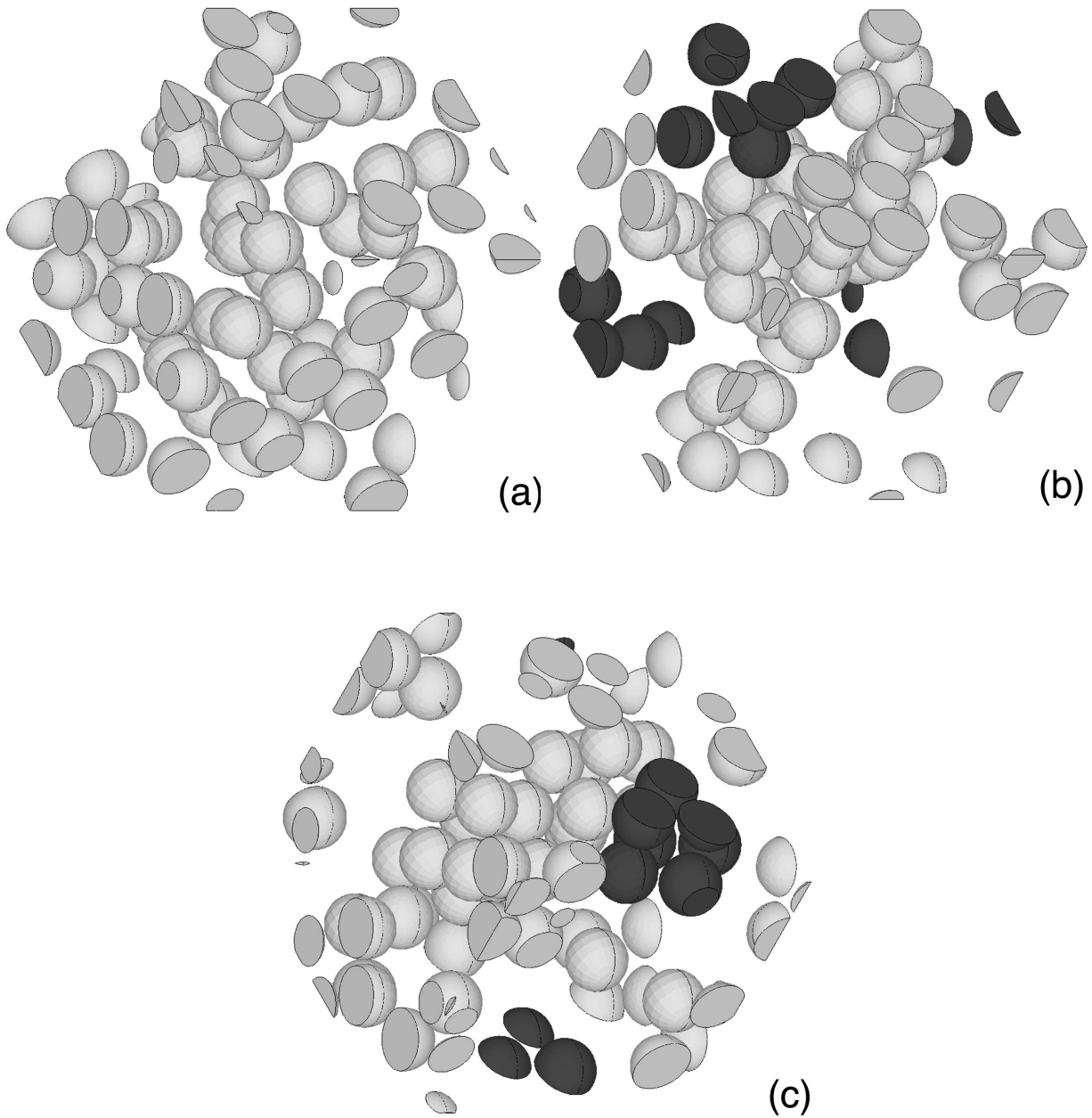


Figura 4.15: Disposición espacial de las esferas en la celda cúbica (a) Material homogéneo. (b) Material inhomogéneo con $\xi_{cl} = 0.20$, (c) Material inhomogéneo con $\xi_{cl} = 0.40$. La fracción volumétrica media de esferas es $\xi=0.15$ en todos los casos. Las esferas pertenecientes a un mismo *cluster* se han dibujado en un tono más oscuro

4.3 Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

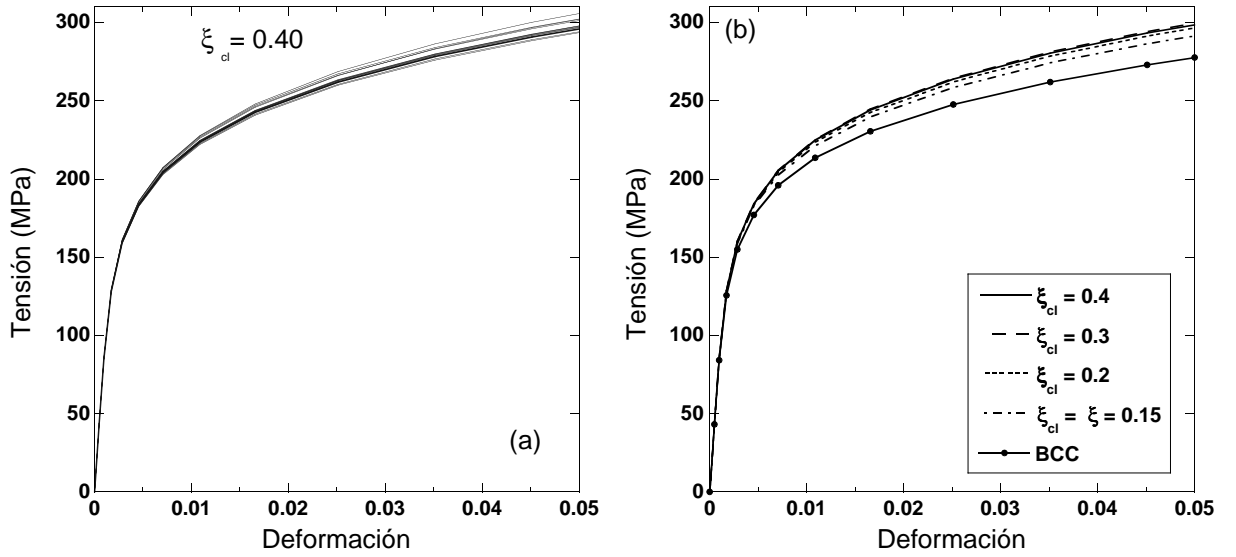


Figura 4.16: (a) Curvas tensión-deformación del material compuesto con una microestructura inhomogénea formada por una distribución aleatoria de *clusters* con $\xi_{cl} = 0.40$. (b) Curvas tensión-deformación promedio de los materiales compuestos inhomogéneos con $\xi_{cl} = 0.2, 0.3$ y 0.4 , del material homogéneo y del material reforzado con una disposición regular BCC de las partículas. La fracción volumétrica media de esferas es $\xi = 0.15$ en todos los casos.

Las curvas tensión-deformación promedio para las cuatro microestructuras simuladas (homogénea e inhomogéneas con $\xi_{cl} = 0.2, 0.3$ y 0.4) y para una distribución regular BCC de esferas se han representado en la Fig. 4.16(b). No se apreciaron diferencias significativas entre las curvas en la región elástica, mientras que la respuesta del material homogéneo en régimen plástico fue ligeramente más flexible que las de los materiales inhomogéneos. Esta diferencia fue mucho más marcada en el material compuesto con microestructura BCC, y su tensión de plastificación fue sensiblemente inferior a la obtenida en los materiales con microestructura aleatoria. La tensión de plastificación creció con el grado de inhomogeneidad para $\xi_{cl} = 0.2$ y 0.3 pero decreció ligeramente para $\xi_{cl} = 0.4$, y este resultado está de acuerdo con los resultados de Corbin y Wilkinson (1994) que también encontraron que la máxima rigidez en el comportamiento de un material inhomogéneo se alcanzaba para un grado de inhomogeneidad intermedio. Sin embargo, las máximas diferencias entre una microestructura homogénea e inhomogénea llegaban al 20% en sus cálculos, mientras que sólo alcanzaron un 2% en nuestras simulaciones numéricas. El análisis de Corbin y Wilkinson (1994) simulaba al material inhomogéneo como un compuesto bifásico donde cada fase

representaba a un material homogéneo con una fracción volumétrica de refuerzo diferente para tener en cuenta la presencia de zonas ricas y pobres en partículas. El comportamiento efectivo se calculó mediante el método autoconsistente y las propiedades de cada fase también se calcularon empleando dicho método a partir de las propiedades de la matriz y de las partículas. Es conocido que el método autoconsistente proporciona una respuesta demasiado rígida de las propiedades efectivas cuando la fracción volumétrica de refuerzo es elevada y el comportamiento de los *clusters* resultaba demasiado rígido, sobrestimando el efecto de la inhomogeneidad. Las simulaciones tridimensionales realizadas mostraron la presencia de un grado crítico de inhomogeneidad pero el incremento de resistencia mecánica que proporcionaba la heterogeneidad es prácticamente despreciable para las propiedades y fracciones volumétricas que se utilizan normalmente en materiales compuestos reforzados con partículas.

Campos de tensión y deformación locales

Las distribuciones de probabilidad acumulada para la deformación plástica y la tensión hidrostática en la matriz se han dibujado en las curvas de las Figs. 4.17(a) y 4.17(b) para una deformación aplicada de 0.05. Las curvas se calcularon a partir de las magnitudes de ambas variables en cada punto de Gauss de los elementos de la matriz y del volumen asociado a dicho punto de Gauss para los 12 cálculos realizados para cada microestructura. La Fig. 4.17(a) muestra que la distribución acumulada de la deformación plástica en la matriz fue muy semejante para todas las microestructuras aleatorias pero difirió de la obtenida para la distribución regular BCC, que es mucho más estrecha y donde la máxima deformación plástica sólo alcanzó el 12%, un valor muy inferior al registrando en las distribuciones aleatorias. La distribución de las tensiones hidrostáticas en la matriz, σ_m^h (Fig. 4.17(b)), para la estructura regular BCC volvió a ser la más estrecha seguida por el material inhomogéneo con $\xi_{cl} = 0.40$, mientras que la distribución más ancha correspondía a la microestructura estadísticamente homogénea. La anchura de la distribución de σ_m^h se correlaciona bien con la desviación estándar de la distancia al vecino más próximo, d_λ , definida en la ecuación 2.4, de forma que ambas disminuyen a la vez. Evidentemente, los valores máximos y mínimos de deformación plástica y tensión hidrostática (en valor absoluto) se desarrollan en las zonas de la matriz situadas entre partículas de refuerzo muy próximas o muy alejadas, respectivamente, que aparecen en todas las microestructuras aleatorias pero no en la red regular BCC.

4.3 Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

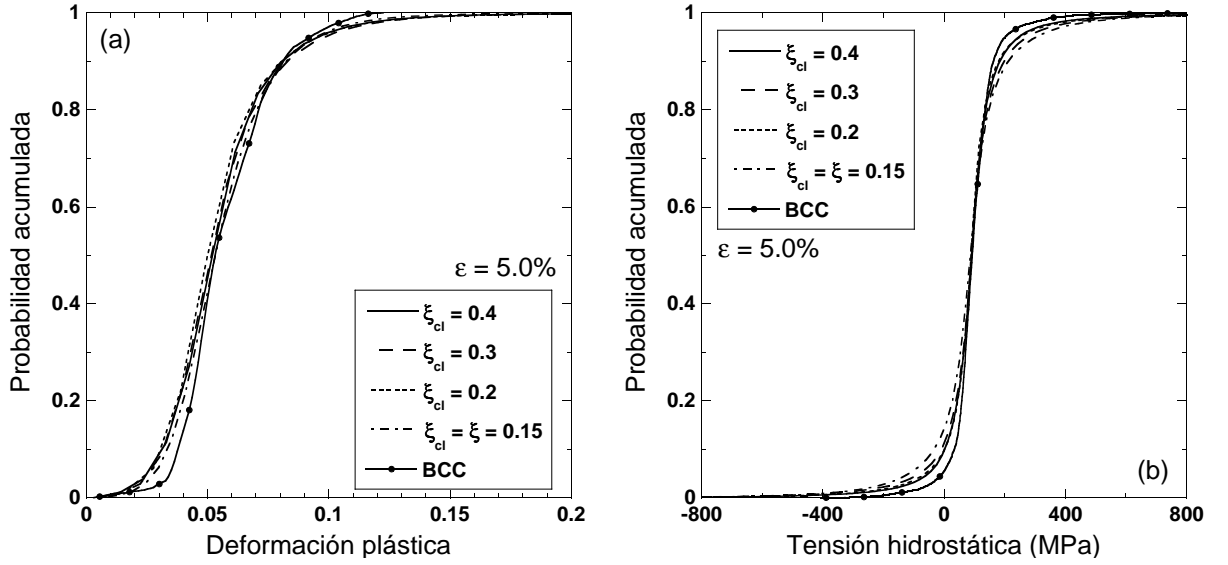


Figura 4.17: Distribuciones de probabilidad acumuladas en la matriz. (a) Deformación plástica equivalente. (b) Tensión hidrostática. La deformación externa aplicada fue $\epsilon = 0.05$

La evolución de la tensión en las partículas durante la deformación se puede analizar a partir de la media volumétrica del tensor de tensiones en cada esfera, $\bar{\sigma}_p$, que se calculó mediante

$$\bar{\sigma}_p = \frac{\sum_i \sigma_i V_i}{\sum_i V_i} \quad (4.13)$$

donde σ_i y V_i corresponden al tensor de tensiones y volumen asociados al punto de Gauss i perteneciente a una esfera. La tensión principal máxima del tensor de tensiones medio de cada partícula $\bar{\sigma}_p^I$ se determinó a partir de los autovalores de $\bar{\sigma}_p$ y la evolución del valor medio de $\bar{\sigma}_p^I$ para todas las esferas correspondientes a cada microestructura ($49 \times 12 = 588$ en los materiales inhomogéneos y $30 \times 12 = 360$ en el material homogéneo) se ha representado en la Fig. 4.18(a) en función de la deformación aplicada junto con la curva correspondiente al material BCC. Aunque las curvas tensión-deformación efectivas eran muy poco sensibles a la distribución espacial del refuerzo, las curvas de la Fig. 4.18(a) ponen de manifiesto que esta conclusión no se verifica a nivel local. El valor medio de las tensiones principales de cada partícula fue significativamente mayor en los materiales compuestos inhomogéneos y el máximo ocurrió para el material compuesto con $\xi_{cl} = 0.30$ donde $\bar{\sigma}_p^I$ alcanzó un valor superior en un 12% al encontrado en el material homogéneo. Por el contrario, la tensión principal en las partículas del material compuesto con microestructura

BCC fue muy inferior a la de los materiales con microestructuras aleatorias. La desviación estandar de $\bar{\sigma}_p^I$, dibujada en la Fig. 4.18(b) para mayor claridad, fue muy superior en los materiales con microestructuras inhomogéneas y alcanzó su valor máximo en el material con $\xi_{cl} = 0.20$. La dispersión en los valores de $\bar{\sigma}_p^I$ entre esferas de una misma microestructura

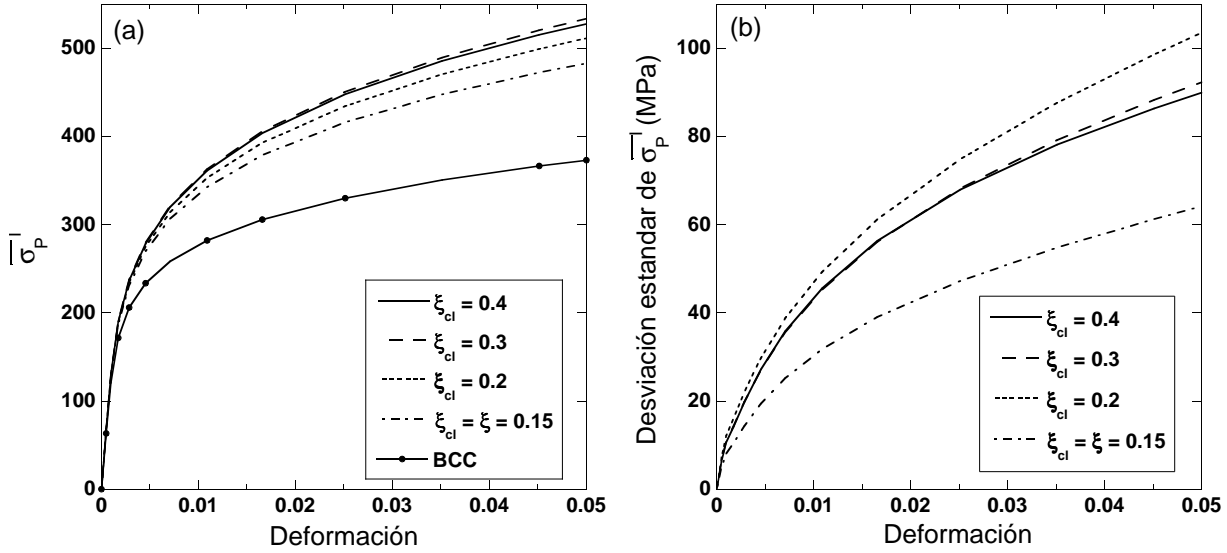


Figura 4.18: (a) Evolución de la media de la tensión principal máxima en las partículas esféricas, $\bar{\sigma}_p^I$, en función de la deformación aplicada ϵ (b) Desviación estándar de la media de la tensión principal máxima en las partículas esféricas.

puede entenderse mejor a partir de las curvas de probabilidad acumulada dibujadas en las Figs. 4.19(a), 4.19(b) y 4.19(c). La primera muestra los resultados en la región elástica ($\epsilon = 0.005\%$), la segunda corresponde a la transición elasto-plástica ($\epsilon = 0.71\%$) y la última a $\epsilon = 5\%$, cuando la deformación plástica es dominante. Estas figuras muestran que los valores mínimos de $\bar{\sigma}_p^I$ fueron similares para las cuatro microestructuras desde el principio de la deformación y que la distribución más estrecha correspondió al material homogéneo. Sin embargo, los valores máximos de la tensión principal en las esferas no se encontraron en el material con *clusters* de mayor compacidad ($\xi_{cl} = 0.4$), ni en el material con mayores tensiones medias ($\xi_{cl} = 0.3$, Fig.4.18(a)) sino en el material compuesto con $\xi_{cl} = 0.20$. Este fenómeno se observó desde el principio de la deformación, fue independiente del régimen elástico o plástico y está relacionado con las posiciones relativas entre esferas como se explica a continuación.

El valor nulo de la función de distribución radial para $r/d \approx 1$ en el material compuesto

4.3 Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

con $\xi_{cl} = 0.40$ (Fig. 2.8) mostró que los *clusters* estaban aislados dentro de la matriz en este material, y esta microestructura era equivalente a una matriz reforzada con esferas aisladas de material compuesto. La tensión en las partículas dentro de los cluster es alta y relativamente constante porque prácticamente sólo está influida por las partículas del mismo *cluster* al existir una corona relativamente ancha de matriz que separa los *clusters* contiguos. Por el contrario, los *clusters* de los materiales compuestos con $\xi_{cl}=0.20$ y 0.30 están interpenetrados unos con otros (la función de distribución radial no llega a anularse, Fig. 2.8) y la microestructura es equivalente a un red interpenetrada de dos materiales: la matriz sin reforzar y las regiones con alta fracción volumétrica de refuerzo. La mayoría de las partículas no soportan unas tensiones tan altas como en el material con $\xi_{cl} = 0.40$ al ser menor la compacidad de las esferas dentro del *cluster*. Sin embargo, algunas esferas están situadas en la intersección de dos *clusters* e interaccionan con las partículas de su propio *cluster* y del *cluster* vecino, apareciendo los máximos valores de la tensión en estas partículas.

4.3.3. Estimación de la fractura del refuerzo

Existe una amplia evidencia experimental de que la resistencia de las partículas cerámicas de refuerzo puede ser caracterizada mediante el modelo de Weibull (sección 1.3.1). La simulación numérica proporciona el tensor de tensiones σ_i en N dominios de volumen V_i de la esfera correspondientes a los puntos de Gauss de la discretización por elementos finitos. Estos resultados numéricos han demostrado que para una sollicitación en tracción uniaxial, las tensiones principales máximas en las partículas están orientadas en el eje de carga y además $\sigma_i^I \gg \sigma_i^{II}$ y σ_i^{III} y es razonable asumir que la fractura de un dominio está controlada solo por σ_i^I y su probabilidad F_i viene dada por

$$F_i = 1 - \exp \left\{ -\frac{V_i}{V_0} \left\langle \frac{\sigma_i^I}{\sigma_0} \right\rangle^m \right\} \quad (4.14)$$

donde m y σ_0 son el módulo de Weibull y la tensión característica de la partícula cerámica respectivamente, V_0 es un volumen arbitrario de referencia igual al volumen de la partícula y σ_i^I es la tensión principal máxima en el dominio. Los dominios del modelo se pueden identificar directamente con los puntos de Gauss ya que existe una solución de la tensión σ_i en cada uno de ellos y V_i es el volumen asociado al punto de Gauss.

La fractura de una esfera frágil se produce cuando falla cualquiera de los dominios que

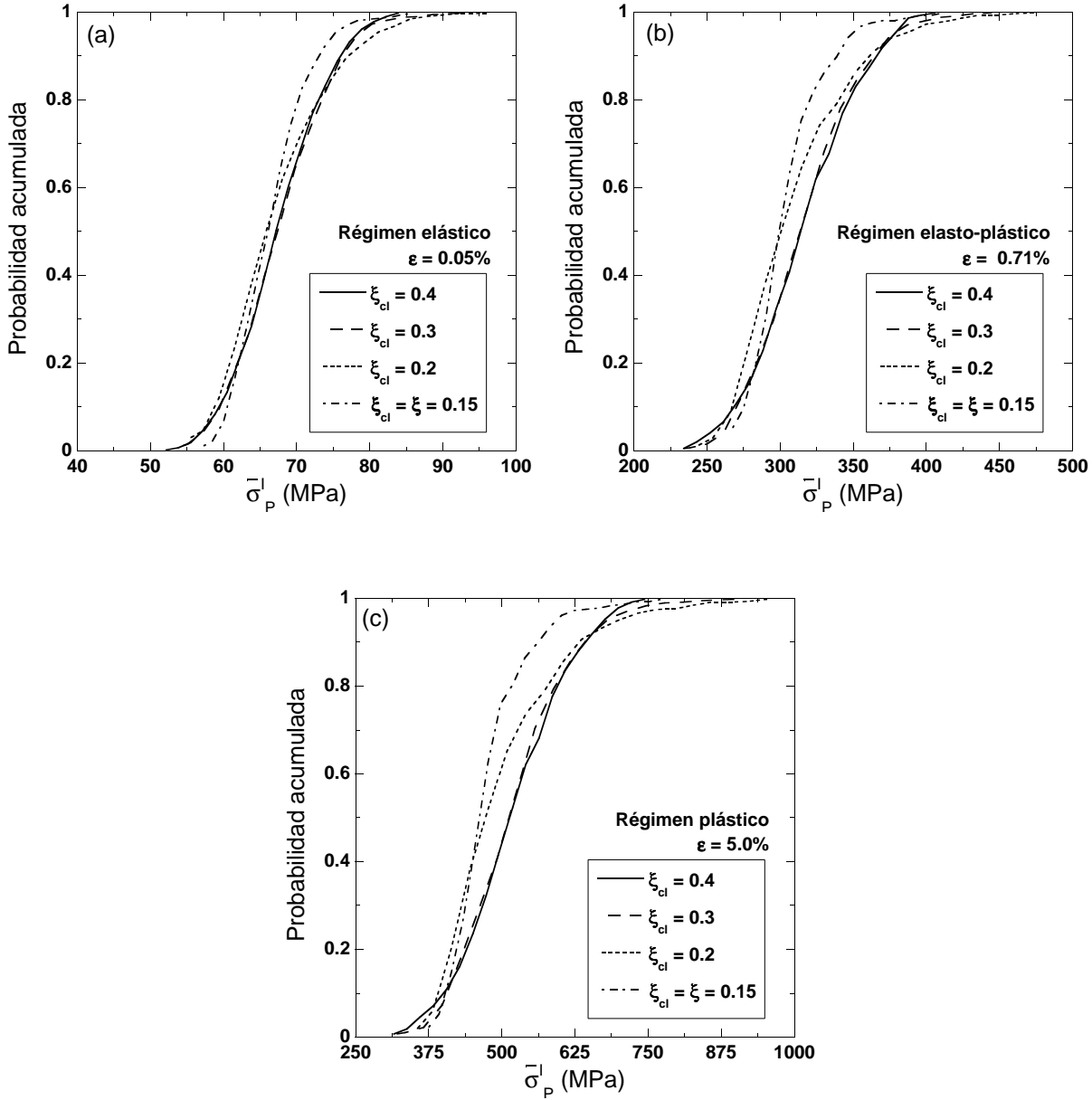


Figura 4.19: Distribuciones de probabilidad acumulada de la tensión principal máxima en las partículas $\bar{\sigma}_p^I$ en los materiales homogéneos e inhomogéneos. (a) $\epsilon = 0.05\%$. (b) $\epsilon = 0.71\%$. (c) $\epsilon = 5\%$

4.3 Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

la componen, y su probabilidad de fractura se puede expresar como

$$F = 1 - \prod_{i=1}^N \exp \left\{ -\frac{V_i}{V_0} \left\langle \frac{\sigma_i^I}{\sigma_0} \right\rangle \right\} = 1 - \exp \left\{ \sum_{i=1}^N -\frac{V_i}{V_0} \left\langle \frac{\sigma_i^I}{\sigma_0} \right\rangle \right\} \quad (4.15)$$

y se calculó para cada esfera en cada microestructura (588 esferas en los materiales compuestos inhomogéneos y 360 en los homogéneos) permitiendo estimar la fracción de partículas rotas para cada microestructura en función de la deformación como el valor medio de dichas probabilidades de fractura. Este resultado es —hablando propiamente— sólo un indicador de daño ya que no se ha tenido en cuenta la redistribución de las tensiones debido a la rotura de las partículas, pero permite analizar en primera aproximación cual es el efecto de la distribución inhomogénea del refuerzo en la nucleación del daño por fractura de las partículas cerámicas. Además, este efecto no es demasiado importante mientras la fracción total de partículas rotas sea pequeña ($\leq 10\%$) (Eckschlager et al., 2002).

Los parámetros de Weibull de las partículas cerámicas han sido estimados en numerosos estudios mediante microscopía cuantitativa (ver sección 1.3.1) y los valores encontrados están en el intervalo $1 \text{ GPa} < \sigma_0 < 2 \text{ GPa}$ con $m \approx 5$ y las predicciones para la fracción de partículas rotas en función de la deformación aplicada basadas en estos valores se han representado en las Figs. 4.20(a), 4.20(b) y 4.20(c). Las figuras muestran que la fracción de partículas rotas creció de forma dramática (en un factor de 3 a 6) en los materiales con microestructura inhomogénea frente a los materiales con microestructura homogénea para cualquier valor de la deformación aplicada. Los resultados para una disposición regular BCC del refuerzo no se han dibujado al resultar insignificantes los niveles de daño al comienzo de la deformación. La fractura de las esferas en los materiales con microestructura inhomogénea al comienzo de la deformación reduce mucho la tensión soportada por el compuesto eliminando el pequeño incremento de resistencia mecánica debido a la presencia de *clusters*. Además, el rápido desarrollo del daño lleva a un marcado descenso de la capacidad de endurecimiento por deformación y la inestabilidad plástica (que controla la ductilidad en tracción de estos compuestos) ocurre a deformaciones muy pequeñas.

