



UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

**DEPARTAMENTO DE MECÁNICA DE MEDIOS CONTINUOS Y
TEORÍA DE ESTRUCTURAS**

TESIS DOCTORAL

**COMPORTAMIENTO MECÁNICO DE MATERIALES COMPUESTOS DE
MATRIZ METÁLICA Y REFUERZO DE PARTÍCULAS. UN ENFOQUE
BASADO EN CELDAS MULTIPARTÍCULA**

AUTOR: Jorge Alonso Zahr Viñuela

DIRECTOR: Prof. Dr. D. José Luis Pérez Castellanos

Leganés, Junio 2010

TESIS DOCTORAL

**COMPORTAMIENTO MECÁNICO DE MATERIALES COMPUESTOS DE
MATRIZ METÁLICA Y REFUERZO DE PARTÍCULAS. UN ENFOQUE BASADO
EN CELDAS MULTIPARTÍCULA**

AUTOR: Jorge Alonso Zahr Viñuela

DIRECTOR: José Luis Pérez Castellanos

Tribunal Calificador:

Presidente:

Vocal:

Vocal:

Vocal:

Secretario:

Calificación:

Leganés, de de 2010

A mi hijo Salvador

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer especialmente al profesor Dr. José Luis Pérez Castellanos, no sólo por su inestimable ayuda e implicación como director de Tesis, sino también por la amistad y apoyo constante que me ha brindado a nivel personal.

Expreso también mi gratitud al profesor Dr. Ramón Zaera, la primera persona del Departamento con quién me entrevisté en 2003, y que facilitó mi puesta en contacto con José Luis, lo que a la postre daría lugar a la realización de esta Tesis Doctoral. Extiendo esta mención también al profesor Dr. José Fernández Sáez, por el apoyo expreso que me brindó, siendo director de Departamento, en momentos difíciles en términos de burocracia.

Al profesor Dr. Andreas Rossoll, de la Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, por su gran ayuda durante mi estancia en su laboratorio, así como las interesantes ideas que me ha transmitido en conversaciones posteriores.

A todos los miembros del Departamento, que en todo momento han mostrado no sólo compañerismo y comprensión, sino gran disposición para ayudar en lo que sea necesario.

A todos quienes han sido mis compañeros de despacho, en distintos momentos a lo largo de estos años, por su compañerismo y apoyo, con una mención especial para David Varas e Ignacio Villa. Junto a ellos, a Rolando, Guadalupe, “Josito”, Karlos y Shirley por la amistad, la compañía y las conversaciones amables en el café.

A mis padres, por el verdadero apoyo que en la vida siempre han dado a todos los proyectos que he emprendido. A mi padre, agradezco especialmente la sabiduría de sus consejos, y a mi madre la profunda dedicación de sus oraciones.

A Mario Gutiérrez e Isabel Campos, por su inestimable ayuda como abuelos con el cuidado mi pequeño hijo Salvador, especialmente en los momentos más difíciles, cercanos a la etapa de finalización de la Tesis.

Por último, a Cristina, por su apoyo constante, sus ánimos y su cariño.

RESUMEN

En esta Tesis Doctoral se estudia el comportamiento mecánico de los materiales compuestos de matriz metálica y refuerzo de partículas cerámicas (PMMCs). En su mayor parte, el método empleado consiste en el análisis de celdas multipartícula por el método de los Elementos Finitos, aunque en algunos aspectos, se ha complementado sus resultados mediante el uso de determinados modelos analíticos seleccionados de la literatura.

Los aspectos del comportamiento mecánico de PMMCs estudiados en este trabajo fueron, esencialmente tres: (a) la determinación de constantes elásticas efectivas a partir de las propiedades de las fases y de información microestructural, (b) el comportamiento efectivo en régimen elásto-plástico cuando una de las fases del material compuesto posee este tipo de comportamiento y, finalmente, (c) la influencia que los eventos de decohesión entre matriz y partículas tienen sobre la respuesta mecánica efectiva del material.

Como herramienta operacional, se ha desarrollado un algoritmo para la generación de distribuciones aleatorias de partículas prismáticas en el espacio tridimensional, permitiendo el control por parte del usuario de parámetros microestructurales como la fracción volumétrica de refuerzo y la esbeltez de las partículas, así como el grado de aleatoriedad de su orientación y de variabilidad de su tamaño. La decisión de considerar partículas de geometría prismática surge del interés de incorporar en los modelos, de algún modo, el efecto de concentración de tensiones asociado a la presencia de aristas en las partículas.

Mediante este modelo de celdas multipartícula, usado en conjunto con el método de los Elementos Finitos, se han obtenido valores de las constantes elásticas efectivas de un compuesto formado por una matriz de aleación de aluminio reforzado con partículas cerámicas de carburo de silicio, considerando diferentes escenarios microestructurales. Estos escenarios reflejan diferentes combinaciones de esbeltez de partícula, fracción volumétrica de refuerzo y aleatoriedad de orientación, lo que permitió estudiar tanto materiales isótropos como transversalmente isótropos.

Los resultados así obtenidos fueron extendidos mediante la ecuación de Halpin-Tsai, desde los valores puntuales considerados para la fracción volumétrica en los modelos hasta un rango continuo de hasta 30%. Para el parámetro principal que interviene en esta ecuación puede encontrarse en la literatura algunos valores aplicables a un conjunto específico de escenarios microestructurales. Por una parte, en el presente trabajo se ha revisado la validez de los valores utilizados en la literatura. Por otra, se aportan valores nuevos, aplicables a escenarios microestructurales que no tenían descripción previa.

En PMMCs, usualmente es la fase matriz la única que, en determinados casos, exhibe un comportamiento no lineal, con deformación plástica y endurecimiento por deformación. Así, en el caso del estudio del comportamiento elasto-plástico de este tipo de materiales, el trabajo se centra en los siguientes aspectos. En primer lugar, se ha descrito el estado tenso-deformacional *interior* del compuesto cuando se impone sobre el material una sollicitación mecánica macroscópica de tipo uniaxial. En segundo lugar, se ha buscado establecer una relación fenomenológica entre la curva de endurecimiento de la fase matriz y la curva de endurecimiento del compuesto. En tercer lugar, se ha estudiado, para la misma sollicitación de tracción uniaxial, la evolución durante la historia de deformación de determinadas variables energéticas. Esto permitió describir un efecto de *confinamiento* energético, asociado a la deformación plástica de la fase matriz, que es responsable de la producción de tensiones residuales cuyo origen no es térmico, sino puramente mecánico. Estos estudios se realizaron por medio del análisis numérico de celdas multipartícula.

Adicionalmente, ha interesado en esta Tesis, disponer de un método analítico para estimar la respuesta mecánica efectiva (y no lineal) cuando la matriz tiene una respuesta no lineal y las partículas son prismáticas. En la literatura, esto se ha realizado frecuentemente en el contexto de la Elasticidad no lineal, mediante el modelo de homogeneización Secante, ya sea en su versión Clásica o Modificada, para el caso de compuestos reforzados con esferas o elipsoides. Se propone en este trabajo una implementación particular del método Secante aplicable a compuestos con partículas *prismáticas* y cuyas fases constituyentes tienen una respuesta elástica isotrópica.

El estudio de la influencia del daño por decohesión entre la matriz y las partículas sobre la respuesta efectiva del material compuesto, se realizó situando en las interfases de los modelos numéricos de celda, elementos finitos cuyo comportamiento constitutivo obedece al modelo de fisura cohesiva, de amplia descripción en la literatura. En este caso, debido al coste computacional y dado que el interés residía en una descripción cualitativa, las simulaciones se realizaron utilizando celdas bidimensionales, tanto en tensión como deformación plana. Además de efectuarse una revisión de algunos elementos conceptuales de la Mecánica del Daño, relacionando la degradación de la rigidez material con el trabajo disipado en un proceso de daño, en este estudio se describió detalladamente el modo en el que la decohesión degrada tanto el límite elástico como el módulo de Young del material compuesto, no sólo a través de la nucleación inicial de poros asociada a la decohesión, sino también por el subsiguiente crecimiento de los mismos.

ABSTRACT

In the present work, the mechanical behavior of Particle Reinforced Metal Matrix Composites is studied. Mainly, the method employed is based on the numerical analysis of multiparticle cell models through the Finite Element Method.

Specifically, three aspects of the mechanical behavior were studied: (a) calculation of the effective elastic constants from the elastic properties of the constituents and information about the composite microstructure, (b) study of the non linear effective behavior when the matrix deforms plastically, with strain hardening and, finally, (c) study of the influence of particle-matrix decohesion events on the composite's mechanical response.

As a tool for the above mentioned studies, an algorithm for the generation of random spatial distributions of prismatic particles in the tridimensional space has been developed, that allows control of microstructural factors such as reinforcement volume fraction, particle aspect ratio and degree of randomness in particle orientation. The use of particles with prismatic geometry arises from the desire to include in some way in the modeling the effect of stress and strain concentration due to the presence of sharp edges on particles.

By means of a Finite Element discretization of these multiparticle cells, values of the effective elastic constants were obtained for an Al alloy based composite reinforced with silicon carbide particles, considering different microstructural scenarios. These scenarios reflect different combinations of particle aspect ratio, volume fraction of reinforcement and randomness of orientation, which allowed the study of both, isotropic and transversely isotropic materials.

Using the well-known Halpin-Tsai equation, the results are extended from the specific values used for particle volume fraction in the cell models to a continuous range up to 30%. New values for the 's' parameter of the HT equation for microstructural scenarios not covered in the literature, and improved values for some of the scenarios covered by some authors, are presented. It is also shown that results can be extended to other systems such as steel reinforced with SiC particles using the new 's' values.

In PMMCs, the matrix phase is usually the one that in some cases, exhibits a nonlinear behavior, with plastic deformation and strain hardening. Thus, for the study of elastic-plastic behavior of these materials, the work focuses on the following aspects. First, the stress-strain state *inside* the composite is described, when uniaxial macroscopic loading is externally applied. Secondly, a phenomenological relationship between the hardening curve of the matrix phase and the hardening curve of the composite has been investigated. Finally, for the

same uniaxial loading, the evolution during the strain history of certain energy variables has been studied. This allowed the description of an *energy confinement* effect associated with plastic straining of the matrix phase, which is responsible for the production of residual stresses whose origin is not thermal, but purely mechanical. All of these studied were made by numerical analysis of multiparticle cells.

Additionally, the author of this Thesis considered of interest to have at hand an analytical method to estimate the effective (and nonlinear) mechanical response when the matrix phase has a nonlinear response and the particles are prismatic. In literature, this has been done frequently in the context of Nonlinear Elasticity, by means of the Secant homogenization method, whether in its Classical or Modified version, in the case of composites reinforced with spheres or ellipsoids. A particular implementation of the Secant method is proposed in this work. It is applicable to composites reinforced with *prismatic* particles, when its constituent phases have an isotropic elastic response.

The study of the influence of particle-matrix decohesion damage on the composite's effective response was performed by placing at the interfaces of numerical cell models, finite elements whose constitutive behavior follows the Cohesive Crack model, which is widely described in the literature. In this case, due to computational cost and since the interest lay in a qualitative description, the simulations were performed using two-dimensional cells, both in plane stress and plane strain. Besides carrying out a review of some conceptual elements of Damage Mechanics (relating the material stiffness degradation with the work dissipated in a process of damage), in this study is described in detail the mechanism by which particle-matrix decohesion degrades both the yield strength and Young's modulus of the composite material, not only through the nucleation of pores due to the decohesion, but also for their subsequent growth.

SIMBOLOGÍA

RVE	Elemento representativo de volumen
F	Fracción volumétrica de partículas
R	Esbeltez de partículas
α	Apertura del cono de orientación
$\langle \circ \rangle_{\Omega}$	Promedio volumétrico de \circ en la región Ω .
$\langle \rangle$	Dependiendo del contexto, puede significar promedio volumétrico calculado sobre la <i>totalidad</i> del RVE de análisis, o bien, puede ser el bracket de Macaulay, en cuyo caso,
	$\langle x \rangle = \begin{cases} x & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$
$\sigma = \sigma(x)$	Campo tensorial correspondiente a la tensión microscópica, donde $x \in \text{RVE}$ es la posición.
$\varepsilon = \varepsilon(x)$	Campo tensorial correspondiente a la deformación microscópica, donde $x \in \text{RVE}$ es la posición.
$\Sigma_{\Omega} = \bar{\sigma}_{\Omega} = \langle \sigma \rangle_{\Omega}$	Promedio volumétrico del tensor de tensiones en la región Ω .
$E_{\Omega} = \bar{\varepsilon}_{\Omega} = \langle \varepsilon \rangle_{\Omega}$	Promedio volumétrico del tensor de tensiones en la región Ω .
Σ	Tensor de tensiones del compuesto, también denominado <i>efectivo</i> .
E	Tensor de deformaciones <i>efectivas</i> .
E, ν, K, G	Constantes elásticas efectivas. Son, respectivamente, módulo de Young, coeficiente de Poisson, módulo de compresibilidad y módulo de cortadura.
E_r, ν_r, K_r, G_r	Constantes elásticas de la fase $r = \mathbf{matriz}, \mathbf{partículas}$.
M, M_m, M_p	Tensores de cuarto orden de flexibilidad efectiva, de la matriz y de las partículas, respectivamente.
L, L_m, L_p	Tensores de cuarto orden de rigidez efectiva, de la matriz y de las partículas, respectivamente.
A_r, B_r	Tensores de cuarto orden de concentración de la deformación y de la tensión, respectivamente, de la fase $r = m, p$.
J	Tensor proyector hidrostático de cuarto orden, $J_{ijkl} = \delta_{ij}\delta_{kl}/3$
K	Tensor proyector desviador de cuarto orden, $K_{ijkl} = (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})/2 - J_{ijkl}$

NOTACIÓN PARA OPERACIONES CON TENSORES

s escalar

a, b vectores, de componentes a_i, b_i

σ, ε tensores de segundo orden, de componentes $\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$

A, B tensores de cuarto orden, de componentes A_{ijkl}, B_{ijkl}

$a \times b$ producto vectorial de dos vectores

Productos escalares

$a \cdot b$ producto escalar de dos vectores, de valor $s = a \cdot b = a_i b_i$

$\sigma : \varepsilon$ producto escalar de dos tensores de segundo orden, de valor $s = \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$

$A :: B$ producto escalar de dos tensores de cuarto orden, de valor $s = A_{ijkl} B_{ijkl}$

Productos tensoriales

$a \otimes b$ producto tensorial de dos vectores, de componentes $(a \otimes b)_{ij} = a_i b_j$

$\sigma \otimes \varepsilon$ producto tensorial de dos tensores de segundo orden que resulta en un tensor de cuarto orden, de componentes $(\sigma \otimes \varepsilon)_{ijkl} = \sigma_{ij} \varepsilon_{kl}$

Otras transformaciones

$\sigma \cdot a$ resulta en un vector de componentes $(\sigma \cdot a)_i = \sigma_{ij} a_j$

$A : \sigma$ resulta en un tensor de segundo orden, de componentes $(A : \sigma)_{ij} = A_{ijkl} \sigma_{kl}$

$A : B$ resulta en un tensor de cuarto orden, de componentes $(A : B)_{ijkl} = A_{ijmn} B_{mnkl}$

TABLA DE CONTENIDOS

CAPÍTULO 1	<i>INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS</i>	21
1.1	CONTEXTO DE LA TESIS	22
1.2	MOTIVACIÓN	25
1.3	OBJETIVOS	28
1.4	CONTENIDO DE LA TESIS	30
1.5	APORTACIONES ORIGINALES	31
CAPÍTULO 2	<i>ANTECEDENTES</i>	33
2.1	LOS MATERIALES COMPUESTOS DE MATRIZ METÁLICA Y REFUERZO DE PARTÍCULAS	34
2.1.1	PROPIEDADES MECÁNICAS.	34
2.1.2	MICROESTRUCTURA.	35
2.1.3	TENSIONES RESIDUALES.	36
2.1.4	MECANISMOS DE DAÑO.	37
2.1.4.a	Modelos aplicables al estudio de la Decoherión matriz-partícula.	39
2.1.4.b	Modelos aplicables al estudio de la Fractura de Partículas.	41
2.1.4.c	Modelos aplicables al estudio del Daño Dúctil en la matriz metálica.	42
2.2	COMPORTAMIENTO MECÁNICO DE PMMCs, PARTE I. MODELOS ANALÍTICOS O SEMI ANALÍTICOS	44
2.2.1	DETERMINACIÓN DE CONSTANTES ELÁSTICAS EFECTIVAS.	44
2.2.1.a	Modelos basados en Teoría de Campo Medio.	44
2.2.1.b	Métodos Autoconsistentes.	46
2.2.1.c	Modelos de Homogeneización por Expansión Asintótica (AEH).	47
2.2.1.d	Límites Variacionales para las constantes elásticas efectivas.	48
2.2.2	RÉGIMEN ELASTO-PLÁSTICO, SIN DAÑO.	49
2.2.2.a	Modelos Tangente.	50
2.2.2.b	Modelos Secante.	50
2.2.3	RÉGIMEN ELASTO-PLÁSTICO, CON DAÑO.	52
2.3	COMPORTAMIENTO MECÁNICO DE PMMCs, PARTE II. MÉTODOS BASADOS EN EL ANÁLISIS DE CELDA	54
2.3.1	FORMULACIÓN.	55
2.3.2	OBSERVACIONES Y APLICACIONES.	56

CAPÍTULO 3 *MÉTODOS Y HERRAMIENTAS* 62

3.1	CONSIDERACIONES PREVIAS SOBRE MICROESTRUCTURAS PERIÓDICAS	63
3.2	GENERACIÓN DE CELDAS MULTIPARTÍCULA	67
3.2.1	DESCRIPCIÓN DEL ALGORITMO.	67
3.2.2	CONDICIONES DE NO-INTERFERENCIA ENTRE PARTÍCULAS	72
3.3	IMPLEMENTACIÓN EN EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS	73
3.3.1	MICROESTRUCTURAS PERIÓDICAS Y CELDAS MULTIPARTÍCULA: CONDICIONES DE CONTORNO PERIÓDICAS.	73
3.3.1.a	Ecuaciones que garantizan periodicidad.	73
3.3.1.b	Observaciones.	74
3.3.2	METODOLOGÍA DE MALLADO.	76
3.3.3	PREPARACIÓN PARA LA EJECUCIÓN.	78
3.3.3.a	Discretización de las Condiciones de Contorno Periódicas.	78
3.3.3.b	Control de la solución.	79
3.3.3.c	Consideraciones sobre Elementos Cohesivos en la malla.	80
3.3.4	ECUACIÓN CONSTITUTIVA DE LAS FASES SÓLIDAS.	81
3.3.5	INTERFAZ MATRIZ-PARTÍCULAS: IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO DE FISURA COHESIVA.	82
3.3.5.a	Relación tensión-deformación inicial.	84
3.3.5.b	Resistencia de la interfaz y proceso de Daño.	86
3.3.5.c	Calibración de la Rigidez Cohesiva Inicial.	88
3.3.5.d	Criterio de Iniciación del Daño.	90
3.3.5.e	Energía de Fractura.	93
3.3.6	MEDIDAS TENSO-DEFORMACIONALES A NIVEL MACROSCÓPICO.	96
3.3.7	MÉTODOS Y HERRAMIENTAS DISEÑADOS PARA LA EXTRACCIÓN DE RESULTADOS NUMÉRICOS.	98
3.3.7.a	Subrutina de usuario UVARM	98
3.3.7.b	Post-procesamiento de resultados.	98
3.3.8	DENSIDAD DE MALLA Y TIPO DE ELEMENTO. ANÁLISIS CUALITATIVO.	100
3.4	LISTADO-RESUMEN DE LAS HERRAMIENTAS DESARROLLADAS	102

CAPÍTULO 4 *VALIDACIÓN DE LA HERRAMIENTA:* 103

RESULTADOS EXPERIMENTALES Y NUMÉRICOS

4.1	METODOLOGÍA DE VALIDACIÓN Y MATERIALES UTILIZADOS	104
4.1.1	CONSIDERACIONES PREVIAS SOBRE EL MÉTODO DE VALIDACIÓN.	104
4.1.2	MATERIALES Y HERRAMIENTAS.	105
4.2	RESULTADOS EXPERIMENTALES, PARTE I. MATRIZ SIN REFUERZO	106
4.3	METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN NUMÉRICA	108