En general, la fracción de partículas rotas aumentó con el grado de inhomogeneidad y el material compuesto con $\xi_{cl} = 0.40$ sufrió más daño aunque el valor medio de las tensiones principales en las partículas $\bar{\sigma}_p^I$ era superior en el material con $\xi_{cl} = 0.30$. Este resultado muestra la diferencia entre los valores máximos de la tensión principal en las partículas, que controlan la fractura de estas según la ecuación 4.15, y los valores medios en una partícula, que condicionan la respuesta efectiva global del compuesto. Además, los resultados de la

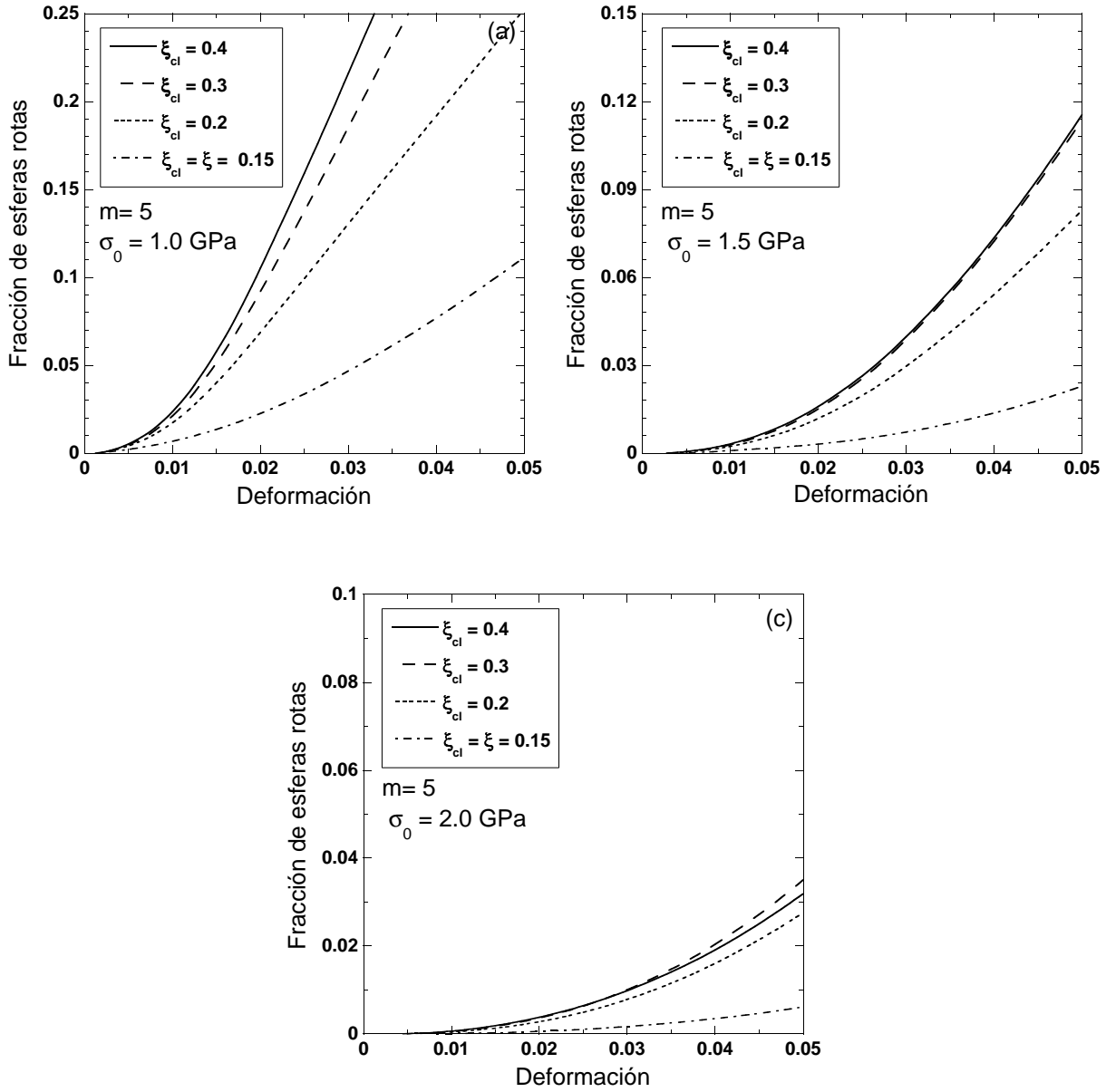


Figura 4.20: Predicción de la fracción de partículas rotas en función de la deformación aplicada para materiales compuestos con diversos grados de inhomogeneidad en la distribución de las partículas esféricas de refuerzo. $m=5$. (a) $\sigma_0=1.0$ GPa. (b) $\sigma_0=1.5$ GPa. (c) $\sigma_0=2.0$ GPa.

4.3 Deformación elasto-plástica en materiales inhomogéneos

Fig. 4.20 indican que un pequeño grado de inhomogeneidad en la microestructura (como ocurre en el material compuesto con $\xi_{cl}=0.20$) tiene consecuencias muy negativas en el comienzo del daño y —en consecuencia— en las propiedades globales del material. Estas observaciones están en completo acuerdo con los resultados experimentales de la literatura (Conlon y Wilkinson, 2001; Li et al., 1999; Poza y LLorca, 1996; Murphy et al., 1998).

CAPÍTULO 5

Simulación del daño

5.1. Decohesión de la intercara

La decohesión entre el refuerzo y la matriz es el modo de daño más frecuente en materiales compuestos cuando las partículas de refuerzo son mucho más resistentes que la matriz o el material compuesto se ensaya a alta temperatura. El primer estudio riguroso de este fenómeno en el campo de la micromecánica fue realizado por Needleman (1987) que propuso un modelo bidimensional de fisura cohesiva para simular la separación progresiva de la matriz y el refuerzo. Posteriormente, diversos autores han empleado esta representación bidimensional en el contexto de celdas axilsimétricas para simular la decohesión en un material compuesto reforzado con partículas de diferentes formas y distribuidas de forma regular en la matriz (Needleman, 1987; Nutt y Needleman, 1987), pero estos estudios no pudieron analizar el efecto de la distribución aleatoria de las partículas de refuerzo en las propiedades de los materiales compuestos. La relación entre las tensiones transmitidas por la fisura cohesiva y su apertura en el modelo de Needleman (1987) tenía, además, un inconveniente adicional: la rigidez inicial de la fisura cohesiva tiene un valor finito, determinado por la resistencia a tracción y la energía de fractura de la intercara, que puede ser muy bajo e introducir una flexibilidad ficticia que altere notablemente las distribuciones de tensiones en la matriz, las partículas y la intercara.

Para obviar estas limitaciones, en esta sección se ha simulado el daño por decohesión entre las partículas y la matriz utilizando celdas multipartícula tridimensionales. La intercara matriz/partícula se modelizó mediante un elemento finito de intercara tridimensional

que representa una fisura cohesiva. La ecuación constitutiva de la intercara siguió el modelo cohesivo de Tvergaard y Hutchinson (1993) que no presenta las limitaciones del modelo de Needleman (1987) porque la rigidez inicial es un parámetro que se puede seleccionar de manera independiente.

5.1.1. Implementación del modelo de fisura cohesiva

El primer modelo de fisura cohesiva para simular la decohesión matriz/refuerzo en un material compuesto fue propuesto por Needleman (1987) a partir de consideraciones sobre la energía de enlace de los átomos en la intercara. Posteriormente, Tvergaard y Hutchinson (1993) propusieron un modelo alternativo de índole fenomenológica que consideraba en la fractura de la intercara el efecto de las aperturas normal y tangencial entre los labios de la fisura y que incluía como parámetro independiente la rigidez inicial de la fisura.

El modelo bidimensional de Tvergaard y Hutchinson (1993) introduce una apertura generalizada de la intercara λ definida a partir de las aperturas normal y tangencial, Δu_n y Δu_t , respectivamente. El concepto de apertura generalizada se extiende al caso tridimensional proyectando la apertura tangencial Δu_t sobre dos direcciones tangentes a la fisura y perpendiculares entre sí, Δu_{t1} y Δu_{t2} , de acuerdo con

$$\lambda = \sqrt{\left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_c}\right)^2 + \left(\frac{\Delta u_{t1}}{\Delta u_{ct}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta u_{t2}}{\Delta u_{ct}}\right)^2} \quad (5.1)$$

donde Δu_c y Δu_{ct} son los valores críticos de la apertura normal y tangencial entre los labios de la fisura. Para estos valores desaparecen las tensiones transmitidas entre los labios de la grieta.

Las tensiones transmitidas entre los labios de la fisura se calculan en el modelo de Tvergaard y Hutchinson (1993) a partir de un potencial Φ expresado como

$$\Phi(\Delta u_n, \Delta u_t) = \Delta u_c \int_0^\lambda \sigma(\lambda') d\lambda' \quad (5.2)$$

de acuerdo con

$$t_n = \frac{\partial \Phi}{\partial \Delta u_n}, \quad t_{t1} = \frac{\partial \Phi}{\partial \Delta u_{t1}}, \quad t_{t2} = \frac{\partial \Phi}{\partial \Delta u_{t2}} \quad (5.3)$$

donde t_n , t_{t1} y t_{t2} son las tensiones transmitidas por la fisura en las direcciones normal y tangenciales y la función $\sigma(\lambda)$ tiene forma triangular (Fig. 5.1). Esta función representa la tensión normal transmitida por la fisura (normalizada por t_c) en función de la apertura

5.1 Decohesión de la intercara

normal de los labios de la grieta cuando las aperturas tangenciales son nulas. El modelo original (Tvergaard y Hutchinson, 1993) no tenía en cuenta la degradación progresiva de la rigidez de la intercara al superarse la tensión t_c . Esta limitación se ha superado en el presente modelo, y la rigidez inicial de la fisura E_i decrece progresivamente al producirse la rotura de la intercara, de acuerdo con la Fig. 5.1. Esa dependencia se expresa matemáticamente como

$$\sigma(\lambda) = \begin{cases} E_i \lambda & \text{si } \lambda \leq t_c/E_i \\ t_c - \frac{\lambda - t_c/E_i}{1 - t_c/E_i} t_c, & \text{si } \lambda > t_c/E_i \text{ y } \lambda \geq \lambda^* \\ \left(t_c - \frac{\lambda^* - t_c/E_i}{1 - t_c/E_i} t_c \right) \left(\frac{\lambda}{\lambda^*} \right), & \text{si } \lambda > t_c/E_i \text{ y } \lambda < \lambda^* \end{cases} \quad (5.4)$$

donde E_i —que tiene dimensiones de tensión— es la rigidez inicial relativa de la intercara, t_c es la máxima tensión normal que puede transmitir la intercara y λ^* es la máxima apertura generalizada de la intercara durante toda la historia de la deformación. Es preciso indicar aquí que la rigidez real de la intercara —con dimensiones de tensión dividida por unidad de longitud— también depende de Δu_c y viene dada por $E_i/\Delta u_c$.

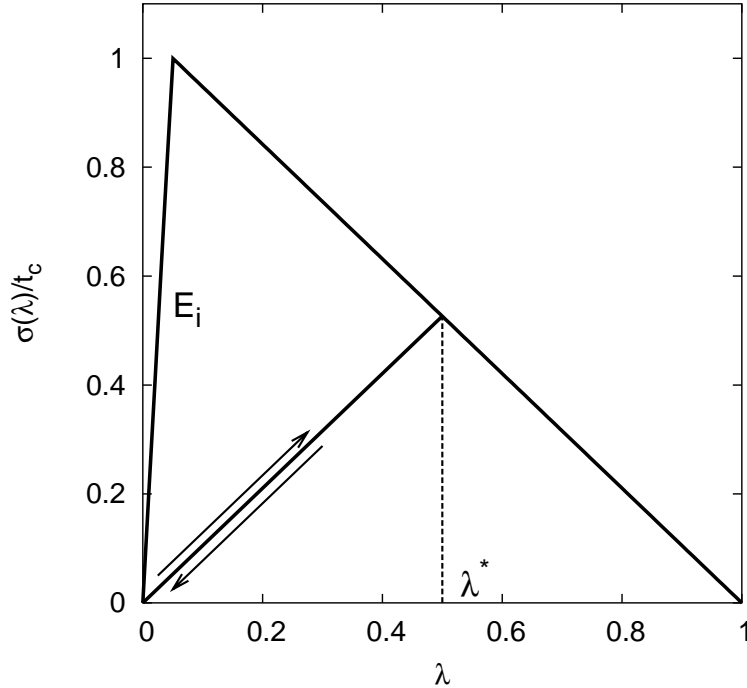


Figura 5.1: Función $\sigma(\lambda)$ incluyendo la degradación de la rigidez de la fisura en función de la apertura generalizada λ .

Los parámetros necesarios para caracterizar el proceso de decohesión en este modelo

son la resistencia a tracción de la intercara, t_c , la energía de fractura de la intercara, Γ_{in} , y la relación entre las aperturas críticas en la dirección tangencial y normal, $\gamma = \Delta u_{ct}/\Delta u_c$. Este último parámetro suele tomarse igual a 1 para procesos de fractura dominados por tensiones normales. La apertura normal crítica, Δu_c , está relacionada con la energía de fractura y la resistencia a tracción según

$$\Gamma_{in} = \frac{1}{2} t_c \Delta u_c \quad (5.5)$$

Este modelo cohesivo se implementó en el elemento de intercara tridimensional (desarrollado en la sección 3.4) que es compatible con los tetraedros cuadráticos C3D10M de Abaqus. El vector \mathbf{t}_{loc} se obtuvo derivando el potencial de la ecuación 5.2 respecto del vector de apertura de grieta en ejes locales $\Delta \mathbf{u}_{loc} = (\Delta u_n, \Delta u_{t1}, \Delta u_{t2})^T$. Para una relación entre la apertura críticas tangencial y normal $\gamma = 1$, dicho vector puede escribirse como

$$\mathbf{t}_{loc} = \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial \Delta \mathbf{u}_{loc}} = \sigma(\lambda) \begin{pmatrix} \frac{\partial \lambda}{\partial \Delta u_n} \\ \frac{\partial \lambda}{\partial \Delta u_{t1}} \\ \frac{\partial \lambda}{\partial \Delta u_{t2}} \end{pmatrix} = \frac{\sigma(\lambda)}{\lambda} \begin{pmatrix} \frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \\ \frac{\Delta u_{t1}}{\Delta u_c} \\ \frac{\Delta u_{t2}}{\Delta u_c} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

y el tensor de rigidez tangente local \mathbf{C}_{loc} se calculó a partir de

$$\mathbf{C}_{loc} = \frac{\partial \mathbf{t}_{loc}}{\partial \Delta \mathbf{u}_{loc}} \quad (5.7)$$

resultando

$$\frac{1}{u_c} \begin{pmatrix} G(\lambda) \left(\frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \right)^2 + \frac{\sigma(\lambda)}{\lambda} & G(\lambda) \frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \frac{\Delta u_{t1}}{\Delta u_c} & G(\lambda) \frac{\Delta u_n}{\Delta u_c} \frac{\Delta u_{t2}}{\Delta u_c} \\ G(\lambda) \left(\frac{\Delta u_{t1}}{\Delta u_c} \right)^2 + \frac{\sigma(\lambda)}{\lambda} & 0 & \\ G(\lambda) \left(\frac{\Delta u_{t2}}{\Delta u_c} \right)^2 + \frac{\sigma(\lambda)}{\lambda} & & \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

donde la función $G(\lambda)$ viene expresada por

$$G(\lambda) = \frac{1}{\lambda^2} \left[\frac{d\sigma(\lambda)}{d\lambda} - \frac{\sigma(\lambda)}{\lambda} \right] \quad (5.9)$$

Selección de la rigidez inicial

Uno de los principales inconvenientes de los modelos que simulan la fractura mediante elementos de intercara es que hay que introducir una rigidez inicial ficticia entre los labios de la grieta. Esta rigidez es infinita en la realidad pero un valor de la rigidez inicial demasiado alto en el modelo numérico ocasiona serios problemas de convergencia debido al mal

5.1 Decohesión de la intercara

condicionamiento de la matriz de rigidez. Por otro lado, un valor inicial pequeño introduce una flexibilidad artificial en la estructura y modifica sustancialmente las tensiones junto a la grieta. Así, la rigidez inicial debe ser un compromiso entre un valor suficientemente elevado para no modificar las tensiones entorno a la grieta y otro suficientemente bajo para evitar problemas de convergencia. Esta elección debe hacerse para cada tipo de problema en función de las propiedades de los materiales y las características de la estructura.

La determinación de la rigidez inicial relativa del modelo, E_i , para simular la decohesión entre partículas cerámicas y una matriz metálica se realizó simulando la deformación a tracción uniaxial de una celda cilíndrica (Fig. 5.2) de altura $2L$ con una partícula esférica en el centro. El tamaño de los elementos de la malla fue igual al empleado en los modelos multipartícula y se introdujeron elementos cohesivos entre la matriz y la esfera.

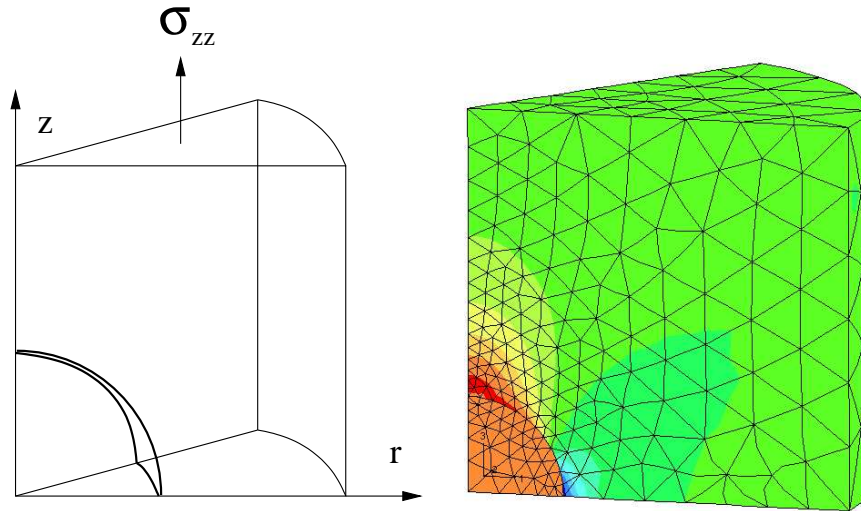


Figura 5.2: Simulación de un ensayo de tracción uniaxial en la dirección z de una celda axilsimétrica. En la figura de la derecha se han representado las curvas de isotensión equivalente en la matriz y la partícula

Se realizaron las simulaciones en régimen elástico asumiendo un estado de tracción uniaxial a lo largo del eje z . Se simularon partículas con un radio de $30 \mu\text{m}$ y los parámetros de la intercara fueron los mismos que se usaron posteriormente en las simulaciones con las celdas multipartícula (energía de fractura $\Gamma_{in} = 400 \text{ J/m}^2$ y resistencia a tracción $t_c = 500 \text{ MPa}$). La rigidez relativa de la intercara, E_i , se varió de forma sistemática y además se realizó una simulación sin elementos de intercara.

La evolución de la componente axial del tensor de tensiones σ_{zz} (normalizada por la

tensión media de tracción soportada por la celda, σ_0) a lo largo del eje z de la celda se ha representado en la Fig. 5.3 para diferentes valores de E_i . La figura muestra como las tensiones en el modelo varían de forma drástica con la rigidez inicial de la intercara. Así, el modelo de Needleman (1987) proporciona una rigidez inicial cercana a 5 GPa (Fig. 5.3) para los valores de Γ_{in} y t_c elegidos y no permite calcular con precisión la distribución de tensiones en el material compuesto. Los valores de E_i mayores de 500 GPa creaban serios problemas de convergencia y se optó por emplear $E_i = 100$ GPa en nuestras simulaciones. Este valor, que corresponde a una rigidez real de $1.875 \cdot 10^6$ MPa/m para la intercara, subestima la tensión en las partículas en sólo un 3% y proporciona una convergencia adecuada.

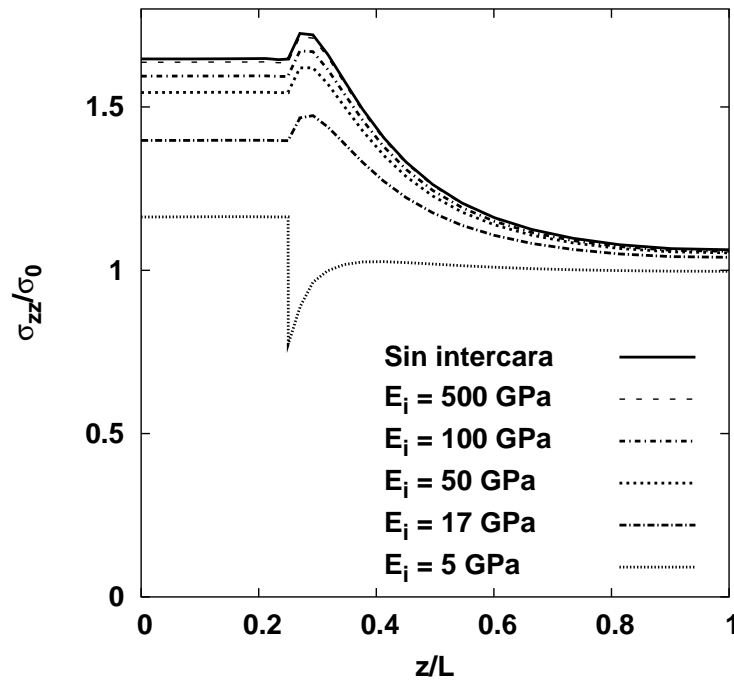


Figura 5.3: Perfiles de tensión axial a lo largo de el eje de la celda para diferentes valores de la rigidez inicial de la intercara, E_i .

5.1.2. Volumen representativo y discretización

La influencia de la distribución espacial de las partículas en el daño por decohesión se estudió empleando microestructuras estadísticamente homogéneas e inhomogéneas donde las partículas estaban agrupadas formando *clusters* esféricos. La complejidad de los cálculos

5.1 Decohesión de la intercara

con daño impuso una limitación al tamaño de los modelos y se utilizaron celdas con 7 *clusters* de 5 partículas cada uno. Las celdas de los materiales estadísticamente homogéneos también tenían 35 partículas en su interior. El error cometido debido al tamaño finito de las celdas multipartícula se evaluó a partir de la dispersión en los resultados de las simulaciones con distintas celdas.

El modelo se discretizó mediante elementos tetraédricos modificados de 10 nodos (C3D10M en Abaqus). La discretización de cada partícula se realizó con unos 500 elementos y los modelos resultantes tenían ≈ 110000 nodos y ≈ 70000 elementos. La introducción de los elementos de intercara en los modelos de elementos finitos se automatizó mediante un programa. Las superficies de las partículas (fisuras) se mallaron con triángulos de 6 nodos y el programa calculaba qué elementos sólidos estaban a cada lado de las superficies a partir de las normales a las superficies calculadas mediante las funciones de forma de los triángulos. Se duplicaron los nodos de dichas superficies y se modificó la conectividad de los elementos situados hacia la normal con los nuevos nodos. Por último, el elemento triangular de 6 nodos se sustituyó por un elemento de intercara de 12 nodos: los 6 originales y los 6 duplicados.

Los cálculos se realizaron en un ordenador Alpha Server ES40 con cuatro procesadores y 4Gb de memoria. El tiempo medio de cálculo de cada modelo fue de una semana.

5.1.3. Resultados y discusión

Se ha estudiado un material compuesto con una fracción volumétrica de partículas $\xi = 0.15$ y se han modelizado dos microestructuras: una homogénea y otra inhomogénea donde la fracción volumétrica local de partículas en cada *cluster* se aproximó al máximo valor posible para 5 esferas, $\xi_{cl} = 0.37$. Las constantes elásticas de la matriz y de las partículas fueron iguales a las empleadas en otras simulaciones de la tesis ($E_p = 400$ GPa y $\nu_p = 0.2$ para las esferas y $E_m = 70$ GPa y $\nu_m = 0.33$ para la matriz). La matriz modelizó como un sólido elasto-plástico siguiendo el criterio de plastificación de Von Mises y con endurecimiento isótropo. La evolución de la tensión de plastificación con la deformación plástica equivalente vino expresada de nuevo por la ecuación 4.6 con $A = 400$ MPa y $n = 0.15$. Las simulaciones se realizaron en el contexto de grandes deformaciones.

La intercara matriz/partícula se simuló mediante el modelo de Tvergaard y Hutchinson (1993), modificado según se ha descrito más arriba. El radio de las partículas —el modelo

cohesivo introduce una longitud efectiva en las simulaciones— se eligió igual a $30 \mu\text{m}$. La rigidez inicial de la intercara fue $E_i = 100 \text{ GPa}$ y la energía de fractura se tomó igual a 400 J/m^2 , que está dentro del rango experimental de $200\text{-}600 \text{ J/m}^2$ para las intercaras Al/Al₂O₃ McNaney et al. (1996); Evans et al. (1999). La resistencia a tracción, t_c , de las intercaras se ajustó a un modelo de Weibull con parámetros $m = 5$ y $t_{c0} = 500 \text{ MPa}$. El valor de t_c para cada intercara se determinó generando aleatoriamente un número N entre 0 y 1 y la correspondiente resistencia a tracción se calculó de acuerdo con el modelo de Weibull como

$$t_c = t_{c0} (-\ln(1 - N))^{1/m} \quad (5.10)$$

Estos valores de la resistencia a tracción de la intercara son típicos para materiales compuestos de matriz de aluminio reforzados con partículas cerámicas y muy similares a los medidos experimentalmente para refuerzos de forma esférica (Babout et al., 2004).

Comportamiento efectivo

El comportamiento a tracción uniaxial de cada celda unitaria se simuló en dos direcciones perpendiculares para cada modelo. Las cuatro curvas obtenidas para cada microestructura (homogénea e inhomogénea) se han dibujado en la Fig. 5.4 donde aparecen los resultados obtenidos con y sin decohesión en la intercara. Las curvas aparecen superpuestas en la región elástica y la máxima desviación estándar de las curvas fue de un 1% en el material homogéneo y menor de un 0.5% en el inhomogéneo. El número de simulaciones realizado por cada microestructura fue reducido debido al elevado coste computacional, pero el pequeño valor de la desviación estándar entre los diferentes modelos indicó que el tamaño del volumen representativo era adecuado para la fracción volumétrica y propiedades de las fases elegidas, y que la solución obtenida está próxima a la solución exacta del problema para una celda de tamaño indefinido.

El material con microestructura inhomogénea presentó una respuesta más rígida que el material homogéneo en ausencia de daño, de acuerdo con los resultados detallados en la sección 4.3, pero las diferencias en la tensión fueron siempre inferiores al $\approx 3\%$. La presencia del daño por decohesión redujo de manera apreciable la resistencia mecánica de los materiales compuestos: aproximadamente un 4% para las microestructuras homogéneas y un 11% para las inhomogéneas para una deformación $\epsilon = 8\%$.

Evidentemente, los materiales con microestructura inhomogénea fueron más sensibles

5.1 Decohesión de la intercara

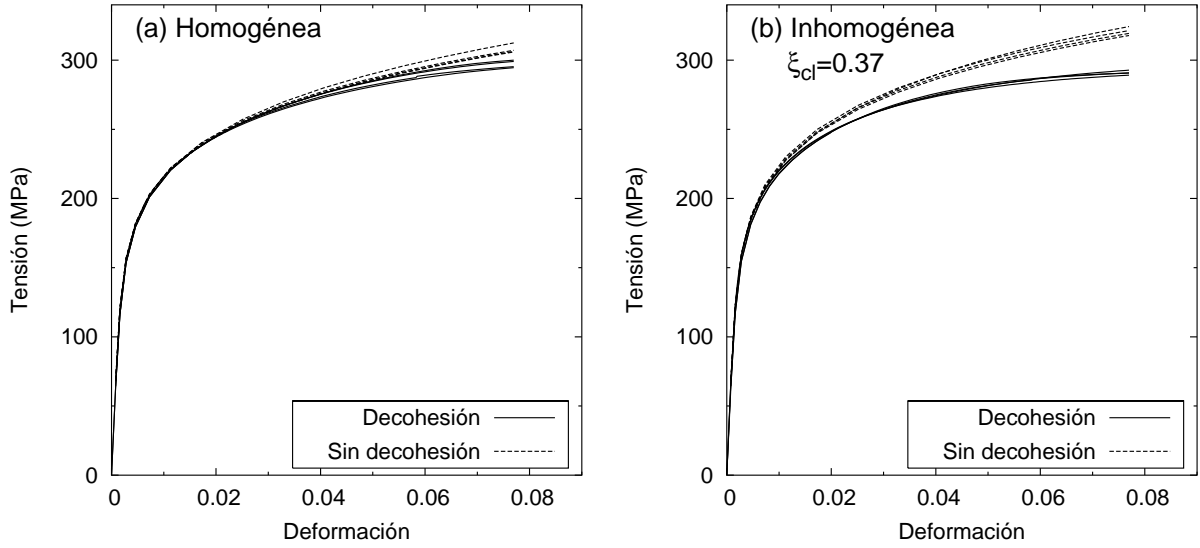


Figura 5.4: Curvas tensión-deformación para un material compuesto con $\xi = 0.15$ con y sin daño por decohesión de la intercara (a) Microestructuras homogéneas (b) Microestructuras inhomogéneas

al daño por decohesión en la intercara al igual que sucedía cuando el daño era inducido por la fractura de las partículas de refuerzo. En efecto, las curvas tensión-deformación de ambos materiales (homogéneos e inhomogéneos) se superpusieron cuando se incluye el efecto de la decohesión y el incremento en la rigidez producida por la agregación de las partículas fue compensada con la reducción de la tensión debida a la decohesión de las intercara, que ocurrió antes y tuvo mayor importancia en el material con microestructura inhomogénea.