4.4	RESULTADOS EXPERIMENTALES, PARTE II. VARIABLES DE CONTROL Y CURVAS DE ENDURECIMIENTO	111
4.4.1	CONSTANTES ELÁSTICAS Y LÍMITE DE ELASTICIDAD.	111
4.4.2	COMPORTAMIENTO TENSIÓN-DEFORMACIÓN EN TRACCIÓN UNIAXIAL.	112
CAPÍTULO 5	<i>DETERMINACIÓN DE CONSTANTES ELÁSTICAS</i>	117
<hr/>		
5.1	METODOLOGÍA Y ESCENARIOS MICROESTRUCTURALES	118
5.2	RESULTADOS PARA TIPOS MICROESTRUCTURALES ISÓTROPAS	120
5.3	RESULTADOS PARA TIPOS MICROESTRUCTURALES TRANSVERSALMENTE ISÓTROPAS	122
5.4	APROXIMACIÓN DE RESULTADOS: ECUACIÓN DE HALPIN-TSAI	127
5.5	EXTENSIÓN A OTROS SISTEMAS Y FRACCIONES VOLUMÉTRICAS	132
5.5.1	ACERO REFORZADO CON PARTÍCULAS DE SIC.	132
5.5.2	ALEACIÓN DE AL REFORZADO CON PARTÍCULAS DE SIC.	133
CAPÍTULO 6	<i>COMPORTAMIENTO EN PLASTICIDAD</i>	135
<hr/>		
6.1	OBJETIVOS GENERALES Y METODOLOGÍA	136
6.2	CURVA DE ENDURECIMIENTO DEL COMPUESTO	138
6.3	ESTADO TENSO-DEFORMACIONAL INTERIOR	141
6.3.1	DESCRIPCIÓN DEL ESTADO TENSO-DEFORMACIONAL INTERIOR.	141
6.3.1.a	Descripción basada en Indicadores Estadísticos.	143
6.3.1.b	Descripción basada en Histogramas de Triaxialidad.	148
6.3.2	EVOLUCIÓN DE VARIABLES ENERGÉTICAS.	150
6.4	SOBRE LA DEFINICIÓN DE MEDIDAS REPRESENTATIVAS Y LA APLICABILIDAD DEL MÉTODO SECANTE	157
6.4.1	MEDIDAS REPRESENTATIVAS EN LAS FASES CONSTITUYENTES.	157
6.4.2	FUNDAMENTOS DEL MÉTODO DE HOMOGENEIZACIÓN SECANTE.	159
6.4.3	COMPARACIÓN NUMÉRICA DE LAS MEDIDAS REPRESENTATIVAS EN LA MATRIZ.	164
6.4.4	UNA IMPLEMENTACIÓN PARTICULAR DEL MÉTODO SECANTE.	166
CAPÍTULO 7	<i>DAÑO POR DECOHESIÓN EN PMMCS</i>	171
<hr/>		
7.1	INTRODUCCIÓN	172

7.2	CONSIDERACIONES PREVIAS: ELEMENTOS DE MECÁNICA DEL DAÑO	174
7.2.1	MEDIDA MACROSCÓPICA DEL DAÑO.	174
7.2.2	TRABAJO DISIPADO POR LOS MECANISMOS DE DAÑO.	177
7.3	IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO COHESIVO: CALIBRACIÓN DE LOS PARÁMETROS OPERATIVOS	181
7.3.1	INFLUENCIA DE LA RIGIDEZ COHESIVA INICIAL.	181
7.3.2	INFLUENCIA DE LA VISCOSIDAD DE DAÑO Y DE LA DENSIDAD DE MALLA.	183
7.4	DAÑO POR DECOHESIÓN: MODELADO 2D	187
7.4.1	METODOLOGÍA.	187
7.4.2	RESULTADOS.	189
7.4.3	DEGRADACIÓN DEL MÓDULO EFECTIVO. UN RESULTADO PARTICULAR.	195
7.5	IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO COHESIVO EN 3D. MODELADO INCLUYENDO DESCARGAS	198
7.5.1	METODOLOGÍA Y CONSIDERACIONES NUMÉRICAS.	199
7.5.1.a	Modelo de celda utilizado y malla de elementos finitos.	199
7.5.1.b	Comportamiento constitutivo: fases sólidas e interfaz cohesiva.	201
7.5.1.c	Condiciones de contorno y Método de Control.	201
7.5.2	RESULTADOS DE LAS SIMULACIONES CARGA-DESCARGA.	203
7.5.3	MECÁNICA DEL DAÑO EN DESCARGA.	207
7.5.4	OBSERVACIONES.	211
<u>CAPÍTULO 8 CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS</u>		<u>215</u>
8.1	CONCLUSIONES	216
8.2	TRABAJOS FUTUROS	218
<u>ANEXOS</u>		<u>221</u>
ANEXO A	OBTENCIÓN DE LAS ECUACIONES QUE GARANTIZAN PERIODICIDAD	222
ANEXO B	ALGORITMIA PARA EL MÉTODO SECANTE	227
<u>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u>		<u>231</u>

Capítulo 1

Introducción y Objetivos

En este capítulo se sitúa la tesis en su contexto, se comentan las razones que han motivado su planteamiento y desarrollo, se enumeran los objetivos planteados y se describe la organización del documento.

1.1 Contexto de la Tesis

Macromecánica y Micromecánica.

La Mecánica de los Medios Continuos considera, en general, el comportamiento del material sólido suponiendo que en su interior no existen vacíos, discontinuidades o diferencias de fase. Los análisis se centran en el **comportamiento macroscópico** del sólido, sin considerar lo que ocurre en niveles que pueden identificarse como microscópicos. A escala macroscópica se desarrollan, por ejemplo, el comportamiento elasto-plástico y los procesos de fractura con la aparición de grietas visibles. Desde hace más de dos siglos este enfoque ha servido para modelizar y analizar la respuesta de materiales en ingeniería.

Hay, sin embargo, problemas que no pueden ser tratados empleando las simplificaciones de la Mecánica de los Medios Continuos, o en los que es importante incluir la escala **microscópica** como parte de la formulación. Es un ejemplo el análisis del comportamiento mecánico de los materiales compuestos pues estos materiales derivan sus propiedades de las de los elementos constituyentes en el nivel microscópico. La determinación de las propiedades macroscópicas de un material heterogéneo a partir de las propiedades de las fases, constituye uno de los problemas clásicos de la ciencia y de la ingeniería.

La **microestructura** de un material puede estar formada por elementos diferentes como, por ejemplo, fibras o partículas embebidas en una matriz, granos, cristales, inclusiones, vacíos y micro-cavidades, micro-fisuras, defectos, etc. Cuando se considera el entorno material infinitesimal de un medio continuo en la escala **microscópica** se observa que el material no es uniforme, sino que está formado por diferentes elementos constitutivos, cada uno de los cuales puede tener propiedades distintas y presentarse con formas características. La microestructura puede, además, sufrir cambios durante el proceso de deformación como, por ejemplo, rotura de partículas y fibras, decohesiones, deslizamientos entre granos, nucleación, crecimiento y coalescencia de vacíos, aparición de porosidades y micro-fisuras, crecimiento de fases sólidas, endurecimiento por transformaciones de fase, etc. Las **propiedades micromecánicas** están influenciadas por las propiedades de los elementos constituyentes, especialmente su estructura, resistencia, propiedades mecánicas o químicas, entre otras, así como por las interrelaciones entre éstas. La **micromecánica** trata de establecer las variables continuas en la vecindad de un punto material, considerando la **microestructura del entorno** y las **propiedades de las fases constituyentes**.

En los últimos 30 años, se ha tratado de acoplar las visiones **macroscópica** y **microscópica** del material compatibilizando los campos de variables. Los modelos que tratan de representar comportamientos micromecánicos frecuentemente emplean las mismas variables que se usan en la Mecánica de los Medios Continuos, esto es, tensiones, deformaciones, desplazamientos.

Los materiales compuestos de matriz metálica.

Los materiales compuestos de matriz metálica (MMC) han surgido como una gran innovación en materiales en los últimos 30 años. Estos materiales están constituidos por una matriz metálica (aleaciones de aluminio, magnesio, titanio, entre otras) y un refuerzo de fibras o partículas generalmente cerámicas. La matriz confiere al elemento estructural su forma y transmite las tensiones al refuerzo el cual soporta las tensiones transmitidas por la matriz.

La elección del tipo de refuerzo no es arbitraria sino que está influida por diversos factores. Así, por ejemplo, si el material va a utilizarse en aplicaciones estructurales, el módulo de elasticidad, la resistencia máxima y la densidad pasan a ser parámetros importantes y, en consecuencia lo son la resistencia mecánica y la densidad del refuerzo. Si el material va a utilizarse en piezas que trabajarán bajo el efecto de la temperatura, el coeficiente de dilatación y la conductividad térmica juegan papeles importantes.

El interés práctico de los MMC radica, pues, en que unen a su baja densidad (la que aporta la matriz) un buen comportamiento mecánico. En principio, se consideró únicamente refuerzo de fibras continuas, pero aún presentando excelentes propiedades mecánicas, el costo de las fibras y de fabricación del material, restringieron su uso a aplicaciones en las que se requerían especiales prestaciones. Los MMC con refuerzo de partículas (PMMC) manifiestan una mejora menos espectacular de las propiedades mecánicas respecto de los materiales reforzados con fibras, pero por su menor coste (debido principalmente a su más fácil fabricabilidad) constituyeron una mejor respuesta a los requerimientos comerciales resultando muy interesantes para su aplicación industrial en general.

Las aplicaciones de los PMMCs, que son el sujeto de esta Tesis, en las industrias aeronáutica, aeroespacial y automovilística, así como sus propiedades mecánicas, están ampliamente descritas en textos de referencia como son los de McDanel y otros (1986), Clyne y Withers (1993), Chawla (1987), Taya y Arsenault (1989), Arsenault y Everett (1990), Cahn y otros (1993), Suresh y otros (1993), Daniel e Ishai (1994), Harrigan (1994) y Evans y otros, (2003) y diversas comunicaciones científicas como las de Stubbington (1988), Wie (1992), LLOYD (1994), Ibrahim y otros (1991) y Mital y otros (1996).

Modelos de comportamiento de los PMMC.

La utilización de los PMMCs ha requerido profundizar en el conocimiento de la influencia que en sus características mecánicas tienen la proporción, tamaño y forma del refuerzo, el proceso de fabricación, etc. Diferentes investigaciones han conducido a identificar los factores que juegan un mayor papel en la resistencia máxima y en la ductilidad del material compuesto. El problema es que resulta muy difícil aislar experimentalmente cada uno de estos factores para cuantificar su influencia.

En relación al problema de la determinación de las propiedades mecánicas macroscópicas del compuesto a partir de las propiedades de las fases, en los últimos 60 años se ha propuesto un gran número de modelos y métodos. Estos pueden agruparse en cuatro familias genéricas:

- Modelos basados en la Teoría de Campo Medio.
- Modelos basados en la Teoría de Homogeneización por Expansión Asintótica.
- Métodos Variacionales.
- Modelos o Métodos basados en el Análisis de Celdas.

Los modelos incluidos en las tres primeras familias son esencialmente analíticos, aunque en algunos casos utilizan resultados numéricos obtenidos por medio de los modelos de celda. Los modelos de **Campo Medio** estudian las propiedades mecánicas del compuesto a partir de las relaciones existentes entre valores de la media volumétrica de la tensión y de la deformación, en modelos o muestras microscópicas representativas. En los modelos basados en **Homogeneización por Expansión Asintótica**, se plantean relaciones matemáticas entre los micro-campos y los macro-campos de tensión y de deformación utilizando métodos de perturbaciones multiescala. Recurriendo a principios **Variacionales**, se han planteado, además, diferentes expresiones para ser utilizadas como cotas superior e inferior de las constantes elásticas del compuesto.

Los fundamentos físicos y matemáticos de estas familias de modelos, su ámbito de aplicación (elasticidad, plasticidad, visco-plasticidad, consideración del daño, etc.), así como las ventajas y limitaciones de cada una pueden consultarse en artículos científicos y libros de referencia como son los de Hull y Clyne (1996) y Nemat-Nasser y Hori, (1999) o los ya citados textos de Clyne y Withers (1993) y Evans y otros (2003).

Los **Métodos de celda**, por su parte, se construyen generalmente a partir de una discretización por el Método de Elementos Finitos de un elemento representativo de volumen (RVE) de la microestructura del material compuesto.

El elemento de volumen representativo es un volumen material que se define en la vecindad de un punto material y que es estadísticamente representativo de la microestructura del material. Este concepto fue introducido por Hill (1963) y ampliamente detallado por Hashin (1983). El RVE es la parte más pequeña de material de la que se considera que contiene todas las particularidades micro-estructurales siendo, por tanto, representativa del material en su conjunto. El RVE ha de ser un volumen lo suficientemente pequeño desde el punto de vista macroscópico como para ser tratado como un punto material del continuo y, a la vez, lo suficientemente grande como para poder considerarlo representativo de la micro-estructura del material. La definición de un RVE conlleva una decisión (basada generalmente en observaciones, resultados experimentales y análisis) sobre las características microestructurales que se considera que influyen en las propiedades macroscópicas que se quiere determinar.

1.2 Motivación

Los **métodos de celda** constituyen una herramienta de análisis que puede ser aplicada en dos contextos bien diferenciados. Por una parte, puede usarse el análisis de celdas como herramienta para proveer datos internos requeridos por los modelos analíticos mencionados en el apartado anterior. Por otra parte, pueden ser utilizados como herramienta *independiente* con la que obtener valores de propiedades homogeneizadas, valores macroscópicos de tensión y deformación e información detallada de los campos microscópicos de tensión y deformación, constituyéndose así en una *alternativa* a los modelos analíticos.

Mediante el análisis numérico de modelos de celda pueden obtenerse, por ejemplo, *puntos* sobre las curvas tensión-deformación características del material compuesto en estudio, para distintos tipos de sollicitación mecánica. Es importante mencionar, sin embargo, que el análisis de celdas en su forma independiente no permite, per sé, obtener expresiones analíticas para las curvas σ - ϵ , salvo mediante *ajuste* sobre los puntos resultantes de las simulaciones.

Las soluciones así obtenidas dependen de las condiciones de contorno aplicadas, pudiendo ser estas generalmente de uno de los tres tipos siguientes: (a) tensiones uniformes aplicadas en la frontera de la celda, (b) desplazamientos uniformes aplicados en la frontera o bien, (c) condiciones de contorno periódicas. Además, en determinados casos pueden usarse propiedades de simetría para reducir el número de grados de libertad del problema.

Estas soluciones dan origen a una **caracterización fenomenológica** del comportamiento mecánico del material compuesto en estudio que, aunque valiosa y útil, no está sustentada en

principios físicos ni en enfoques de Mecánica de Medios Continuos, excepto, evidentemente, aquellos sobre los cuales está basado el Método de Elementos Finitos subyacente a los modelos de celda. Esta consideración sitúa al análisis de celdas independiente, como herramienta de análisis, en un contexto más cercano al estudio experimental que a la modelización teórica.

Como ventaja con respecto al estudio puramente experimental, el análisis de celda en su forma independiente permite analizar en forma aislada y con relativa sencillez la influencia de parámetros microestructurales como la fracción volumétrica, la forma y la esbeltez del refuerzo no sólo sobre las constantes elásticas y la tensión de fluencia, sino también sobre los fenómenos de daño que pueden tener lugar en el seno del compuesto. En resumen, estos métodos permiten estudiar **escenarios** de tipo **¿qué pasa si...?**, algo complejo y muy costoso de realizar con métodos puramente experimentales. Debe tenerse presente, en todo caso, que las ventajas de las celdas multipartícula desaparecen si el objeto principal en estudio se limita a la obtención de las constantes elásticas de un PMMC cuya microestructura es espacialmente isótropa.

Por las ventajas mencionadas frente al análisis puramente experimental en términos de la capacidad de aislar influencias específicas, esta Tesis se centrará en el uso de métodos de celda, en su forma de aplicación independiente de otros modelos analíticos. Se ha optado por modelos FEM de celdas **multipartícula** por las ventajas que éstos ofrecen frente a las celdas de **partícula única** en aspectos como los siguientes:

- Una mejor representación de la influencia en el estado tenso-deformacional del compuesto de la **interacción** entre partículas vecinas.
- La capacidad de incluir en celdas multipartícula **aleatoriedad** en la orientación de cada una de las partículas de la celda, así como **distribuciones estadísticas** para la esbeltez y el volumen de cada partícula en el modelo.
- Una más adecuada representación de los **efectos de localización** al modelar el comportamiento del compuesto en régimen elasto-plástico, sin daño y con daño.

El interés general reside en la posibilidad de definir distintos escenarios, caracterizados tanto por la configuración microestructural como por las propiedades mecánicas asignadas a las fases constituyentes, y estudiar separadamente el modo en que variaciones en estos escenarios afectan específicamente a (a) las constantes elásticas efectivas, (b) la curva de endurecimiento y (c) a la progresión de los procesos de daño en el interior del material.

Se ha optado por incluir en las celdas partículas de forma **prismática** por dos motivos principales. En primer lugar, esta decisión surge del deseo de incorporar en los modelos, de algún modo, el efecto de concentración de tensiones asociado a la presencia de aristas en las partículas, máxime, teniendo en cuenta que puede encontrarse en la industria numerosos ejemplos de PMMCs reales cuyas partículas presentan aristas. En segundo lugar, si bien existen en la literatura ejemplos de usos de métodos de celda multipartícula, en la mayoría de los casos éstos han considerado partículas esféricas o elipsoidales en las que el efecto de concentración de tensión, aunque presente, es menos acusado que en partículas prismáticas.

Además, en el caso particular de partículas esféricas o elipsoidales, existen modelos analíticos de uso relativamente sencillo –generalmente basados en el tensor de Eshelby– que permiten estimar con bastante precisión las constantes elásticas del compuesto, a partir de aquellas de las fases y la fracción volumétrica de esferas o elipsoides. En cambio, en el caso de partículas prismáticas *aleatoriamente orientadas* no existen modelos analíticos sencillos para estimar las constantes elásticas efectivas, excepción hecha de los relativamente amplios límites de Hashin-Shtrickman, de modo que la posibilidad de efectuar una caracterización fenomenológica en este ámbito es, de por sí, interesante.

Por otro lado, en el caso de esferas o elipsoides, los modelos analíticos de estimación de constantes elásticas mencionados en el párrafo precedente han sido extendidos (con distinto grado de éxito) al régimen elasto-plástico, ya sea mediante modelos tangentes como secantes. Dado que estas extensiones requieren disponer de un método de estimación elástico, la misma consideración del párrafo anterior aplica ahora, esto es, no se dispone de un método analítico directo para estimar el comportamiento elasto-plástico cuando las partículas son *prismáticas en orientación aleatoria*. El autor ha considerado interesante proponer un modo de utilizar la caracterización fenomenológica elástica antes mencionada, en la extensión a plasticidad por el método secante, aun teniendo en cuenta que este método tiene sus propias limitaciones, que habrán de ser exploradas.

Finalmente, en el caso del análisis del daño, el interés reside no sólo en la exposición cualitativa del modo en que los fenómenos de daño modifican la curva de endurecimiento del compuesto y su rigidez material, sino también en la exposición de un método de estimación de la fracción del trabajo total efectuado por las fuerzas externas que es disipado por dichos fenómenos de daño.

1.3 Objetivos

En concordancia con lo señalado en el apartado anterior, para esta Tesis Doctoral se ha planteado dos *objetivos generales*, consistentes en:

- Obtener, mediante modelos de celda, información sobre el comportamiento y propiedades mecánicas de los PMMCs, incluyendo el análisis de sus propiedades elásticas efectivas, de las propiedades efectivas de endurecimiento por deformación y, bajo sollicitación mecánica macroscópica, de la naturaleza de los micro-campos de tensión y deformación y de algunos de los procesos de daño que estos materiales pueden sufrir.
- Profundizar y, eventualmente, re-interpretar algunos de los conceptos e hipótesis en que se fundamentan algunos de los modelos analíticos o formulaciones teóricas propuestas en la literatura, tanto en el ámbito del estudio del comportamiento no lineal en plasticidad, como en el de la revisión de algunos conceptos de la Mecánica de Daño.

Se han planteado así mismo, una serie de *objetivos específicos*, que se detallan a continuación:

1. Elaborar una herramienta que permita generar modelos de celdas multipartícula, reflejando las características de la población de partículas (forma, tamaño, esbeltez y orientación). Dicha herramienta debe tener las siguientes características:
 - 1.1. Debe ser capaz de producir una distribución aleatoria de partículas en el espacio tridimensional contenido en una celda de análisis.
 - 1.2. Según la aplicación en la que sea utilizada, la herramienta debe permitir, a voluntad del usuario, incorporar la condición de periodicidad geométrica.
 - 1.3. La herramienta debe ser capaz de incorporar en el modelo geométrico opciones de variabilidad estadística de parámetros como el tamaño, relación de esbeltez y orientación de partículas según determinadas funciones de distribución de probabilidad.
 - 1.4. Por último, debe disponerse de una herramienta capaz de generar una malla de elementos finitos a partir del modelo geométrico, incorporando condiciones de periodicidad.
 - 1.5. Implementar en el modelo de elementos finitos resultante el uso de elementos de intercara que permitan modelar el daño por decohesión entre matriz y partículas de refuerzo.

2. Implementar una metodología de simulación numérica, basada en el análisis de celda multipartícula, que permita obtener información cualitativa y cuantitativa sobre el proceso de deformación y daño en PMMCs bajo sollicitación mecánica. Lo anterior implica realizar diversos *estudios de influencia* sobre el comportamiento, generalmente en tracción simple y en condiciones cuasi estáticas, con el objeto de:
 - 2.1. Construir una *caracterización fenomenológica* de las constantes elásticas efectivas del material compuesto, estableciendo la influencia de sus características microestructurales (fracción volumétrica de refuerzo, forma, tamaño, esbeltez y orientación de partículas).
 - 2.2. Obtener numéricamente la *curva de endurecimiento* del material compuesto, caracterizando fenomenológicamente sus parámetros en términos de la fracción volumétrica de un refuerzo lineal y elástico, conociendo las propiedades de endurecimiento de la fase matriz.
 - 2.3. Implementar en el modelo de elementos finitos el uso de *elementos de intercara* que permitan modelar la progresión del daño por decohesión entre matriz y partículas, con el objeto de describir cualitativamente la influencia de dicho mecanismo de daño sobre la curva de endurecimiento del compuesto, describiendo además el modo en que el daño y la deformación se *localizan* en el interior del material.
 - 2.4. Implementar un procedimiento para cuantificar numéricamente la degradación progresiva de la rigidez material con la deformación, en presencia del mecanismo de daño por decohesión.
3. Proponer un modo de implementar el método Secante, en sus versiones clásica y modificada, para estimar analíticamente el comportamiento mecánico en régimen no lineal con deformación plástica, haciendo uso de la caracterización fenomenológica elástica señalada en el objetivo 2.1.
4. Elaborar, en relación con el objetivo 2.4, una metodología basada en una reinterpretación de conceptos de la Mecánica de Daño, para cuantificar la fracción del trabajo total efectuado por las fuerzas externas que se disipa en los mecanismos de daño.

1.4 Contenido de la Tesis

El capítulo 2 incluye una revisión del estado actual del conocimiento sobre los PMMCs, describiendo sus características más relevantes, sus mecanismos de daño y los modelos existentes, aplicables al estudio del comportamiento mecánico. El capítulo finaliza con una profundización de algunos aspectos ya señalados en el apartado 1.3 sobre *motivación* y que justifican los objetivos establecidos en el presente capítulo introductorio.

Las herramientas numéricas utilizadas a lo largo de la Tesis se detallan en el capítulo 3. Se incluye en primer lugar, una definición de lo que se considera en este trabajo por *microestructura periódica*. En éste se explica el algoritmo de generación de modelos de celda multipartícula elaborado, así como su implementación mediante el Método de Elementos Finitos, las condiciones de contorno utilizadas, el método de mallado, la implementación del modelo de fisura cohesiva para modelizar la interfaz matriz-partícula, así como un conjunto de programas de elaboración propia para la extracción y post-procesamiento de resultados.

El capítulo 4 presenta resultados de actividades de validación previa de los modelos numéricos construidos con el algoritmo de generación desarrollado. Comparando valores de constantes elásticas obtenidas experimental y numéricamente, se concluye sobre la capacidad de predicción del modelo.

En el capítulo 5 se realiza una caracterización fenomenológica de las constantes elásticas de PMMCs, incluyendo en el análisis no solo la influencia de los parámetros microestructurales sino también el grado de isotropía de la distribución espacial de las partículas de refuerzo. Los resultados se obtienen inicialmente a partir de un análisis de celdas, para ser posteriormente generalizados utilizando la ecuación de Halpin-Tsai como función de ajuste.

En el capítulo 6, asignando a la fase matriz un comportamiento constitutivo elasto-plástico con una ley de endurecimiento de tipo potencial, se estudia la curva de endurecimiento del compuesto y se describen los micro-campos de tensión y deformación en el *interior* del material. Adicionalmente, se presenta una revisión crítica acerca de la definición de medidas *tenso-deformacionales representativas* que se han utilizado en la literatura, en el planteamiento de métodos analíticos para describir la deformación de PMMCs en régimen no lineal, particularmente en el contexto del Método Secante, del cual se expone brevemente algunas ventajas y limitaciones. Se propone, finalmente, un modo de aplicar el método Secante al caso de PMMCs con partículas prismáticas en orientación aleatoria, utilizando como base la caracterización fenomenológica elástica presentada en el capítulo 5.

Los contenidos esenciales de la Tesis concluyen en el capítulo 7, donde se estudia el efecto del mecanismo de daño por decohesión. El capítulo comienza con una revisión de algunos conceptos de la Mecánica de Daño, que permiten establecer una relación entre el método clásico de las *descargas elásticas intermedias* y la fracción del trabajo total efectuado por las fuerzas externas, que se disipa en un proceso de daño. A continuación, se exponen los resultados cualitativos sobre la influencia del daño sobre la curva de endurecimiento del compuesto, obtenidos mediante análisis de celda. Finalmente, se expone una limitación encontrada en los modelos constitutivos basados en Mecánica de Daño, cuando son utilizados en la modelación de procesos de *carga y descarga*, debido a la cual, puede producirse una situación de no-unicidad en la solución del estado tenso-deformacional por el Método de Elementos Finitos.

1.5 Aportaciones Originales

Se enumera a continuación las aportaciones originales de esta Tesis Doctoral.

1. Desarrollo y programación de un algoritmo para producir distribuciones aleatorias y periódicas de partículas prismáticas en el espacio tridimensional, considerando restricciones de no interferencia entre partículas.
2. Caracterización de las constantes elásticas de materiales compuestos reforzados con partículas mediante el análisis numérico de celdas multipartícula, en conjunto con el uso de la ecuación de Halpin-Tsai, para cuyo parámetro principal, 's', se propone:
 - Valores revisados para determinados escenarios microestructurales para los que existe una descripción previa en la literatura.
 - Valores nuevos para algunos escenarios microestructurales sin descripción previa.
3. Implementación de dos metodologías para describir el estado tenso-deformacional *interior* en PMMCs sometidos a tensión macroscópica uniaxial: una basada en el uso de indicadores estadísticos y otra basada en el uso de histogramas de distribución espacial de determinadas variables escalares de interés.
4. Descripción de un efecto de *confinamiento energético* debido a la deformación plástica en la fase matriz, efecto que se ha relacionado con la producción de tensiones residuales en el interior del material compuesto. Para cuantificar este fenómeno se ha introducido el concepto de *energía elástica confinada*, que es una energía almacenada en el interior del

material, de naturaleza elástica, pero que no puede ser liberada en un proceso de descarga subsiguiente a una etapa previa de carga.

5. Propuesta de una implementación particular del método Secante, para describir la relación no lineal entre la macro-tensión y la macro-deformación en PMMCs reforzados con partículas prismáticas en orientación aleatoria. Esta implementación se basa en la caracterización elástica que hace uso de la ec. de Halpin-Tsai mencionada en el punto (2.)
6. Descripción del modo en que la decohesión entre matriz y partículas degrada el módulo de elasticidad efectivo, como un proceso en *dos instancias*. La primera está asociada al hecho de que la decohesión impide transmitir tensión desde la matriz a las partículas de refuerzo. La segunda se asocia al hecho de que el volumen contenido entre las superficies de interfaz decohesionada puede crecer debido a la deformación plástica de la matriz circundante. Lo novedoso de esta descripción en dos instancias es que se recurre a variables energéticas para evaluar aproximadamente la importancia relativa de estas dos instancias en la degradación de la rigidez material efectiva.

Capítulo 2

Antecedentes

El capítulo incluye una descripción general de los materiales compuestos de matriz metálica y refuerzo de partículas cerámicas a través de sus propiedades mecánicas, su microestructura, y sus mecanismos de daño. Además, se describe los modelos analíticos o semi-analíticos más relevantes utilizables en el estudio del comportamiento mecánico de estos materiales. En este contexto, se describen también los métodos basados en el análisis de celda, que son el objeto principal de esta Tesis.

2.1 Los Materiales Compuestos de Matriz Metálica y Refuerzo de Partículas

Se describen, a continuación, las propiedades mecánicas de los materiales compuestos de matriz metálica y refuerzo de partículas cerámicas así como las características de su microestructura, los mecanismos de daño y las tensiones residuales asociadas a su proceso de fabricación.

2.1.1 Propiedades Mecánicas.

Entre los efectos positivos de la presencia del refuerzo en los PMMC se destaca el incremento de rigidez y de resistencia mecánica del compuesto respecto al material base. Este incremento se debe tanto al efecto de la transferencia de carga de la matriz al refuerzo como al propio efecto que el refuerzo tiene sobre las propiedades de la matriz.

El **módulo de elasticidad** es el parámetro que de modo más especial aumenta al considerar el refuerzo, con respecto al del material base. La presencia de partículas puede llegar a duplicar el valor del **límite elástico** del material de la matriz, dependiendo de la forma, orientación y cantidad de refuerzo, así como de las características de la matriz. Este incremento es muy variable, pues dados los diferentes sistemas de fabricación y calidades de los materiales, los resultados de los ensayos que se obtienen en la bibliografía resultan muy dispersos. En función de la esbeltez y orientación de las partículas, tanto el módulo como el límite elástico pueden variar si se miden en direcciones longitudinal o transversal.

El valor del módulo de elasticidad depende fuertemente, además, del modo de medida; en general, si se mide dinámicamente, resulta mayor que si se determina a partir de la pendiente de la curva tensión-deformación estática. Igualmente, se ha comprobado que mediante ensayos de tracción puede obtenerse un módulo aparente mayor que mediante ensayos de compresión; la razón para esta diferencia está en las tensiones residuales de origen térmico.

En PMMCs de aluminio, la mejora de la **resistencia máxima** en el material reforzado en relación a la de la matriz, $\sigma_{mmc}-\sigma_{mat}$, es menor cuando la resistencia máxima de la matriz, σ_{mat} , crece (es decir, si la matriz tiene una mayor resistencia, el hecho de reforzar aumenta menos esta resistencia que si la matriz tiene una menor resistencia). Sin embargo, para otras aleaciones el incremento $\sigma_{mmc}-\sigma_{mat}$ es relativamente independiente de σ_{mat} . Por otro lado, de los datos experimentales de los que se dispone (casi todos ellos relativos a aluminio y sus aleaciones y a algunas aleaciones de magnesio), se deduce que la resistencia en compresión es

mayor que en tracción. Además, un incremento de la fracción volumétrica de partículas cerámicas da lugar a un incremento de la magnitud de la diferencia entre la resistencia en compresión y la resistencia en tracción.

Como efecto negativo de la adición de partículas cerámicas a una matriz metálica, debe indicarse una reducción en la **ductilidad**. Así, la deformación de rotura de una aleación metálica disminuye rápidamente al aumentar la fracción volumétrica de partículas; también disminuye cuando se aumenta el tiempo de envejecimiento con pre-tratamientos térmicos. Por otro lado, la ductilidad en compresión suele ser mayor que la ductilidad en tracción.

2.1.2 Microestructura.

Los parámetros que caracterizan la microestructura de un PMMC desde el punto de vista de su comportamiento mecánico son

- Las características de la población de partículas (fracción volumétrica, forma, tamaño, esbeltez y orientación de las partículas de refuerzo).
- La distribución espacial del refuerzo (uniformidad o presencia de agrupamientos o *clusters* de partículas).

La *fracción volumétrica* de partículas cerámicas mejora el módulo de Young y el límite elástico del compuesto pero disminuye su ductilidad. La *forma* de la partícula influye en su comportamiento mecánico en términos de la intensidad del efecto de concentración de tensión y deformación en zonas de la fase matriz cercanas a partículas de refuerzo, siendo esta concentración más suave en el caso de partículas esferoidales, y más intensa si las partículas poseen formas irregulares con aristas. La literatura científica ofrece mayoritariamente estudios teóricos del comportamiento mecánico de PMMC con refuerzo de partículas esféricas, elipsoidales o cilíndricas. El estudio sistemático de la influencia de la *esbeltez y orientación* es, sin embargo, más limitado, sobre todo en el caso de partículas no esféricas aleatoriamente orientadas.

La *distribución espacial* de las partículas de refuerzo embebidas en la matriz, puede influir tanto en algunas de las propiedades mecánicas del compuesto (límite elástico, ductilidad,...) como en los procesos de localización de la deformación y el daño durante una sollicitación mecánica. En algunos casos, las partículas no están uniformemente distribuidas en la matriz; los diferentes factores que afectan a la distribución final del refuerzo son el proceso de mezclado, la segregación por gravedad antes de la solidificación y la expulsión de la interfase sólido-líquido y segregación a las regiones inter-dendríticas que solidifican más tarde. Como

resultado se producen ordenamientos de las partículas o la aparición de agrupamientos (“clustering”), como se aprecia en la figura 2.1, dependiendo esta tendencia, principalmente, de la velocidad de solidificación.

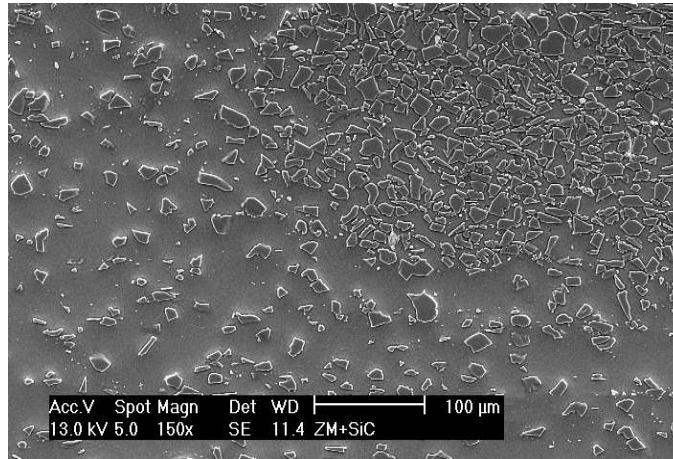


Figura 2.1. Cluster o agrupamiento de partículas , El-Saeid Y. y otros (2003)

Por otro lado, los PMMC son envejecidos después de su fabricación mediante tratamientos térmicos lo cual da lugar a la recrystalización del material base. La presencia de partículas favorece la aparición de núcleos de recrystalización; sin embargo, si las partículas están muy juntas impiden el crecimiento de grano y la recrystalización puede no producirse.

2.1.3 Tensiones Residuales.

Los procesos de fabricación en PMMCs pueden producir importantes tensiones residuales. Este es el caso, por ejemplo, del brusco enfriamiento (velocidades de enfriamiento en el rango de 20 y 500 K/s) al que es sometido el material tras un proceso de extrusión. Aquí, la diferente velocidad de enfriamiento de las zonas exteriores e interiores de la sección transversal del perfil extruido da lugar a la aparición de un fuerte gradiente de temperaturas según el radio de la barra, lo que provoca diferentes deformaciones dentro del PRC que inducen, a su vez, la formación de tensiones residuales. Este gradiente unido a la variación de las propiedades mecánicas del material con la temperatura da lugar a la aparición de un primer campo tensional, de tipo macroscópico.

Por otra parte, la matriz y el refuerzo tienen normalmente diferente coeficiente de dilatación térmica. Este hecho implica que cuando el PRC está sujeto a cambios de temperatura se generan tensiones de origen térmico entre ambos componentes. Los materiales son mezclados

y conformados a alta temperatura (libres de tensiones residuales), de modo que la matriz se contrae alrededor de la partícula más que el propio refuerzo, produciéndose deformaciones al conseguir la compatibilidad de forma e induciéndose un campo de tensiones residuales. En algunos casos, los campos de tensiones podrían inducir niveles de deformación plástica significativos.

La magnitud de las tensiones residuales dependerá, entre otras variables, de la fracción volumétrica del refuerzo, del tamaño y geometría de éste, de las temperaturas inicial y final del proceso, y de la velocidad de enfriamiento. Las tensiones residuales tienen influencia en el comportamiento mecánico del PMMC, pudiendo alterar los valores del límite elástico y la tenacidad. Otros efectos que se asocian a las tensiones residuales son la disminución de la resistencia a la fatiga, distorsión de forma y corrosión.

2.1.4 Mecanismos de Daño.

Los mecanismos de daño que experimentan los PMMC's bajo sollicitación mecánica son principalmente la fractura de las partículas, la decohesión partícula/matriz (figura 2.2.) y el daño en la matriz dúctil. Usualmente, el proceso de daño se inicia con la decohesión o la fractura de partículas (existiendo una *competición* entre estos dos mecanismos) y concluye con el daño dúctil en la matriz por nucleación, crecimiento y coalescencia de microvacíos.

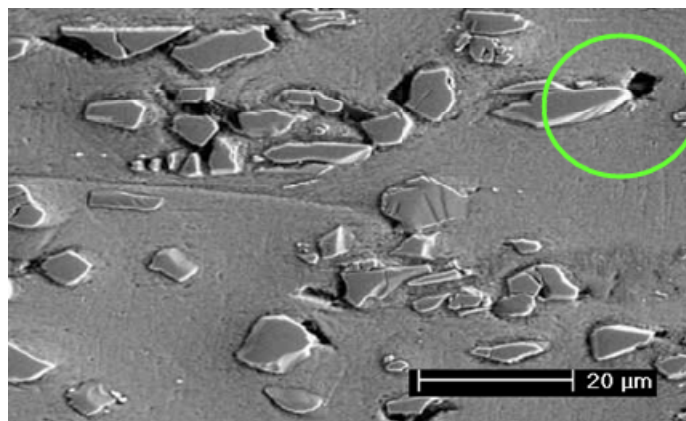


Figura 2.2 Partículas rotas y decohesionadas, El-Saeid Y. y otros (2003)

La fractura o decohesión de las partículas de refuerzo se produce al transferirse la carga de la matriz a las partículas, siendo el predominio de uno u otro mecanismo función de la relación

existente entre la resistencia del material de las partículas y la resistencia mecánica de la interfaz (**Babout y otros, 2004** y **Downes y King, 1991**). El proceso de daño progresivo sigue cualitativamente las siguientes etapas:

- La tensión en las partículas intactas y en la interfaz matriz-partícula aumenta durante la deformación debido al progresivo endurecimiento por deformación de la matriz.
- Si una partícula rompe o decohesiona, relaja la tensión que estaba resistiendo, que pasa a ser absorbida por la matriz que la rodea. Al superar la matriz su capacidad de endurecimiento por deformación, no puede aceptar la tensión relajada por la partícula que ha roto o decohesionado.
- La tensión relajada por la fractura o decohesión de la partícula es entonces transferida a las partículas intactas del entorno.
- La sobrecarga tensional de las partículas todavía intactas produce, eventualmente, su rotura o decohesión. En consecuencia, el número de partículas rotas o decohesionadas aumenta en un proceso en cadena.
- Se produce inicialmente una distribución homogénea de las partículas rotas o decohesionadas aunque tiende a localizarse enseguida en una sección dada de la probeta.
- La rotura final se produce por un mecanismo dúctil con nucleación, y crecimiento de microvacíos en la matriz que finalmente coalescen con los vacíos producidos por las roturas de las partículas y las decohesiones partícula/matriz.

Un importante efecto de la decohesión y rotura progresiva y creciente de partículas durante el proceso de deformación plástica es la disminución de la capacidad de endurecimiento por deformación del compuesto respecto a la que tiene el material base. Así, el punto de inestabilidad plástica es alcanzado antes en el material reforzado.

En los micro-mecanismos de daño de los PMMC tiene una notable influencia la triaxialidad del campo tensional en la matriz dúctil. La deformación de fractura de la matriz dúctil, de hecho, no es una propiedad intrínseca del material sino que depende de la triaxialidad del campo tensional, como puso de manifiesto **Bridgman (1952)** en su análisis de la estricción de una probeta de tracción.

Liu y Lewandowski (1993) han analizado el efecto de la presión hidrostática en la deformación y la fractura de materiales compuestos de refuerzo cerámico. **González y LLorca (2003)** han estudiado el efecto de la presión hidrostática sobre la deformación a tracción de un material compuesto con matriz de aluminio y esfuerzo de partículas, concluyendo que los esfuerzos a tracción en las partículas cerámicas, y de esta manera la proporción de las partículas rotas, se redujeron al aumentar la presión hidrostática.

2.1.4.a Modelos aplicables al estudio de la Decohesión matriz-partícula.

Una interfaz matriz-partícula se caracterizan por su *resistencia*, correspondiente al máximo valor de tensión que la interfaz puede transmitir. El fallo por decohesión entre la partícula y la matriz se inicia cuando la tensión transmitida en un punto de la interfaz, iguala a la resistencia de la misma. Esta decohesion comienza a propagarse a lo largo de la interfaz, pudiendo llegar a pararse después de un cierto recorrido.