La forma de las curvas tensión-deformación con decohesión fue suave y no se observaron discontinuidades por la fractura de las intercara ya que su rotura es dúctil y progresa lentamente con la deformación plástica debido al valor de la energía de fractura de las intercara (400 J/m^2). Este comportamiento facilitó la convergencia de los cálculos y permitió emplear un control en desplazamientos para calcular la curva tensión-deformación.

La aparición del daño en los materiales compuestos reforzados con partículas produce una reducción muy notable de su capacidad de endurecimiento por deformación que se traduce en una disminución de la resistencia a tracción y de la ductilidad. Existe una amplia evidencia experimental de que la rotura en tracción de los materiales compuestos de matriz metálica se produce inmediatamente después de alcanzarse la inestabilidad plástica (Kiser et al., 1996; González y LLorca, 1996). En consecuencia, la ductilidad en tracción, ϵ_u , y la

correspondiente resistencia a tracción, σ_u , pueden aproximarse a partir de la condición de Considère

$$\sigma = \frac{d\sigma}{d\epsilon} \quad (5.11)$$

donde σ es la tensión aplicada y $d\sigma/d\epsilon$ es la capacidad de endurecimiento por deformación. Este criterio también puede aplicarse para predecir el comienzo de la inestabilidad plástica en materiales compuestos de matriz metálica reforzados con partículas porque la deformación volumétrica debida a la deformación elástica del refuerzo y a la generación de huecos en la matriz y en las intercaras es muy pequeña (Weber et al., 1999)

La ductilidad y la resistencia a tracción de las curvas de la Fig. 5.4 de acuerdo con el criterio de Considère se han recogido en la tabla 5.1 para los materiales con daño. La condición de Considère no se llegó a alcanzar para la deformación máxima de las simulaciones en los materiales sin daño. Sin embargo, es fácil estimar que la ductilidad del material compuesto en ausencia de daño debe ser del orden del coeficiente de endurecimiento por deformación de la matriz.

		Homogéneo	Heterogéneo
$\sigma_u (MPa)$	Con decohesión	297 ± 2	288 ± 3
$\epsilon_u (\%)$	Sin decohesión	≈ 0.15	≈ 0.15
	Con decohesión	7.5 ± 0.2	6.6 ± 0.5

Cuadro 5.1: Valores medios de la ductilidad, ϵ_u , y de la resistencia a tracción, σ_u , en materiales compuestos con microestructuras homogéneas e inhomogéneas

Estos resultados demuestran como la presencia de daño por decohesión en la intercara redujo drásticamente la ductilidad del 15% al 7.6% en los materiales con una microestructura homogénea. La presencia de *clusters* en la microestructura hizo caer aun más la ductilidad del material compuesto, como se ha observado recientemente de forma experimental (Spowart et al., 2003).

La nucleación de daño en una partícula (ya sea por su rotura o por la decohesión de su intercara con la matriz) elimina su efecto reforzante y produce una disminución de la fracción volumétrica de refuerzo efectivo. Macroscópicamente, este hecho se manifiesta en una pérdida de rigidez del material compuesto que ha sido observada experimentalmente mediante descargas periódicas durante un ensayo a tracción (LLorca et al., 1993; Liu y Lewandowski, 1993). Durante las simulaciones numéricas se realizaron ciclos de carga-descarga para deformaciones del 2, 4, 6 y 8% y la evolución de la media del módulo de

5.1 Decohesión de la intercara

elasticidad E , adimensionalizado con respecto al valor medio inicial E_0 , se ha representado en la figura 5.5 en función de la deformación plástica. La degradación del módulo

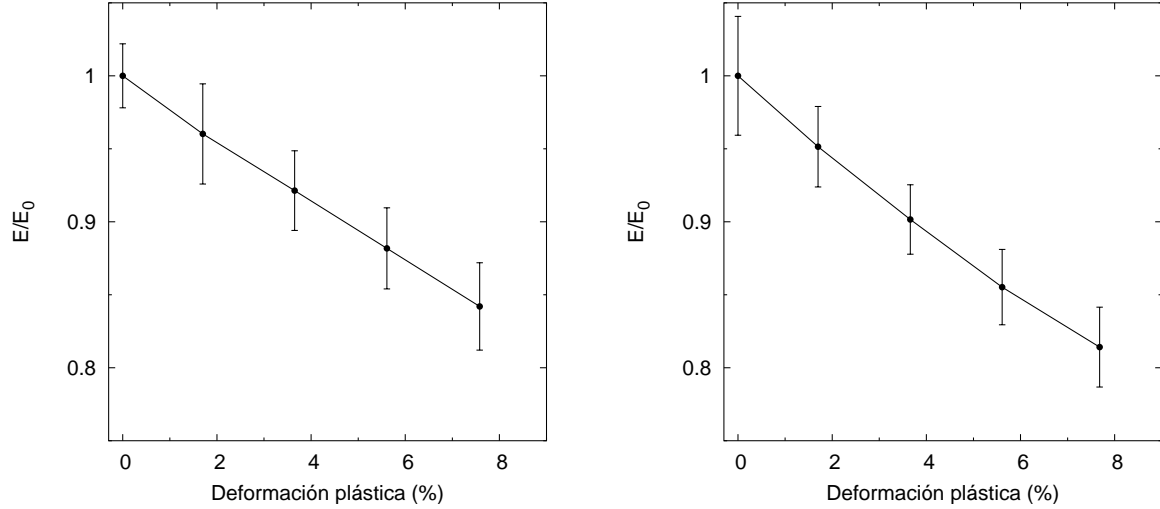


Figura 5.5: Evolución del módulo de elasticidad en función de la deformación plástica (a) Microestructura homogénea (b) Microestructura inhomogénea. Las barras de error representan la desviación estándar para las simulaciones numéricas

de elasticidad con la deformación aplicada es aproximadamente lineal y más rápida en la microestructura inhomogénea. La reducción del módulo de elasticidad para una deformación aplicada de un 8% alcanzó $\approx 15\%$ en la microestructura homogénea y $\approx 18\%$ en la inhomogénea. Tanto la relación lineal de la degradación del módulo de elasticidad con la deformación como la magnitud absoluta de la pérdida de rigidez se aproxima bastante bien a los resultados experimentales de la literatura para este tipo de materiales (LLorca et al., 1993; Liu y Lewandowski, 1993; Zhao y Weng, 1996; Babout et al., 2001).

Estudio local de la decohesión

El modelo micromecánico permitió estudiar la evolución de los microcampos de tensión y deformación en las fases y comparar los patrones de decohesión a nivel microscópico con las observaciones experimentales de otros autores (Whitehouse y Clyne, 1993; Kanetake et al., 1995; Babout et al., 2001).

Las Figs. 5.6(a) y 5.6(b) muestran una cara de la celda multipartícula para una deformación aplicada $\epsilon = 8\%$ en los materiales con microestructura homogénea y inhomogénea, respectivamente. Las intercaras matriz/partícula decohesionadas se han señalado con fle-

chas en la figura y el patrón de decohesión concuerda perfectamente con las observaciones experimentales para estos materiales: la decohesión se concentró en los polos de las partículas, siguiendo la dirección de la tensión principal. La decohesión comenzó cuando se superaba la resistencia a tracción de la intercara y el hueco generado creció con la deformación. Las partículas donde apareció la decohesión estaban muy cercanas a otra partícula y ambas se encontraban orientadas según el eje de carga. El número de partículas decohesionadas fue mayor en el material con *clusters* (Fig. 5.6(b)) debido a la concentración de tensiones dentro de las zonas inhomogéneas y el mayor número de partículas decohesionadas en los materiales inhomogéneos produjo una reducción más severa de la tensión soportada por el material compuesto. Además, los patrones de decohesión encontrados son idénticos a los observados experimentalmente (Babout et al., 2001, 2004) y el modelo capturó perfectamente la nucleación y el crecimiento por deformación plástica de los huecos generados por decohesión. Es importante también destacar que las partículas sin decohesionar y la matriz permanecieron perfectamente unidas y que no se observó ningún tipo de distorsión en los campos de tensión debido a la presencia de los elementos de intercara.

El daño en los materiales compuestos se manifiesta en un incremento del volumen del material debido a los huecos que se generan en la microestructura. La deformación volumétrica de las celdas multipartículas puede obtenerse fácilmente, y su evolución en función de la deformación aplicada se ha representado en la Fig. 5.7 para las microestructuras homogéneas e inhomogéneas con y sin daño por decohesión de la intercara. El aumento del volumen con la deformación en régimen plástico fue muy pequeño en ausencia de daño para ambas microestructuras y la pequeña deformación volumétrica se debe a la deformación elástica de la matriz y de las esferas de refuerzo y es algo superior en el material inhomogéneo porque la tensión soportada por las partículas es mayor. La decohesión produjo un aumento muy importante de la deformación volumétrica, que aparece al comenzar la plastificación del material compuesto y demuestra que la decohesión se inicia al comienzo de la deformación plástica. La inhomogeneidad de la microestructura se manifestó muy claramente en esta figura y el aumento de volumen debido a la generación de huecos en las intercaras es prácticamente el doble en el material inhomogéneo frente al homogéneo.

Por último, es interesante estudiar el efecto de la decohesión en las tensiones de las partículas de refuerzo. Desde el punto de vista cualitativo, este resultado se encuentra recogido en la Fig. 5.9(b) donde se han representado los contornos de isotensión equivalente en la superficie de las partículas cerámicas correspondientes a la microestructura

5.1 Decohesión de la intercara

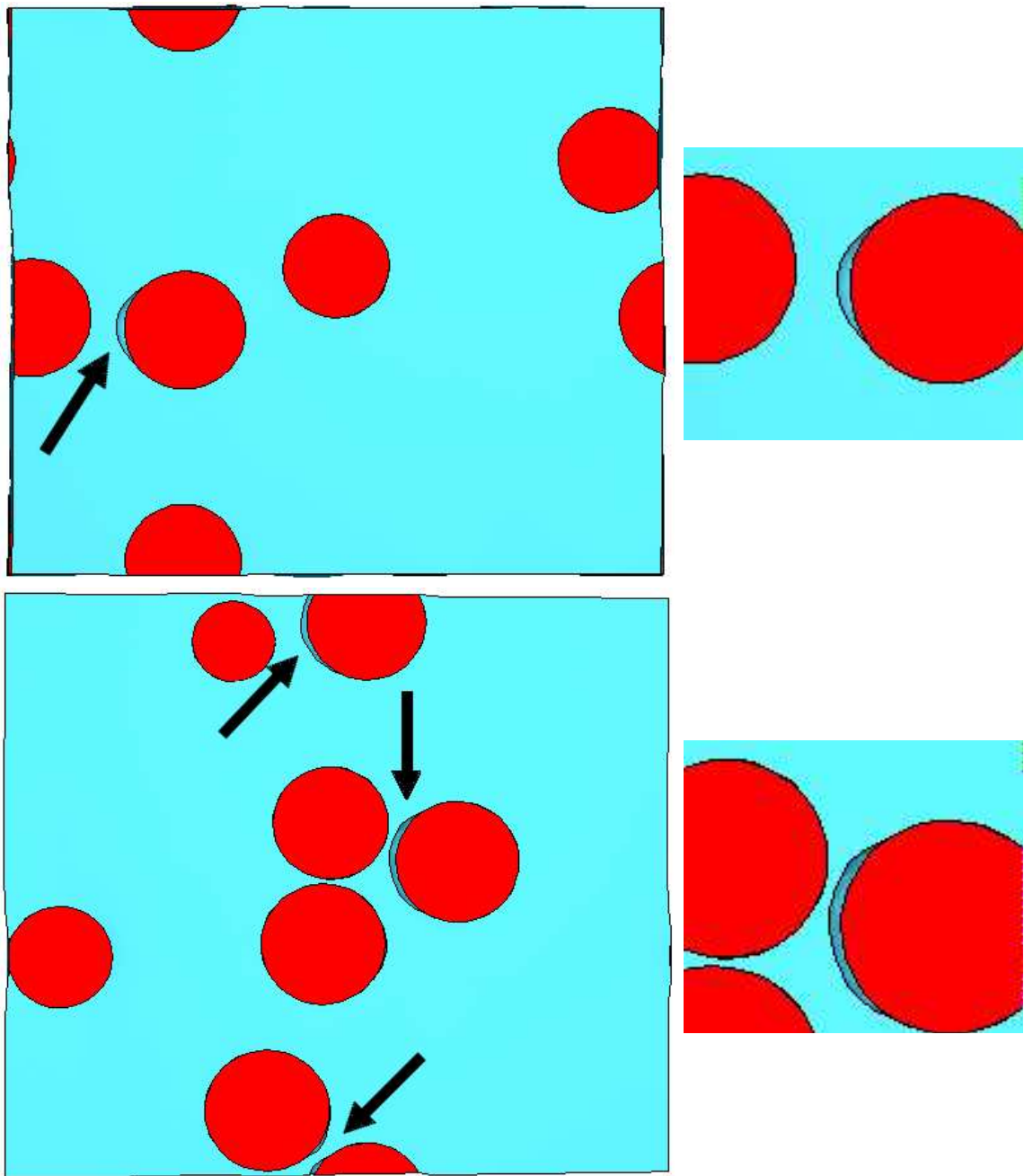


Figura 5.6: Patrones de decohesión entre las partículas y la matriz para una deformación del 8 % (a) Microestructura homogénea. (b) Microestructura con inhomogénea. La tensión uniaxial está aplicada en dirección horizontal. Los huecos generados por la decohesión se ha señalado con flechas

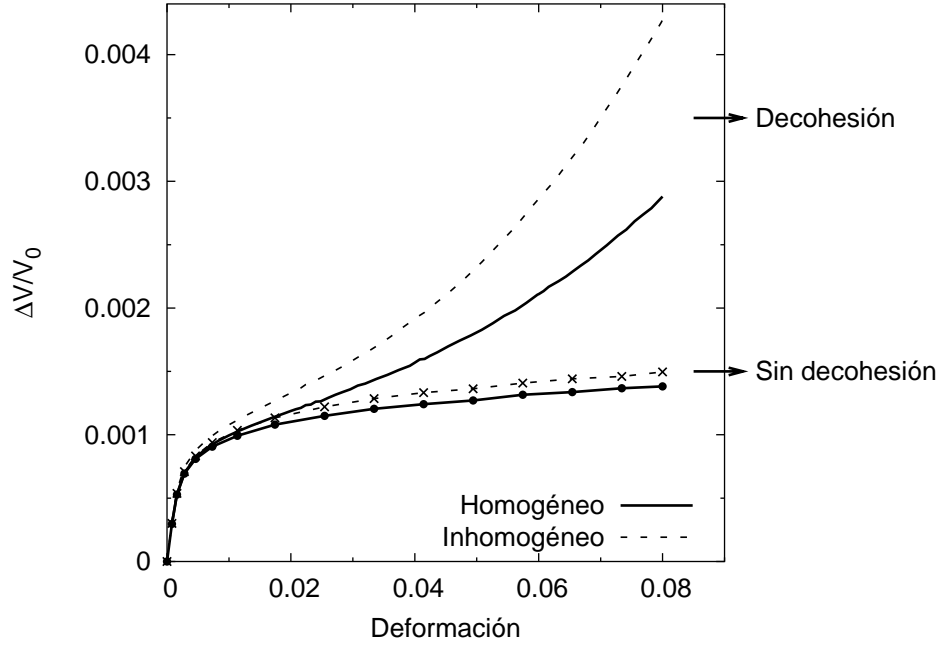


Figura 5.7: Evolución de la deformación volumétrica de los materiales compuestos en función de la deformación aplicada para microestructuras homogéneas y e inhomogéneas con y sin decohesión

homogénea para $\epsilon = 8\%$ en tracción y cuya deformada se ha representado en la Fig. 5.9(a). La tensión equivalente en las partículas decohesionadas (señaladas con una flecha) es nula cerca de la decohesión y aumenta hacia el interior de la partícula aunque es inferior a la tensión en las partículas que no han sufrido daño en la intercara.

El efecto de la decohesión en la tensión soportada por las partículas se ha estudiado cuantitativamente a partir del valor de la tensión equivalente de cada esfera, $\bar{\sigma}_p^{eq}$, que se calcula a partir del tensor de tensiones medio en dicha esfera para cada valor de la deformación según

$$\bar{\sigma}_p = \frac{\sum_i \sigma_i V_i}{\sum_i V_i} \quad \text{y} \quad \bar{\sigma}_p^{eq} = \left[\frac{3}{2} (\mathbf{K} \bar{\sigma}_p) (\mathbf{K} \bar{\sigma}_p) \right]^{1/2} \quad (5.12)$$

donde σ_i y V_i son, respectivamente, el tensor de tensiones y el volumen en el punto de Gauss i de una partícula. La evolución del valor medio de $\bar{\sigma}_p^{eq}$ para todas las esferas correspondientes a cada modelo se ha dibujado en función de la deformación aplicada en la Fig. 5.8. Evidentemente, $\bar{\sigma}_p^{eq}$ crece con la deformación en ausencia de decohesión pero alcanzó un máximo en los materiales con daño. Este efecto fue mucho más acusado en los

5.1 Decohesión de la intercara

materiales con microestructura inhomogénea donde la tensión que soportaron las partículas en ausencia de daño fue un 40 % superior a la soportada en presencia de decohesión para $\epsilon = 8\%$. Es interesante señalar que la tensión equivalente máxima soportada por las partículas fue prácticamente igual a la resistencia a tracción de la intercara (500 MPa). Este resultado puede tener importantes aplicaciones para el desarrollo de nuevos modelos de campo medio que incluyan el efecto de la decohesión imponiendo un valor máximo a la tensión soportada por los refuerzos.

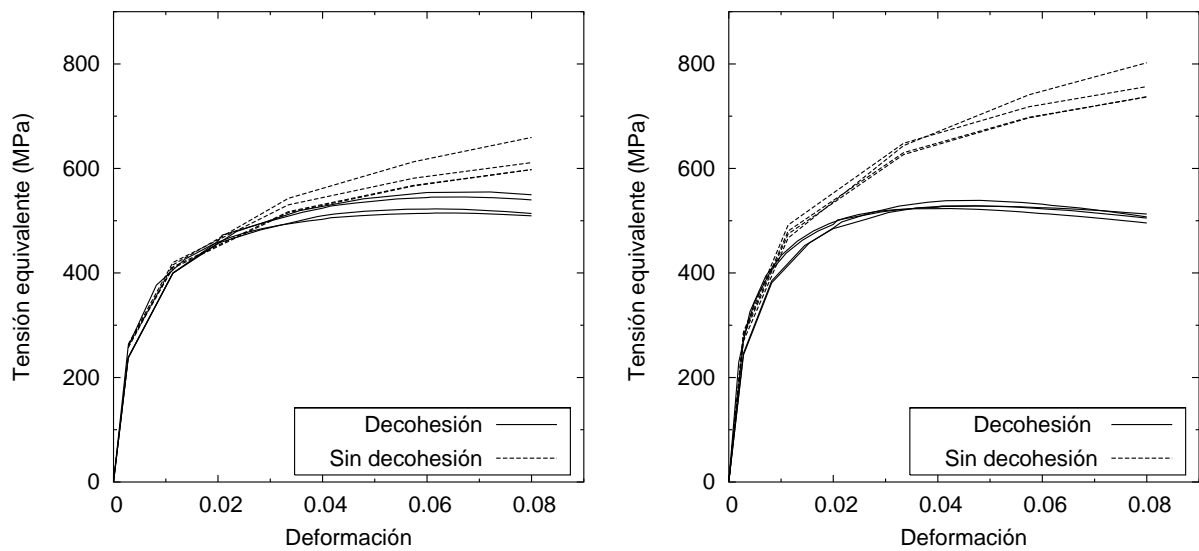
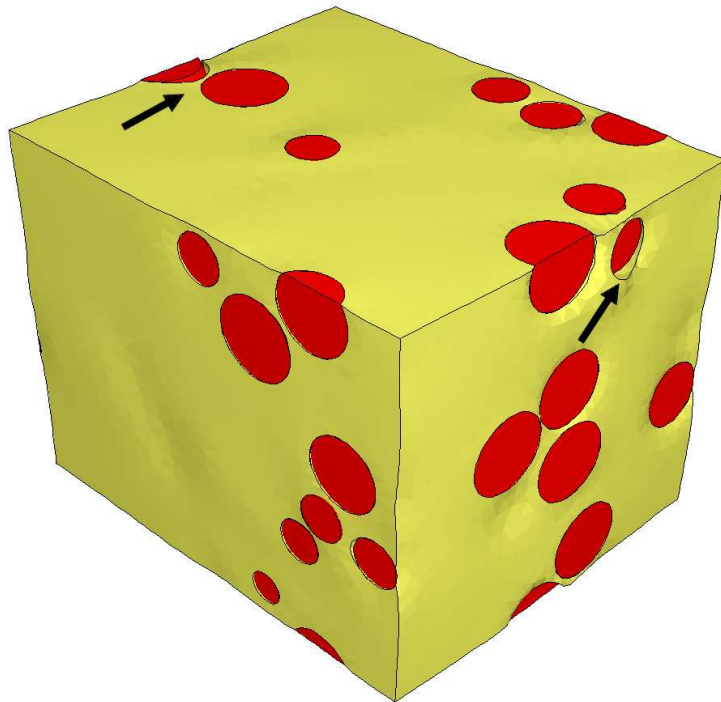
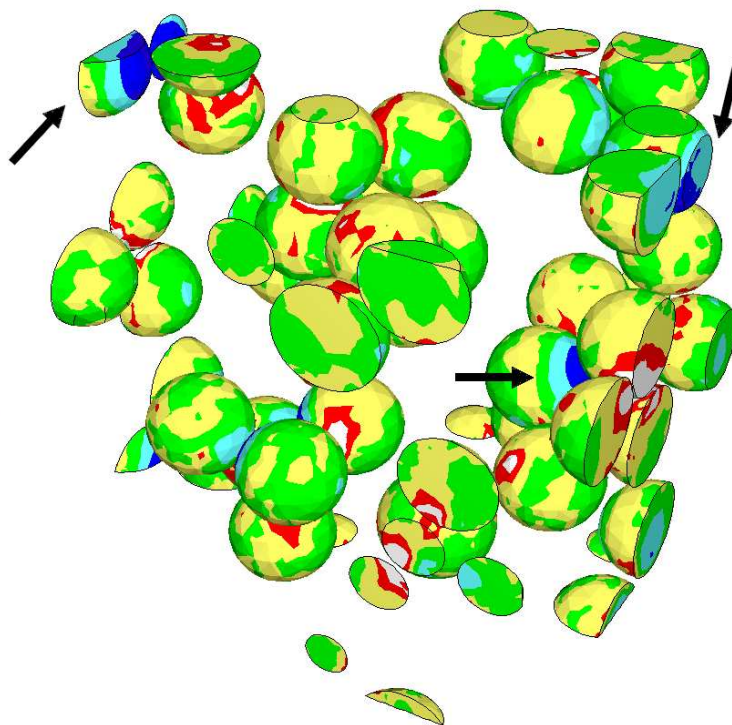


Figura 5.8: Evolución de la tensión equivalente en las partículas en función de la deformación aplicada en un material compuesto con $\xi = 0.15$. (a) Microestructuras homogéneas (b) Microestructuras inhomogéneas



(a)



(b)

Figura 5.9: Material compuesto con $\xi = 0.15$ y microestructura heterogénea sometido a una deformación del 8%. (a) Configuración deformada. (b) Contornos de isotensión equivalente en las partículas. Las flechas muestran las decohesiones en la intercara.

5.2. Fractura de las partículas

El mecanismo dominante de nucleación de daño a temperatura ambiente en materiales compuestos de matriz metálica reforzados con partículas cerámicas suele ser la fractura del refuerzo. La fractura partículas se produce por la aparición de una grieta perpendicular a la dirección de carga (LLorca et al., 1993; Liu y Lewandowski, 1993; Babout et al., 2003; Gammage, 2002).

El objetivo de esta sección es estudiar el efecto de la fractura progresiva de las partículas en la deformación en tracción uniaxial de un material compuesto. El análisis se realizó dentro del marco de las celdas cúbicas multipartícula y la fractura de las partículas se tuvo en cuenta introduciendo un elemento de intercara en el ecuador de las partículas, perpendicularmente a la dirección de la sollicitación. La ecuación constitutiva de la fisura cohesiva del elemento de intercara siguió el modelo de Tvergaard y Hutchinson (1993), modificado más arriba, con los parámetros adecuados para representar la fractura frágil de las partículas.

Selección de la rigidez inicial

La determinación de la rigidez inicial relativa E_i de la fisura cohesiva para simular la fractura frágil de las partículas cerámicas se realizó estudiando el comportamiento de una celda cúbica unipartícula, de lado L , con condiciones de contorno simétricas (Fig. 5.10). El tamaño de los elementos de la malla fue igual al empleado en los modelos multipartícula y se introdujeron elementos cohesivos en el plano ecuatorial de las partículas. Los parámetros del modelo cohesivo fueron los mismos que se usaron posteriormente en las simulaciones con las celda multipartícula: una energía de fractura de 40 J/m^2 y una resistencia a tracción $t_c = 600 \text{ MPa}$, valores típicos para un material cerámico frágil. Se realizaron simulaciones en régimen elástico en tracción uniaxial a lo largo del eje vertical, z . La rigidez relativa de la intercara, E_i , se varió sistemáticamente y además se realizó una simulación sin elementos de intercara.

La evolución de la componente axial del tensor de tensiones, σ_{zz} , normalizada por la tensión media de tracción soportada por la celda, σ_0 , se ha representado en la Fig. 5.11 a lo largo de una línea que pasaba por el centro de la esfera y estaba contenida en su plano ecuatorial para diferentes valores de E_i . La figura muestra que los perfiles de tensiones se alejaron mucho del valor exacto (sin intercara) para valores de E_i menores que 6 GPa y se optó por emplear $E_i = 60 \text{ GPa}$ para las simulaciones con celdas multipartícula. La rigidez

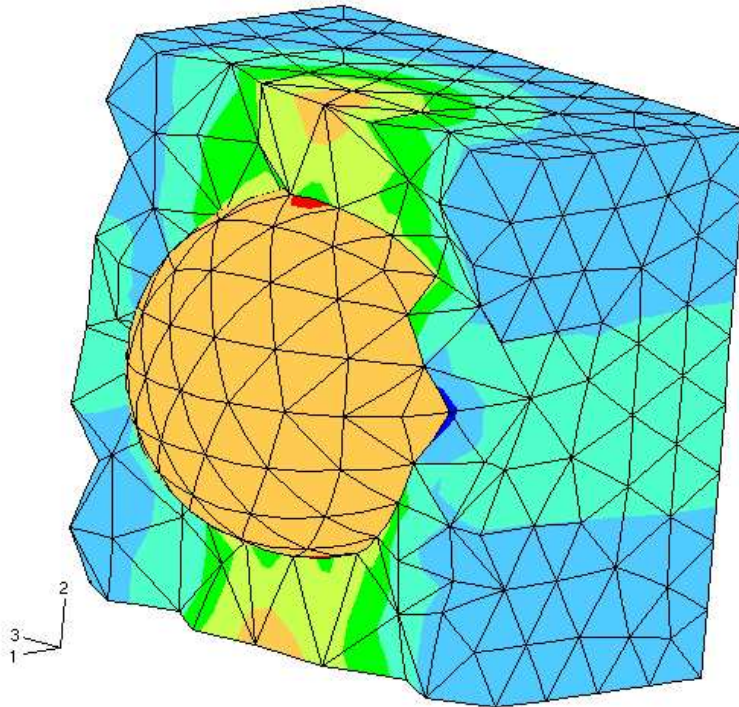


Figura 5.10: Celda cúbica con una partícula usada para seleccionar la rigidez inicial de los elementos de intercara en el ecuador de la partícula. Las curvas de isotensión equivalente se han representado en la figura.

real de esta intercara, E_i/u_c , es un orden de magnitud mayor a la necesaria para simular la decohesión entre la matriz y las partículas y la convergencia del cálculo en las simulaciones de la fractura de las partículas fue algo más costosa.

5.2.1. Volumen representativo, discretización y control

Se generó una celda cúbica con 30 partículas distribuidas en la matriz de forma aleatoria y estadísticamente homogénea. Se emplearon elementos tetraédricos modificados, C3D10M en Abaqus, y la discretización de cada partícula se realizó con unos 500 elementos resultando modelos que tenían unos 110000 nodos y 70000 elementos.