El proceso de decohesión puede describirse mediante modelos de fisura cohesiva, tales como los presentados por **Needleman (1987)**, **Tvergaard (1990)** o **Tvergaard y Hutchinson (1993)**. El modelo de Needleman considera que la *interfaz cohesiva* tiene un comportamiento constitutivo que representado por un potencial elástico, definido como una función escalar que relaciona la tensión transmitida por la interfaz y su apertura. En esta función, la *variable independiente* es el desplazamiento relativo entre los lados de la interfaz y los *parámetros* son la tensión normal máxima que la interfaz puede transmitir (resistencia) y la energía de fractura.

$$\phi(\delta_n, \delta_s) = \frac{27}{4} t^R \delta_f \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\delta_n}{\delta_f} \right)^2 \left(1 - \frac{4}{3} \frac{\delta_n}{\delta_f} + \frac{1}{2} \left(\frac{\delta_n}{\delta_f} \right)^2 \right) + \frac{\gamma}{2} \left(\frac{\delta_s}{\delta_f} \right)^2 \left(1 - 2 \frac{\delta_n}{\delta_f} + \left(\frac{\delta_n}{\delta_f} \right)^2 \right) \right\} \quad (2.1)$$

$$\text{con} \quad t_n = -\frac{\partial \phi}{\partial \delta_n} \quad ; \quad t_s = -\frac{\partial \phi}{\partial \delta_s} \quad \text{si } \delta_n \leq \delta_f \quad (2.2)$$

$$t_n = t_s = 0 \quad \text{si } \delta_n > \delta_f$$

donde:

δ_n, δ_s : apertura normal y de cortadura entre las caras de la interfaz.

t_n, t_s : tensión normal y de cortadura transmitida por la interfaz.

t^R : resistencia mecánica de la interfaz.

δ_f : apertura normal de interfaz al final del ablandamiento, cuando la interfaz ya no puede transmitir tensión. En este modelo, esta apertura queda definida de t^R y de la energía de fractura, G^C , según

$$G^C = \frac{9}{16} t^R \delta_f$$

Este potencial define una ley *tracción-separación* con primera derivada continua en la variable independiente y donde, para una *apertura* impuesta creciente, la tensión normal transmitida por la interfaz inicialmente crece desde cero hasta la resistencia de la interfaz, para luego decrecer hasta cero en lo que se conoce como curva de ablandamiento. Esta ley se representa en la figura 2.3 (izquierda).

Una severa deficiencia de este modelo es que la rigidez cohesiva inicial en la ley de tracción-separación no es un parámetro independiente, sino que es resultante de la propia expresión analítica utilizada para el potencial elástico, pudiendo expresarse en términos de t^R y δ_f como

$$K_n = \frac{27}{4} (t^R)^2 \delta_f$$

En el caso de **Tvergaard (1990)**, el modelo cohesivo anterior es modificado introduciendo un parámetro de daño que permite simular descargas intermedias, así como la posibilidad de describir fractura en cortante puro. En el caso de **Tvergaard y Hutchinson (1993)**, no sólo se considera a la rigidez cohesiva inicial como parámetro independiente de la resistencia y la energía de fractura, sino que se propone un nuevo potencial elástico que da origen a una ley tracción-separación de tipo trapezoidal (figura 2.3 derecha), cuya primera derivada pasa, por tanto, a ser sólo continua *por tramos*. Esta ley trapezoidal ha sido frecuentemente modificada, eliminando, por sencillez, su meseta horizontal.

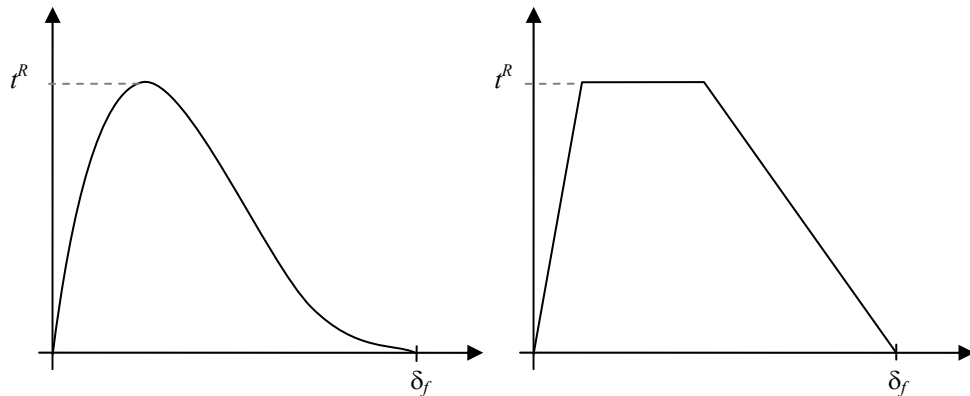


Figura 2.3: Leyes tracción-separación en los modelos cohesivos de Needleman (a la izquierda) y Tvergaard y Hutchinson (a la derecha).

En el apartado 2.3 se citan algunos ejemplos de aplicación de estos modelos cohesivos en el estudio de la decohesión mediante modelos de celda. En ellos, estos modelos se utilizan para definir el comportamiento constitutivo de una interfaz que inicialmente tiene espesor nulo, pero que aumenta en función de la sollicitación mecánica macroscópica del material.

Como enfoque alternativo (aunque menos extendido en la literatura) para estudiar la decohesión, se puede representar la interfaz matriz-partícula como un sólido con espesor mucho menor que la extensión de la interfaz, y describir su comportamiento tenso-deformacional mediante modelos constitutivos *dañables* para materiales *sólidos* como, por ejemplo, modelos derivados de la Mecánica del Daño o de la Mecánica de Medios Porosos. En cualquiera de estos casos, la dificultad reside en la elección de los parámetros de modelo constitutivo sólido seleccionado, de modo de representar adecuadamente el estado tensional y la degradación progresiva de la capacidad de la interfaz para transmitir tensión. Como ejemplo se cita a **Kari y otros (2008)**.

2.1.4.b Modelos aplicables al estudio de la Fractura de Partículas.

Los materiales cerámicos utilizados en las partículas de PMMCs presentan una amplia dispersión en sus valores de resistencia mecánica en tracción debido a su sensibilidad a la presencia de defectos. La dispersión de resultados ha obligado al uso de herramientas estadísticas basadas en criterios tensionales en el análisis de los resultados de los ensayos mecánicos. Se ha demostrado que la función de distribución de probabilidad de **Weibull y Becher (1951)** permite describir adecuadamente el proceso de fractura frágil de las partículas.

Una vez determinados los parámetros de la distribución de Weibull (generalmente por métodos experimentales), pueden efectuarse tanto estimaciones de tipo global como local. Por un lado, considerando todo el compuesto, para un valor de tensión dado actuante en las partículas puede estimarse la fracción total de partículas fracturadas en el compuesto. Por otro lado, si se considera aisladamente el material de que está formada una partícula, puede estimarse la probabilidad de que dicho material se fracture a una tensión dada.

Estimaciones del primer tipo se han utilizado, por ejemplo, en algunos de los modelos de campo medio citados en 2.2.3, generalmente como método que permite transportar información obtenida mediante análisis de celda sobre la tensión en las partículas, hacia modelos de campo medio del comportamiento mecánico con daño.

Otro enfoque que puede encontrarse en la literatura para modelar la fractura de partículas consiste en utilizar una formulación cohesiva como aquellas señaladas en el apartado anterior, adaptando los parámetros que las definen de modo de representar adecuadamente el proceso de fractura frágil que caracteriza la rotura de partículas cerámicas en PMMCs. En estos casos, las propiedades cohesivas suelen ser asignadas mediante las estimaciones del segundo tipo, esto es, generando números aleatorios gobernados por la función de distribución de probabilidad de Weibull.

2.1.4.c Modelos aplicables al estudio del Daño Dúctil en la matriz metálica.

El daño dúctil en metales, se ha caracterizado como un proceso de nucleación, crecimiento y coalescencia de microvacíos en el seno del material. Un microvacío se *nuclea* alrededor de inclusiones no metálicas o terceras fases, bien cuando la tensión aplicada es suficiente para romper las ligaduras interfaciales entre las partículas (inclusiones) y la matriz, o bien por un proceso de rotura de partículas debido a la diferencia de rigidez entre éstas y la matriz que, en general, es mucho más deformable. El fenómeno de *crecimiento* de microvacíos es el proceso que consume más energía dentro del proceso general de fractura dúctil y de aquí que diferentes investigadores hayan tratado de obtener leyes que gobiernan la evolución del tamaño de microvacíos. La *coalescencia* de huecos es el fenómeno a través del cual los huecos se van uniendo a huecos adyacentes hasta llegar a la rotura final. Todos estos procesos se pueden producir simultáneamente en el material: mientras hay microvacíos que crecen y acaban coalesciendo, se están nucleando nuevos microvacíos que van desarrollando el proceso de rotura.

Existen numerosos modelos que estiman la tensión a la cual se produce la *nucleación* de un microvacío. El modelo de **Argon y otros (1975)** considera que la tensión en la intercara puede expresarse como suma de la tensión hidrostática σ_m , y la tensión equivalente de Von Mises σ_{eq} . La partícula y la matriz iniciarán la decohesión, nucleándose un microvacío, cuando la tensión en la intercara alcance un valor crítico.

Existen modelos del proceso de *crecimiento* de microvacíos que no consideran la interacción del daño que se va produciendo en el material con los campos de tensiones y deformaciones causadas por las sollicitaciones exteriores. Así, **Rice y Tracey (1969)** consideraron el crecimiento de un hueco inicialmente esférico sin interacción con sus huecos vecinos contenido en un sólido infinito de material elasto-plástico y sometido a un campo triaxial de tensiones. Una aproximación al problema de la *coalescencia* de microvacíos se debe a **Brown y Embury (1973)**, según la cual dos microvacíos adyacentes crecen por deformación plástica hasta un punto en que su longitud sea igual a su separación.

Un intento de abordar el análisis conjunto de los procesos básicos que constituyen la fractura dúctil desde el punto de vista de la Mecánica de los Medios Continuos, ha sido considerar el material como un medio poroso, donde los microvacíos están contenidos en una matriz plástica. Para ello es necesario establecer la ley constitutiva del material poroso, la cual debe constar de una función de plastificación, de las variables que describan el proceso de deformación y fractura, de las reglas de evolución de estas variables, de los criterios de nucleación de microvacíos y de los criterios de rotura del material. En este grupo de modelos hay que considerar el denominado modelo **GTN**, consistente en las modificaciones

introducidas por **Tvergaard (1981 y 1982)** y **Tvergaard y Needleman (1984)** sobre el potencial de plastificación propuesto **Gurson (1977)**. **Thomason (1990)** planteó además un criterio de rotura que tiene en cuenta la forma y distancia entre microvacíos, considerando éstos de manera más individualizada.

Hay dos aspectos importantes a tener en cuenta en este tipo de modelos. Uno es el de la obtención de sus parámetros característicos; diversos autores, **Zhang y Huges (1996)**, han puesto de manifiesto no solamente la dificultad de asociar dichos parámetros a variables medibles físicamente, sino la no unicidad de los valores óptimos. El otro es el de la posible dependencia de estos parámetros con el campo tensional presente en un determinado problema, como han puesto de manifiesto **Koplik y Needleman (1988)**.

Como alternativa, aparecen los modelos basados en la **Mecánica del Daño**, donde las variables que describen el daño del material, representan en un sentido estadístico la distribución de microdefectos, y son consideradas **variables de estado**, cuya evolución debe ser determinada como parte del modelo. **Kachanov, (1958)**, planteó la primera definición de la variable de daño a través del área efectiva. Basándose en el concepto de tensión efectiva de **Rabotnov, (1969)**, **Lemaitre (1971)** y **(1985)** introdujo el principio de deformación equivalente que se expresa de la siguiente forma: “las leyes constitutivas del material dañado se obtienen a partir de las del material sin daño, sustituyendo la tensión por la tensión efectiva”. Partiendo de las teorías de Lemaitre, **Rousselier (1981)** planteó un modelo de daño en el que supone una función de plastificación compuesta por dos términos aditivos; el primer término coincide con la función de Von Mises, mientras que el segundo tiene en cuenta la influencia de la variable de daño en el campo tensional. La variable de daño, se asocia a la porosidad del material y su correspondiente ley de evolución se obtiene mediante las hipótesis de conservación de la masa y de incompresibilidad del material no dañado durante el proceso de deformación.

Cuando se utilizan como modelos constitutivos de materiales metálicos en el contexto del análisis por el método de Elementos Finitos, tanto los modelos para materiales porosos como de aquellos basados en la Mecánica del Daño han mostrado la desventaja de que pueden dar lugar a soluciones, en mayor o menor medida, dependientes de la malla utilizada. Como solución, se han propuesto diversos métodos de regularización, entre las que destacan las implementaciones no locales. En el contexto del estudio del daño dúctil en PMMCs, este efecto fue descrito por **Drabek y Böhm (2005)**, quienes utilizaron como modelo constitutivo para la fase matriz en celdas con una o dos partículas, los modelos de Rousselier y de Gurson, tanto en la implementación clásica como en una implementación no local.

2.2 Comportamiento Mecánico de PMMCs, parte I. Modelos Analíticos o semi Analíticos

En lo que sigue se hace una somera descripción de algunos de los principales modelos analíticos o semi analíticos presentes en la literatura, aplicables al estudio del comportamiento mecánico de PMMCs.

2.2.1 Determinación de Constantes Elásticas Efectivas.

2.2.1.a Modelos basados en Teoría de Campo Medio.

Los modelos de campo medio se basan en el hecho de que las propiedades mecánicas efectivas del compuesto pueden obtenerse mediante relaciones entre las medias volumétricas de los micro-campos de tensión y deformación. Son métodos especialmente útiles para ser usados en régimen elástico, aunque pueden extenderse a régimen elasto-plástico. Aunque ha sido adaptados para incluir el efecto del daño, estos modelos son, en general, poco eficaces en éste ámbito de modelización, puesto que el daño está más relacionado con valores máximos de tensión y deformación que con valores medios. En lo que sigue se exponen métodos de Campo Medio aplicables a la determinación de constantes elásticas de PMMCs, haciendo uso de la notación siguiente:

\bar{a} : promedio volumétrico de a calculado en la totalidad del volumen de compuesto.

\bar{a}_r : promedio volumétrico de a calculado en la subregión r del compuesto, pudiendo ser $r = m, p$ por matriz o partículas, respectivamente.

Tomando como parámetro la fracción volumétrica de partículas F , la tensión media, $\bar{\sigma}$, y la deformación medias, $\bar{\varepsilon}$, en el compuesto se obtienen a partir de las tensiones y deformaciones medias en las fases (2.3) y (2.4), denotando los subíndices m y p , respectivamente, valores medios en la matriz y en las partículas:

$$\bar{\sigma} = F \bar{\sigma}_p + (1-F) \bar{\sigma}_m \quad (2.3)$$

$$\bar{\varepsilon} = F \bar{\varepsilon}_p + (1-F) \bar{\varepsilon}_m \quad (2.4)$$

Las contribuciones individuales se cuantifican considerando que en régimen elástico las tensiones y deformaciones medias en cada fase se relacionan a través de los tensores de rigidez de cuarto orden respectivos, L_m y L_p :

$$\bar{\sigma}_m = L_m : \bar{\varepsilon}_m \quad ; \quad \bar{\sigma}_p = L_p : \bar{\varepsilon}_p \quad (2.5)$$

Por otra parte, se definen, los *Tensores de Concentración* de la tensión y de la deformación, (2.6a) y (2.6b), que relacionan las tensiones y deformaciones medias en la matriz y las partículas con las tensiones y deformaciones medias en el material compuesto.

$$\bar{\sigma}_m = B_m : \bar{\sigma} \quad ; \quad \bar{\sigma}_p = B_p : \bar{\sigma} \quad (2.6a)$$

$$\bar{\varepsilon}_m = A_m : \bar{\varepsilon} \quad ; \quad \bar{\varepsilon}_p = A_p : \bar{\varepsilon} \quad (2.6b)$$

donde, además, han de cumplirse

$$I = FA_p + (1-F)A_m = FB_p + (1-F)B_m \quad (2.7)$$

El objetivo de los modelos de campo medio en elasticidad se resume en encontrar el tensor de rigidez L del material compuesto que satisface (2.8), en función de la fracción volumétrica y de los tensores de rigidez de las fases constituyentes, que se consideran como datos del problema.

$$\bar{\sigma} = L : \bar{\varepsilon} \quad (2.8)$$

Se puede demostrar que L queda completamente definido si se conoce uno de los cuatro tensores de concentración antes indicados. Por ejemplo, operando algebraicamente, se puede obtener el tensor de rigidez efectiva mediante (2.9), o bien, el tensor de flexibilidad efectiva mediante (2.10):

$$L = L_m + F(L_p - L_m) : A_p \quad (2.9)$$

$$M = M_m + F(M_p - M_m) : B_p \quad (2.10)$$

donde $M = L^{-1}$ tanto para el compuesto como para las fases constituyentes, m y p .

De este modo, en el caso elástico, el problema de calcular el tensor de rigidez del compuesto se reduce a calcular uno de los tensores de concentración, por ejemplo, A_p . Para A_p se han presentado diversas soluciones, entre las que se puede citar los siguientes.

Eshelby (1957): estudiando el campo tensional en el interior de una partícula embebida en matriz elástica de extensión *infinita*, presentó una solución para A_p basada en un método de *Inclusión Equivalente* y representada mediante la expresión (2.11), en que S_p es un tensor de cuarto orden que depende de la forma de la partícula y de las constantes elásticas de la matriz:

$$A_p = A_p^{dil} = [I + S_p M_m (L_p - L_m)]^{-1} \quad (2.11)$$

Withers y otros (1990) han demostrado mediante técnicas fotoelásticas la validez de los modelos de **Eshelby** para predecir el estado tensional en el entorno de partículas cilíndricas e incluso de fibras. Debe indicarse, en todo caso, que este método, por considerar un medio circundante infinito, sólo es aplicable cuando la fracción volumétrica de refuerzo es baja (generalmente menor del 10%), motivo por el que este método se denomina a veces “solución diluida de Eshelby”.

Mori y Tanaka (1973): presentaron un modelo que, en una posterior reformulación por **Benveniste (1987)**, modifica el modelo de Eshelby incorporando la influencia de la interacción entre partículas vecinas. En este caso, el tensor de concentración de la deformación A_p^{MT} puede calcularse como

$$A_p = A_p^{MT} = A_p^{dil} \left[(1-F)I + FA_p^{dil} \right]^{-1} \quad (2.12)$$

2.2.1.b Métodos Autoconsistentes.

Si en la expresión (2.9) de los modelos de Campo Medio, se considera que A_p es variable con la rigidez efectiva L , dicha expresión pasa a ser una ecuación, posiblemente no lineal, en incógnita L . Se dice entonces que el modelo es de tipo *autoconsistente*. No todos los modelos autoconsistentes, en todo caso, pueden considerarse como modelos de Campo Medio propiamente tales. Algunos de estos modelos se citan a continuación.

Kröner (1958) planteó su formulación autoconsistente en la que el material se representa de forma que todas las fases están embebidas en un *material equivalente* cuyas propiedades efectivas son las propiedades a determinar. Esto se logra cambiando que L_m por L en la solución de Eshelby para A_p , ec. (2.11). Así, la ecuación (2.9) da origen a una ecuación no lineal en variable L que se resuelve mediante iteraciones. El modelo, fue formulado originalmente para obtener constantes elásticas de sólidos poli-cristalinos a partir de aquellas de un monocristal; se ha utilizado también para homogeneización de constantes elásticas de compuestos.

Christensen y Lo (1979) propusieron una formulación autoconsistente generalizada, que permite determinar las constantes elásticas de compuestos con partículas esféricas o fibras cilíndricas alineadas. En este modelo, la partícula se embebe en una corona de matriz, y este conjunto a su vez, se embebe en un material equivalente (y geoméricamente infinito) cuyas constantes elásticas son la incógnita del problema. Este modelo autoconsistente no puede considerarse propiamente como un modelo de campo medio ya que no utiliza la media volumétrica de las tensiones ni de las deformaciones en las fases.

Hill (1964) y **Halpin y Tsai (1967)** a partir de simplificaciones sobre una formulación autoconsistente propuesta por Hill (1964), que consideraba un filamento cilíndrico, rodeado de un cilindro de matriz, embebido a su vez en un medio infinito representativo del compuesto y cuyas constantes elásticas son la incógnita del problema, Halpin y Tsai propusieron la ec. (2.13)

$$\frac{\ell}{\ell_m} = \frac{1 + s\eta F}{1 - \eta F} \quad \text{con} \quad \eta = \eta\left(\frac{\ell_p}{\ell_m}; s\right) = \frac{\frac{\ell_p}{\ell_m} - 1}{\frac{\ell_p}{\ell_m} + s} \quad (2.13)$$

donde ℓ puede ser cualquiera de las constantes elásticas E , K o G , mientras que ℓ_p y ℓ_m son, respectivamente, la correspondiente constante elástica de las partículas y de la matriz.

La deducción de esta expresión y, más importante, su relación con la formulación autoconsistente de Hill, se encuentra documentada en **Halpin y Kardos (1976)**. En la expresión (2.13) la constante elástica en estudio, normalizada por el valor de la misma constante de la fase matriz, es considerada como función de la fracción volumétrica, de una medida del *contraste* entre las propiedades elásticas de partículas y matriz (ℓ_p/ℓ_m) y de un parámetro escalar ‘s’ que está relacionado con la forma y orientación del refuerzo de un modo que varía con la condición de carga y con la constante elástica en estudio. Nótese que cuando $s \rightarrow \infty$, la expresión (2.13) pasa a ser *la regla de las mezclas*.

Por su sencillez de uso, este modelo ha sido utilizado ampliamente como herramienta de diseño en ingeniería, pudiendo ser aplicado tanto a compuestos de elasticidad isótropa como transversalmente isótropa.

2.2.1.c Modelos de Homogeneización por Expansión Asintótica (AEH).

Al igual que los Modelos de Campo Medio, los modelos basados en las teorías de homogeneización permiten sustituir un medio heterogéneo por un medio homogéneo representativo equivalente, de forma tal que las leyes de comportamiento macroestructural incluyen la información de la microestructura del medio.

Se han propuesto diferentes métodos de homogeneización entre los cuales cabe destacar los denominados *métodos de expansión asintótica* o AEH. En estos modelos se establecen relaciones entre los micro-campos y los macro-campos de tensión y deformación utilizando un método de perturbación multiescala. Las propiedades efectivas del material se obtienen a

partir de estas relaciones. Estos métodos, necesariamente, asumen que el compuesto posee microestructura periódica.

Frente a otros métodos de homogeneización, los métodos AEH tienen la ventaja de que no sólo permiten resolver el problema de *homogeneización*, entendido como la determinación del estado tenso-deformacional macroscópico y las propiedades efectivas a partir de información en la micro-escala, sino también el problema inverso de *localización*.

Sobre modelos AEH puede consultarse, entre otras referencias, a **Bensoussan y Lions (1978)**, **Sánchez-Hubert y Sánchez-Palencia (1992)** y, más recientemente, **Pinho-da-Cruz y otros (2009)**, que proporciona una excelente descripción del tratamiento matemático del problema homogeneización en elasticidad lineal, así como el trabajo clásico de **Hori y Nemat-Nasser (1999)**, donde se compara la Teoría de Campo Medio con la AEH, proponiéndose un modelo micromecánico híbrido de las dos teorías.

La AEH ha sido aplicada exitosamente a la determinación de constantes elásticas. Sin embargo, su extensión a régimen no lineal, con deformación plástica está menos desarrollada.

2.2.1.d Límites Variacionales para las constantes elásticas efectivas.

Aplicando principios variacionales puede obtenerse expresiones que acotan los valores de las propiedades efectivas del compuesto.

Los límites de Hill, (2.18), que se basan en los modelos de **Voigth (1910)** y de **Reuss (1929)**, son independientes de la distribución espacial de partículas y, aunque resultan fáciles de aplicar, tienen poco valor predictivo por su amplitud.

$$\left[FM_p + (1-F)M_m\right]^{-1} \leq L \leq \left[FL_p + (1-F)L_m\right] \quad (2.14)$$

El miembro derecho la expresión anterior corresponde al tensor de rigidez estimado de la *regla de las mezclas*, mientras que el miembro izquierdo corresponde al inverso del tensor de flexibilidad, estimado también mediante la regla de las mezclas. La igualdad en (2.14) sólo ocurre bajo circunstancias muy particulares, de modo que en compuestos reales en que al menos una de las fases es discontinua (partículas), las desigualdades de (2.14) pueden considerarse *estrictas*.

Lo mismo ocurre con los límites de **Hashin y Shtrikman (1963)**, aplicables a materiales con microestructura estadísticamente isótropa y materializados en las expresiones (2.15) y (2.16), para los módulos de compresibilidad y cortadura efectivos, K y G , respectivamente. Estos

límites son más útiles como herramienta de estimación que los de Hill, ya que son mucho más estrechos.

$$\bar{K} - a_m \leq K \leq \bar{K} - a_p \quad (2.15)$$

$$\bar{G} - b_m \leq G \leq \bar{G} - b_p \quad (2.16)$$

donde:

$$a_m = \frac{F(1-F)(K_p - K_m)^2}{\tilde{K} + \frac{4}{3}G_m} \quad ; \quad a_p = \frac{F(1-F)(K_p - K_m)^2}{\tilde{K} + \frac{4}{3}G_p}$$

$$b_m = \frac{F(1-F)(G_p - G_m)^2}{\tilde{G} + \frac{G_m}{6} \left(\frac{9K_m + 8G_m}{K_m + 2G_m} \right)} \quad ; \quad b_p = \frac{F(1-F)(G_p - G_m)^2}{\tilde{G} + \frac{G_p}{6} \left(\frac{9K_p + 8G_p}{K_p + 2G_p} \right)}$$

$$\bar{\ell} = F\ell_p + (1-F)\ell_m \quad ; \quad \tilde{\ell} = (1-F)\ell_p + F\ell_m$$

En las últimas expresiones, ℓ puede ser alternativamente K o G , mientras que ℓ_p y ℓ_m son, respectivamente, la correspondiente constante elástica de las partículas y de la matriz.

Las constantes elásticas se pueden acotar mejor si se conocen las características de la distribución espacial de la matriz y de las partículas. Mediante integración de funciones de probabilidad se definen parámetros que contienen información sobre la distribución de partículas y matriz. En este contexto se planteó la estimación de tercer orden, cuyas expresiones para valores efectivos de K y G , pueden consultarse en **Torquato (1998)**, donde se explica el modo de cálculo para distintas geometrías de partícula. Estos estimadores son considerados los más precisos que puede obtenerse, aunque no es directa su aplicabilidad a partículas no esféricas en orientación aleatoria.

2.2.2 Régimen Elasto-Plástico, sin Daño.

Las aproximaciones de Campo Medio citadas en el apartado 2.2.1.a pueden ser extendidas a régimen elasto-plástico siguiendo dos enfoques: los modelos tangentes y los modelos secantes.

2.2.2.a Modelos Tangente.

Los modelos tangentes se basan en la formulación incremental de la teoría de la plasticidad. Así, las ecuaciones (2.6) y (2.7) pueden escribirse en función de los *tensores de concentración tangente* del siguiente modo:

$$d\bar{\sigma}_m = B_m^{\tan} : d\bar{\sigma} \quad ; \quad d\bar{\sigma}_p = B_p^{\tan} : d\bar{\sigma} \quad (2.17)$$

$$d\bar{\varepsilon}_m = A_m^{\tan} : d\bar{\varepsilon} \quad ; \quad d\bar{\varepsilon}_p = A_p^{\tan} : d\bar{\varepsilon} \quad (2.18)$$

Como ocurría con L en elasticidad, el *tensor de rigidez tangente* del material compuesto, L^{\tan} , se puede evaluar a partir de los tensores de concentración tangentes de cada fase, reescribiendo la ecuación (2.9) como

$$L^{\tan} = L_m^{\tan} + F(L_p - L_m^{\tan}) : A_p^{\tan} \quad (2.19)$$

En esta expresión, L_p es la rigidez de las partículas lineales y elásticas, que es un dato del problema e invariante con la deformación, mientras que L_m^{\tan} es la rigidez tangente de la fase matriz, que es variable con la deformación en la matriz, siendo la forma de esta dependencia una *propiedad* de la fase matriz y, por lo tanto, un *dato* del problema.

En cuanto se dispone de un valor para L_m^{\tan} , puede calcularse L^{\tan} por alguno de los métodos antes presentados para homogeneización elástica, a través de la determinación de A_p^{\tan} . Sin embargo, puesto que L_m^{\tan} varía con la deformación, también L^{\tan} varía con la deformación, de modo que el método de homogeneización elástico seleccionado debe aplicarse para *cada* valor de deformación macroscópica.

La primera implementación de este enfoque incremental corresponde a la formulación autoconsistente de **Hill (1965)**. Los métodos tangentes proporcionan, en general, una respuesta muy rígida del compuesto.

2.2.2.b Modelos Secante.

Los modelos secantes se fundamentan en la formulación en deformaciones totales de la teoría de la plasticidad modelando el comportamiento elasto-plástico como elástico no-lineal, lo que no permite aplicarlos en situaciones en que se verifiquen descargas elásticas. En lugar de considerar la expresión (2.9) de la Teoría de Campo Medio planteada en *rigidez*, consideran la (2.10), formulada en *flexibilidad*, que puede ser reescrita como

$$M^{\sec} = M_m^{\sec} + F(M_p - M_m^{\sec}) : B_p^{\sec} \quad (2.20)$$

En el caso de las partículas elásticas, su flexibilidad se considera un *dato* del problema, siendo además invariante con la deformación. La flexibilidad secante de la matriz, por su parte, puede escribirse como indica la expresión (2.21).

$$M_m^{\text{sec}} = \frac{1}{3K_m} \mathbf{J} + \frac{1}{3G_m^{\text{sec}}} \mathbf{K} \quad (2.21)$$

donde \mathbf{J} y \mathbf{K} son, respectivamente, los tensores de cuarto orden de proyección volumétrica y de proyección desviadora y K_m y G_m^{sec} los módulos de compresibilidad y de cortadura secante de la matriz. En (2.21), K_m se considera un *dato* del problema, invariable además con la deformación; en cambio, el módulo de cortadura secante G_m^{sec} (y, por extensión, M_m^{sec}) sí varía con la deformación en la matriz, siendo la forma de esta dependencia una *propiedad* de la fase matriz que define su comportamiento no lineal y se considera, por tanto, un *dato* del problema.

Existen al menos dos distintas medidas posibles para cuantificar la deformación *representativa* en la fase matriz a la que debe evaluarse su flexibilidad. En función de la medida adoptada para esta deformación, el método Secante se denomina Clásico o Modificado, este último, propuesto por **Suquet (1995)**.

Tal como en el caso de los modelos tangente, en cuanto se fija la dependencia $G_m^{\text{sec}} = G_m^{\text{sec}}(\varepsilon_m)$, puede aplicarse cualquiera de los métodos antes descritos para la homogeneización de constantes elásticas para obtener la flexibilidad secante del compuesto en función de las flexibilidades de las fases. Puesto que M_m^{sec} varía con la deformación, también M^{sec} varía con la deformación, de modo que el método de homogeneización elástico seleccionado debe aplicarse para *cada* valor de deformación macroscópica. Diversos autores han mostrado que la selección del método de homogeneización elástico seleccionado para homogeneizar las flexibilidades secantes influye de manera determinante en la precisión del método.

Dado que este método proporciona en general una respuesta menos rígida que el método tangente, su uso está más extendido en la literatura. En el capítulo 6 del presente trabajo se profundiza tanto en los aspectos teóricos que fundamentan este modelo como en su implementación práctica en el caso de PMMCs cuya matriz posee endurecimiento potencial. Particularmente, se describe las diferencias entre las versiones Clásica y Modificada, así como el significado de las medidas de la tensión y la deformación en la fase matriz que han de usarse en la ecs. (2.20) y (2.21).

2.2.3 Régimen Elasto-Plástico, con Daño.

Los modelos de Campo Medio nombrados hasta ahora (ver 2.2.1.a, 2.2.1.b y 2.2.2) no incorporan el efecto del daño en el comportamiento mecánico, de modo que la relación σ - ε que se obtiene no considera el acoplamiento existente entre el daño y la deformación. Diversos autores han intentado introducir la progresión del daño, fundamentalmente al considerar el daño por fractura de partículas. Se cita a continuación algunos ejemplos presentes en la literatura. Nótese que algunos de estos modelos utilizan, como datos internos, resultados proporcionados por modelos de celda.

Mochida y otros (1991) presentaron un modelo que considera el daño del material compuesto en tres situaciones posibles, a saber, partículas pulverizadas, partículas rotas, partículas decohesionadas (figura 2.5). En el modelo se separan para el tensor de rigidez L las contribuciones de la matriz, de las partículas sanas y de las dañadas, asociando a los tensores de rigidez de estas últimas, valores específicos según el tipo de daño a considerar (pulverización, rotura o decohesión). Debe indicarse que en este modelo, el daño es un *parámetro de entrada* y no un *parámetro en evolución*. Es decir, puede obtenerse constantes elásticas para distintos valores o tipos de daño, pero no se puede obtener la evolución del daño con la deformación. Por otra parte, siendo un modelo secante, no permite reproducir el efecto de la redistribución de tensiones asociadas a la fractura de partículas.

Bourgeois (1994) propuso en su Tesis Doctoral un modelo en el que las partículas intactas se comportaban como inclusiones elásticas e isotropas y las partículas dañadas se representan como fisuras con forma de disco. Para la matriz consideró un comportamiento elasto-plástico utilizando para su tratamiento numérico la teoría de las deformaciones totales. Planteó un procedimiento incremental de obtención de la curva σ - ε del compuesto, basado en el uso de constantes elásticas secantes de la matriz. Con este modelo se puede obtener una estimación de la evolución del daño con la deformación; sin embargo, las redistribuciones de tensiones asociadas a la rotura progresiva de las partículas no se pueden reproducir correctamente utilizando la formulación secante.

Maire y otros (1997) propusieron un modelo con el que se puede calcular la curva σ - ε incorporando el efecto de la redistribución de tensiones debida a la fractura de partículas. El material compuesto se representa mediante una red interpenetrante de dos familias de partículas esféricas rodeadas de matriz: partículas sanas y partículas con una grieta ortogonal al eje de aplicación de la carga. El modelo utiliza plasticidad incremental y simplificaciones al caso unidimensional para simular el régimen elasto-plástico, recurriendo al modelo autoconsistente de Hill (1965) para evaluar las descargas asociadas al incremento en la

fracción de partículas fracturadas con la deformación. A su vez, la cuantía de este incremento está controlada por una función de distribución de probabilidad de Weibull.

González y LLorca (2000) presentaron una extensión del modelo de Maire al caso 3D, por lo que puede ser utilizado para modelar sollicitaciones arbitrarias, no sólo uniaxiales. También hace uso de plasticidad incremental y del modelo autoconsistente de Hill. Como en el modelo de Maire, cada incremento de deformación consta de dos etapas: inicialmente se verifica un endurecimiento a fracción de partículas dañadas constante, calculando los tensores de rigidez y de concentración tangentes por el método autoconsistente incremental. Aquí sin embargo, estos tensores se utilizaron en su formulación isótropa, dado que en su forma anisótropa sobreestiman la rigidez global del material. Posteriormente, empleando una distribución de Weibull, se cuantifica el incremento en la fracción de partículas rotas asociadas al incremento de tensión antes obtenido, se cuantifica la redistribución de tensiones (descarga elástica) correspondiente usando el método autoconsistente de Hill.

Brockenbrough y Zok (1995) analizaron el papel de la fractura de partículas en la plastificación y daño de los PMMC. El modelo utilizado corresponde a una red tridimensional y periódica de celdas hexagonales, cada una de las cuales contiene una partícula que puede, a su vez estar intacta o partida. Suponiendo una distribución espacial homogénea de las partículas intactas y dañadas, la tensión media o macroscópica que actúa sobre el PMMC viene dada por (2.22), en función de la deformación media o macroscópica.

$$\sigma(\bar{\varepsilon}) = \sigma^I(\bar{\varepsilon})(1 - \rho) + \sigma^F(\bar{\varepsilon})\rho \quad (2.22)$$

donde ρ es la fracción de celdas con refuerzo fracturado y σ^I y σ^F son las tensiones medias soportadas por las celda intactas y dañadas respectivamente. Estas dos respuestas tensionales a la macros deformación $\bar{\varepsilon}$ se obtuvieron mediante análisis numérico de dos celdas, cada una de tipo unipartícula y axisimétrica (como aproximación a las celdas hexagonales), y que en un caso contiene una partícula intacta y en el otro una fracturada. La compatibilidad de desplazamientos entre celdas adyacentes implica una situación de iso-deformación que impide tener en cuenta la redistribución de tensiones al producirse la rotura del refuerzo. El daño en este modelo crece progresivamente puesto que se emplea una distribución de Weibull para estimar ρ en función de la tensión macroscópica.

LLorca y González (1998) modifican el modelo de iso-deformación de **Brockenbrough y Zok** desarrollando un modelo en el que recogen como variables diferenciadas la fracción de volumen, la forma y el estado de las partículas (ver figura 2.4, en que se representa una sección transversal del conjunto de celdas hexagonales originario). La tensión promedio que actúa sobre el PMMC puede expresarse como

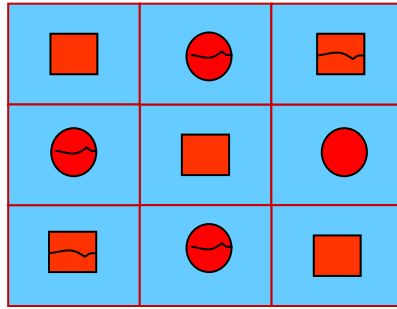


Figura 2.4: Modelo de LLorca y González (1998)

$$\sigma(\bar{\varepsilon}) = \sum_i \gamma_i \left\{ \sigma_i^I(\bar{\varepsilon})(1 - \rho_i) + \sigma_i^F(\bar{\varepsilon})\rho_i \right\} \quad (2.23)$$

donde el subíndice i identifica los conjuntos de celdas con la misma forma y fracción de volumen de refuerzo γ_i , σ_i^I es la tensión media actuando en una celda del conjunto i -ésimo conteniendo una partícula intacta, σ_i^F es la tensión media actuando en una celda del conjunto i -ésimo conteniendo una partícula rota y ρ_i es la fracción actual en el conjunto i -ésimo de celdas conteniendo una partícula rota.

Evidentemente, también aplica en este caso la hipótesis de iso-deformación. Como en el modelo anterior, la respuesta en tensiones de cada conjunto de celdas en distintas formas (cilindros o esferas) y en distintos estados (intacto o dañado), se obtuvo mediante análisis numérico de celdas axisimétricas.

En la línea de lo señalado en el párrafo inicial del apartado 1.2, los dos últimos modelos citados constituyen ejemplos de modelos de Campo Medio que recurren al análisis de celda para evaluar algunos de los datos internos por ellos requeridos.

2.3 Comportamiento Mecánico de PMMCs, parte II. Métodos Basados en el Análisis de Celda

En el presente apartado se describe la formulación de los métodos de celda en relación con el problema de Homogeneización, describiéndose algunos de los ejemplos de aplicación e implementación más relevantes que puede encontrarse en la literatura.

2.3.1 Formulación.

Sea un Elemento Representativo de Volumen (*RVE*) del material compuesto, de modo que $RVE = U(V_r)$, donde r , en el caso de PMMCs, puede ser $r = \text{matriz, partículas}$. El comportamiento constitutivo en cada fase es un *dato* del problema y se representará, en lo que sigue, mediante una función G_r del siguiente modo:

$$\sigma(x) = G_r(\varepsilon(x)) \quad \forall x \in V_r \quad (2.24)$$

El problema general de homogeneización consta entonces de dos partes: un *problema local* y un *problema de homogeneización asociado* al problema local, como se explica a continuación.

Problema Local:

Consiste en encontrar, para una determinada condición de contorno en ∂RVE , los campos tensoriales $\sigma = \sigma(x)$, $\varepsilon = \varepsilon(x)$ y el campo de desplazamiento $u = u(x)$, que satisfacen

$$\sigma(x) = G_r(\varepsilon(x)) \quad x \in V_r \quad \text{con } r = \text{matriz, partículas} \quad (2.25a)$$

$$\varepsilon(x) = \frac{1}{2} \{ \nabla \otimes u(x) + (\nabla \otimes u(x))^T \} \quad x \in RVE \quad (2.25b)$$

$$\nabla \sigma(x) = 0 \quad x \in RVE \quad (2.25c)$$

Problema de Homogeneización Asociado:

Consiste en encontrar, para las funciones conocidas G_r del problema local, la función G que satisface

$$\Sigma = G(E) \quad (2.26)$$

donde Σ y E son *alguna medida* de la tensión y de la deformación *macroscópica* del compuesto, y que es *representativa* del campo de tensión y deformación que es solución del *Problema Local*.

Obsérvese que la relación entre las variables tenso-deformacionales locales y macroscópicas, o equivalentemente, la relación entre el Problema Local y su Problema de Homogeneización Asociado, queda completamente definida en cuanto se fijan los dos elementos siguientes: (a) el tipo de condición de contorno impuesta en ∂RVE para el *Problema Local* (que puede ser prescrita en tracciones o en desplazamientos) y, (b) la *medida* adoptada para Σ y E .

Se profundizará sobre el tipo de condiciones de contorno a utilizar en el apartado 3.1, y sobre la definición de la medida macroscópica de la tensión y la deformación en 3.3.6.

Si se asocia la noción de *celda* al concepto de *RVE* (introducido anteriormente, al final del apartado 1.1), los métodos basados en el análisis de celda consisten en la realización de tres actividades:

- i.* Diseñar la geometría de la celda o *RVE* que constituye el dominio en el que ha de resolverse el *Problema Local*, de acuerdo a las características microestructurales que se desee modelar. En el caso de PMMCs, dicha celda puede contener una o más partículas embebidas en matriz; en otros casos puede contener uno o más vacíos o cavidades e incluso una o más microfisuras. En esta etapa es necesario, además, definir el comportamiento constitutivo de las fases constituyentes (funciones G_r), que rige punto a punto en el interior de la celda.
- ii.* Definir el tipo de condiciones de contorno a aplicar en ∂RVE y, en función de ellas, resolver el Problema Local, siendo esta *elección* crucial en la validez y representatividad de los resultados obtenidos (ver apartado 3.1). En determinados casos y sobre todo si la geometría del RVE es relativamente sencilla, la solución del Problema Local puede ser de tipo analítico. En otros casos en cambio, han de usarse métodos numéricos tales como el de los Elementos Finitos.
- iii.* Definir la medida a usar para cuantificar Σ y \mathbf{E} , en su relación con las condiciones de contorno utilizadas en la solución de (*ii.*), lo cual permite, por extensión, obtener la función G que relaciona estas dos variables.