La rotura frágil de una partícula provoca una relajación de las tensiones elásticas que se traduce en una disminución de la tensión y la deformación efectivas y este fenómeno es conocido como *snap-back*. El cálculo de curvas carga-desplazamiento con *snap-back* se suele abordar mediante un método de control mixto en carga y desplazamiento, i.e. *arc-*

5.2 Fractura de las partículas

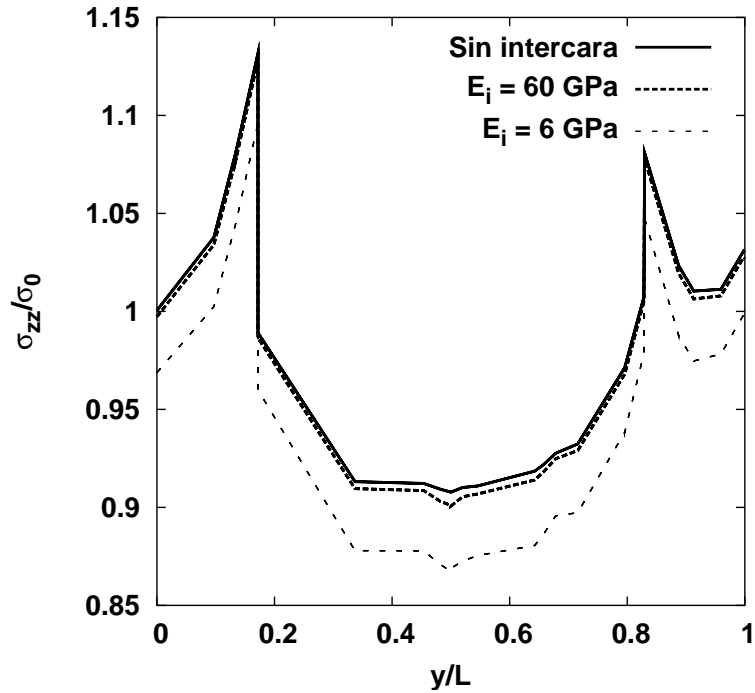


Figura 5.11: Perfiles de tensión axial a lo largo de un eje contenido en el ecuador de la esfera y que para por su centro (Fig. 5.10) para diferentes valores de la rigidez inicial de la intercara, E_i .

length (Crisfield, 1986), pero este método no funcionó de forma adecuada para nuestros modelos. En consecuencia, el control de las cargas aplicadas se realizó imponiendo de un valor creciente de la suma de todas las aperturas normales de las intercaras del modelo, de acuerdo con la metodología desarrollada en la sección 3.5.

Los cálculos se realizaron en un ordenador Alpha Server ES40 con cuatro procesadores y 4Gb de memoria y el tiempo medio de cálculo de un modelo fue de más de una semana.

5.2.2. Resultados y discusión

Las simulaciones para analizar el efecto de la fractura del refuerzo se realizaron sobre un material compuesto con $\xi = 0.15$. Las constantes elásticas seleccionadas para las esferas y la matriz fueron $E_p = 400$ GPa y $\nu_p = 0.20$ y $E_m = 70$ GPa, y $\nu_m = 0.33$, respectivamente. La matriz se modelizó como un sólido elasto-plástico siguiendo el criterio de plastificación de Von Mises y con endurecimiento isótropo. La evolución de la tensión de plastificación con la deformación plástica equivalente siguió la expresión 4.6 con $A = 400$ MPa y $n =$

0.15.

La fisura cohesiva se simuló mediante el modelo modificado de Tvergaard y Hutchinson (1993), cuya implementación se detalló en la sección anterior. El radio de las partículas fue de $30 \mu\text{m}$. La rigidez relativa inicial del elemento de intercara fue $E_i = 60 \text{ GPa}$ y la energía de fractura 40 J/m^2 . La tensión de rotura t_c de las partículas cerámicas se ajustó a un modelo de Weibull con parámetros $m=5$ y $t_{c0} = 600 \text{ MPa}$. La resistencia a tracción de cada esfera dentro del modelo se determinó a partir de números aleatorios y de la ecuación 5.10, al igual que para la resistencia de las intercara en los modelos de decohesión.

Comportamiento efectivo

Se calculó la deformación uniaxial en tracción para una única celda cúbica unitaria con microestructura estadísticamente homogénea. Las correspondientes curvas tensión-deformación con y sin fractura del refuerzo se han dibujado en la Fig. 5.12

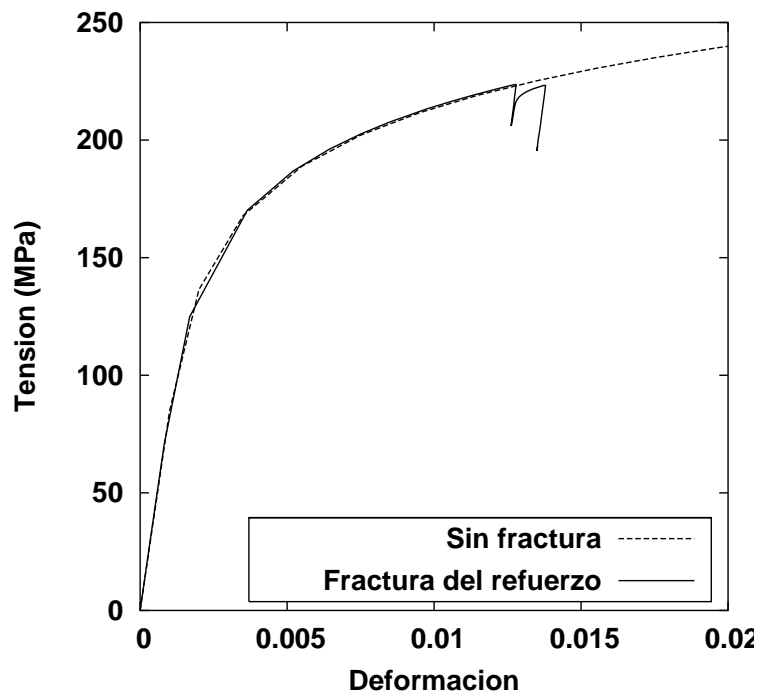


Figura 5.12: Efecto de la fractura del refuerzo en la curva tensión-deformación de un material compuesto con microestructura estadísticamente homogénea, $\xi = 0.15$

Los dientes de sierra de la curva para el modelo con fractura de partículas no aparecen en las curvas tensión-deformación experimentales de estos materiales y ponen de manifiesto

5.2 Fractura de las partículas

que el número de partículas dentro del volumen representativo no es suficiente para simular el comportamiento efectivo del material. La rotura de una sola partícula en un modelo con 30 esferas supone la fractura brusca de más de un 3% del refuerzo. Los picos de la curva corresponden a las partículas rotas que se han señalado en la Fig. 5.13 mediante flechas.

El número de partículas necesario para obtener un comportamiento más realista de la curva tensión deformación fue excesivo para la capacidad de los ordenadores y métodos de cálculo empleados en la tesis. Además, el método de control rompe la simetría de la matriz de rigidez y la memoria necesaria casi se duplica, por lo que el tamaño de los modelos está más limitado que cuando se estudia la fractura por decohesión de la intercara. Por estas razones, no es posible obtener resultados más generales con la potencia de cálculo disponible, a pesar de la buena convergencia del elemento de intercara combinado con la nueva técnica de control.

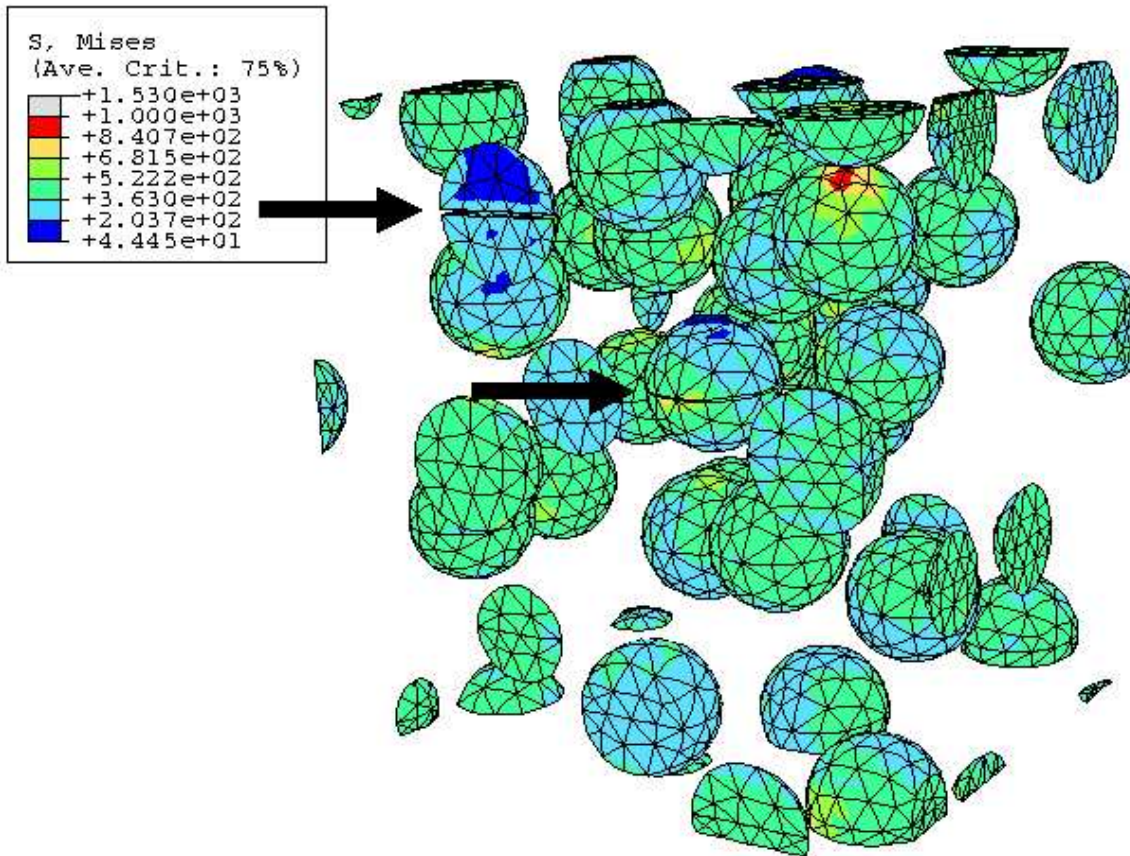


Figura 5.13: Contornos de isotensión equivalente tras la fractura de dos partículas en deformación uniaxial. Las partículas rotas se han señalado mediante flechas. $\xi = 0.15$

5.3. Daño en la matriz

El desarrollo del daño en la matriz por nucleación, crecimiento y coalescencia de huecos se ha simulado en materiales compuestos reforzados con partículas esféricas mediante el modelo de Gurson modificado o modelo GTN (Tvergaard, 1981). Los estudios previos de la evolución del daño en la matriz (LLorca et al., 1991; Tvergaard, 1998) estaban basados en la aplicación del modelo GTN a celdas unitarias axilsimétricas con condiciones de contorno periódicas que representaban una distribución regular (hexagonal) de partículas en el espacio. Estos trabajos proporcionaron una información muy útil sobre la influencia de la forma de las partículas de refuerzo (esferas, cilindros, prismas, ...) en la nucleación y evolución del daño en la matriz, pero no fueron capaces de analizar el efecto de la distribución espacial del refuerzo. Además, estos análisis se apoyaron en celdas periódicas con una sola partícula para representar la microestructura del material compuesto e imponen que el daño se produzca a la vez en todo el material. Esta hipótesis de partida puede tener un efecto importante el comportamiento efectivo.

El objetivo de esta sección es analizar el proceso de nucleación y crecimiento del daño en la matriz a partir del modelo GTN y de celdas multipartícula tridimensionales que permiten conocer el efecto de la distribución aleatoria del refuerzo sobre el daño dúctil de la matriz. Los resultados obtenidos se compararon con los obtenidos mediante celdas axilsimétricas para evaluar las ventajas y limitaciones de los estudios previos. Por último, se estudió el efecto de algunos parámetros del modelo GTN (la fracción de partículas nucleadoras de huecos y la deformación media para la nucleación de huecos) en el proceso de deformación del material compuesto.

5.3.1. Modelos numéricos

No existe ninguna estimación sobre el tamaño del volumen representativo necesario para estudiar de la evolución del daño dúctil en la matriz. Se optó por usar el mismo volumen representativo que en las simulaciones elasto-plásticas sin daño (sección 4.2) y analizar su validez *a posteriori*, a partir de la dispersión en los resultados. La microestructura del material se representó mediante celdas multipartícula con 30 esferas dispersas de forma aleatoria, estadísticamente homogénea e isotrópica en su interior y condiciones de contorno periódicas. Se estudiaron materiales con fracciones volumétricas de esferas de refuerzo $\xi=0.2$ y 0.3 . La malla de elementos finitos utilizó unos 500 elementos por partícula y se

usaron elementos tetraédricos modificados (C3D10M en Abaqus) para la discretización. Los cálculos se realizaron en el contexto de grandes deformaciones, utilizando el estado inicial sin deformar como referencia. Cada cálculo tuvo una duración aproximada de 4 días en un ordenador Alpha ES40 con 4 procesadores y 4Gb de memoria.

Para comparar con los resultados anteriores (Llorca et al., 1991; Tvergaard, 1998), se generaron celdas axilsimétricas uni-partícula (sección 1.2.4). Las celdas se discretizaron mediante elementos triangulares de 6 nodos para las partículas y elementos isoparamétricos de 8 nodos con integración reducida para la matriz, Fig. 5.14. La densidad de la malla de elementos finitos en la discretización de la celda axilsimétrica fue mayor que en las celdas multipartícula al tratarse de un modelo 2D.

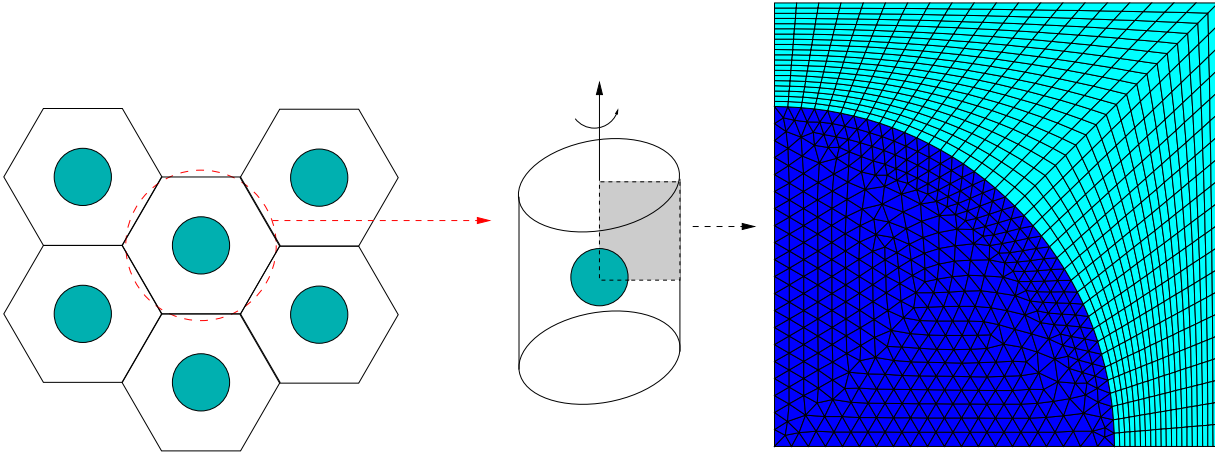


Figura 5.14: Celda axilsimétrica para simular un material compuesto con $\xi=0.3$ y una distribución hexagonal de esferas en la matriz

El material compuesto estudiado estaba formado por una matriz elasto-plástica e isotrópica reforzada con esferas elásticas e isotrópicas. Las constantes elásticas de las esferas fueron $E_p = 400$ GPa y $\nu_p = 0.20$. Las constantes elásticas de la matriz fueron $E_m = 70$ GPa y $\nu_m = 0.33$ (valores típicos de una aleación de aluminio) y la superficie de plastificación de la matriz vino dictada por el modelo GTN, presentado en la sección 1.3.3, de acuerdo con

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}}{\bar{\sigma}} + 2q_1 f \cosh\left(\frac{3\sigma_h}{2\bar{\sigma}}\right) - q_1^2 f^2 - 1 = 0 \quad (5.13)$$

donde f es la fracción volumétrica de huecos en la matriz, σ_{eq} y σ_h son, respectivamente, la tensión equivalente de Von Mises y la tensión hidrostática, $q_1 = 0.15$ (Tvergaard, 1981) y $\bar{\sigma}$ es la tensión de plastificación de la matriz sin porosidad que viene dada por la ecuación

5.3 Daño en la matriz

4.6 en función de la deformación plástica equivalente acumulada ϵ_{pl} con $A = 400$ MPa y $n = 0.10$. La fracción volumétrica de huecos en la matriz f se sustituyó por la función f^* ,

$$\begin{aligned} f^* &= f, & \text{si} & \quad f \leq f_c \\ f^* &= f_c + K(f - f_c), & \text{si} & \quad f > f_c \end{aligned} \quad (5.14)$$

tal y como propusieron Tvergaard y Needleman (1984) para imponer el comienzo de la coalescencia de huecos en la matriz para $f = f_c = 0.15$ y la fractura final de la matriz para $f = 0.25$. Esta modificación al modelo GTN se introdujo en el programa Abaqus mediante la subrutina de usuario usdfld.f.

La evolución de la porosidad en la matriz es función de la nucleación de nuevos huecos y del crecimiento de los ya existentes. El crecimiento de los huecos se determinó de la condición de incompresibilidad de la matriz en plasticidad, ecuación 1.60, y la nucleación de nuevos huecos en la matriz se introdujo de acuerdo con la expresión

$$df_{nuc} = \frac{f_n}{s_n \sqrt{2\pi}} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_n}{s_n} \right)^2 \right] d\bar{\epsilon} \quad (5.15)$$

donde f_n es la fracción de partículas (segundas fases, inclusiones, ...) que nuclean nuevos huecos, ϵ_n es la deformación plástica media para la nucleación de huecos y s_n es la desviación típica de la deformación plástica para nuclear huecos.

5.3.2. Resultados y discusión

El análisis del daño en la matriz se realizó sobre materiales compuestos con dos fracciones volumétricas de esferas de refuerzo ($\xi = 0.2$ y 0.3). Se estudiaron dos celdas unitarias diferentes por fracción volumétrica, y en cada una se simuló su deformación en tracción uniaxial en tres direcciones perpendiculares, obteniéndose 6 curvas tensión-deformación diferentes por cada material compuesto. Con objeto de dilucidar con más claridad el efecto del daño en la respuesta mecánica, se realizaron otras 6 simulaciones para cada fracción volumétrica de refuerzo suponiendo que la matriz tenía un comportamiento elasto-plástico sin daño de acuerdo con el modelo de Von Mises ($f = 0$ en la ecuación 5.13).

Las curvas tensión-deformación para los materiales compuestos con $\xi = 0.2$ y 0.3 en ausencia de daño en la matriz se han dibujado en la Fig. 5.15 junto con los resultados obtenidos para las celdas axilsimétricas con condiciones de contorno simétricas que representan

la distribución de las esferas de la Fig. 5.14. Las 6 curvas tensión-deformación correspondientes a cada fracción volumétrica están prácticamente superpuestas en el campo elástico y muestran una ligera divergencia en régimen plástico aunque la máxima diferencia entre las curvas no llegó al 4% con una desviación estandar del conjunto de 1.3%.

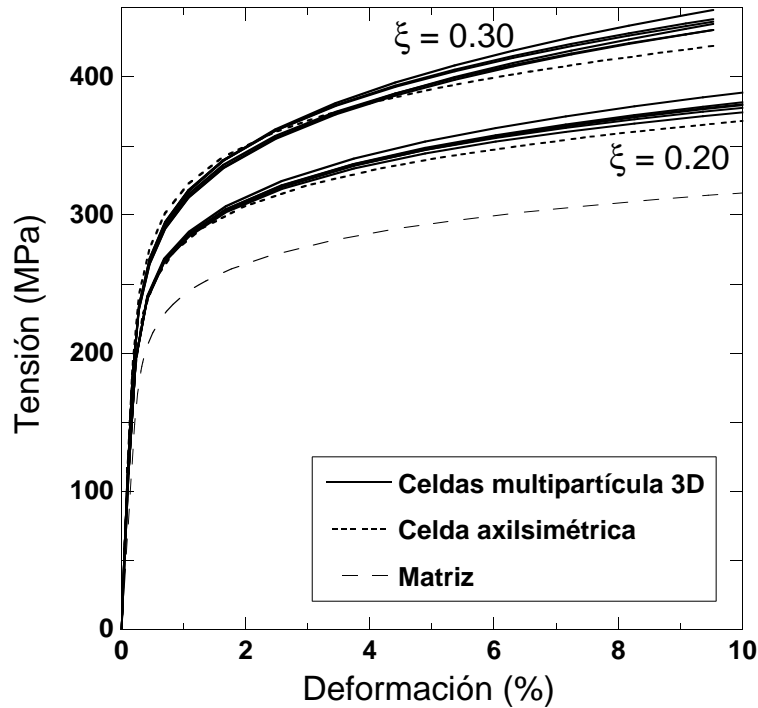


Figura 5.15: Curvas tensión-deformación en tracción uniaxial para los materiales compuestos con $\xi=0.2$ y 0.3 en ausencia de daño en la matriz. Junto a las 6 curvas obtenidas con los modelos de celdas multipartícula se ha representado la curva correspondiente al modelo axilsimétrico. La curva tensión-deformación de la matriz también se ha representado como referencia.

Las celdas axilsimétricas proporcionaron resultados precisos en el campo elástico (los módulos de elasticidad fueron sólo un 2% y un 5% menores que los correspondientes a los modelos multipartícula para $\xi = 0.2$ y 0.3 , respectivamente) y subestimaron ligeramente el endurecimiento por deformación en el régimen plástico. En consecuencia, las diferencias en el comportamiento efectivo proporcionado por los modelos axilsimétricos y las celdas multipartícula no fueron demasiado significativas, sobre todo si se tiene en cuenta la enorme diferencia en el coste computacional de ambas estrategias de modelización.

La semejanza en los valores medios de la tensión y la deformación entre ambos modelos no garantiza que la distribución de estas variables a nivel local sea también semejante. En

5.3 Daño en la matriz

efecto, los valores máximos de la tensión y la deformación fueron muy superiores en los modelos multipartícula porque existen partículas muy próximas entre sí que generan fuertes concentraciones de tensiones. Estos valores máximos controlan la nucleación del daño y se ha estudiado su distribución en la microestructura en ausencia de daño. Los contornos de isodeformación plástica equivalente y de isotensión hidrostática en la matriz se han representado en las Figs. 5.16(a) y 5.16(b), respectivamente, para el material con $\xi = 0.20$ tras una deformación axial del 9.5 %. La distribución de ambos campos es muy heterogénea dentro de la matriz y los máximos de la deformación plástica y de la tensión hidrostática se localizaron en las zonas de matriz situadas entre dos esferas cercanas y orientadas según el eje de carga. En general, los valores locales de la tensión hidrostática son muy dependientes del alineamiento entre las partículas y la tensión externa e incluso aparecen tensiones hidrostáticas de compresión entre partículas alineadas perpendicularmente al eje de carga.

La segunda serie de simulaciones incluyó el efecto del daño por nucleación y crecimiento de huecos en la matriz. Los valores de los parámetros del modelo GTN se obtuvieron de la literatura (LLorca et al., 1991; Tvergaard, 1998) y corresponden a una fracción volumétrica de partículas nucleantes de huecos, $f_n = 0.04$, una deformación media para la nucleación de huecos, $\epsilon_n = 0.10$, y una desviación estándar para esa magnitud, $s_n = 0.05$. Las curvas tensión-deformación correspondientes a las celdas multipartícula y al modelo axilsimétrico se han representado en la Fig. 5.17.

La comparación de las figuras 5.15 y 5.17 muestra una reducción notable de la tensión de plastificación en el material compuesto debido al daño en la matriz llegando a aparecer un máximo en las curvas tensión-deformación. Además, el daño redujo la dispersión de las curvas de los modelos multipartícula para una misma fracción volumétrica y las diferencias entre la tensión soportada por los materiales compuestos con $\xi = 0.2$ y $\xi = 0.3$.

Los contornos correspondientes a una fracción volumétrica de poros constante en la matriz se han dibujado en la Fig. 5.18(a) para el material con $\xi = 0.20$ al final del análisis ($\epsilon=9.5\%$). Las mayores fracciones volumétricas de huecos se localizaron en las regiones de la matriz situadas entre partículas cercanas y orientadas según el eje de carga. Esta disposición de las esferas indujo una alta concentración de deformación plástica en la matriz (Fig. 5.16(a)) que facilitó la nucleación de huecos para valores muy bajos de la deformación global. Estos huecos crecieron rápidamente porque las tensiones hidrostáticas eran máximas y positivas en esas mismas regiones, como se puede observar en la Fig. 5.16(b). La condición

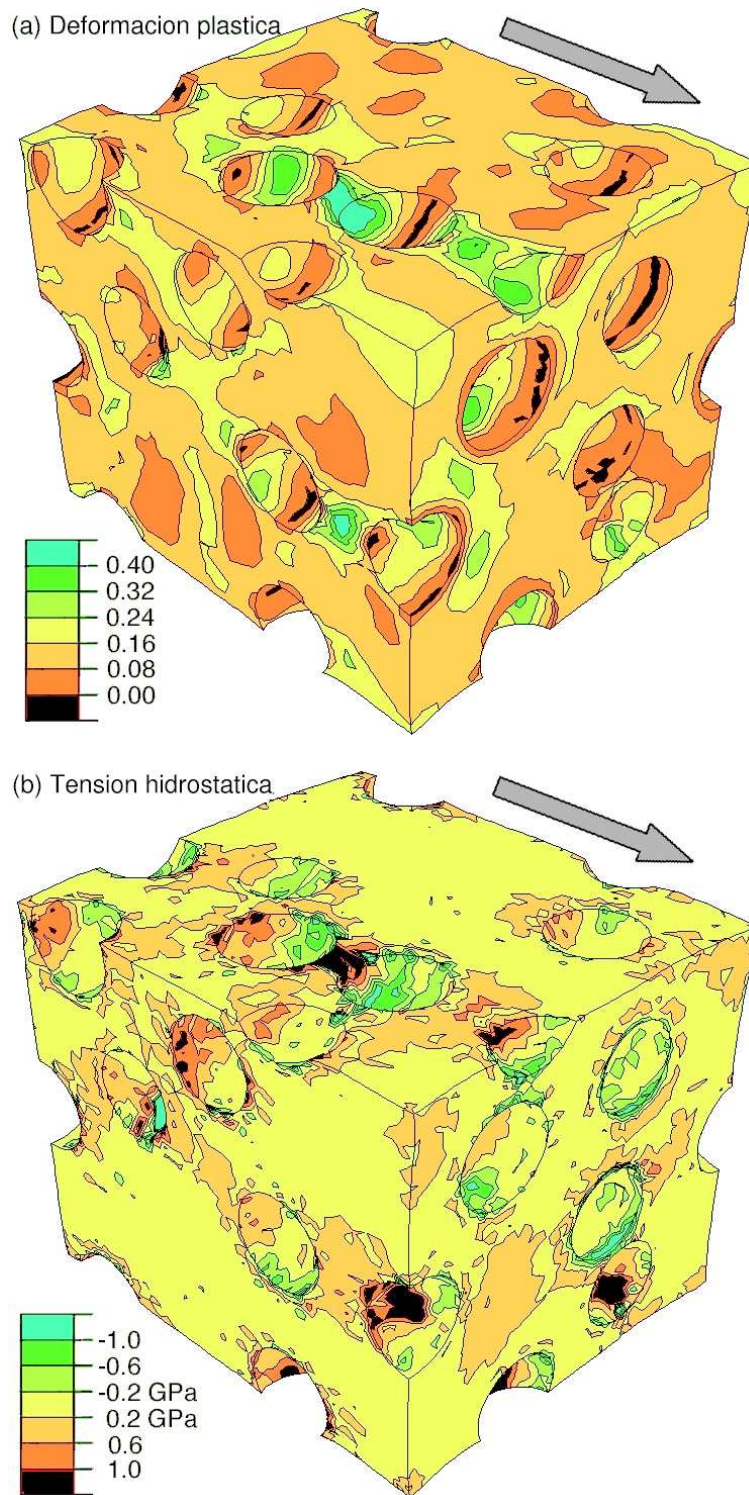


Figura 5.16: (a) Contornos de isodeformación plástica equivalente (b) Contornos de isotensión hidrostática en la matriz para una deformación aplicada $\epsilon = 9.5\%$ en la dirección de la flecha. $\xi = 0.20$.

5.3 Daño en la matriz

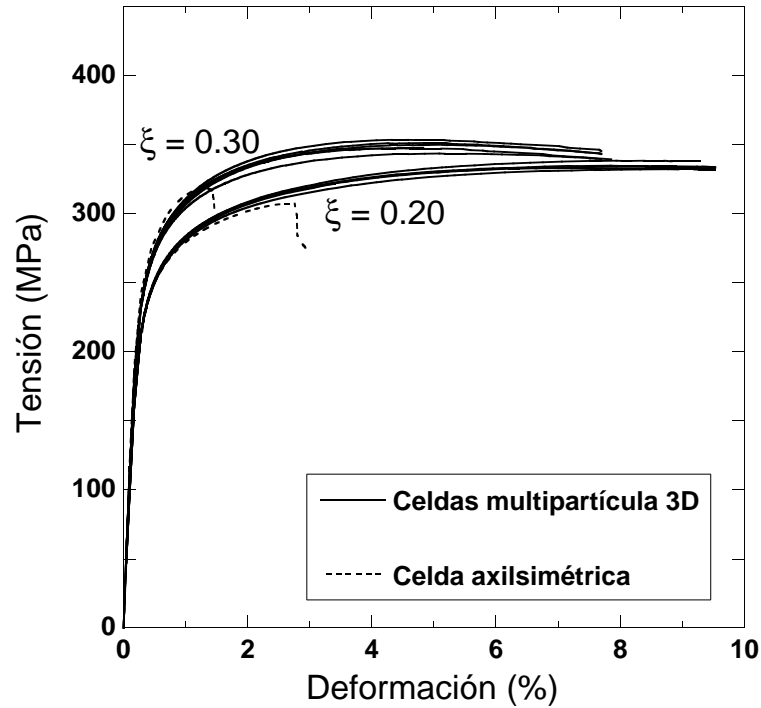


Figura 5.17: Curvas tensión-deformación en tracción uniaxial para los materiales compuestos con $\xi=0.2$ y 0.3 incluyendo el efecto del daño en la matriz mediante el modelo GTN. Junto a las 6 curvas obtenidas con los modelos de celdas multipartícula se ha representado la curva correspondiente al modelo axilsimétrico.

crítica para la coalescencia de huecos ($f = 0.25$) se alcanzó rápidamente en esas zonas y la resistencia mecánica de la matriz se redujo a 0. Como consecuencia, la tensión hidrostática se relajó conforme el material iba perdiendo capacidad de soportar carga, como se puede apreciar comparando las curvas de tensión hidrostática constante de las Figs. 5.16(b) y 5.18(b). La reducción progresiva de las tensiones hidrostáticas en la matriz impidió que el daño se propagara y quedó confinado en estas regiones sin extenderse de forma inmediata a todo el material.

El comportamiento efectivo del material compuesto (Fig. 5.17) refleja los mecanismos descritos. La relajación de las tensiones debida a la nucleación y crecimiento de huecos en la matriz redujo significativamente la resistencia mecánica del material compuesto. Además, no se observó una caída abrupta o una discontinuidad en las curvas ya que el daño estaba confinado. El efecto contrapuesto del endurecimiento por deformación de la matriz y de la nucleación y crecimiento de huecos —que aumentan y disminuyen, respectivamente, la

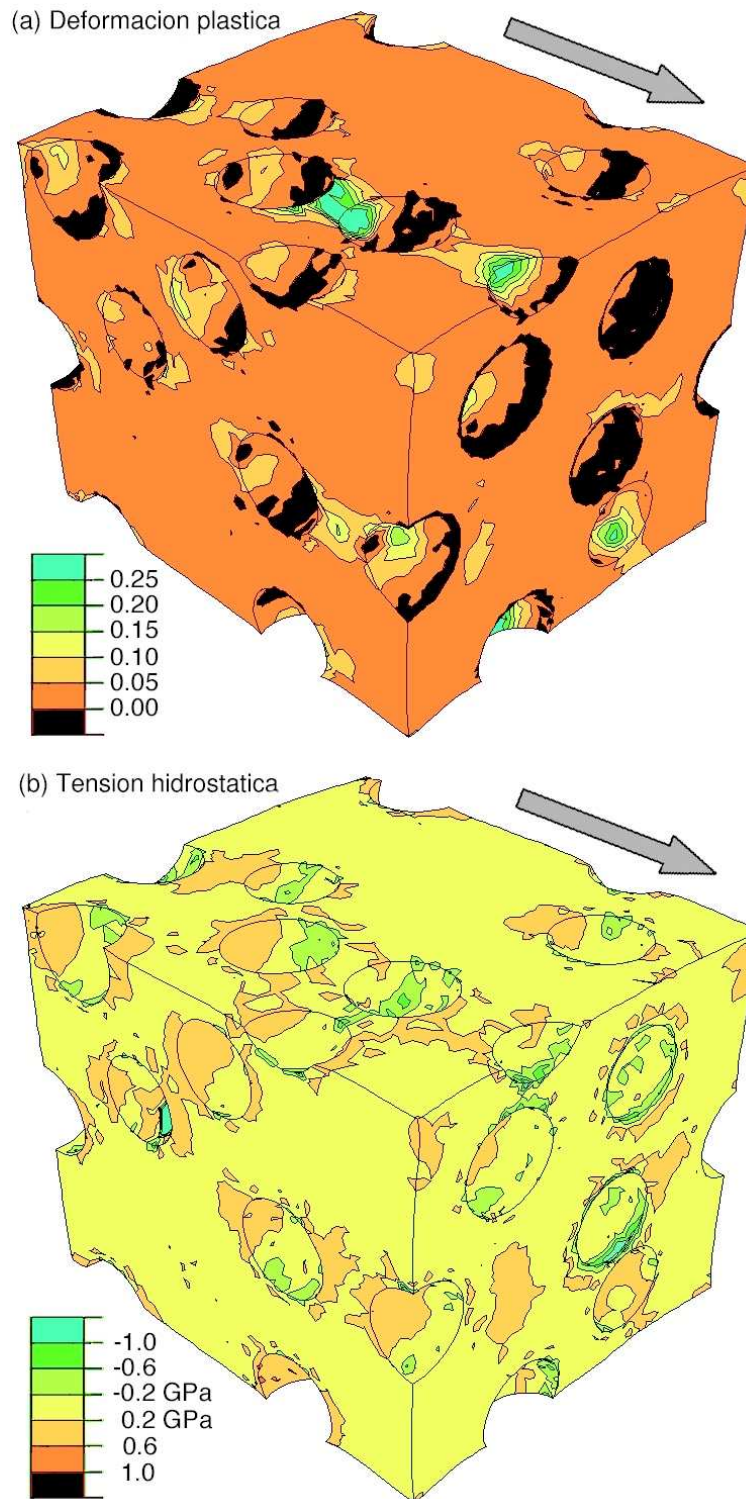


Figura 5.18: (a) Contornos de fracción volumétrica de huecos constante en la matriz. (b) Contornos de isotensión hidrostática en la matriz. La deformación aplicada fue $\epsilon = 9.5\%$ en la dirección de la flecha. $\xi = 0.20$.

5.3 Daño en la matriz

capacidad de carga del compuesto— dieron lugar a la aparición de un máximo en las curvas tensión-deformación (Fig. 5.17). Además, las diferencias en las tensiones soportadas por los materiales con $\xi = 0.2$ y 0.3 disminuyeron cuando se incluyó el efecto del daño en la matriz porque una fracción volumétrica de refuerzo mayor genera mayores tensiones y deformaciones locales y facilita la nucleación y crecimiento de huecos con la consiguiente reducción de las tensiones soportadas por el material compuesto.

Las curvas tensión-deformación correspondientes a las celdas axilsimétricas (también dibujadas en la Fig. 5.17) concuerdan con los resultados de los modelos multipartícula en la zona inicial pero presentaron una reducción brusca en la tensión para deformaciones muy pequeñas. Esta discontinuidad se debe a las condiciones de contorno simétricas que propagan a todo el material la inestabilidad cuando se inicia la coalescencia de los huecos en la celda unitaria.

La nucleación y crecimiento de huecos en la matriz da lugar a un aumento del volumen del material compuesto, que es un buen parámetro global para estimar el daño. La deformación volumétrica ϵ_V de las celdas multipartícula se ha representado en función de la deformación aplicada en la Fig. 5.19 para dos materiales compuestos con $\xi=0.2$ y $\xi=0.3$. Los materiales compuestos sin daño apenas sufrieron cambios de volumen (solo los debidos a la deformación elástica de las fases) mientras que la presencia de daño en la matriz produjo un aumento progresivo del volumen del compuesto con la deformación que fue mucho más importante en el material con $\xi = 0.3$. La diferencia entre los valores locales de f (Fig. 5.18) y la deformación volumétrica media (inferior al 1% en todos los casos) confirmaron la localización del daño en la matriz.

Finalmente, es necesario señalar que los modelos de daño basados en el ablandamiento del material localizan la deformación en bandas de un elemento de ancho y la respuesta depende del tamaño de malla. Este fenómeno tiene una influencia limitada en los modelos multipartícula porque el daño se localiza en zonas aisladas de la matriz, pero es determinante en la posición del punto de inestabilidad en las simulaciones axilsimétricas. Esta dependencia con la malla podría evitarse mediante el uso de las versiones no-locales de los modelos de daño aunque a costa de introducir una longitud característica cuyo significado físico es necesario discutir (Resuch et al., 2003).

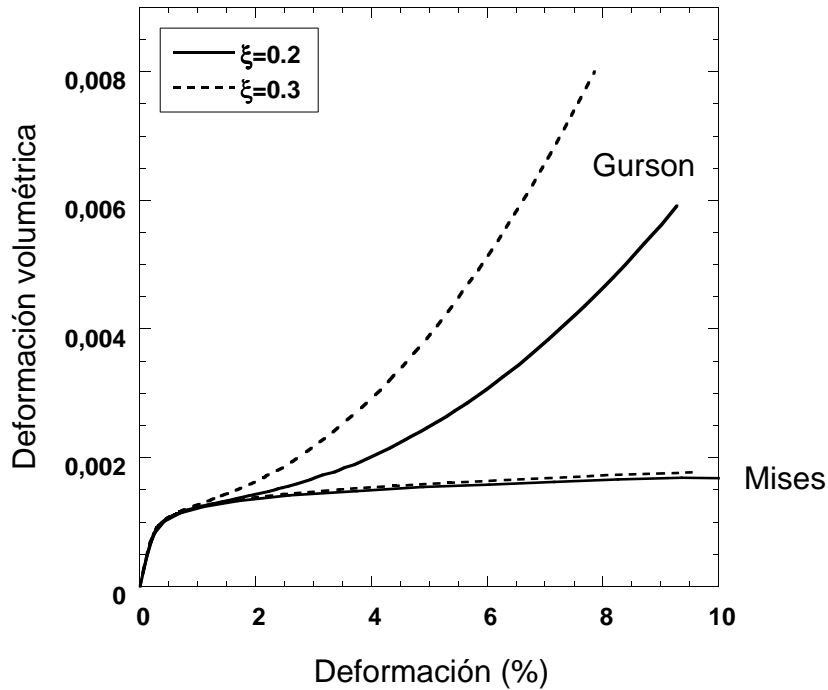


Figura 5.19: Deformación volumétrica en función de la deformación aplicada para materiales compuestos cuando la deformación plástica de la matriz viene representada por el modelo de Von Mises o de Gurson. $\xi=0.20, 0.30$.

Efecto de los parámetros de daño de la matriz

La aparición del daño en la matriz viene condicionada principalmente por dos parámetros: la fracción de partículas nucleadoras de huecos, f_n , y la deformación media para la nucleación de huecos, ϵ_n y su influencia se ha estudiado en el material compuesto con $\xi = 0.2$ mediante un análisis paramétrico sobre una única celda multipartícula. Las curvas tensión-deformación para diferentes valores de f_n (0.02-0.08) se han dibujado en la Fig. 5.20 y muestran, como es lógico, que la capacidad de endurecimiento por deformación del material compuesto disminuyó al aumentar la fracción de partículas que generan huecos y, por tanto, la porosidad en la matriz.

Los valores de la resistencia a tracción y de la ductilidad para estos materiales se han obtenido a partir de la condición de Considère (ecuación 5.11) y se han representado Fig. 5.21 en función de f_n . La resistencia a tracción y la ductilidad del material compuesto se redujeron al aumentar la fracción volumétrica de partículas que nuclean huecos, y estos resultados están en consonancia con los valores experimentales de la ductilidad de los

5.3 Daño en la matriz

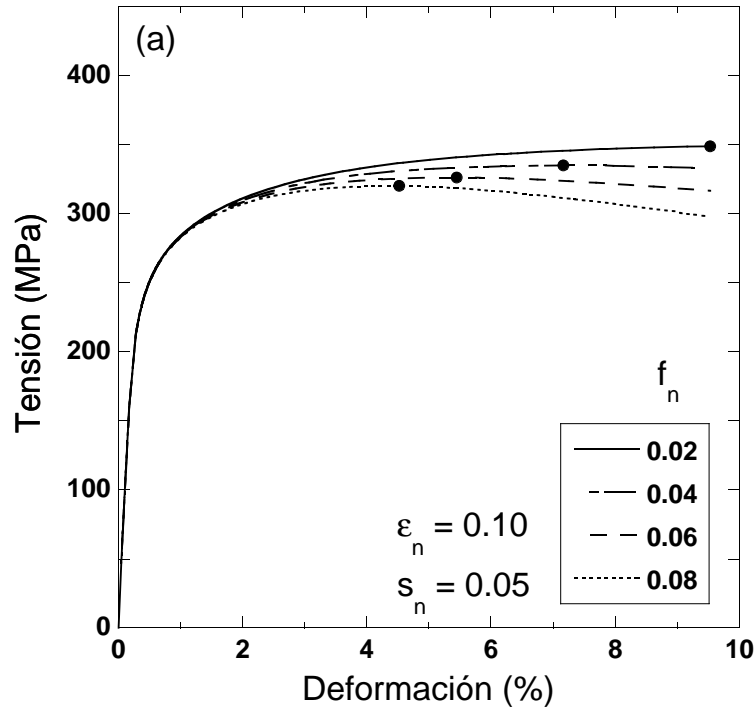


Figura 5.20: Efecto de la fracción volumétrica de partículas nucleadoras de huecos f_n , en la curva tensión-deformación del material compuesto en tracción uniaxial, $\xi=0.20$. Los puntos sobre las curvas indican el comienzo de la inestabilidad plástica según el criterio de Considère

materiales compuestos de matriz metálica. La presencia de partículas nucleantes de huecos en la microestructura reduce la capacidad de endurecimiento por deformación y adelanta el comienzo de la inestabilidad plástica (Fig. 5.20), que precipita la fractura final aunque el daño en la matriz esté localizado entre partículas orientadas en el eje de carga y no se haya propagado por la microestructura.

La deformación volumétrica, ϵ_V , correspondiente a las simulaciones de la Fig. 5.20 se ha representado en la Fig. 5.22. El material compuesto apenas sufrió cambio de volumen en ausencia de daño pero la presencia de daño en la matriz produjo un aumento progresivo del volumen del compuesto con la deformación aplicada. El aumento de la fracción volumétrica de partículas nucleantes de huecos en la matriz, f_n , aceleró el incremento del volumen con la deformación aunque el comienzo del daño en la matriz esta controlado por ϵ_n y no se vio afectado por la fracción volumétrica de partículas nucleantes de huecos.

Las simulaciones numéricas también demostraron que la deformación media para la nucleación de huecos, ϵ_n , apenas tuvo influencia en la curva tensión-deformación del material

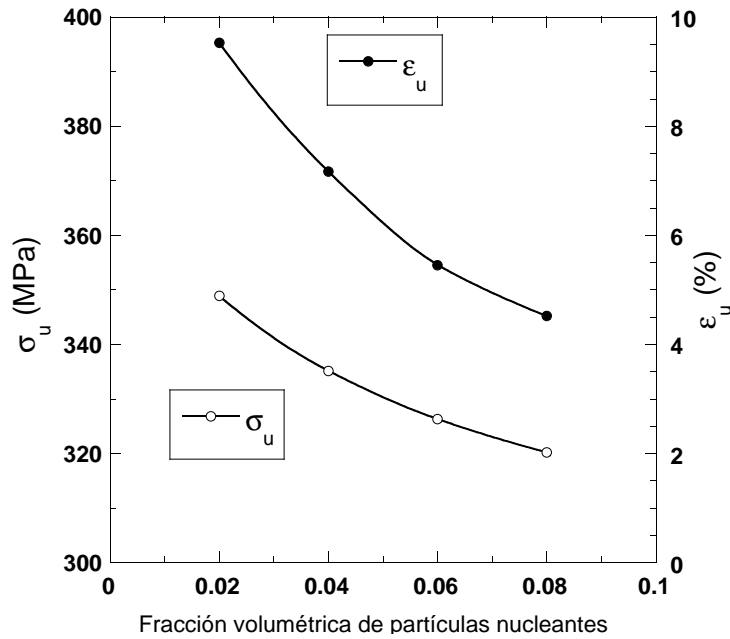


Figura 5.21: Resistencia a tracción, σ_u y ductilidad, ϵ_u , del material compuesto, calculadas a partir del criterio de Considère, en función de la fracción de partículas nucleantes de huecos, f_n . $\xi=0.20$

compuesto (Fig. 5.23). La nucleación de huecos en la matriz se retrasó al aumentar ϵ_n y la curva tensión-deformación se modificó ligeramente pero su influencia en el comportamiento global del material compuesto fue muy pequeña. La deformación y el daño se concentraron en las mismas zonas de la matriz y, aunque el daño se genere más tarde al aumentar ϵ_n , las diferencias se reducen rápidamente porque la deformación plástica crece también más rápidamente en las regiones donde se localiza el daño.

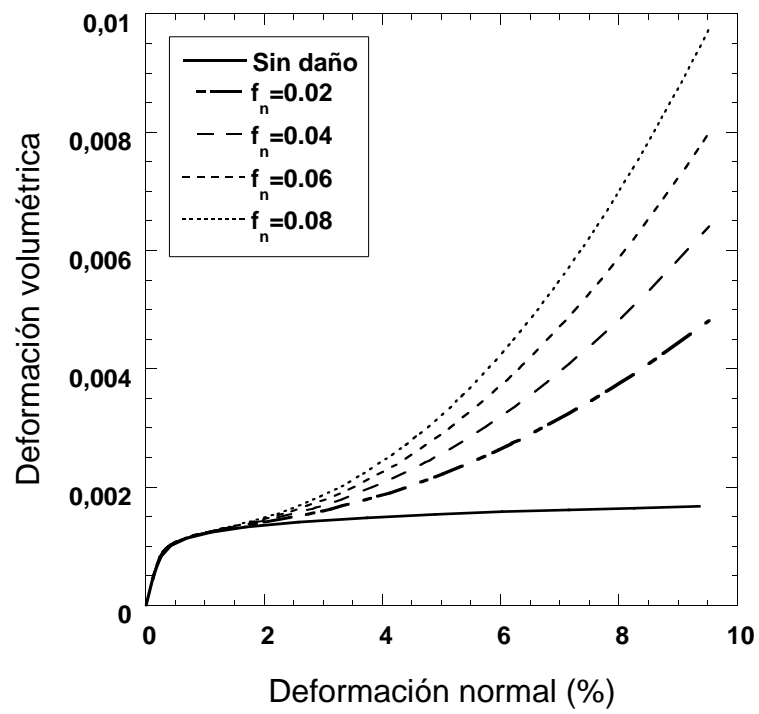


Figura 5.22: Deformación volumétrica en función de la deformación aplicada para materiales compuestos con diferentes valores de f_n , $\xi=0.20$

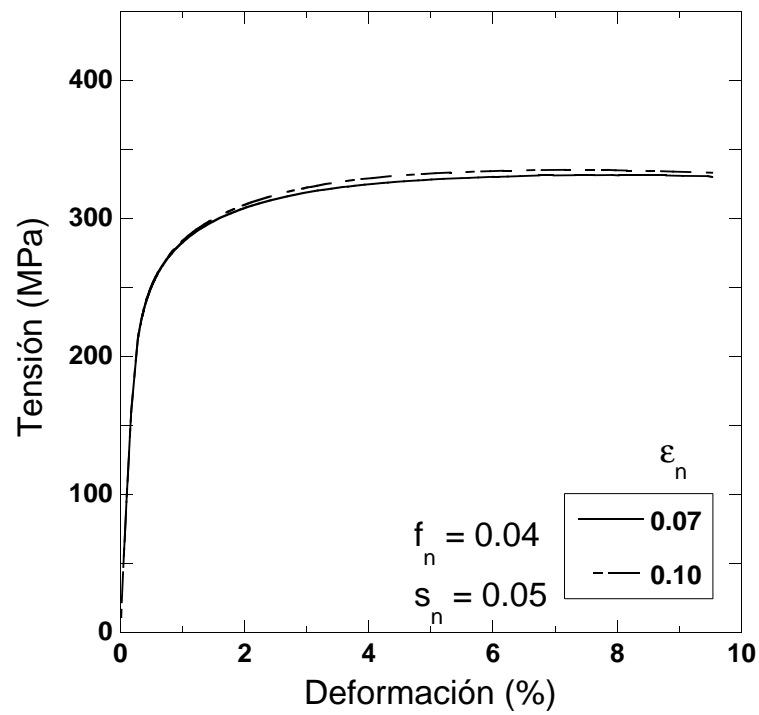


Figura 5.23: Efecto de la deformación media para la nucleación de huecos en la matriz, ϵ_n , sobre la curva tensión-deformación en tracción uniaxial de un material compuesto. $\xi = 0.20$.

CAPÍTULO 6

Validación experimental

La validación experimental de algunos de los modelos y técnicas desarrolladas en los capítulos anteriores se realizó a partir de un material compuesto modelo, cuya fabricación y caracterización mecánica y microestructural se ha realizado dentro del marco de la tesis doctoral. La fabricación del material compuesto y la caracterización microestructural se llevaron a cabo en la universidad Mc Master (Hamilton, Canadá) bajo la supervisión del profesor David Wilkinson durante una estancia de 3 meses de duración. La caracterización mecánica del material compuesto y de sus componentes así como las correspondientes simulaciones numéricas se hicieron en la Universidad Politécnica de Madrid.

6.1. Selección y fabricación del material

La selección de un material compuesto que permitiera validar —al menos parcialmente— los modelos desarrollados a lo largo de la tesis fue sometida a un análisis detallado. El material compuesto y la técnica de fabricación debían cumplir los siguientes requisitos:

- La matriz debía mostrar un comportamiento elasto-plástico con endurecimiento por deformación
- Las partículas de refuerzo debían ser de forma esférica y con poca dispersión en el diámetro, elásticas y mucho más rígidas que la matriz para tener un alto contraste de propiedades mecánicas entre las fases

- La fabricación debía dar lugar a una distribución aleatoria y estadísticamente isotropa de partículas en la matriz
- El daño en las partículas debía producirse principalmente por un solo mecanismo (rotura de partículas o decohesión de la intercara matriz/partícula) para simplificar la validación de los modelos
- El precio de la matriz y las partículas debía ser razonable y la fabricación debía ajustarse a los medios experimentales disponibles.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, se decidió fabricar un material compuesto de matriz metálica para tener una matriz con comportamiento elasto-plástico y endurecimiento por deformación. Se optó por fabricar los materiales mediante metalurgia de polvos que proporciona cierto control sobre la distribución de las partículas dentro de la matriz.

La matriz elegida fue una aleación de Al-Mg-Si, Al-6061, cuyas propiedades mecánicas pueden modificarse fácilmente mediante tratamientos térmicos. Los polvos de la aleación de aluminio empleados tenían un diámetro máximo de $90\ \mu\text{m}$ (tamiz -170 según la norma ASTM) y fueron suministrados por la empresa Valimet, Inc (Stockton, Canadá).

Como refuerzo se utilizaron partículas esféricas de carburo de wolframio, WC, que presenta un módulo de elasticidad y una resistencia mecánica muy elevadas. Las partículas fueron suministradas por Montreal Carbide Co. Ltd. (Montreal, Canadá) y se fabricaron mediante proyección térmica (*thermal spraying*). Este proceso proporcionó partículas de forma esférica que en ocasiones contenían pequeños poros esféricos en el interior y regiones cuya composición química era W_2C . En cualquier caso, la fracción volumétrica de porosidad observada en las partículas nunca superó el 5%. El diámetro de las partículas estaba comprendido entre 53 y $78\ \mu\text{m}$. La forma esférica y la uniformidad del diámetro de las partículas se pueden apreciar en una micrografía obtenida por microscopía electrónica de barrido (Fig. 6.1).

Se fabricaron dos materiales compuestos con fracción volumétrica de partículas de WC del 0.1 y 0.3, mediante la técnica de la metalurgia de polvos que permite obtener una distribución homogénea de las partículas dentro de la matriz. Los parámetros de fabricación siguieron los resultados de Gammage (2002) para este tipo de materiales. También se fabricaron probetas de la matriz de aluminio sin reforzar siguiendo la misma técnica. En la fabricación se partió de los volúmenes necesarios de cada fase para procesar unos $10\ \text{cm}^3$ de material, que se determinaron a partir de las densidades teóricas de la matriz y las

6.1 Selección y fabricación del material

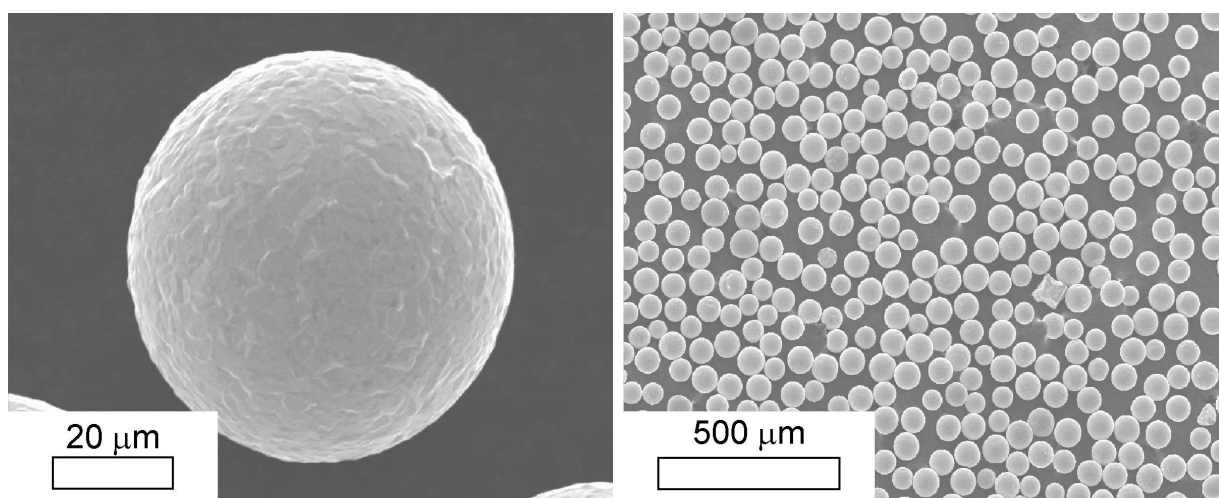


Figura 6.1: Imágenes obtenidas con microscopía electrónica de barrido de las partículas de refuerzo de WC

partículas de refuerzo. La mezcla de polvos se añadió a una disolución de una sustancia ligante (polietilenglicol, PEG) en acetona que se obtuvo calentando el disolvente. La pasta resultante se depositó en un recipiente cilíndrico que se agitó por rotación hasta la evaporación de la acetona. Los posibles restos de acetona se eliminaron calentando la mezcla a 100°C durante unos minutos.

La mezcla de polvos de Al, WC y PEG se depositó en un molde de grafito de sección rectangular y se compactó en una prensa hidráulica a temperatura ambiente hasta obtener un compacto con consistencia suficiente para ser manipulado. Este compacto se calentó por encima de los 350°C para eliminar el ligante orgánico en atmósfera de N₂ para evitar la oxidación de los polvos y luego se colocó en un molde de grafito de sección 55 x 20 mm². El conjunto se introdujo en una máquina de prensado y se hizo vacío en el molde hasta alcanzar una presión de 0.1 Torr. Una vez alcanzado este valor, comenzó el calentamiento a una velocidad de 5.5°C/min. hasta alcanzar los 525°C. Esta temperatura se mantuvo durante una hora para asegurar la homogeneidad de la temperatura en el compacto. A continuación se aplicó una tensión uniaxial mediante el desplazamiento de dos columnas accionadas con un mecanismo hidráulico que comprimían los pistones del molde. Se aseguró el desplazamiento relativo de los dos pistones del molde de grafito para obtener una densidad final más uniforme a lo largo del eje de compresión. La presión aplicada fue de 75 MPa durante 100 minutos. Pasado este tiempo, se retiró la presión y se procedió al enfriamiento de la cámara hasta temperatura ambiente.