2.3.2 Observaciones y Aplicaciones.

Si el Problema Local de la etapa (*ii.*) puede resolverse por métodos analíticos, entonces en forma natural las consideraciones que se adopten en la etapa (*iii.*) darán lugar a una expresión analítica para la relación constitutiva G , que es, en esencia, la incógnita del problema al relacionar $\Sigma = G(\mathbf{E})$.

Un ejemplo clásico de este tipo lo constituye el procedimiento empleado por **Gurson (1977)** para obtener un potencial de plastificación para metales con porosidad. Aunque este autor formuló el Problema Local cambiando *desplazamiento* por *velocidad* y *deformación* por *velocidad de deformación*, en dicho procedimiento pueden identificarse las etapas mencionadas anteriormente:

- i.* El autor consideró dos tipos de celda, a saber, una celda axisimétrica con una cavidad esférica y una celda plana con una cavidad circular considerando deformación plana.
- ii.* En ambo casos, dicho autor resolvió el Problema Local mediante un procedimiento analítico (sujeto a un determinado número de simplificaciones) considerando condiciones de contorno que obligan a mantener *rectas* las aristas exteriores de las celdas.
- iii.* La definición de la tensión y de la velocidad de deformación macroscópicas, Σ y \dot{E} , a partir de promedios volumétricos y superficiales adecuados de las variables tenso-deformacionales locales deducidas en la etapa anterior, permitió establecer una relación analítica entre Σ y \dot{E} (esto es, la función G del *Problema de Homogeneización asociado*), materializada en una expresión para el potencial de plastificación, respetando principios de convexidad de la superficie de fluencia resultante y de normalidad en las leyes de evolución.

Sin embargo, en muchos casos de interés una solución analítica del Problema Local suele ser inviable, en cuyo caso, lo normal es resolver el Problema Local mediante la discretización FEM del RVE. Esto ocurre, por ejemplo, cuando interesa incluir en la celda numerosos características micro-estructurales, lo que impide la solución analítica por la complejidad de la geometría resultante, sobre todo en el caso tridimensional. Suele ser inviable también una solución analítica del Problema Local si interesa incluir en el modelo de celda algún mecanismo de daño. En cualquier caso, si la solución del Problema Local es de tipo numérico, el comportamiento constitutivo G del compuesto queda descrito mediante una tabla de valores tensión-deformación en lugar de una expresión analítica.

Uno de los primeros ejemplos de este tipo, en que se aborda el comportamiento mecánico de compuestos incluyendo el efecto del daño, puede encontrarse en los trabajos de **Needleman (1987)** y **Nutt y Needleman (1987)**. En ambos se estudia mediante análisis numérico de celda unipartícula y axisimétrica el comportamiento del RVE considerando el daño por decohesión, en un caso para partícula esférica y en otro para un whisker que incluye arista viva. En ambos casos, el comportamiento constitutivo de la fase matriz fue elasto-plástico, las partículas fueron elásticas y lineales y la interfaz entre ellas se modeló mediante el modelo cohesivo propuesto en Needleman (1987) y descrito brevemente en el apartado 2.1.4.a.

Otro de los modelos de este tipo es el modelo de celdas de **Bao (1992)** dedicado al estudio de la influencia de la fractura de partículas en la curva de endurecimiento. Este modelo considera el PMMC como una distribución periódica de celdas hexagonales de partícula centrada, algunas de las cuales contienen partículas fracturadas (fig. 2.5 izquierda). La particularidad de este modelo es que el RVE de análisis consiste en una única celda formada por un conjunto de

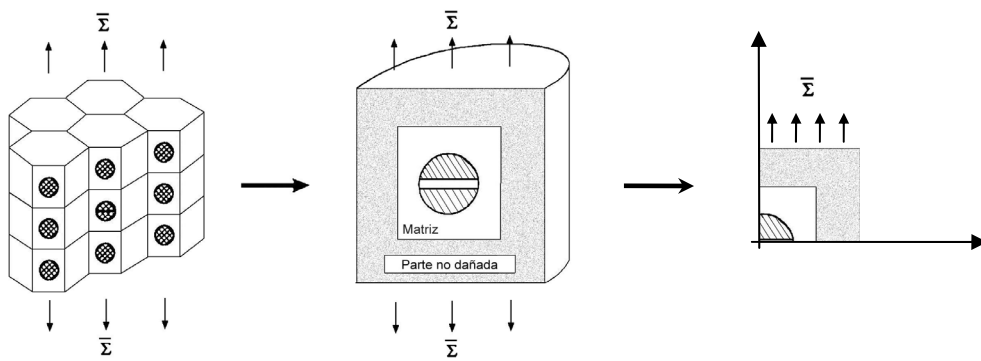


Figura 2.5: Modelo de celdas de **Bao**. *Izquierda:* idealización mediante celdas hexagonales en que la celda central contiene una partícula fracturada, rodeada de celdas con partículas sanas. *Derecha:* modelo resultante de celda axisimétrica.

tres fases: una partícula rota inserta en un cilindro de matriz, a su vez embebida en un cilindro de *material compuesto* sin daño, todo ello, en una configuración axisimétrica en que la proporción volumétrica entre las dos fases interiores y el volumen total corresponde a la fracción de partículas rotas (fig. 2.5 derecha). Estas celdas fueron analizadas por el método de Elementos Finitos variando sistemáticamente la fracción de partículas rotas.

Las primeras aplicaciones basadas en análisis de celdas por métodos numéricos utilizaron celdas unitarias de tipo **unipartícula** (o bien, de tipo univacío, si el material en estudio es de tipo poroso en lugar de un compuesto reforzado con partículas), como los ejemplos antes mencionados de Gurson, Needleman o Bao, o incluso aquellos mencionados en el apartado 2.2.3, utilizados como herramienta de soporte a determinados modelos analíticos. Como se ha indicado, no sólo puede variarse en éstos la forma, fracción volumétrica y esbeltez de la partícula contenida en la celda, sino que pueden modelarse también procesos de daño. No pueden incluir sin embargo aleatoriedad en la orientación de la partícula en relación con la dirección macroscópica de la carga, particularmente en los casos que las celdas utilizan simetría o axisimetría para reducir el número de grados de libertad.

Posteriormente y en forma concurrente con el progresivo aumento de la potencia computacional disponible, se hizo posible el análisis numérico de celdas unitarias de tipo **multipartícula** (o multivacío). Frente a los modelos de partícula única, las celdas multipartícula tienen varias ventajas (ya reseñadas en el apartado de 1.2), sobre todo en el ámbito del estudio del comportamiento elasto-plástico y del daño. En la literatura puede encontrarse ejemplos en los que se incluye en las celdas de análisis distinto número de partículas esféricas, elipsoidales o cilíndricas reflejando, en algunos casos, la existencia de posibles estructuras de cluster en la distribución espacial de las partículas.

La dificultad de estos modelos se encuentra en dos áreas. En primer lugar se encuentra la estimación del número mínimo de partículas a incluir, de modo que la celda multipartícula resultante sea, en efecto, un RVE. En elasticidad existen estimaciones basadas en trabajos de **Drugan y Willis (1996)** y **Drugan (2000)**. En plasticidad y daño, sin embargo, no hay estimaciones universalmente aceptadas, de modo que el comportamiento mecánico del compuesto suele obtenerse del promedio de varias simulaciones de celdas multipartícula. En segundo lugar, existe la dificultad asociada a la propia generación de la distribución de las partículas en el espacio bi o tridimensional, sobre todo en el caso de partículas con formas irregulares orientadas aleatoriamente. Se citan a continuación algunos ejemplos presentes en la literatura basados en el análisis de celdas multipartícula.

Segurado y Llorca (2002) han desarrollado un modelo de celda tridimensional que puede incluir un número de partículas esféricas o vacíos esféricos que fue utilizado en la determinación de constantes elásticas efectivas, tanto de PMMCs como de materiales porosos. **González, Segurado y Llorca (2004)** utilizaron este mismo modelo pero asignando a la fase matriz en el Problema Local un comportamiento constitutivo no lineal con deformación plástica y endurecimiento por deformación. Los resultados obtenidos en tracción uniaxial y en cortadura pura fueron usados como *referencia de comparación* para evaluar la precisión de métodos analíticos para comportamiento elasto-plástico, particularmente, diversas implementaciones del método Secante Clásico y Modificado, concluyendo que la calidad de las aproximaciones secantes dependían fuertemente del método de homogeneización elástica que se usa como base del método secante. En los dos trabajos mencionados se utilizaron condiciones de contorno periódicas para garantizar la repetibilidad de la celda multipartícula en la configuración deformada.

En cuanto a la modelación del daño, **Segurado y Llorca (2005)** han simulado el proceso de decohesión matriz-partícula situando en la interfaz un elemento finito de intercara diseñado específicamente, cuyo comportamiento constitutivo se deriva del modelo de fisura cohesiva de **Tveergaard y Hutchinson (1993)**. Al igual que antes, en este trabajo se utilizaron condiciones de contorno periódicas que implican que, aunque el daño por decohesión se localice *dentro* de la celda multipartícula, una vez que ocurre daño en una zona de la celda, en realidad ocurre también, por repetición periódica, en infinitos puntos del espacio tridimensional.

Chawla y otros (2006), por su parte, presentaron un modelo en que la forma de las partículas consideradas se obtuvo de la visualización de la microestructura en microscopio de varias secciones transversales de una probeta de un compuesto reforzado con partículas irregulares de SiC. Con esta información se construyó una celda multipartícula tridimensional, utilizada en el estudio de constantes elásticas efectivas y de procesos de deformación plástica.

Otros ejemplos de modelos multipartícula son los de **Pierard y otros (2007)**, que utiliza partículas elipsoidales, y el de **Galli y otros (2008)**. Las propiedades efectivas de un material reforzado con fibras cilíndricas cortas han sido obtenidas por **Kari y otros (2007)** y las de un material reforzado con esferas aleatoriamente distribuidas han sido obtenidas por **Böhm y otros (2004)**

Otra familia de modelos de celda multipartícula son aquellos basados en los algoritmos de teselación de Voronoi, que han sido utilizados para análisis en dos dimensiones. Cada celda se representa en un elemento finito básico (figura 2.6) que contiene una partícula embebida en matriz y con una formulación independiente en tensiones y desplazamientos.

Las tensiones en el elemento, en la matriz y en la inclusión, se obtienen a partir de sendas funciones de Airy, cuyos coeficientes han de determinarse:

$$\phi_m = \sum_{i,j} \alpha_{i,j}^m x^i y^j \quad ; \quad \phi_p = \sum_{i,j} \alpha_{i,j}^p x^i y^j \quad (2.27)$$

Morthy y Ghosh (1998) propusieron un modelo basado en los algoritmos de Voronoi que incluyese la progresión del daño. Para ello le añadieron a la función de Airy un término que

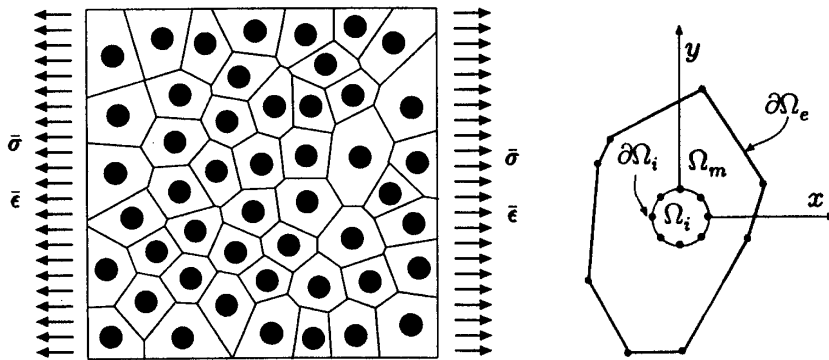


Figura 2.6: Modelo multipartícula basado en la celda bidimensional de Voronoi.

incluye la distribución de tensiones en las proximidades de una grieta dentro del refuerzo y cuyos coeficientes han de ser, también, calculados.

$$\phi_m = \sum_{i,j} \alpha_{ij}^m x^i y^j + \phi_m^{rec} \quad ; \quad \phi_p = \sum_{i,j} \alpha_{i,j}^p x^i y^j + \phi_p^{rec} \quad (2.28)$$

Capítulo 3

Métodos y Herramientas

En este capítulo se describe los métodos utilizados, las herramientas desarrolladas, así como las técnicas numéricas empleadas en el análisis del comportamiento mecánico de PMMC's. Algunas de estas herramientas han sido desarrolladas o programadas específicamente durante el desarrollo de esta Tesis Doctoral, mientras que otras están constituidas por herramientas de tipo genérico, tales como el código comercial ABAQUS para análisis por el Método de Elementos Finitos. Se incluye al final del capítulo un listado-resumen de las herramientas de elaboración propia.

3.1 Consideraciones Previas sobre Microestructuras Periódicas

El comportamiento mecánico de PMMC's se estudia en esta Tesis Doctoral mediante el análisis numérico de modelos de celda multipartícula, representativos de la micro estructura del material compuesto. Estas celdas son discretizadas según el Método de Elementos Finitos, sometiéndolas a distintos tipos de sollicitación mecánica, posibilitando así la obtención numérica de propiedades mecánicas homogeneizadas para el PMMC. Además, se incluye en el estudio el efecto del daño por decohesión entre matriz y partículas, recurriendo al uso del Modelo de Fisura Cohesiva.

Las soluciones así obtenidas dependen, sin embargo, de las condiciones de contorno aplicadas, pudiendo consistir éstas ya sea en tracciones prescritas en la frontera, como en desplazamientos prescritos en la frontera. En régimen elástico, Hori y Nemat-Nasser (1999) mostraron que:

- (a) De entre los infinitos modos posibles de *prescribir tracciones* en la frontera del RVE que producen un promedio volumétrico de deformación fijo e igual a E , produce mínima energía elástica específica (SE), aquel que consiste en *tracciones uniformes* en la frontera, mientras que produce SE máxima aquel que da lugar a una microestructura deformada *periódica* (o *repetible* en las 3 direcciones del espacio cartesiano).
- (b) De entre los infinitos modos posibles de *prescribir desplazamientos* en la frontera del RVE que producen un promedio volumétrico de deformación fijo e igual a E , produce SE máxima aquel que consiste en desplazamientos uniformes en la frontera, mientras que produce SE mínima aquel que da lugar a una microestructura deformada *periódica*.
- (c) De (a) y (b) se deduce que, a igualdad en el promedio volumétrico de la deformación E , la prescripción de *tracciones uniformes* en la frontera o de *desplazamientos uniformes* en la frontera define, respectivamente, una cota inferior y superior para la energía elástica SE, en comparación con unas condiciones de contorno *arbitrarias* (sea prescritas en tracciones o en desplazamientos).
- (d) **Unicidad de la solución:** si se considera *desplazamientos* prescritos en la frontera del RVE que dan origen a una celda deformada *periódica*, cuyos promedios volumétricos de deformación, tensión y energía elástica son $E=E_p$, $\Sigma=\Sigma_p$ y $SE=SE_p$, respectivamente, entonces, de entre los infinitos modos posibles de *prescribir tracciones* en la frontera del RVE, sólo aquel que da lugar a una microestructura deformada *periódica* produce $E=E_p$, $\Sigma=\Sigma_p$ y $SE=SE_p$.

Estos hechos han motivado el uso de *condiciones de contorno periódicas*, ya sea a través de desplazamiento o fuerzas prescritas en la frontera, en la mayoría de los casos existentes en la literatura que emplean métodos de celda.

Evidentemente, la imposición de condiciones de contorno periódicas sólo tiene sentido cuando la propia naturaleza de la microestructura del compuesto sea de tipo periódica. En lo que sigue, se define lo que se considera en este trabajo por *microestructura periódica*.

Un sólido deformable está formado por infinitos *puntos materiales* que ocupan una región Ω del espacio tridimensional. Además, dicho sólido está formado por uno o más materiales reales que, en general, se caracterizan por sus diferentes propiedades, que pueden ser mecánicas (E, ν, σ_y , etc.), térmicas (c, k, α , etc.) o físicas (como la densidad ρ).

Si un sólido Ω está constituido por un material perfectamente homogéneo, cada una de sus propiedades tendrá un valor constante en todos los puntos materiales que lo forman. Si, por el contrario, el material es heterogéneo (caso de los materiales compuestos o de las aleaciones no uniformes), sus propiedades varían de un punto material del sólido a otro. Esto significa que, en un instante de referencia, las propiedades del material son funciones de la posición \vec{X} de cada uno de los puntos materiales que forman el sólido. Es decir, si las N propiedades del material son n_1, n_2, \dots, n_N , existen N funciones del tipo:

$$n_i = n_i(\vec{X}) \quad \text{con} \quad i = 1, \dots, N$$

Definición 1: Estructura Periódica.

Sea Ω la región del espacio ocupada por un sólido cuyo material está caracterizado por las N propiedades n_1, n_2, \dots, n_N . Sea $P \in \Omega$ un punto material del sólido y \vec{X}_P su vector posición.

Se dice que la estructura de Ω es periódica en la dirección del vector unitario \hat{u} si existe un vector $\vec{L} = L \hat{u}$, denominado período en la dirección \hat{u} , tal que:

$$\forall P \in \Omega, z \in Z \quad n_i(\vec{X}_P) = n_i(\vec{X}_P + z\vec{L}), \quad i = 1, \dots, N$$

Definición 2: Puntos Correspondientes.

Sea Ω una región cuya estructura es periódica en la dirección de \hat{u} , y sea $\vec{L} = L \hat{u}$ el período. Sean $P, Q \in \Omega$ puntos materiales del sólido que ocupa la región y \vec{X}_P, \vec{X}_Q sus vectores posición. Sean n_1, n_2, \dots, n_N las N propiedades que caracterizan el material.

Se dice que P y Q son puntos correspondientes si $\exists z \in Z$ tal que $\vec{X}_Q = \vec{X}_P + z\vec{L}$

Observación: Si Ω es una estructura periódica de período \vec{L} , con P y Q puntos correspondientes de Ω , entonces:

$$n_i(\vec{X}_P) = n_i(\vec{X}_Q) \text{ para } i = 1, \dots, N$$

Geoméricamente, esto implica que una micro estructura periódica puede describirse a través de una *celda generadora* que se repite en todas las direcciones relevantes. Debe observarse además que las definiciones anteriores para estructuras periódicas y puntos correspondientes son suficientemente generales en el sentido de que no condicionan la forma de la celda generadora ni la orientación de las direcciones en las cuales existe periodicidad.

En el caso particular de estructuras periódicas en bidimensionales, las definiciones anteriores admiten periodicidad rectangular, hexagonal u otras, siendo posible, en cada caso, identificar hasta 2 vectores período (no necesariamente ortogonales). Esto se ejemplifica en las figuras 3.1 a 3.3. En el caso 3D una microestructura periódica puede ser caracterizada por hasta tres vectores período, pudiendo ser menos de tres si la periodicidad se manifiesta solo en alguna de las tres direcciones del espacio cartesiano.

En adelante, sólo se considerará estructuras de periodicidad prismática como las del ejemplo 3, en su relación con las tensiones, deformaciones y desplazamientos debidos a una sollicitación mecánica. En el apartado 3.3.1 se describirá el conjunto de ecuaciones que es necesario imponer en la frontera de la celda para garantizar periodicidad en la configuración deformada de la misma, en el contexto de las distintas sollicitaciones mecánicas que pueden ser simuladas a través del Método de Elementos Finitos.

Ejemplo 1: Periodicidad hexagonal.

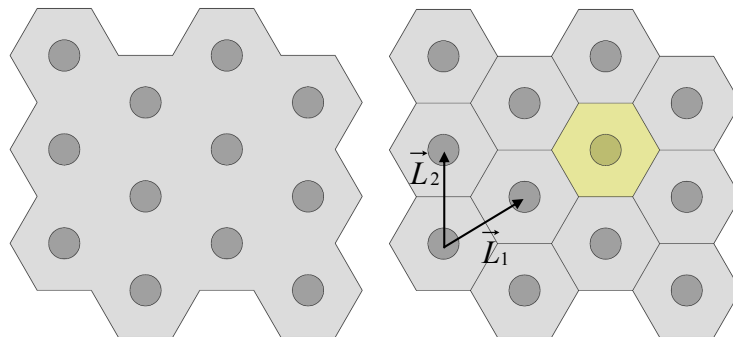


Figura 3.1: Estructura periódica (izquierda) y su celda generadora hexagonal uni-partícula (derecha), indicando los vectores período \vec{L}_1 y \vec{L}_2 , no ortogonales.

Ejemplo 2: Periodicidad con celda de paredes curvas.

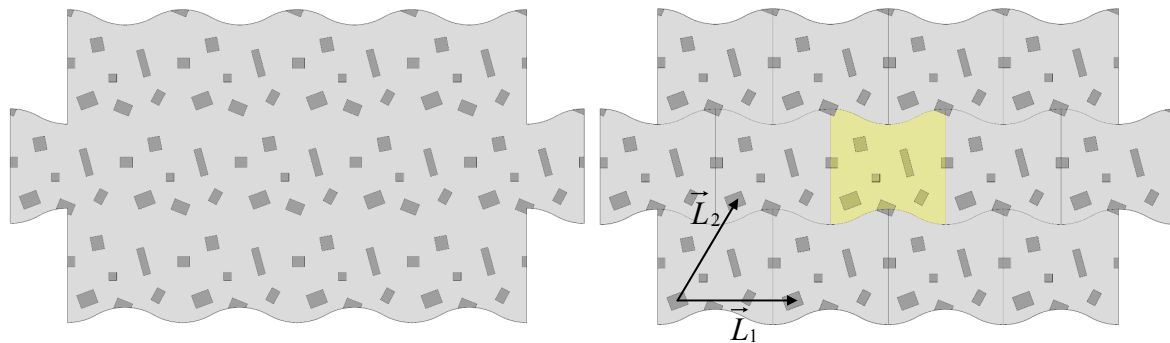


Figura 3.2: Estructura periódica (izquierda) y su celda generadora multi-partículas (derecha) con paredes curvas. Los períodos \vec{L}_1 y \vec{L}_2 tampoco son ortogonales.

Ejemplo 3: Periodicidad prismática.

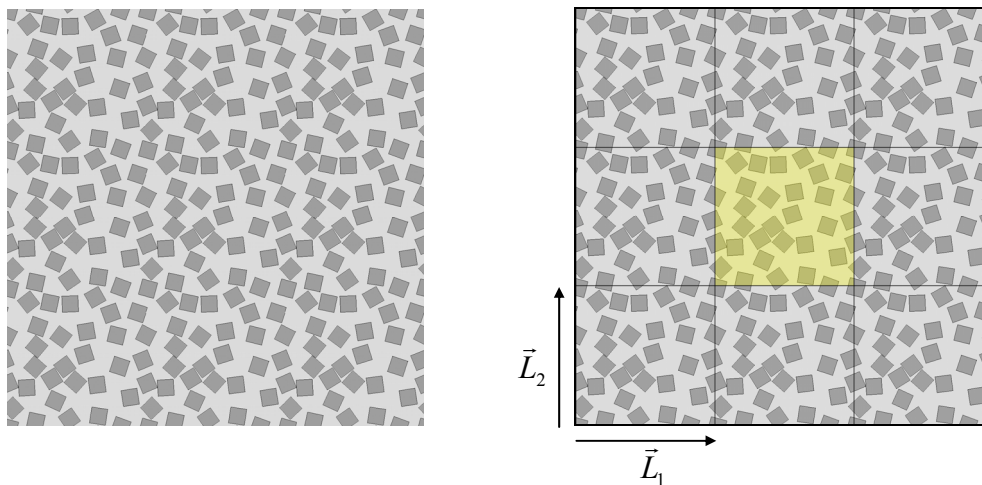


Figura 3.3: Estructura periódica prismática (izquierda). La celda generadora es de tipo multi-partículas (derecha), con sus períodos ortogonales y de igual magnitud (celda cuadrada).

3.2 Generación de Celdas Multipartícula

Con el objeto de modelizar el comportamiento mecánico de materiales reforzados con partículas en el contexto señalado en secciones anteriores, se ha programado en lenguaje Fortran un algoritmo capaz de producir distribuciones espaciales de partículas dentro de una celda de geometría periódica, de acuerdo a criterios que permitan representar de la manera más fidedigna posible los distintos parámetros geométricos que caracterizan la microestructura de un material compuesto real.

3.2.1 Descripción del Algoritmo.

En este algoritmo, la celda cúbica queda caracterizada por su arista, L , la fracción volumétrica de refuerzo F , y el número N de partículas prismáticas que contiene. Cada partícula queda, a su vez, caracterizada por un tamaño, una orientación y una sola esbeltez (por simplicidad, dos de las tres dimensiones que definen un prisma 3D se han fijado como iguales, ver figura 3.1). El algoritmo asigna a la primera partícula un *tamaño*, una *esbeltez*, una *posición* y una *orientación* en el espacio tridimensional de acuerdo a los siguientes criterios:

Tamaño de partícula: se cuantifica mediante su volumen, siendo este una variable aleatoria con una distribución Normal de probabilidades, cuyo valor medio \bar{V} es *resultante* de los valores asignados a L , F y N , y cuya desviación estándar, S_V , es prescrita por el usuario.

Esbeltez de partícula: es también una variable aleatoria con distribución Normal, pudiendo fijar el usuario tanto su valor medio \bar{R} como su desviación estándar S_R .

Posición y Orientación de partícula: se asigna aleatoriamente dando a cada punto del espacio dentro de la celda igual probabilidad. La orientación puede ser asignada aleatoriamente, o bien, puede ser restringida por el usuario de modo que la partícula pueda rotar en forma aleatoria e iso-probable *dentro* de un cono cuyo ángulo de apertura es definido por el usuario y cuyo eje tiene la dirección de un eje de trabajo determinado, que es igual para todas las partículas. Este cono de restricción se muestra esquemáticamente en la figura 3.4

La primera partícula propuesta por el algoritmo siempre es aceptada. Las partículas siguientes serán aceptadas sólo si no presentan interferencia espacial con partículas previamente aceptadas (las condiciones de *no interferencia* espacial entre partículas se describen en el apartado 3.2.2). Los pasos seguidos por el algoritmo para definir cada nueva partícula se representan esquemáticamente en la figura.3.5

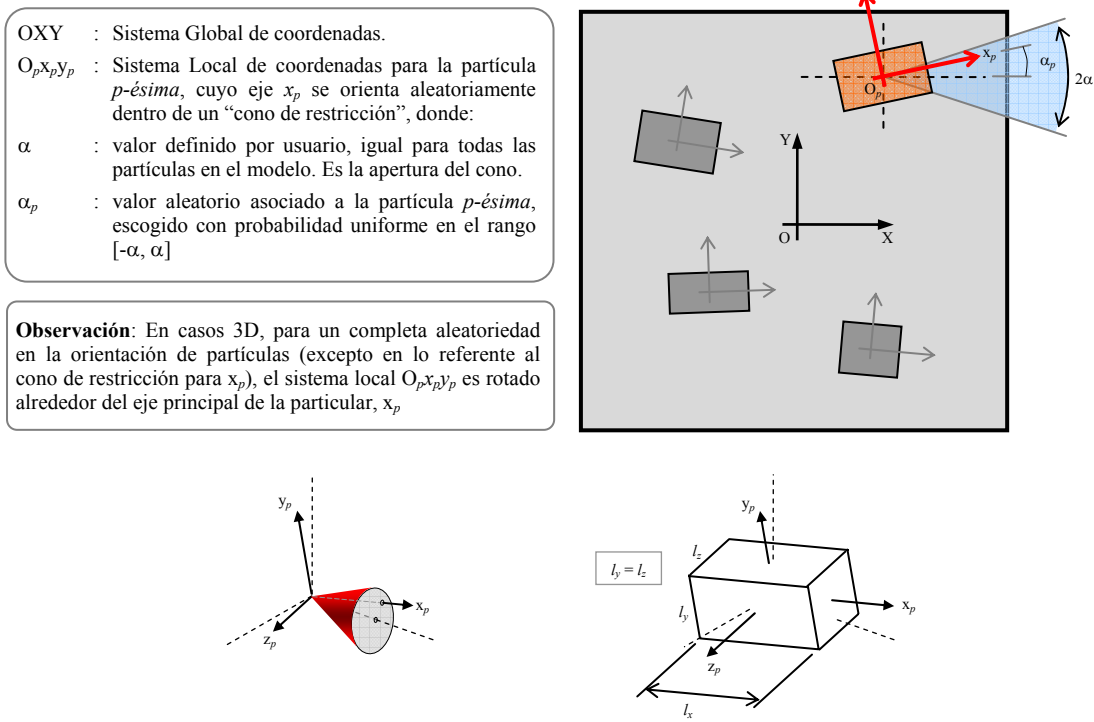


Figura 3.4: Método de control para la aleatoriedad de la orientación de cada partícula. Se muestran los sistemas de coordenadas Global y Local, así como el “cono de restricción” para la orientación de las partículas. Las líneas segmentadas son paralelas al sistema Global de coordenadas.

Nótese que si se prescribe como condición de operación para el programa un valor nulo para la desviación estándar del volumen de partícula, todas las partículas de la celda tendrán igual tamaño, de modo que si el algoritmo es capaz de encontrar exitosamente las N posiciones aleatorias requeridas por el usuario, entonces la fracción volumétrica de refuerzo acumulada al final del proceso de generación será exactamente igual a la fracción volumétrica requerida por el usuario como dato de entrada. No ocurrirá lo mismo si el usuario asigna una desviación estándar no nula para el tamaño de partícula. En este caso, la fracción volumétrica de refuerzo prescrita por el usuario constituye un *objetivo* a alcanzar por el algoritmo de generación. Cuanto mayor sea el número de partículas en el modelo, mayor es la probabilidad de que la diferencia entre la fracción volumétrica alcanzada y el objetivo sea despreciable. En la práctica, si el número de partículas es superior a 20 se puede generar celdas cuya microestructura presenta sólo pequeñas desviaciones del objetivo, en términos de fracción volumétrica de refuerzo.

En términos cualitativos, permitiendo una aleatoriedad total en la orientación de las partículas, las fracciones volumétricas de partículas máximas que se consiguen son de entre 30% y 32%, rango que parece ser independiente de la constancia o variabilidad impuesta sobre la esbeltez

GENERACIÓN de CADA NUEVA PARTÍCULA

a) Posición y orientación de la nueva partícula

Implica generar 8 valores aleatorios, iso-probables en el rango [0,1]. Algunos de ellos son usados para situar el centro de la nueva partícula en el interior de la celda, mientras que otros son utilizados para definir la orientación aleatoria del sistema Local de coordenadas de la nueva partícula, de acuerdo al “cono de restricción” definido por el usuario. Como resultado, se almacena *temporalmente* tanto la posición del centro como los cosenos directores asociados a esta nueva partícula.

b) Tamaño y esbeltez de la nueva partícula

Implica generar 2 valores aleatorios, con probabilidad Normal Estándar $N[0,1]$. Aplicando transformaciones lineales adecuadas, estos valores son utilizados para definir el tamaño (volumen) y la esbeltez de la nueva partícula. Estas transformaciones lineales utilizan los parámetros definidos por usuario L, F, N, \bar{R}, S_R y S_V .

c) Determinación de coordenadas de los vértices

De los valores calculados en (a) y en (b), se obtienen las coordenadas de los 8 vértices de la nueva partícula con respecto a su sistema Local de coordenadas. Aplicando traslaciones y rotaciones adecuadas, estas coordenadas son luego expresadas en el sistema Global de coordenadas de la celda; sus valores son almacenados *temporalmente*.

d) Evaluación para periodicidad geométrica

Si la nueva partícula propuesta atraviesa alguno de los planos que definen las caras de la celda, ésta es copiada a la cara opuesta de la celda, de lo que resulta una celda multipartícula de geometría periódica.

e) Aceptación o rechazo de la nueva partícula

Esto implica la verificación de las condiciones de no interferencia espacial entre la nueva partícula y todas las partículas previamente aceptadas (incluyendo sus eventuales traslaciones periódicas). Además, las eventuales traslaciones periódicas de la nueva partícula deben ser verificadas frente a todas las partículas previamente aceptadas.

ACEPTACIÓN: Si la nueva partícula propuesta es aceptada, son almacenadas *definitivamente* las coordenadas de sus 8 vértices, así como las coordenadas de los vértices de sus traslaciones periódicas, si las hay. Se almacena también la fracción volumétrica acumulada hasta la partícula actual, así como los valores de las propiedades geométricas que a ella se han asignado.

RECHAZO: esto ocurre si la nueva partícula (o alguna de sus eventuales traslaciones periódicas) interfiere con otra partícula previamente aceptada. En tal caso, se eliminan todos los valores almacenados *temporalmente* y se intenta su posicionamiento en una nueva posición aleatoriamente determinada.

CONDICIÓN de PARADA: El algoritmo se detiene cuando el número de partículas aceptadas iguala al número de partículas N prescrito por el usuario.

Figura 3.5 Conjunto de pasos seguidos por el algoritmo de generación de celdas multipartículas

de partículas, así como del número de partículas en la celda y de la posible variabilidad en su tamaño. Restringiendo la aleatoriedad en la orientación de partículas a un cono de orientaciones preferentes es posible conseguir fracciones volumétricas de hasta 35%. En las figuras 3.6 a 3.9 se muestran algunos ejemplos de microestructuras periódicas multipartícula, generadas con diferentes parámetros microestructurales.

Orientación aleatoria de partículas | fracción volumétrica de refuerzo $F = 10\%$

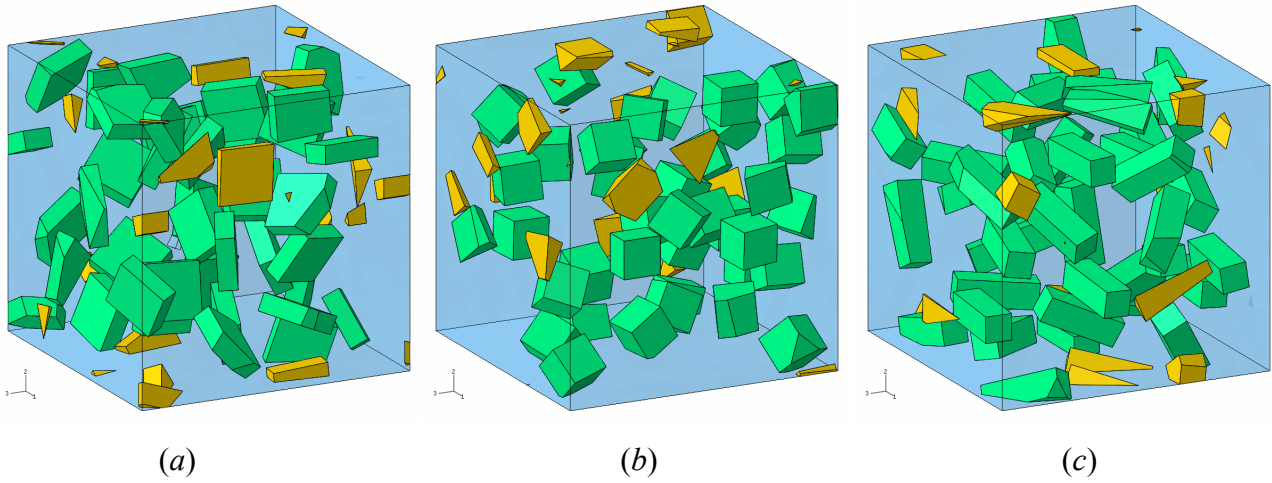


Figura 3.6: celdas multipartícula con $N = 40$ partículas en 3 esbelteces: (a) partículas chatas con $R = 0.3$; (b) partículas cúbicas $R = 1.0$ y (c) partículas largas $R = 3.0$

Orientación aleatoria de partículas | fracción volumétrica de refuerzo $F = 30\%$

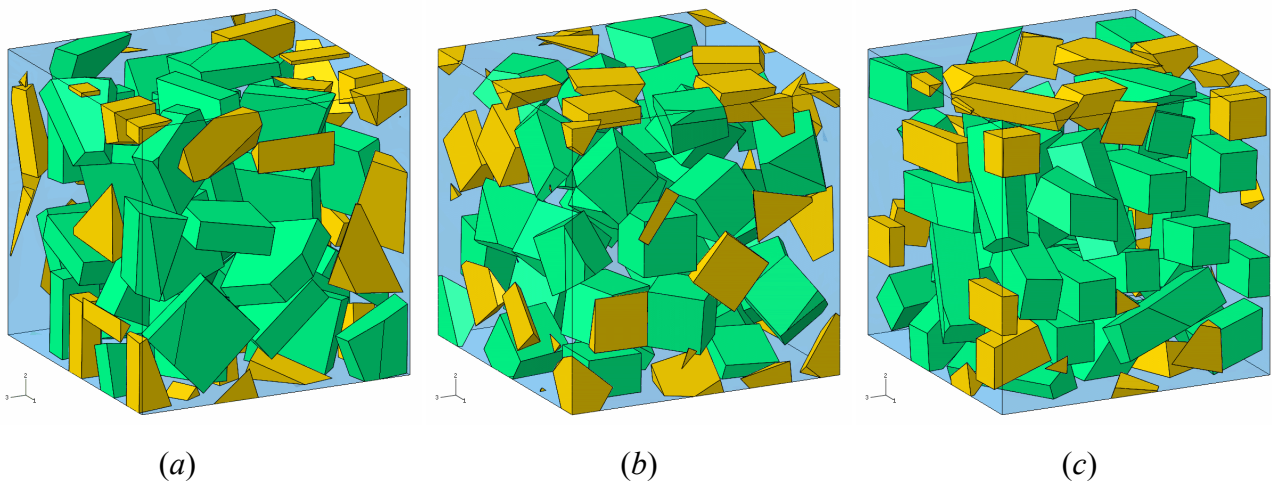


Figura 3.7: celdas multipartícula con $N = 40$ partículas en 3 esbelteces: (a) partículas chatas con $R = 0.3$; (b) partículas cúbicas $R = 1.0$ y (c) partículas largas $R = 3.0$

Orientación de partículas totalmente restringida | fracción volumétrica de refuerzo $F = 10\%$

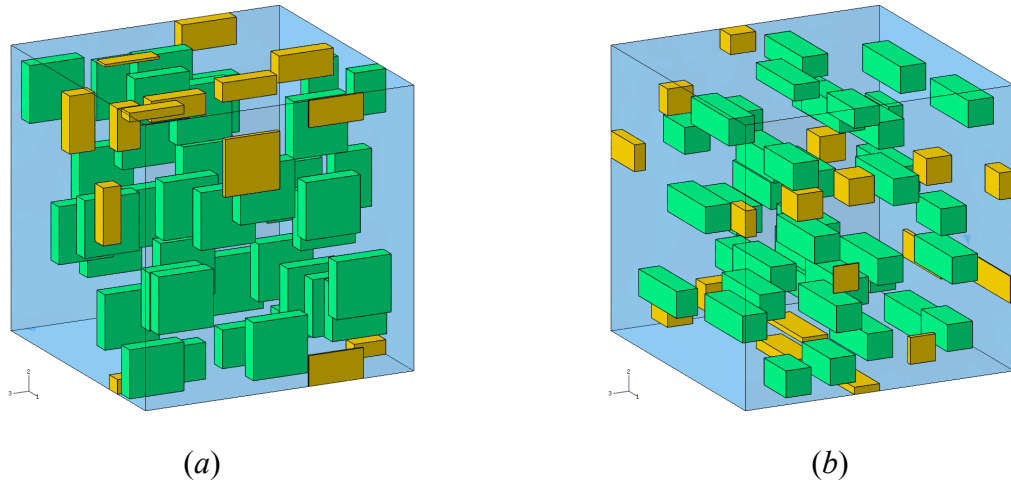


Figura 3.8: celdas multipartícula de fracción volumétrica de refuerzo $F = 10\%$ y $N = 40$ partículas, en 2 esbelteces: (a) partículas chatas $R = 0.3$; (b) partículas largas $R = 3.0$

Orientación de partículas totalmente restringida | fracción volumétrica de refuerzo $F = 30\%$

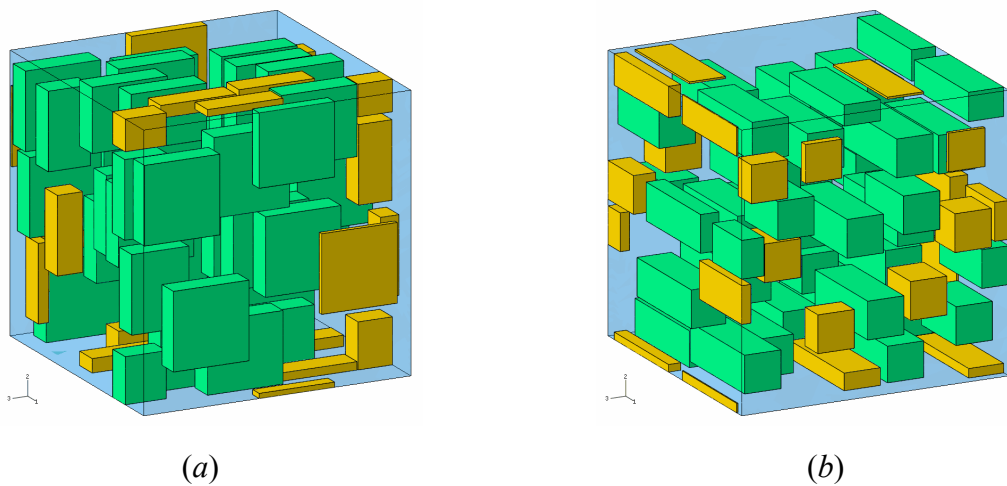


Figura 3.9: celdas multipartícula de fracción volumétrica de refuerzo $F = 30\%$ y $N = 40$ partículas, en 2 esbelteces: (a) partículas chatas $R = 0.3$; (b) partículas largas $R = 3.0$

3.2.2 Condiciones de No-Interferencia entre Partículas

Sean P y Q dos partículas cuya posible interferencia espacial ha de ser evaluada. Supóngase además que P es una nueva partícula propuesta por el algoritmo de generación, mientras que Q es una partícula previamente aceptada.