Como resultado de la sinterización se obtuvieron piezas de sección rectangular de 55 x 20 mm² y 10-20 mm de altura, que fueron laminadas para romper la capa de Al₂O₃ (procedente del polvo de aluminio) entre los granos del material sinterizado, que fragiliza el material. El laminado se realizó con la pieza en caliente para evitar la fractura del material o de las partículas de refuerzo durante la deformación y las piezas redujeron su espesor en el laminado en una proporción entre 10:1 y 15:1 dependiendo de su espesor inicial. Las piezas se calentaron a 500°C en un horno situado junto a la maquina de laminar durante 20 minutos antes de cada pasada de laminación y se realizaron 20 pasadas hasta alcanzar el espesor final. La observación al microscopio de los materiales laminados confirmó que no se había producido la fractura de las partículas de WC durante la laminación. La aleación de Al-6061 sin reforzar se fabricó también siguiendo el proceso y los parámetros utilizados para los materiales compuestos.

A partir de los materiales laminados se mecanizaron probetas de tracción planas con forma de hueso de perro de 100 mm de longitud (Fig. 6.5). Las probetas fueron sometidas a un tratamiento térmico de solubilización de los precipitados a 530°C durante 40 minutos, enfriadas en agua y envejecidas a la temperatura ambiente durante 15 días antes de ser ensayadas. Este tratamiento térmico corresponde a la condición T4.

6.2. Comportamiento mecánico de las fases

La simulación del comportamiento mecánico del material compuesto partió de las propiedades mecánicas de cada una de las fases, que se midieron o estimaron según se describe a continuación.

6.2.1. Partículas de WC

Las partículas de refuerzo eran de forma esférica (Fig.6.1) y su diámetro medio era de 65 μm con muy poca dispersión. La densidad medida con un densímetro (Mettler Toledo AG245) fue de 16.33±0.05 g/cm³, muy próxima al valor teórico de 15.7 g/cm³ del WC.

Modulo de elasticidad y coeficiente de Poisson

El módulo de elasticidad y el coeficiente de Poisson de las esferas no pudo medirse experimentalmente porque su pequeño diámetro limitaba la precisión de las medidas y se

6.2 Comportamiento mecánico de las fases

estimaron de acuerdo con los valores de la literatura para el WC policristalino y denso. El módulo de elasticidad se tomó $E_p = 700$ GPa y el coeficiente de Poisson $\nu_p = 0.2$ (ASM International, 1991).

Tensión de rotura

La tensión de rotura en tracción de las partículas se midió mediante ensayos de compresión diametral. La compresión diametral de una esfera genera tensiones de tracción en dirección perpendicular a la carga que causan la rotura de la esfera cerámica porque su resistencia a tracción es muy inferior a su resistencia a compresión.

El dispositivo para realizar los ensayos de compresión de las partículas consistió en una máquina de ensayos electro-mecánica (modelo Instron 5866) acoplada una placa de WC sobre la que se esparcieron las partículas de WC. Un punzón micrométrico, fabricado por la National Jet Compay (EE. UU.), se instaló en el puente móvil de la máquina de ensayos conectado a una célula de carga Instron de 100 N de capacidad máxima. Se emplearon punzones de acero rápido y WC de 25.44 mm de altura y 1.02 mm de diámetro. Uno de los extremos del punzón se mecanizó hasta alcanzar 80 μm de diámetro (Fig. 6.2.1) para ensayar a compresión una solo partícula cada vez. El posicionamiento de las partículas para

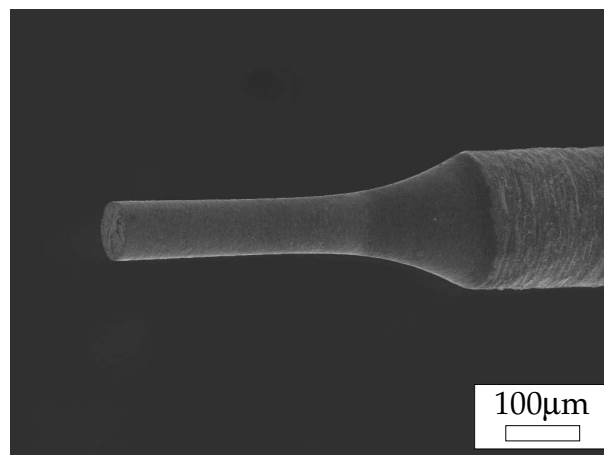


Figura 6.2: Punzón micrométrico para los ensayos de compresión diametral

el ensayo se realizó moviendo la plataforma de WC mediante un sistema de posicionamiento de tornillos micrométricos y con ayuda de un telescopio Questar conectado a un monitor. La imagen del monitor permitió colocar la cabeza del punzón sobre una partícula de WC con precisión (Fig. 6.2.1) para realizar el ensayo a compresión.



Figura 6.3: Dispositivo para realizar los ensayos de compresión diametral de las esferas de WC

El ensayo de cada esfera se realizó en dos fases. Primero se desplazó el punzón hasta una posición cercana a la partícula y se puso en contacto con la base de WC para tener una referencia de la posición de ésta. A continuación se levantó el punzón y se colocó sobre la partícula. El desplazamiento vertical del punzón proporciona el diámetro de la partícula. Tras efectuar esta medida, se realizó el ensayo de compresión hasta rotura a una velocidad

6.2 Comportamiento mecánico de las fases

de desplazamiento del punzón de 18 $\mu\text{m}/\text{min}$. Aparte de una pequeña no linealidad al comienzo, debido al contacto Hertziano entre el extremo plano del punzón y la partícula, las curvas carga-desplazamiento fueron prácticamente lineales hasta rotura. La tensión de rotura, σ_f , se calculó a partir de la expresión de Hiramatsu y Oka (1966),

$$\sigma_f = 0.7 \frac{P}{\pi(d/2)^2} \quad (6.1)$$

donde P es la carga máxima del ensayo y d es el diámetro de la partícula ensayada.

La mayor parte de las esferas rompieron por una grieta paralela al eje de compresión (donde la tensión de tracción es máxima y viene dada por la ecuación 6.1. Los resultados de los 50 ensayos realizados se han representado en el histograma de la Fig. 6.4. La tensión de rotura de las partículas fue muy variable por tratarse de un material frágil cuya resistencia a tracción depende de la situación y el tamaño de los defectos en la microestructura. El valor medio de la tensión de rotura $\bar{\sigma}_f$ fue 1493 MPa y el porcentaje de partículas que rompieron con una tensión inferior a 600 MPa no llegó al 10 % .

El estado de tensiones en las esferas durante el ensayo de compresión diametral es fuertemente triaxial e inhomogéneo. Esta última característica dificulta utilizar el modelo de Weibull para ajustar los resultados experimentales y la tensión de rotura proporciona simplemente un valor indicativo de la resistencia mecánica de las partículas de WC (en torno a 1500 MPa) que es bastante mayor a los valores estimados para partículas de Al_2O_3 o SiC de menor tamaño (Mochida et al., 1991; LLorca et al., 1993; LLorca, 1995).

6.2.2. Matriz de aluminio

Las propiedades mecánicas de la aleación de aluminio 6061 se midieron sobre las probetas de tracción fabricadas a partir del material laminado. Se mecanizaron dos probetas de espesor $e \approx 2$ mm con la forma y dimensiones indicadas en la Fig. 6.5, que se sometieron al mismo tratamiento térmico que las probetas de material compuesto: solubilización a 530°C durante 40 minutos, templado en agua y envejecimiento a temperatura ambiente durante dos semanas hasta el momento del ensayo.

Los ensayos de tracción de las probetas de aluminio 6061 se realizaron en una máquina de ensayos electromecánica Instron 5866. La carga aplicada se midió con una célula de carga de 2000 KN y la deformación mediante un extensómetro resistivo de 12.5 mm de base de medida y ± 2.5 mm de desplazamiento. Los ensayos se realizaron aplicando una

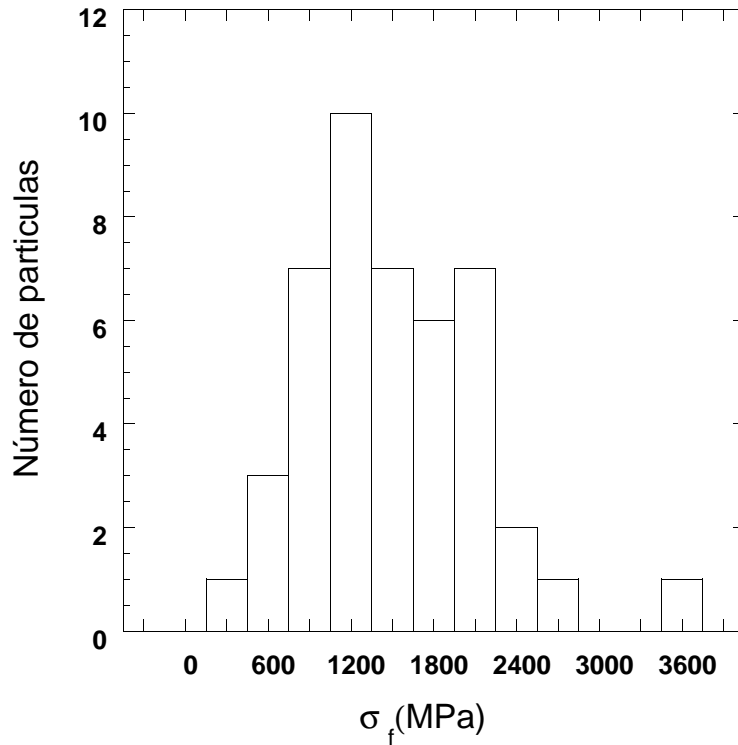


Figura 6.4: Histograma de la tensión de rotura de las esferas

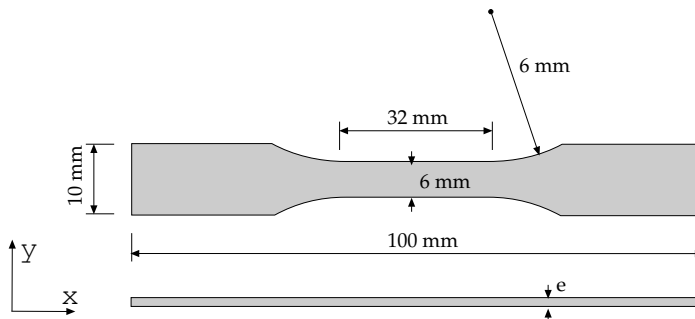


Figura 6.5: Probeta de tracción. El espesor e varió ligeramente en los diferentes materiales

velocidad de 0.5 mm/s al puente de la máquina. La curva tensión-deformación de la matriz de aluminio se ha representado en la Fig. 6.8 junto con los resultados obtenidos para los dos materiales compuestos reforzados con 10 % y 30 % de partículas de WC.

Las superficies de fractura de la aleación de aluminio sin reforzar presentaban un aspecto típico de rotura dúctil con estricción en la sección de la rotura y un plano de fractura a 45° del eje de carga. La ductilidad resultó algo menor que los datos de la literatura para

6.3 Estudio de la microestructura

esta aleación comercial y tratamiento térmico y el límite elástico σ_y de 120 MPa fue muy cercano a los valores estándar (ASM, 1979).

La curva tensión de plastificación-deformación plástica de la aleación, necesaria para la posterior simulación del material, se calculó a partir de las curvas tensión-deformación en tracción restando la parte elástica de la deformación $\epsilon_e = \sigma/E$ a la deformación total ϵ .

6.3. Estudio de la microestructura

La distribución de las partículas dentro de la matriz, la presencia de partículas dañadas y la porosidad en la matriz se estudiaron a partir del análisis en el microscopio óptico de secciones metalográficas. Para ello, las láminas de material compuesto se cortaron y embutieron en resina. Se prepararon tres muestras de cada material: una superficie paralela al plano de laminación (y, por lo tanto, paralela al eje de las probetas de tracción) y dos superficies perpendiculares a dicho plano. Las superficies se desbastaron con una lija de SiC de grano de grit de 220, se pulieron con pasta de diamante de 9 μm , 3 μm y 1 μm y por último con una solución de sílica coloidal.

Las micrografías representativas de la microestructura de los materiales con fracciones volumétricas $\xi = 0.1$ y $\xi = 0.3$, en el plano de laminación se pueden observar en las Figs. 6.6(a) y 6.6(b), respectivamente. Las figuras 6.7(a) y 6.7(b) muestran un detalle de la microestructura de los mismos materiales en un plano perpendicular al anterior. En estas imágenes no es posible descubrir ninguna dirección privilegiada, ni se observó el alineamiento de las partículas a lo largo del eje de laminación y se puede concluir que los materiales resultantes son estadísticamente isótropos. Además, no se observó ninguna tendencia a la agregación de las partículas en el material con $\xi = 0.1$ y su estructura fue estadísticamente homogénea (Figs. 6.6(a) y 6.7(a)). La microestructura del material con $\xi = 0.3$ fue también estadísticamente homogénea aunque se pudo apreciar un mayor grado de agregación de las partículas (Fig. 6.6(b)) debido a la alta fracción volumétrica de refuerzo.

Las micrografías a mayor número de aumentos (Figs. 6.7(a) y 6.7(b)) mostraron claramente los poros en el centro de algunas de las esferas de WC. Estos poros, cuyo volumen nunca superó el 3% del volumen de la partícula, son consecuencia del proceso de fabricación. No se encontraron partículas rotas como consecuencia del proceso de laminación ni se observó porosidad en la matriz y se puede concluir que las condiciones de laminación

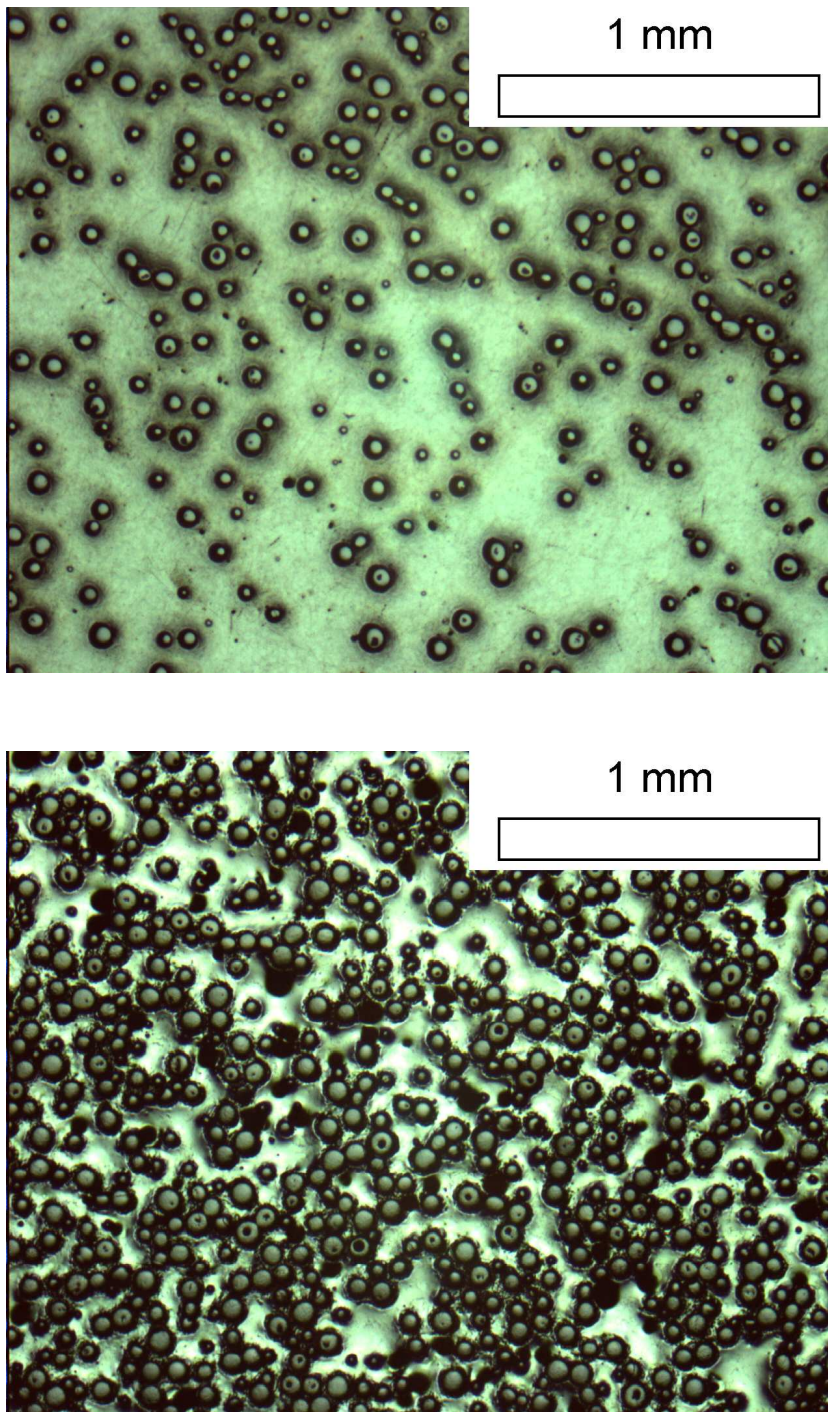


Figura 6.6: Distribución de las partículas en una superficie paralela al plano de laminación. (a) $\xi=0.1$ y (b) $\xi=0.3$. La dirección de laminación es la horizontal.

6.4 Comportamiento mecánico del material compuesto

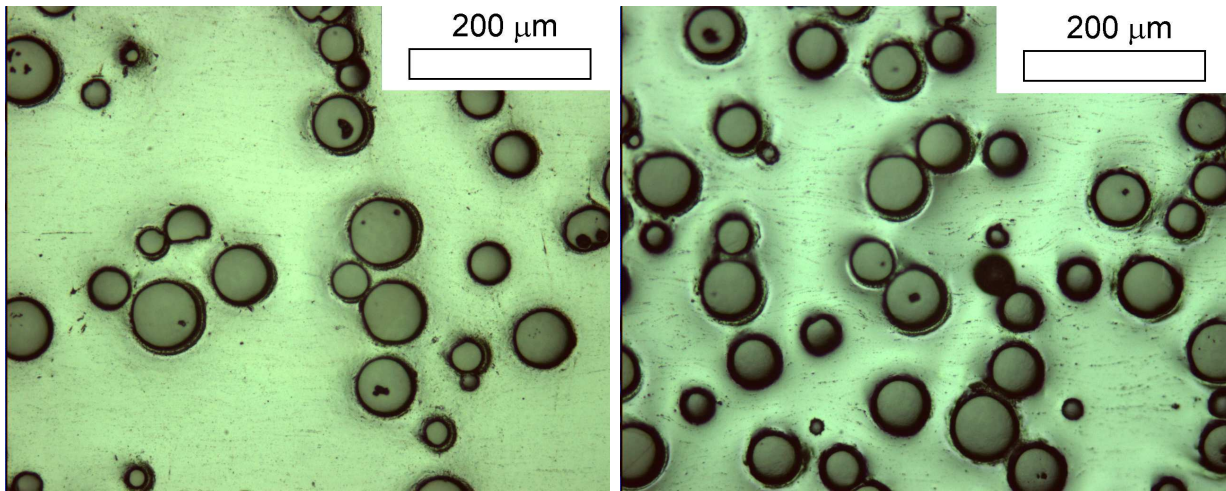


Figura 6.7: Detalle de la microestructura en una superficie perpendicular al plano de laminación. (a) $\xi=0.1$ y (b) $\xi=0.3$

fueron adecuadas.

6.4. Comportamiento mecánico del material compuesto

Se mecanizaron 4 probetas de tracción del material reforzado con un 10 % en volúmen de esferas de WC y dos probetas de material reforzado con un 30 % de WC, todas ellas de la forma y dimensiones indicadas en la Fig. 6.5. Una vez mecanizadas, las probetas fueron sometidas al tratamiento térmico de solubilización, temple en agua y envejecimiento a temperatura ambiente durante dos semanas.

Los ensayos a tracción se realizaron siguiendo las pautas indicadas para las probetas de la aleación de aluminio sin reforzar. Dos probetas del material con fracción volumétrica $\xi = 0.1$ se ensayaron hasta rotura y los ensayos de las otras dos probetas se pararon a deformaciones menores (0.4 % y 3.5 %). Las dos probetas de material compuesto con $\xi = 0.30$ fueron ensayadas hasta rotura. En todos los ensayos se hicieron descargas periódicas para obtener un registro de la degradación del módulo de elasticidad con la deformación. La Fig. 6.8 muestra tres curvas tensión-deformación hasta rotura representativas del comportamiento de la matriz y los materiales compuestos con $\xi = 0.1$ y 0.3.

El módulo de elasticidad de los dos materiales compuestos se ha recogido en la tabla

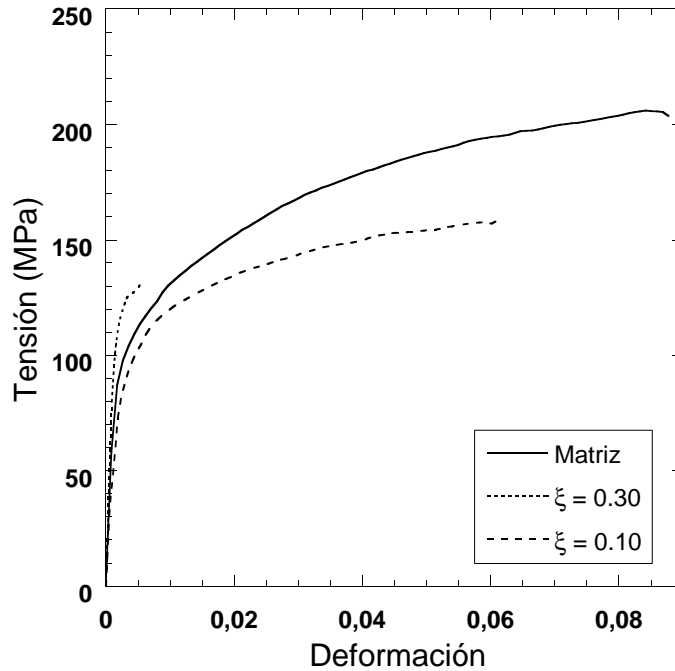


Figura 6.8: Curvas tensión-deformación de la aleación Al 6061 y de los materiales compuestos con $\xi = 0.1$ y 0.3

6.1. El módulo elástico de los materiales compuestos aumentó con la fracción volumétrica de refuerzo pero los valores fueron inferiores a los esperados: los materiales compuestos con $\xi=0.1$ presentaron un módulo elástico cercano a 70 GPa (semejante al de la matriz sin reforzar) mientras que cualquier modelo sencillo predice un valor próximo a ≈ 80 GPa. Las observación de su microestructura demostró que no había partículas rotas antes de los ensayos y tampoco se observó ningún tipo de porosidad o daño en la matriz. En consecuencia, la diferencia entre la rigidez teórica y los resultados experimentales se debió a la falta de cohesión inicial entre algunas esferas y la matriz.

$\xi = 0.1$	$\xi = 0.3$
70.3 GPa	98.1 GPa
68.8 GPa	88.6 GPa
72.5 GPa	

Cuadro 6.1: Módulos de elasticidad de las probetas de materiales compuestos ensayadas a tracción

6.4 Comportamiento mecánico del material compuesto

El límite elástico, σ_y , y la deformación de rotura, ϵ_u , de las probetas ensayadas a tracción se encuentran recogidos en la tabla 6.2. El límite elástico aumentó con la fracción volumétrica de refuerzo a costa de una reducción muy marcada de la ductilidad del material (Fig. 6.8). La falta de cohesión en la intercara matriz/partícula también repercutió en el comportamiento de los materiales compuestos y las curvas tensión-deformación de los materiales con $\xi=0.1$ quedaron por debajo de las medidas sobre la aleación aluminio sin reforzar (Fig. 6.8).

	σ_y	ϵ_u
$\xi=0.1$	105 MPa	0.038
	102 MPa	0.063
	99 MPa	
$\xi=0.3$	125 MPa	0.0054
	115 MPa	0.0056

Cuadro 6.2: Límite elástico, σ_y , y deformación de rotura, ϵ_u , de las probetas de material compuesto ensayadas a tracción.

La evolución del daño durante la deformación en los materiales compuestos se investigó midiendo periódicamente el módulo de elasticidad mediante cargas y descargas para diferentes valores de la deformación aplicada (Fig. 6.9). La degradación del módulo de elasticidad E , adimensionalizada con respecto al valor inicial E_0 , se ha dibujado en la figura 6.10 en función de la deformación plástica para los materiales compuestos con $\xi=0.1$ y $\xi=0.3$. La reducción del módulo fue muy severa inicialmente, hasta que el material alcanzó una deformación plástica superior al 0.5% y el material compuesto con mayor fracción volumétrica se vio más afectado.

6.4.1. Micromecanismos de fractura

Los micromecanismos de fractura de los materiales compuestos se analizaron a partir de la observación de las superficies de fractura en el microscopio electrónico de barrido. Las superficies presentaron un aspecto rugoso y la superficie de rotura fue perpendicular a la dirección de carga (Fig. 6.11).

Las superficies de fractura de los materiales mostraron un gran número de partículas

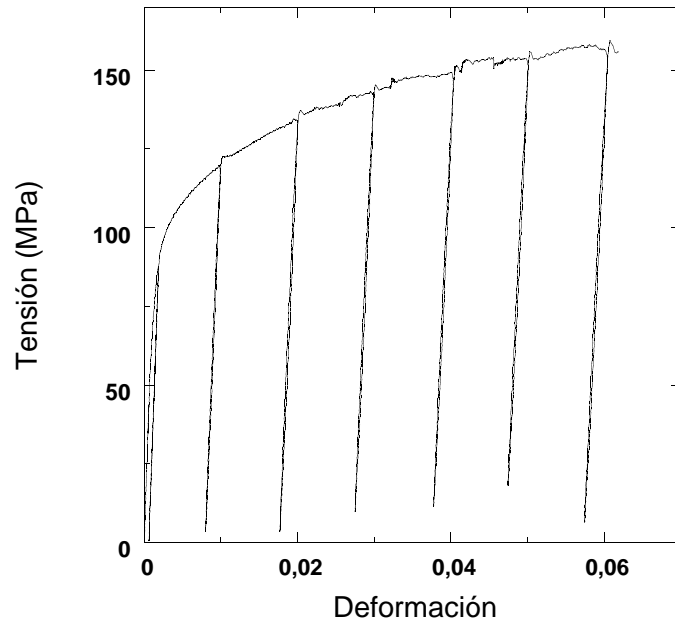


Figura 6.9: Curva tensión-deformación con descargas en el material compuesto con $\xi = 0.1$.

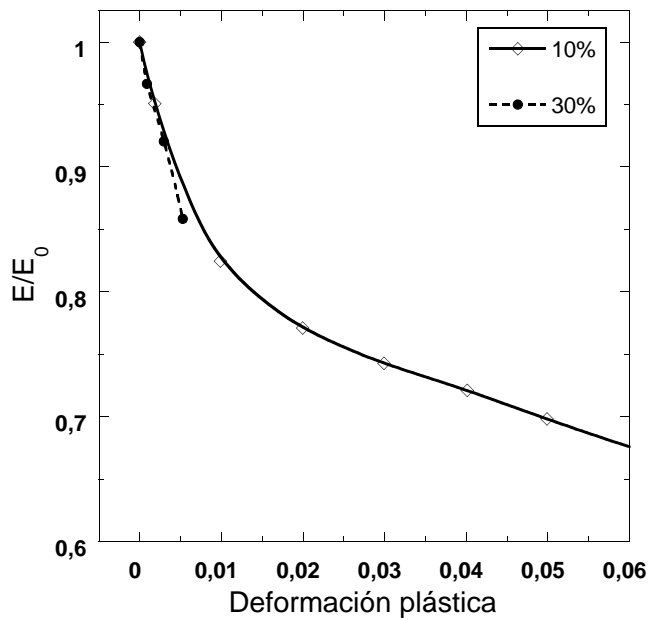


Figura 6.10: Degradación del módulo de elasticidad (normalizado por su valor inicial, E_0) en función de la deformación plástica.

6.4 Comportamiento mecánico del material compuesto

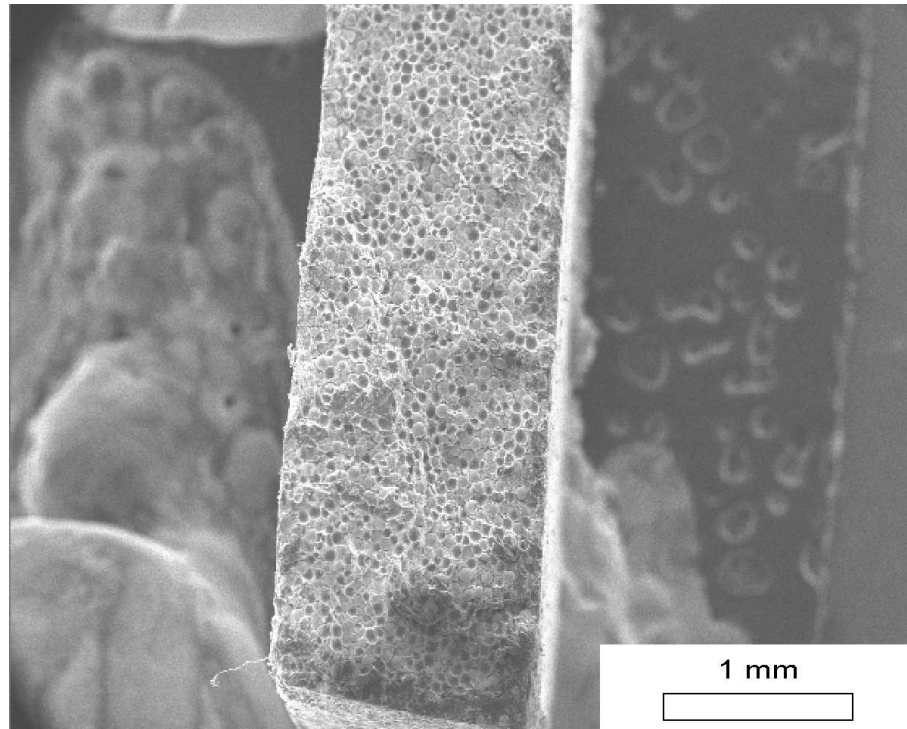


Figura 6.11: Vista general de la superficie de fractura del material compuesto con $\xi=0.1$

decohesionadas y de huecos esféricos (Fig. 6.12(a)) indicando que la rotura del material fue precedida por la decohesión de la intercara entre la matriz y las partículas de refuerzo. La observación a mayor número de aumentos de las partículas (Fig. 6.12(b)) mostró la fuerte deformación plástica de la matriz de aluminio junto a las esferas de WC, indicando que algunas partículas se desprendieron de la matriz al comienzo de la deformación y a partir de ese momento la matriz alrededor de las esferas pudo deformarse plásticamente sin ninguna coacción.

Los micromecanismos de rotura de la matriz mostraron una rotura dúctil por nucleación, crecimiento y coalescencia de huecos (Figs. 6.13 y 6.12(b)). No se apreciaron diferencias significativas entre la superficie de fractura de la matriz de los materiales compuestos con diferente fracción volumétrica de partículas.

La formación de cavidades alrededor de la intercara y su crecimiento durante la deformación plástica se analizó observando en el microscopio electrónico de barrido secciones longitudinales del material con $\xi=0.10$ extraídas de probetas que hubieran sido deformadas sin llegar a rotura. La Fig 6.14(a) muestra el comienzo de la decohesión de la intercara matriz-partícula para una deformación aplicada muy pequeña ($\epsilon=0.004$), casi al comienzo

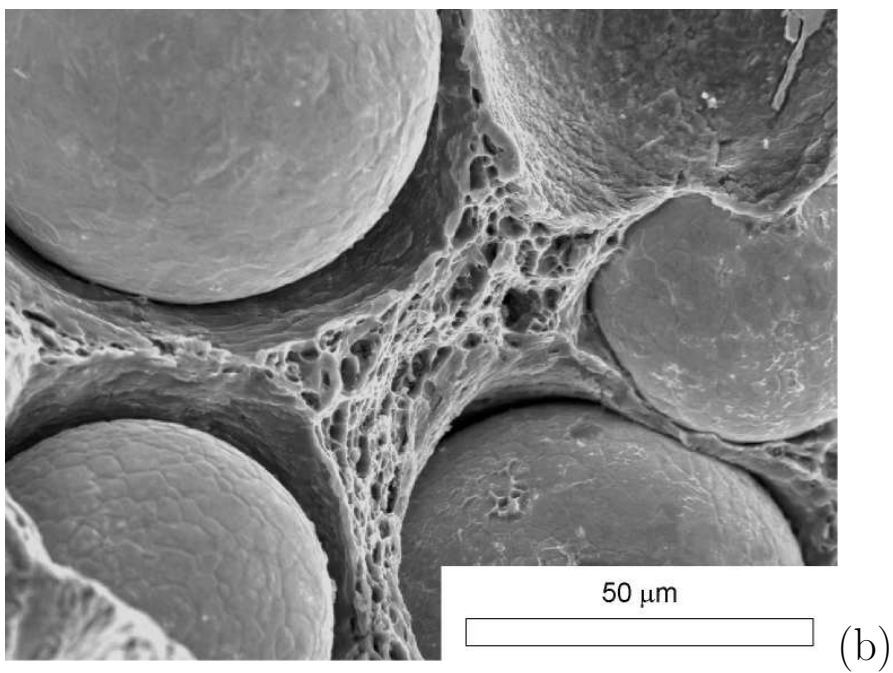
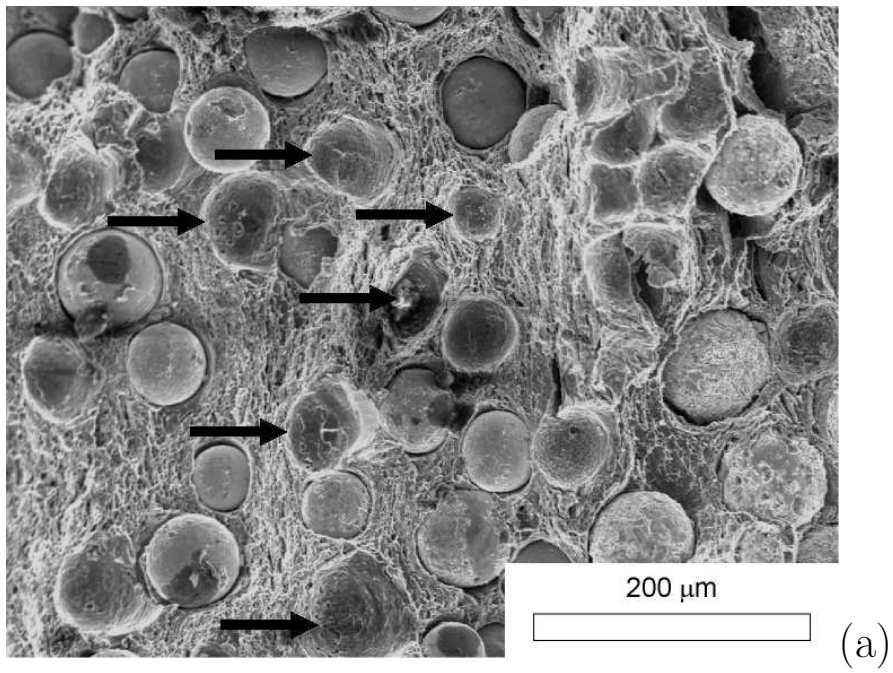


Figura 6.12: Superficies de fractura de los materiales compuestos. (a) $\xi = 0.1$. (b) $\xi = 0.3$. Algunos de los huecos esféricos están señalados con una flecha.

6.4 Comportamiento mecánico del material compuesto

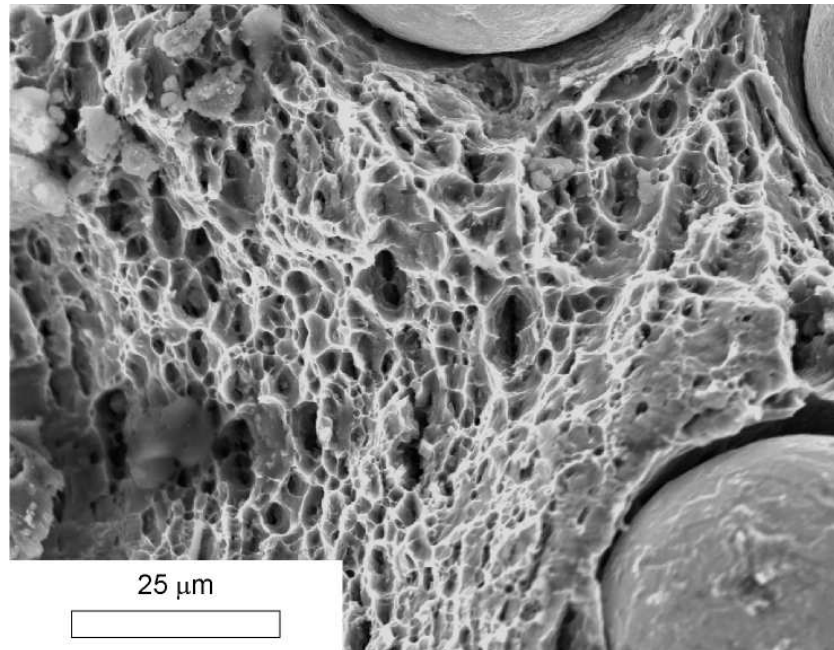


Figura 6.13: Detalle de la superficie de rotura de la matriz, $\xi=0.1$. El mecanismo dominante fue la nucleación, crecimiento y coalescencia de cavidades.

de la deformación plástica del material. La decohesión se inició por la formación de dos poros en la intercara en los polos de la partícula orientados según el eje de carga (eje vertical de la figura) y dichos huecos crecieron por deformación plástica de la matriz. El proceso se aceleró por la presencia de partículas cercanas en la dirección de carga (Fig 6.14(b)).

Estas observaciones permitieron reconstruir los procesos de deformación y fractura en los materiales compuestos. Antes de comenzar la deformación existía una fracción de partículas decohesionadas de la matriz que se tradujo en una reducción de la rigidez inicial del material compuesto. La fracción de partículas decohesionadas aumentó con la deformación (Fig. 6.14(a) y 6.14(b)) dando lugar a una progresiva disminución del módulo de elasticidad del compuesto (Fig. 6.10) y la rotura final se produjo por la nucleación, crecimiento y coalescencia de cavidades en la matriz.

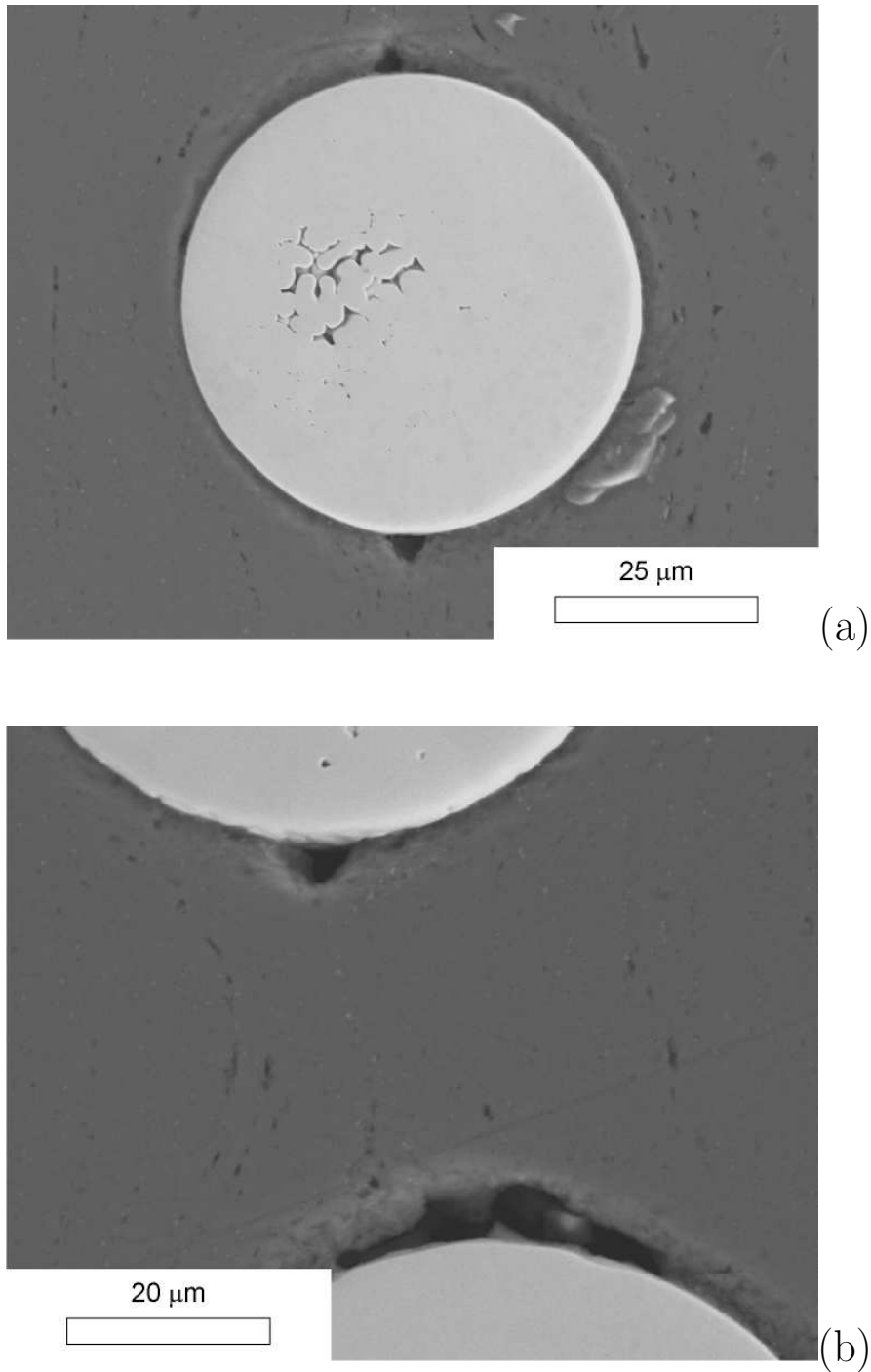


Figura 6.14: (a) Generación de una cavidad por decohesión en la intercara en los polos de una partícula durante el ensayo a tracción, $\epsilon=0.004$. (b) Crecimiento de las cavidades entre dos partículas próximas, $\epsilon = 0.04$. La dirección de aplicación de carga es la vertical

6.5. Modelización

El comportamiento mecánico de los materiales compuestos fabricados se simuló con las técnicas numéricas desarrolladas durante la tesis. Para ello se discretizaron dos celdas unitarias con 35 partículas y fracciones volumétricas de esferas de refuerzo $\xi = 0.1$ y 0.3 . La discretización por elementos finitos fue similar a la usada durante la tesis, con 500 elementos tetraédricos para representar cada esfera y un total de unos 100000 nodos para toda la celda. Se introdujeron elementos cohesivos en las intercaras matriz-partícula para simular el proceso de decohesión observado experimentalmente.

La matriz de aluminio Al-6061 T4 se representó como un sólido elasto-plástico con endurecimiento isótropo y una superficie de plastificación siguiendo el criterio de Von Mises. Las constantes elásticas de la matriz fueron $E_m = 70$ GPa y $\nu_m = 0.20$ y la tensión de plastificación en función de la deformación plástica se obtuvo a partir de las curvas tensión-deformación de la matriz sin reforzar, suavizando la curva experimental mediante una interpolación tipo *sp - line*. Además, la curva tensión-deformación plástica de la matriz se extrapola mediante un ajuste a una curva potencial del tipo $\bar{\sigma} = \sigma_0 + A(\epsilon_{eq})^n$ para deformaciones plásticas superiores a $\epsilon = 0.1$

El problema de la decohesión inicial

Los valores experimentales del módulo de elasticidad de todos los materiales compuestos fueron inferiores a las predicciones de todos los modelos analíticos y numéricos debido a la presencia de daño en el material anterior a su deformación. Las observaciones microscópicas tras el proceso fabricación no mostraron rotura de partículas ni porosidad o daño en la matriz por lo que se dedujo que la reducción de la rigidez era causada por partículas decohesionadas de la matriz. Este hecho se tuvo en cuenta introduciendo en la simulación un porcentaje de intercaras cuya rigidez a tracción era nula mientras se mantenía la rigidez a compresión para tener en cuenta el posible contacto de la matriz con la superficie de las partículas. La fracción volumétrica de partículas decohesionadas se determinó ajustando el módulo de elasticidad de los modelos numéricos con los valores experimentales. En ambos casos ($\xi = 0.1$ y $\xi = 0.3$) se llegó a que la fracción de partículas decohesionadas de la matriz al comienzo de la deformación se encontraba entre el 40% y el 45%.

6.5.1. Modelización

Las primeras simulaciones del comportamiento del material compuesto se realizaron empleando un modelo elasto-plástico sin daño y los máximos valores de las tensiones en las partículas fueron muy inferiores a la tensión de rotura de las partículas de WC medidas experimentalmente (tensión media de rotura ≈ 1500 MPa). Por esta razón, no se incluyó el daño por fractura de partículas en las simulaciones del comportamiento de los materiales compuestos. Esta decisión concuerda con las observaciones experimentales donde no se encontraron partículas rotas tras la deformación.

El daño por decohesión de la intercara entre la matriz y las partículas de refuerzo se introdujo mediante el elemento cohesivo de intercara. El comportamiento mecánico de la intercara siguió el modelo de Tvergaard y Hutchinson (1993) modificado y expuesto en el capítulo anterior. Los valores de la energía de fractura, Γ_{in} , y la resistencia a tracción de la intercara, t_c , no se pudieron medir experimentalmente y se estimaron para ajustar las simulaciones del material con $\xi = 0.1$ a la curva tensión-deformación experimental. Los valores obtenidos fueron $\Gamma_{in} = 100$ J/m² y $t_c = 110$ MPa, que son razonables para este tipo de matriz y partículas (Babout et al., 2004).

Los resultados de las simulaciones numéricas y las curvas tensión-deformación experimentales se han dibujado en las Figs. 6.15 y 6.16 para los materiales con $\xi = 0.1$ y $\xi = 0.3$, respectivamente. También se han incluido en estas figuras los resultados obtenidos en ausencia de daño por decohesión de la intercara matriz/refuerzo. La simulación numérica con daño se aproximó mucho a los resultados experimentales del material compuesto con $\xi=0.10$ en todo el rango de deformación porque los parámetros de la intercara se escogieron con este fin. Este buen acuerdo demuestra que el modelo es capaz de reproducir adecuadamente el comportamiento macroscópico del material desde el comienzo de la deformación hasta la fractura empleando valores realistas de las propiedades de las fases. Las curvas de la Fig. 6.15 también mostraron que el efecto del daño por decohesión fue muy importante y la diferencia entre la tensión soportada por el material compuesto sin considerar daño y la obtenida experimentalmente (y simulada con el modelo de decohesión) fue mayor a un 18% (Fig. 6.15).

Las simulaciones del material compuesto con $\xi = 0.30$ se realizaron utilizando para la matriz, las partículas y la intercara matriz/refuerzo las mismas propiedades que antes. Los resultados de la simulación mostraron un acuerdo razonable con los resultados experi-

6.5 Modelización

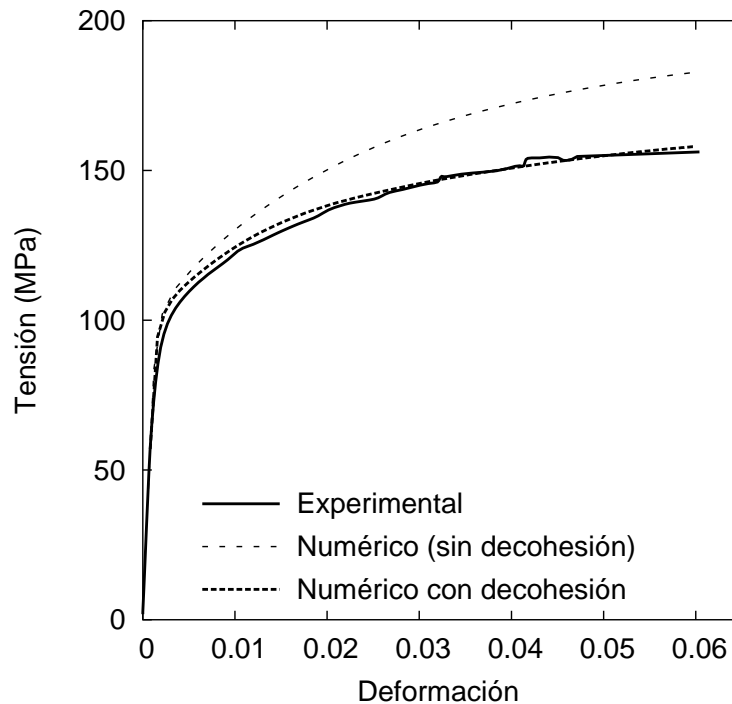


Figura 6.15: Comportamiento en tracción uniaxial para el material compuesto Al 6061 reforzado con esferas de WC. Resultados experimentales y simulaciones numéricas con y si daño. $\xi = 0.10$

mentales aunque algo peor a las simulaciones del material con $\xi = 0.10$ pero, teniendo en cuenta el gran número de parámetros indeterminados del material y que se emplearon para las intercara los valores estimados para el otro material, la predicción de los modelos fue satisfactoria (la curva experimental se encontró entre las simulaciones con y sin daño). Estos resultados confirman además que los parámetros estimados para la intercara (110 MPa y 100 J/m^2) son prácticamente independientes de la fracción volumétrica de las partículas de refuerzo.

Las simulaciones numéricas también permitieron evaluar la reducción progresiva del módulo de elasticidad del material compuesto con la deformación y los resultados experimentales y numéricos se han representado en la Fig. 6.17 para el material con $\xi = 0.1$. El acuerdo entre los valores experimentales y los numéricos es bastante bueno y la diferencia entre ambos valores es siempre menor al 10%. Este hecho confirmó la hipótesis de que el daño en el material compuesto se debió principalmente a la decohesión entre la matriz y las esferas de WC. Esta degradación fue muy severa al comienzo de la deformación plástica

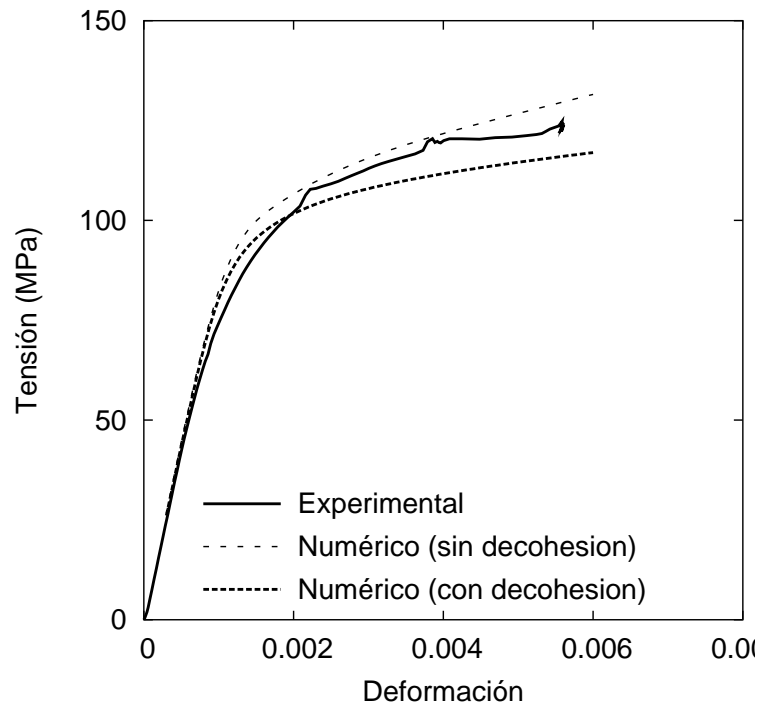


Figura 6.16: Comportamiento en tracción uniaxial para el material compuesto Al 6061 reforzado con esferas de WC. Resultados experimentales y simulaciones numéricas con y sin daño. $\xi = 0.30$.

y progresó más suavemente para deformaciones plásticas superiores al 2%.

El acuerdo entre las simulaciones numéricas y los resultados experimentales ponen de manifiesto que los modelos numéricos desarrollados en esta tesis son capaces de reproducir el comportamiento macroscópico de este tipo de materiales compuestos así como los mecanismos microscópicos de deformación y daño si se cuenta con un conocimiento adecuado de las propiedades de las fases y de la microestructura de un material compuesto.

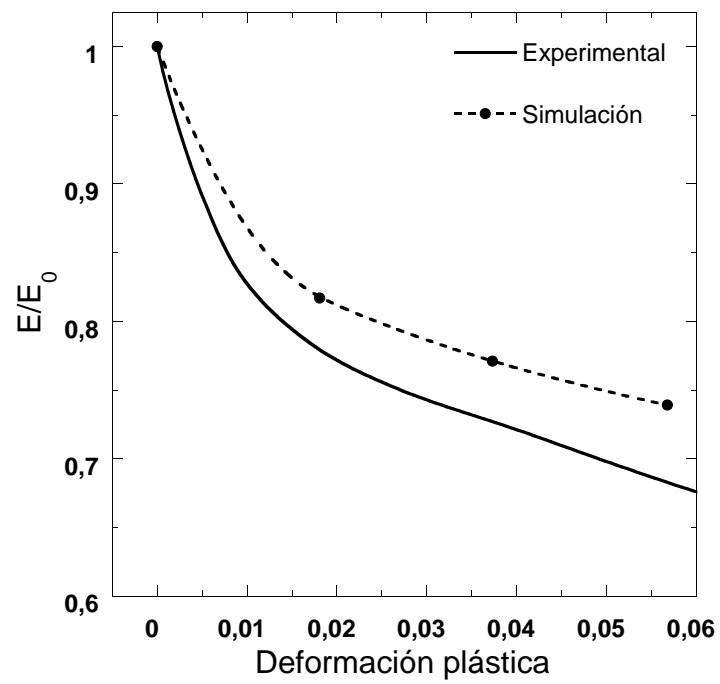


Figura 6.17: Degradación del módulo de elasticidad del material compuesto en función de la deformación plástica para $\xi = 0.10$.

CAPÍTULO 7

Conclusiones y trabajo futuro

7.1. Conclusiones

La presente tesis doctoral ha desarrollado una nueva metodología para analizar el comportamiento mecánico de materiales compuestos a partir de la simulación numérica de la deformación de un volumen representativo de la microestructura. Esta metodología parte de la generación de estos volúmenes representativos en tres dimensiones y se han desarrollado y programado dos algoritmos que permiten generar dispersiones aleatorias y estadísticamente isotrópicas de esferas distribuidas de manera homogénea o heterogénea dentro de la matriz. Los volúmenes se discretizaron en elementos finitos y el comportamiento efectivo del material compuesto se calculó mediante el análisis numérico de varios volúmenes representativos para cada microestructura. La nueva herramienta de simulación se validó comparando los resultados de las simulaciones con los obtenidos experimentalmente sobre un material compuesto de matriz de aluminio reforzado con partículas esféricas de WC, fabricado específicamente para esta investigación.

El primer resultado novedoso de la aplicación de esta nueva metodología de análisis fue determinar la solución *exacta* para un problema clásico en Mecánica de Sólidos: las constantes elásticas de un material formado por una dispersión aleatoria, estadísticamente isotrópica y homogénea de esferas rígidas o huecos esféricos dentro de una matriz elástica. Este resultado permitió evaluar la precisión de los métodos de homogeneización desarrollados durante los últimos cuarenta años y estableció que la estimación de tercer orden de Torquato proporciona la mejor aproximación para calcular las constantes elásticas.

La metodología de esta tesis también ha permitido analizar en detalle el origen de las limitaciones de los modelos de campo medio para simular el comportamiento de los materiales compuesto en régimen elasto-plástico. Los modelos secantes modificados son los que mejor reproducen la deformación elasto-plástica de los materiales compuestos porque las constantes elásticas secantes de la matriz se evalúan a partir de una tensión equivalente calculada a partir del momento de segundo orden del tensor de tensiones en la matriz, que es muy similar a la media de la tensión equivalente en la matriz, calculada numéricamente. Además, las simulaciones numéricas mostraron que los materiales compuestos con una matriz con baja capacidad de endurecimiento por deformación se comportan en la transición elasto-plástica como materiales formados por tres fases con diferentes propiedades: partículas elásticas, regiones elásticas de matriz y regiones plastificadas de matriz. Los modelos de campo medio actuales no son capaces de reproducir con precisión la deformación del material compuesto en esta zona puesto que solo consideran la existencia de dos fases: las partículas elásticas y la matriz plástica.

En tercer lugar, los modelos numéricos han permitido estudiar la influencia de la distribución espacial del refuerzo en el comportamiento elasto-plástico y en la nucleación del daño por fractura de partículas. La presencia de agregados de partículas en la matriz aumenta ligeramente la tensión efectiva en el material compuesto pero a costa de incrementar considerablemente la máxima tensión principal en las partículas a nivel local. En consecuencia, la fracción de partículas rotas durante la deformación es mucho más elevada y el efecto reforzante de la distribución inhomogénea es despreciable frente a la caída en las propiedades mecánicas debida a la fractura de los refuerzos.

Finalmente, las simulaciones han abordado el análisis del efecto del daño por decohesión en la intercara matriz-refuerzo y por la fractura dúctil de la matriz. En el primer caso fue necesario desarrollar un nuevo elemento finito de intercara y en el segundo modificar el modelo de Gurson disponible en el código de elementos finitos. Las simulaciones reprodujeron los patrones de daño observados experimentalmente. A nivel macroscópico, el daño por decohesión en la intercara produjo una importante reducción de la tensión soportada por el material compuesto y en su ductilidad en tracción, y estos efectos fueron mucho más acusados para las microestructuras inhomogéneas. El daño dúctil en la matriz se concentró entre partículas cercanas y alineadas según la dirección de carga y también dio lugar a una importante reducción de las propiedades mecánicas del material compuesto.

7.2. Trabajo futuro

Entre las posibles líneas de trabajo futuro cabe destacar las siguientes:

- Las partículas de refuerzo de los materiales compuestos tienen geometrías muy diversas que van desde partículas angulosas, más o menos equiaxiales, a fibras cortas. La forma de las partículas es un factor importante en la nucleación del daño en el material y sería interesante emplear la metodología desarrollada en esta tesis para estudiar materiales reforzados con partículas angulosas o fibras cortas, que podrían representarse como cubos o elipsoides, respectivamente, orientados aleatoriamente.
- El daño en la matriz se ha simulado en esta tesis mediante el modelo de Gurson modificado pero los resultados obtenidos con este tipo de modelos dependen de la discretización por elementos finitos. Este problema se evitaría mediante la implementación de versiones no locales de éste u otro modelo de daño similar a costa de introducir una longitud característica en el modelo cuyo sentido físico tiene que aclararse.
- El proceso de fractura frágil de las partículas cerámicas se ha abordado en esta tesis utilizando elementos de intercara y suponiendo que la rotura se produce en el ecuador. Esta hipótesis no es realista y es necesario desarrollar otro modelo para incluir este hecho.
- La coalescencia de los huecos en la matriz es la causa final de la rotura de los materiales compuestos de matriz metálica pero hasta ahora no existe un modelo que permita conocer con precisión cual es la condición que da lugar a esta coalescencia. El empleo de una técnica experimental como la tomografía —que permite conocer la evolución del daño en la microestructura durante un ensayo— combinada con la simulación micromecánica empleando la metodología desarrollada permitiría establecer un modelo realista para la coalescencia y rotura final en estos materiales.
- Por último, el estudio de geometrías de *clusters* más complicadas (regiones alargadas o cilíndricas) que aparecen como consecuencia de los procesos de fabricación de los materiales requiere la simulación de volúmenes representativos de mayor tamaño (100 ó 200 partículas), cuyo coste computacional es prohibitivo. El estudio e implementación de nuevos métodos numéricos como la descomposición en dominios (basados en

la división del problema en varias subregiones) podrían disminuir drásticamente el tiempo empleado en cada iteración de los cálculos y permitirían abordar el análisis de volúmenes representativos mucho mayores.

APÉNDICE A

Funciones de forma

Las funciones de forma del elemento de intercara que conecta las caras de dos tetraedros de 10 nodos (triángulos de 6 nodos) deben ser compatibles con las funciones de forma de los tetraedros en esas caras. Las funciones de forma del elemento de intercara *estandar* compatible con el tetraedro cuadrático estandar de 10 nodos de Abaqus (C3D10) se expresan como

$$\begin{aligned}\phi_1(\xi, \eta) &= 2\left(\frac{1}{2} - \xi - \eta\right)(1 - \xi - \eta) \\ \phi_2(\xi, \eta) &= 2\xi\left(\xi - \frac{1}{2}\right) \\ \phi_3(\xi, \eta) &= 2\eta\left(\eta - \frac{1}{2}\right) \\ \phi_4(\xi, \eta) &= 4\xi(1 - \xi - \eta) \\ \phi_5(\xi, \eta) &= 4\xi\eta \\ \phi_6(\xi, \eta) &= 4\eta(1 - \xi - \eta)\end{aligned}\tag{A.1}$$

donde las posiciones de los nodos en la superficie triangular se muestran en la Fig.A.1.

En el caso del elemento de intercara modificado, el triángulo cuadrático se divide en cuatro subtriángulos lineales (Fig.A.1). Las funciones de forma en la posición (ξ, η) dependen del subtriángulo en el que esté localizado el punto, y se expresan como Thoutireddy et al. (2002)

Triángulo I

$$\begin{aligned}
 \phi_1(\xi, \eta) &= 1 - 2\xi - 2\eta \\
 \phi_4(\xi, \eta) &= 2\xi \\
 \phi_6(\xi, \eta) &= 2\eta
 \end{aligned}
 \tag{A.2}$$

Triángulo II

$$\begin{aligned}
 \phi_2(\xi, \eta) &= 2\left(\xi - \frac{1}{2}\right) \\
 \phi_4(\xi, \eta) &= 1 - 2\left(\xi - \frac{1}{2}\right) - 2\eta \\
 \phi_5(\xi, \eta) &= 2\eta
 \end{aligned}
 \tag{A.3}$$

Triángulo III

$$\begin{aligned}
 \phi_3(\xi, \eta) &= 2\left(\eta - \frac{1}{2}\right) \\
 \phi_5(\xi, \eta) &= 2\xi \\
 \phi_6(\xi, \eta) &= 1 - 2\xi - 2\left(\eta - \frac{1}{2}\right)
 \end{aligned}
 \tag{A.4}$$

Triángulo IV

$$\begin{aligned}
 \phi_4(\xi, \eta) &= 2\left(\frac{1}{2} - \eta\right) \\
 \phi_5(\xi, \eta) &= 2\xi + 2\eta - 1 \\
 \phi_6(\xi, \eta) &= 2\left(\frac{1}{2} - \xi\right)
 \end{aligned}
 \tag{A.5}$$

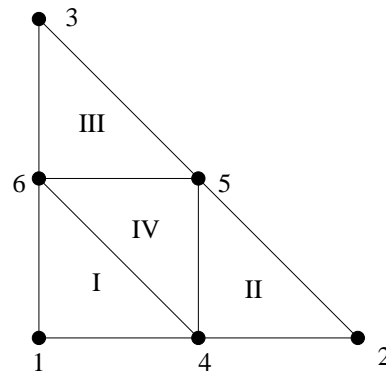


Figura A.1: Posiciones de los nodos y subdivisión en triángulos para las funciones de forma del elemento de intercara modificado

Bibliografía

- Abaqus (2001). *ABAQUS User's manual v.6.1*. Hibbit and Karlsson and Sorensen.
- J. ABOUDI (1997). Micromechanical analysis of composites by method of cells. *Applied Mechanical Review* **42**: 193–221.
- Ansys (2001). *ANSYS 5.7. User's Manual*. Ansys Inc., Cononsburg, PA.
- ASM (1979). *Metals Handbook Ninth Edition*. ASM.
- ASM International (1991). *Engineered materials handbook. v. 4. Ceramics and glasses*. ASM International.
- L. BABOUT, W. LUDWIG, E. MAIRE Y J. BUFFIÈRE (2003). Damage assessment in metallic structural materials using high resolution synchrotron x-ray tomography. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **200**: 303–307.
- L. BABOUT, E. MAIRE, J. BUFFIÈRE Y R. FOUGÈRES (2001). Characterization by x-ray computed tomography of decohesion, porosity growth and coalescence in model metal matrix composites. *Acta Materialia* **49**: 2055–2063.
- L. BABOUT, E. MAIRE Y R. FOURGÈRES (2004). Damage initiation in model metallic materials: X-ray tomography and modelling. *Acta Materialia* **52**: 2457–2487.
- Z. BAŽANT Y J. PLANAS (1998). *Fracture size effect in concrete and other quasibrittle materials*. CRC Press, New York.
- Y. BENEVISTE (1987). A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials. *Mechanic of Materials* **27**: 147–157.

- M. BERAN Y J. MOLYNEUX (1966). Use of classical variational principles to determine bounds for the effective bulk modulus in heterogeneous media. *Journal of Applied Mathematics* **24**: 107–118.
- M. BERVEILLER Y A. ZAOUÏ (1979). An extension to the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **26**: 325–344.
- H. BÖHM. A short introduction to basic aspects of continuous micromechanics. (2000).
- H. BÖHM Y W. HAN (2001). Comparisons between three-dimensional and two-dimensional multi-particle unit cell methods for particle reinforced composites. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **9**: 47–65.
- A. BORBÉLY, H. BIERMANN Y O. HARTMANN (2001). A investigation of the effect of particle distribution on the uniaxial stress-strain behaviour of particulate reinforced metal-matrix composites. *Material Science and Engineering A* **313**: 34–45.
- J. BOSELLI, P. PITCHNER, P. GREGSON Y I. SINCLAIR (2001). Numerical modelling of particle distribution effects on fatigue in Al-SiC composites. *Material Science and Engineering A* **300**: 113–124.
- L. BROWN Y J. EMBURY. The initiation and growth of voids at second phase particles. En *Proceedings ICSMA III* 164–168. (1973).
- V. BURYACHENKO (1996). The overall elastoplastic behavior of multiphase materials with isotropic components. *Acta Mechanica* **119**: 93–117.
- J.-L. CHABOCHE Y P. KANOUTÉ (2003). On the ‘isotropic’ and ‘anisotropic’ approximations of the tangent operator in the incremental tangent and affine methods. *Comptes Rendus Mecanique* **331**: 857–864.
- H. CHEN, Q. YANG Y F. WILLIAMS (1994). A self-consistent finite element approach to the inclusion problem. *Computational Material Science* **2**: 301–307.
- R. CHRISTENSEN (1990). A critical evaluation for a class of micromechanics models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **38**: 379–404.

Bibliografía

- R. CHRISTENSEN Y K. LO (1979). Solution for effective shear properties three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **27**: 315–330.
- T. CHRISTMAN, A. NEEDLEMAN Y S. SURESH (1989). An experimental and numerical study of deformation in ceramic-matrix composites. *Acta Metallurgica et Materialia* **37**: 3029–350.
- T. CLYNE Y P. WITHERS (1993). *An introduction to metal matrix composites*. Cambridge University Press.
- K. CONLON Y D. WILKINSON (2001). Effect of particle distribution on deformation and damage of two-phase alloys. *Material Science and Engineering A* **317**: 108–114.
- S. CORBIN Y D. WILKINSON (1994). The influence of particle distribution on the mechanical response of a particulate metal matrix composite. *Acta Metallurgica et Materialia* **42**: 1311–1318.
- M. A. CRISFIELD (1986). Snap-through and snap-back response in concrete structures and the dangers of under-integration. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **22**: 751–767.
- T. DAXNER, F. RAMMERSTORFER, J. SEGURADO Y H. PETTERMAN (2003). Numerical simulations of the creep deformation of mmcs in 4-point bending mode. *Journal of Engineering Materials Technology* **125**: 50–55.
- T. DOWNES Y J. KING. *Metal-matrix Composites: Processing, Microstructure and Properties* cap. The effect of SiC particle size on the fracture toughness of a MMC, 305–310. RisøNational Laboratory, Roskilde (1991).
- W. DRUGAN (2000). Micromechanics based variational estimates for a higher non-local constitutive equation and optimal choice of effective moduli of elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **48**: 1359–1387.
- W. DRUGAN (2003). Two exact micromechanics-based nonlocal constitutive equations for random linear elastic composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **51**: 1745–1772.

- W. DRUGAN Y J. WILLIS (1996). A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **44**: 497–524.
- G. DVORAK (1992). Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proceedings of the Royal Society of London A* 311–327.
- A. ECKSCHLAGER, H. BÖHM Y W. HAN (2002). A unit cell model for brittle fracture of particles embedded in a ductile matrix. *Computational Material Science* **25**: 85–91.
- J. ESHELBY (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London A* **252**: 561–569.
- R. ESTEVEZ, E. MAIRE, P. FRANCOISI Y D. WILKINSON (1999). Effect of particle clustering on the strength versus damage rivalry in particulate reinforced elastic plastic materials. a 3d analysis from a self-consistent modelling. *European Journal of mechanics -A/Solids* **18**: 785–804.
- A. EVANS, J. HUTCHINSON Y Y. WEI (1999). Interface adhesion: effects of plasticity and segregation. *Acta Materialia* **47**: 4093–4113.
- A. FREUDENTHAL. *Fracture- An advanced treatise* cap. Statistical approach to brittle fracture, 591–619. Academic Press, New York (1968).
- J. GAMMAGE. *Damage in heterogeneous aluminium alloys*. Tesis Doctoral Mc Master University (2002).
- M. GENI Y M. KIKUCHI (1998). Damage analysis of aluminum matrix composite considering non-uniform distribution of Si-C particles. *Acta Materialia* 3125–3133.
- S. GHOSH, Y. LING, B. MAJUMDAR Y R. KIM (2000). Interfacial debonding analysis in multiple fiber reinforced composites. *Mechanic of Materials* **32**: 561–591.
- S. GHOSH Y S. MOORTHY (1997). Quantitative characterization and modeling of composite microstructures by voronoi cells. *Acta Materialia* **46**: 2215–2234.
- S. GHOSH Y S. MOORTHY (1998). Particle fracture simulations in non-uniform microstructures of metal matrix composites. *Acta Materialia* **45**: 2215–2234.

Bibliografía

- P. GILORMINI (1995). Insuffisance de l'extension classique du modèle auto-cohérent au comportement non linéaire. *Comptes Rendus de L'Academie des Sciences Paris IIb* **320**: 115–122.
- C. GONZÁLEZ. *Dos modelos micromecánicos de deformación con daño en materiales compuestos*. Tesis Doctoral Universidad Politécnica de Madrid (2002).
- C. GONZÁLEZ Y J. LLORCA (1996). Prediction of the tensile stress-strain curve and ductility in Al/SiC composite. *Scripta Materialia* **1**: 91–97.
- C. GONZÁLEZ Y J. LLORCA (2000). A self-consistent approach to the elasto-plastic behaviour of two-phase materials including damage. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **48**: 675–692.
- C. GONZÁLEZ, J. SEGURADO Y J. LLORCA (2004). Numerical simulation of elasto-plastic deformation of composites: Evolution of stress microfields and implications for homogenization models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **52**: 1573–1593.
- A. GURSON (1977). Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part i - yield criteria and flow rules for porous ductile media. *Journal of Materials Technology* **9**: 2–15.
- A. GUSEV (1997). Representative volume element size for elastic composites: A numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **45**: 1449–1559.
- J. HALPIN Y S. TSAI (1969). Environmental factors in composite materials design. *Air Force Materials Laboratory Technical Report*.
- Z. HASHIN Y S. SHTRIKMAN (1963). A variational approach to the theory of elastic behavior of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **11**: 127–140.
- S. HAZANOV Y C. HUET (1994). Order relationships for boundary condition effects in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **42**: 1995–2011.
- R. HILL (1965). A self consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **13**: 213–222.

- Y. HIRAMATSU Y Y. OKA (1966). Determination of the tensile strength of rock by a compression test of an irregular test piece. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science*.
- C. HOM Y R. MCMEEKING (1991). Plastic flow in ductile aterials containing a cubic array of rigid spheres. *International Journal of Plasticity* **7**: 255–274.
- C. HUET (1990). Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **38**: 813–841.
- J. HUTCHINSON (1970). Elastic-plastic behavior of polycrystalline metals and composites. *Proceedings of the Royal Society of London A* **355**: 101–127.
- N. KANETAKE, M. NOMURA Y T. CHOH (1995). Continuous observation of microstructural degrdation during tensile loading of particle reinforced aluminium matrix composites. *Material Science and Technology* **11**: 1246–1252.
- M. T. KISER, F. W. ZOK Y D. S. WILKINSON (1996). Plastic flow and fracture of a particulate metal matrix composite. *Acta Materialia* **44**: 3465–3476.
- W. KREHER (1990). Residual stresses and stored elastic energy of composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **38**: 115–128.
- E. KRÖNER (1958). Berechnung der Elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Zeitung Physik* **51**: 504–518.
- M. LI, S. GHOSH Y O. RICHMOND (1999). An experimental-computational approach to the investigation of damage evolution in discontinuously reinforced. *Acta Materialia* **47**: 3515–3532.
- D. LIU Y J. LEWANDOWSKI (1993). The effect of superposed hydrostatic pressure on deformation and fracture. part II: particulate reinforced 6061 Al composite. *Metallurgical Transactions* **24A**: 609–615.
- J. LLORCA (1995). An analysis of the influence of reinforcement fracture on the strength of discontinuosly-reinforced metal matrix composites. *Acta Metallurgica et Materialia* **43**: 181–192.

Bibliografía

- J. LLORCA. *Mechanics of Microstructured Materials. CISM Lectures and Course Notes* 464 cap. Deformation and Damage in Particle-Reinforced Composites: Experiments and Models, 87–124. Springer-Verlag (2004).
- J. LLORCA Y C. GONZÁLEZ (1998). Microstructural factors controlling the strength and ductility of particle-reinforced metal-matrix composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **46**: 1–28.
- J. LLORCA, A. MARTÍN, J. RUIZ Y M. ELICES (1993). Particle fracture during deformation in a spray-formed metal-matrix composite. *Metallurgical transactions A* **24**: 1575–1588.
- J. LLORCA, A. NEEDLEMAN Y S. SURESH (1991). An analysis of the effects of matrix void growth on deformation and ductility in metal-ceramic composites. *Acta Metallurgica et Materialia* **39**: 2317–2335.
- J. LLORCA Y P. POZA (1994). Influence of matrix strength on reinforcement failure and ductility in Al/Al₂O₃ composites. *Material Science and Engineering A* **185**: 25–37.
- J. LLORCA Y J. SEGURADO (2004). Three-dimensional multiparticle cell simulations of deformation and damage in sphere-reinforced composites. *Material Science and Engineering A* **365**: 267–274.
- D. LLOYD (1991). Aspects of failure in particulate reinforced metal matrix composites. *Acta Metallurgica et Materialia* **39**: 59–71.
- E. MAIRE, D. S. WILKINSON, J. D. EMBURY Y R. FOUGERES (1997). Role of damage on the flow and fracture of particulate reinforced alloys and metal matrix composites. *Acta Materialia* **45**: 5261–5274.
- J. J. MCCOY (1970). On the displacement field in an elastic medium with random variations of material properties. *Recent Advances in Engineering Science* **5**: 235–254.
- J. MCNANEY, R. CANNON Y R. RITCHIE (1996). Fracture and fatigue-crack growth along aluminum-alumina interfaces. *Acta Materialia* 4713–4728.
- J. MICHEL, H. MOULINEC Y P. SUQUET (1999). Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering* **172**: 109–143.

- C. MILLER Y S. TORQUATO (1990). Effective conductivity of hard-sphere dispersions. *Journal of Applied Physics* **68**: 5486–5493.
- G. MILTON Y N. PHAN-THIEN (1982). New bounds on the effective moduli of two-component composites. *Proceedings of the Royal Society of London A* **380**: 305–331.
- T. MOCHIDA, M. TAYA Y D. LLOYD (1991). Fracture of particles in a particle/metal matrix composite under plastic strain. *Material Transactions JIM* **32**: 931–942.
- A. MOLONEY, H. KAUSH, T. KAISER Y H. BEER (1987). Parameters determining the strength and toughness of particulate filled epoxide resins. *Journal of Material Science* **22**: 381–393.
- T. MORI Y K. TANAKA (1973). Average stress in the matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica et Materialia* **21**: 571–574.
- H. MOULINEC Y P. SUQUET (1998). A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering* **157**: 69–94.
- A. MURPHY, S. HOWARD Y T. CLYNE (1998). Characterization of the severity of particle clustering and its effect on the fracture of particulate mmcs. *Material Science and Technology* **14**: 959–.
- A. NEEDLEMAN (1987). A continuum model for void nucleation by inclusion debonding. *Journal of Applied Mechanics* **54**: 525–531.
- S. NUTT Y A. NEEDLEMAN (1987). Void nucleation at fiber ends in Al-SiC composites. *Scripta Metallurgica et Materialia* **21**: 705–710.
- P. OOSTRUM. Page headers and footers in L^AT_EX. (1994).
- M. ORTIZ Y A. PANDOLFI (1999). Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack propagation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **44**: 1267–1282.
- J. PERCUS Y G. YEVVICK (1958). Analysis of classical statistical mechanics by means of collective coordinates. *Physical Review* **110**: 1–13.

Bibliografía

- H. PETTERMANN, A. PLANKENSTEINER, H. BÖHM Y F. RAMMERSTORFER (1999). A thermo-elasto-plastic constitutive law for inhomogeneous materials based on an incremental mori-tanaka approach. *Computers and Structures* **71**: 197–214.
- P. PONTE-CASTAÑEDA (1991). The effective mechanical properties of non-linear composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **37**: 45–71.
- P. PONTE-CASTAÑEDA Y P. SUQUET (1998). Nonlinear composites. *Advances in Applied Mechanics* **24**: 171–302.
- P. POZA Y J. LLORCA (1996). Fracture toughness and fracture mechanisms of Al/Al₂O₃ composites at cryogenic and elevated temperature. *Material Science and Engineering A* **206**: 183–193.
- P. POZA Y J. LLORCA (1999). Mechanical behavior of Al-Li/SiC composites. part III: micromechanical modelling. *Metallurgical and Materials Transactions A* **30**: 869–878.
- V. B. PRASAD, B. CHAT, Y. MAHAJAN Y P. RAMAKRISHNAN (2002). Structure-property correlation in discontinuously reinforced aluminium matrix composites as a function of relative particle size ratio. *Material Science and Engineering A* **337**: 179–186.
- R. PYRZ (1994). Correlation of microstructure variability and local stress field in two-phase materials. *Material Science and Engineering A* **117**: 253–259.
- F. RESUCH, B. SVENDSEN Y D. KLINGBEIL (2003). A non-local extension of Gurson-based ductile damage modeling. *Computational Material Science* **26**: 219–229.
- J. RICE Y D. TRACEY (1969). On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **17**: 201–207.
- G. ROUSSELIER (1987). Ductile fracture models and their potencial in a local approach of fracture. *Nuclear Engineering Design* **105**: 97–111.
- M. SAUTTER, C. DIETRICH, M. POECH, S. SCHMAUDER Y H. FISCHMEISTER (1993). Finite element modelling of a transverse loaded fibre composite: Effects of section size and net density. *Computational Material Science* **1**: 225–233.
- W. SCHMIDT, J. KNAPPEN, H. PARTL Y I. HYNA. \LaTeX 2 ϵ -kurzbeschreibung. (1998).

- J. SEGURADO. *Micromechanical analysis of the mechanical behaviour of sintered refractory metals*. Proyecto Fin de Carrera Universidad Politécnica de Madrid (2000).
- J. SEGURADO, C. GONZALEZ Y J. LLORCA (2003a). El efecto de la distribución inhomogénea del refuerzo en las propiedades mecánicas de materiales compuesto. *Anales de Mecánica de la Fractura* **20**: 355–360.
- J. SEGURADO Y J. LLORCA (2002a). Análisis de la deformación y del daño de materiales compuestos reforzados con partículas. *Anales de Mecánica de la Fractura* **19**: 411–416.
- J. SEGURADO Y J. LLORCA (2002b). A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **50**: 2107–2121.
- J. SEGURADO Y J. LLORCA (2004). A new three-dimensional interface finite element to simulate fracture in composites. *International Journal of Solids and Structures* **41**: 2977–2993.
- J. SEGURADO, J. LLORCA Y C. GONZÁLEZ (2002a). On the accuracy of the mean-field approaches to simulate the plastic deformation of composites. *Scripta Materialia* **46**: 525–529.
- J. SEGURADO, J. LLORCA Y C. GONZÁLEZ (2003b). A numerical investigation of the effect of particle clustering on the mechanical properties of composites. *Acta Materialia* **51**: 2355–2369.
- J. SEGURADO, E. PARTEDER Y A. PLANKENSTENIER (2002b). Micromechanical studies of the densification of porous molybdenum. *Material Science and Engineering A* **333**: 270–278.
- J. SPOWART, Z.-Y. MA Y R. S. MISHRA (2003). The effect of friction stir processing (FSP) on the spatial heterogeneity of discontinuously-reinforced aluminium (DRA) microstructures. *Friction Stir Welding and Processing*.
- P. SUQUET (1995). Overall properties of non-linear composites: a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda's nonlinear variational procedure. *C.R. Academic Science. Paris Serie IIb* **320**: 563–571.

Bibliografía

- P. SUQUET. *Continuum micromechanics*, *CISM Course and Lecture Notes*, 337 197–264. Vienna: Springer Verlag (1997).
- G. TANDON Y G. WENG (1988). A theory of particle-reinforced plasticity. *Journal of Applied Mechanics* **55**: 126–135.
- S. TAO Y J. BOYD. *Mechanisms and mechanics of composites fracture* cap. Mechanisms of damage accumulation and fracture in particulate reinforced metal matrix composite. ASM International (1993).
- C. THOMSON, M. WORSWICK, A. PILKEY Y D. LLOYD (2003). Void coalescence within periodic clusters of particles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **51**: 127–146.
- C. THOMSON, M. WORSWICK, A. PILKEY, D. LLOYD Y G. BURGER (1998). Modelling void nucleation and growth within periodic clusters of particles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **47**: 1–26.
- P. THOUTIREDDY, J. MOLINARI, E. REPETTO Y M. ORTIZ (2002). Tetrahedral composite finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **53**: 1337–1351.
- S. TORQUATO (1991). Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties. *Applied Mechanics Review* **44**, nº 2.
- S. TORQUATO (1998). Effective stiffness tensor of composite Media: II. Applications to isotropic dispersions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **46**: 1411–1440.
- S. TORQUATO (2000). *Random heterogeneous materials. Microstructure and macroscopic properties*. Springer.
- S. TORQUATO, F. LADO Y P. SMITH (1987). Bulk properties of two phase disordered media IV. Mechanical properties of suspension of penetrable spheres at nondilute concentrations. *Journal of Chemical Physics* **86**: 6388–6392.
- V. TVERGAARD (1981). Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions. *International Journal of Fracture* **17**: 389–407.

- V. TVERGAARD (1990). Effect of fibre debonding in a whisker-reinforced metal. *Material Science and Engineering A* **125**: 203–213.
- V. TVERGAARD (1998). Effects of ductile matrix failure in three dimensional analysis of metal matrix composites. *Acta Materialia* **46**: 3637–3648.
- V. TVERGAARD (2003). Cohesive zone representations of failure between elastic or rigid solids and ductile solids. *Engineering Fracture Mechanics* **70**: 1859–1868.
- V. TVERGAARD Y J. HUTCHINSON (1993). The influence of plasticity on mixed mode interface toughness. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **41**: 1119–1135.
- V. TVERGAARD Y A. NEEDLEMAN (1984). Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta Metallurgica* **32**: 157–179.
- K. WALLIN, T. SAARIO Y K. TÖRRÖNEN (1987). Fracture of brittle particles in a ductile matrix. *International Journal of Fracture* **32**: 201–209.
- L. WEBER, M. KOUZELI, C. SAN MARCHI Y A. MORTENSEN (1999). On the use of Considère's criterion in tensile testing of materials which accumulate internal damage. *Scripta Materialia* **41**: 549–551.
- W. WEIBULL (1951). A statistical distribution function of wide applicability. *Journal of Applied Mechanics* **18**: 293–299.
- E. WEISSENBECK (1994). *Finite element modelling of discontinuously reinforced metal matrix composites* 164. VDI VERLAG, Düsseldorf.
- A. WHITEHOUSE Y T. CLYNE (1993). Cavity formation during tensile straining of particulate and short fiber metal matrix composites. *Acta Metallurgica et Materialia* **41**: 701–1771.
- B. WIDOM (1966). Random sequential addition of hard spheres to a volume. *Journal of Chemistry Physics* **44**: 3888–3894.
- J. WULF, T. STEINKOPFF Y H. FISCHMEISTER (1996). FE-Simulations of crack-paths in the real microstructure of an Al(6061)/SiC composite. *Acta Materialia* **44**: 1765–1779.
- D. YOUNG. Using BIB_TE_X. (2002).

Bibliografía

- Y. ZHAO Y G. WENG (1996). Plasticity of a two-phase composite with partially debonded inclusions. *International Journal of Plasticity* **12**: 781–804.
- O. ZINKIEWICZ Y R. TAYLOR (1989). *The Finite Element Method— 4th Ed.*. Mc Graw-Hill.
- T. ZOHDİ. Computational modeling and design of new random microheterogeneous materials. CISM Course Notes (2002).
- T. ZOHDİ Y P. WRIGGERS (1999). A domain decomposition method for bodies with microstructure based upon material regularization. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **136**: 91–107.