Con el fin de evitar pruebas más costosas desde el punto de vista numérico, se realiza una prueba preliminar sencilla a través de la desigualdad que se expresa más abajo, donde D_{PQ} es la distancia entre centros entre P y Q , mientras que D_P y D_Q corresponden a $\frac{1}{2}$ de la diagonal de cada partícula. Eso es equivalente a evaluar si hay interferencia entre dos circunferencias que contienen a P y Q .

$$D_{PQ} > D_P + D_Q$$

Si se satisface esta desigualdad, la partícula P es aceptada. En caso contrario, se prosigue el estudio, puesto que la interferencia entre ambas partículas aun no está probada.

A continuación, se estudia si una de las dos partículas del par considerado está total o parcialmente *contenida* dentro de la otra. Esto se verifica con facilidad, puesto que se conoce, para ambas partículas, los cosenos directores y las coordenadas globales de sus centros. Con estos datos usados en la evaluación de P frente a Q , las coordenadas de los vértices de P son expresadas en el sistema local de Q y comparadas con las coordenadas locales de los vértices de esta última. Por completitud, este estudio debe hacerse también en sentido inverso. Si este estudio muestra que al menos uno de los vértices de una partícula del par está situado dentro de la otra, entonces P es rechazada, debiendo buscarse una nueva posición aleatoria para ella.

En caso contrario, una nueva prueba debe realizarse para cubrir situaciones como las descritas en la figura 3.10, en la que se muestra que puede ocurrir interferencia entre partículas si al

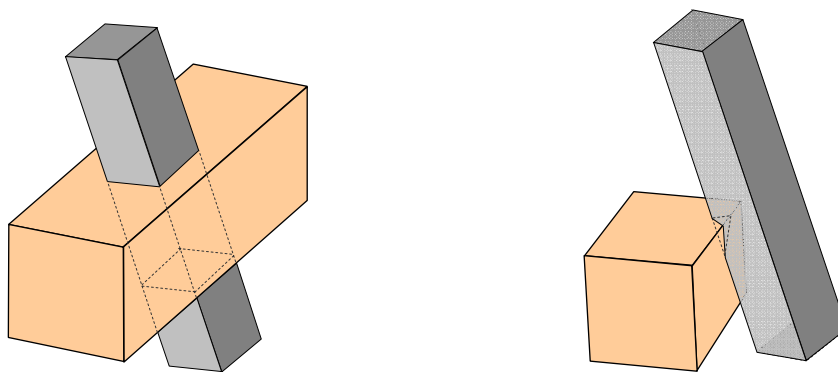


Figura 3.10: Interferencia entre partículas sin vértices contenidos.

menos una de las doce aristas de P es cortada por al menos una de las seis caras de Q . Evidentemente, esta prueba debe realizarse también en sentido contrario. Este conjunto de pruebas es probablemente el más costoso computacionalmente ya que para cada una de las $12 \times 6 \times 2 = 144$ verificaciones “cara-arista”, debe resolverse un sistema lineal de ecuaciones de 3×3 para encontrar la posición del correspondiente punto de intersección.

3.3 Implementación en el Método de Elementos Finitos

3.3.1 Microestructuras Periódicas y Celdas Multipartícula: Condiciones de Contorno Periódicas.

Si una celda o elemento representativo de volumen de una microestructura periódica infinita (ver apartado 3.1) es solicitado mediante un sistema de cargas arbitrario, éste responderá con un conjunto de campos de desplazamientos, deformaciones y tensiones. En esta nueva *configuración deformada* la microestructura conservará su naturaleza periódica, siendo posible identificar una *nueva* celda generadora, deformada de la original. Debe observarse que al ser periódica la microestructura de la celda deformada, también son periódicos los microcampos de tensión y deformación en el interior de la celda.

Por construcción geométrica, la forma de la frontera de la celda generadora *deformada* debe ser compatible con la repetición infinita de la misma, originando así la microestructura periódica deformada. En el caso de microestructuras de *periodicidad prismática*, la repetibilidad de la celda requiere únicamente que las caras opuestas de la celda tengan *igual forma* en la *configuración deformada*, tal como se representa en la figura 3.11 para el caso 2D.

3.3.1.a Ecuaciones que garantizan periodicidad.

Lo expresado anteriormente impone un conjunto de restricciones en la frontera, para el campo de desplazamientos que lleva a la celda desde la configuración original hasta la configuración deformada. Las ecuaciones que garantizan periodicidad de la celda deformada son las ecs. (3.1) a (3.3). La deducción de estas ecuaciones puede encontrarse en el Anexo A.

En una celda generadora cuyas caras son perpendiculares a los ejes del sistema de coordenadas, donde P_i es un punto arbitrario situado en una cara normal al eje i (con $i = 1, 2, 3$) y Q_i el punto que, en la *configuración original*, es *correspondiente* a P_i en la cara opuesta, las ecuaciones que garantizan repetibilidad de la celda son las siguientes:

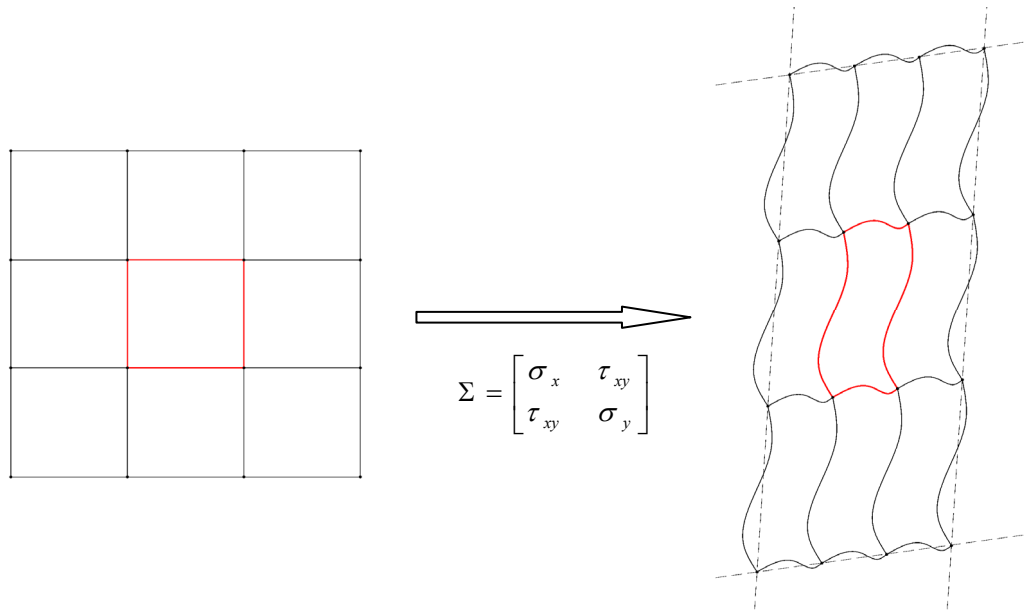


Figura 3.11: la imposición de una sollicitación mecánica *promedio* lleva a la estructura desde la configuración original (a) hasta la configuración deformada (b). En ambos casos se ha identificado la celda generadora.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Periodicidad entre las caras normales al eje x (eje 1):} & \vec{U}_{Q_1} - \vec{U}_{P_1} = \vec{C}_1 \quad (3.1) \\ \text{Periodicidad entre las caras normales al eje y (eje 2):} & \vec{U}_{Q_2} - \vec{U}_{P_2} = \vec{C}_2 \quad (3.2) \\ \text{Periodicidad entre las caras normales al eje z (eje 3):} & \vec{U}_{Q_3} - \vec{U}_{P_3} = \vec{C}_3 \quad (3.3) \end{array} \right.$$

En las ec. (3.1) a (3.3) los vectores $\vec{C}_j = \begin{Bmatrix} c_{1j} \\ c_{2j} \\ c_{3j} \end{Bmatrix}$, con $j = 1, 2$ y 3 son vectores constantes. Sus

componentes se interpretan del siguiente modo:

- si $i = j$ $c_{ij} = c_{jj} = \Delta L_j$ es la elongación (o contracción) de la celda en la dirección j .
- si $i \neq j$ $c_{ij} = \delta_j$ es el deslizamiento relativo (en la dirección del eje i) entre las 2 caras opuestas de la celda, que son perpendiculares al eje j .

3.3.1.b Observaciones.

1. Debe notarse que las ecuaciones (3.1) a (3.3) relacionan los desplazamientos de cada uno de los puntos de una cara, con los de sus *puntos correspondientes* en la cara opuesta. Sin embargo, estas ecuaciones no determinan por sí mismas la forma que tendrán las caras de

la celda en la configuración deformada, sólo queda garantizado el que caras opuestas de la celda sean *forma-compatibles* en dicha configuración (condición garantizada por la constancia de los vectores \vec{C}_j).

La forma final de las caras de la celda no depende sólo de las condiciones de periodicidad, sino también de las propiedades mecánicas particulares de los componentes de la microestructura periódica (matriz y partículas), principalmente de las *diferencias* entre sus comportamientos constitutivos tensión-deformación (propiedades mecánicas). En el contexto de un modelo de Elementos Finitos, la forma final de las caras de la celda *es parte de la solución* del problema.

2. Es posible forzar (prescribir) la forma final de las caras de la celda –por ejemplo, obligándolas a mantenerse *planas* durante la historia de deformación de la celda– mediante ecuaciones que relacionen el desplazamiento de un punto de una cara con los desplazamientos de los demás puntos *de esa misma cara*. Estas nuevas ecuaciones *no sustituyen* a las ecuaciones de periodicidad (3.1) a (3.3), sino que son condiciones *adicionales*, cuya justificación física, validez y aplicabilidad dependerá del caso particular que esté bajo estudio.
3. Un caso particular, ampliamente utilizado en la literatura, consiste en el análisis de modelos celda periódica 3D de tipo uni-partícula (o uni-vacío, en algunos casos) en los que se aprovecha, para reducir el coste de cálculo, las condiciones de simetría de 1 octante del espacio tridimensional. Usualmente, sobre las caras externas de este tipo de celdas (es decir, aquellas caras que *no* se encuentran en los planos de simetría) se impone la condición de mantener “*caras planas*” durante la historia de deformación.

Se puede demostrar sin embargo, que la condición de “*simetría + periodicidad*” es equivalente a mantener *planas* las caras de la celda. Esto implica, por una parte, que la condición de “*caras planas*” durante la deformación *sólo* es equivalente a *periodicidad* de la celda en condiciones de simetría. También implica, por otra parte, que al prescribir *caras planas* sobre una celda simétrica, indirectamente se está prescribiendo *periodicidad*.

4. Debe observarse que en celdas periódicas generales (no simétricas), como las de las figuras 3.6 a 3.9, las ecuaciones de contorno periódicas (3.1) a (3.3) implican que existe una vinculación *punto a punto*, entre cada par de puntos correspondientes situados en caras opuestas de la celda. En el contexto de una discretización FEM de celdas de este tipo, esta vinculación sólo puede establecerse de forma precisa si la distribución espacial de nodos es exactamente la misma en cada pareja de caras opuestas de la celda, lo cual impone ciertas restricciones sobre las técnicas y herramientas a utilizar para el mallado de

la geometría. Específicamente, la malla de elementos finitos debe tener una distribución espacial de nodos exactamente igual en los tres pares de caras opuestas de la celda.

5. Periodicidad del campo tenso-deformacional: las ecuaciones de contorno periódicas (3.1) a (3.3) garantizan que la sollicitación mecánica impuesta sobre la celda preserva la periodicidad geométrica de la microestructura. Debe observarse que si la microestructura deformada es periódica, también los micro-campos de tensiones y deformaciones tienen, en general, naturaleza periódica. Sin embargo, dado que la solución se obtiene mediante discretización por el MEF y que las ecuaciones de periodicidad actúan a nivel nodal, la solución será solo *aproximadamente* periódica, siendo el grado de desviación respecto de la solución periódica exacta distinto para desplazamientos que para tensiones y deformaciones.

Como la solución para el campo de desplazamientos es obtenida en los nodos de la malla, la única fuente de desviación respecto de una solución periódica *exacta en desplazamientos* viene dada por las tolerancias definidas para las *fuerzas residuales* para el método iterativo de Newton que resuelve el equilibrio del sistema. La solución para los campos de tensión y deformación, en cambio, se calcula en los puntos de Gauss de los elementos finitos, siendo posteriormente extrapolada a los nodos de cada elemento, lo que permite que existan discontinuidades en la solución tenso-deformacional entre elementos adyacentes. Debido a esto, incluso si se utilizan esquemas de promediación en los nodos de las contribuciones de tensión y deformación de los elementos conectados, el grado de desviación respecto de *periodicidad exacta* es mayor en deformaciones y tensiones que en desplazamientos.

Evidentemente, cuanto más refinada es la malla de elementos finitos, mejor es la aproximación de la solución numérica en cuanto a reflejar adecuadamente la periodicidad de los micro campos σ - ε .

3.3.2 Metodología de Mallado.

Se utilizó el software Ansys para realizar las mallas correspondientes a la discretización FEM de la geometría de las celdas multipartícula, elaboradas con la herramienta descrita en el apartado anterior. Con este objeto, fueron elaborados un conjunto de *scripts* (en un lenguaje de comandos propietario de Ansys) que permitió automatizar el mallado, ejerciendo cierto control sobre algunos de los parámetros como el tamaño global de elemento y parámetros de gradación del mallado.

El procedimiento de mallado implementado en dichos *scripts* consiste en 4 etapas sucesivas: mallado de las caras de la celda, mallado del volumen de partículas, mallado del volumen de matriz y, opcionalmente, inserción de elementos cohesivos como interfaz entre matriz y partículas. Dada la complejidad de la geometría a mallar, se utiliza una técnica de mallado no estructurado (basado en algoritmos tipo Delaunay), lo que implica el uso de elementos *triangulares* en las caras de la celda y *tetraédricos* en los volúmenes. Asimismo, las mallas pueden construirse con elementos lineales o cuadráticos.

El mallado de las 6 caras de la celda se realiza a su vez en 2 fases: primero se malla 3 caras ortogonales de la celda con elementos triangulares para luego copiar cada una de estas mallas a la cara opuesta de la celda. De esta forma resulta una distribución de nodos exactamente igual en cada pareja de caras opuestas de la celda, condición requerida para la posterior implementación de *condiciones de contorno periódicas*. La conectividad nodal de los elementos triangulares que fueron generados mediante copia se modificó para garantizar que la dirección de su normal principal se orientase hacia el interior de la celda, tal como ocurre en el caso de los elementos triangulares originales (los que originaron las copias).

El mallado de volúmenes, tanto de partículas como de matriz, se realiza con elementos tetraédricos respetando las mallas triangulares preexistentes en las 6 caras de la celda. A elección del usuario, los tetraedros empleados en el mallado de las fases pueden ser lineales, cuadráticos *standard* o cuadráticos *modificados* (en una formulación propietaria de ABAQUS). En la sección 3.3.8 se ofrece una descripción cualitativa de las diferencias en el comportamiento de estas formulaciones. Una vez finalizado el mallado de volúmenes los elementos triangulares son eliminados del modelo (no son necesarios en las posteriores simulaciones FEM) y una primera versión del modelo numérico es almacenada. En este caso, la interfaz matriz-partículas queda definida mediante nodos compartidos por los elementos finitos situados a uno y otro lado de dicha interfaz. Así, la celda resultante posee interfaces indañables.

Por último, es posible embeber elementos cohesivos de intercara (lineales o cuadráticos) en las interfaces matriz-partícula, lo que posibilitará la modelización del daño por decohesión en las posteriores simulaciones FEM. En tal caso, una segunda versión del modelo numérico es almacenada, incluyendo ahora los elementos cohesivos. El comportamiento constitutivo con daño de estos elementos cohesivos será descrito más adelante (sección 3.3.5).

En el caso de utilizar elementos cohesivos en conjunto con tetraedros cuadráticos para las fases sólidas, medidas especiales –que se describen en el próximo apartado– deben considerarse para garantizar una adecuada conectividad nodal.

3.3.3 Preparación para la Ejecución.

En este apartado se describe el modo en que se discretizaron las condiciones de contorno periódicas para su implementación en el modelo de Elementos Finitos, indicándose además el método de control del proceso de solución numérica. Con las mallas construidas, se utilizó un programa Fortran de elaboración propia para traducir la malla ANSYS a formato ABAQUS, de un modo compatible con las ecuaciones de periodicidad discreta.

Finalmente, se explica el modo en que se resolvieron las conectividades nodales entre los elementos cohesivos lineales y los tetraedros sólidos cuadráticos utilizados para las fases sólidas, en aquellos modelos que así lo requerían.

3.3.3.a Discretización de las Condiciones de Contorno Periódicas.

Las ecuaciones de periodicidad (3.1) a (3.3) están escritas para parejas de puntos correspondientes P y Q , situados en el continuo cartesiano, en caras opuestas de la celda. En la malla FEM de la celda multipartícula, las 3 ecuaciones de periodicidad se reescriben para reflejar la discretización como:

$$\left[\vec{U}_{Q_j}^{(k)} - \vec{U}_{P_j}^{(k)} \right]_{k=1, \dots, N_j} = \vec{C}_j \quad (3.4)$$

donde N_j es el número de *pares correspondientes* de nodos de malla, presentes en las caras que son normales al eje $j = 1, 2, 3$.

Por construcción, las mallas elaboradas según lo descrito en el apartado anterior poseen distribuciones de nodos y elementos exactamente iguales en las caras opuestas de la celda. Sin embargo, la correcta implementación de las ecuaciones de contorno periódicas exige *identificar e indexar* cada uno de los pares correspondientes de nodos situados en caras opuestas de la celda, permitiendo la elaboración de *grupos ordenados* de nodos en las 3 caras originales de la celda y en sus 3 respectivas caras opuestas. Estos grupos ordenados de nodos son representantes de los términos $\vec{U}_{P_j}^{(k)}$ y $\vec{U}_{Q_j}^{(k)}$ en las ecuaciones de periodicidad para la celda discretizada. Además, los 3 vectores constantes \vec{C}_j quedan representados mediante tres nodos de control y sus respectivos grados de libertad de desplazamiento (tres por cada nodo de control).

Esta identificación e indexación de las correspondencias nodales se realizó mediante un programa Fortran de elaboración propia que, además, se encarga de traducir la malla de elementos finitos a un formato compatible con el código comercial ABAQUS –que se ha

elegido para la realización de todas las simulaciones– incluyendo en él tanto estos *grupos ordenados* de nodos como la definición de 3 nodos auxiliares que actúan como nodos maestros o de control.

3.3.3.b Control de la solución.

Los 3 vectores \vec{C}_j de las ecuaciones de periodicidad discreta (3.4) dan origen a un total de 9 componentes de desplazamiento, algunas de las cuales son *datos de entrada* y mientras que otras son *parte de la solución* buscada, de acuerdo al estado tensional en estudio.

Notación: para la i -ésima componente de desplazamiento del nodo de control j -ésimo (c_{ij}), sea f_{ij} la correspondiente componente de la fuerza nodal asociada a ese nodo j -ésimo.

Método de Control: una simulación en control de posición implica prescribir un valor no nulo sobre la componente adecuada de desplazamiento c_{ij} , obteniendo como *resultante* del análisis el valor de su fuerza de reacción asociada, f_{ij} . De manera análoga, una simulación en control de fuerza consiste en prescribir un valor no nulo para la componente adecuada de f_{ij} , obteniendo como resultante el valor de la componente de desplazamiento c_{ij} .

Se considera a continuación dos casos posibles de sollicitación mecánica en *control de posición*:

i. Tracción (o compresión) uniaxial en la dirección del **eje k** , en control de desplazamiento.

En este caso, entre las componentes de los vectores \vec{C}_j hay tanto datos como resultados. Son datos de entrada, prescritos por el usuario, los siguientes:

$$c_{ij} = \Delta L_k \quad \text{si } i = j = k \quad \text{- Elongación (o contracción) prescrita en la dirección del eje } k.$$

$$c_{ij} = 0 \quad \text{si } i \neq j \quad \text{- Impide distorsión angular (deslizamiento entre caras opuestas).}$$

Así mismo, son resultantes los siguientes:

$$c_{ij} \quad \text{con } i = j \neq k \quad \text{- Elongaciones transversales (efecto Poisson).}$$

Para aquellos grados de libertad *prescritos*, se obtendrá del análisis las respectivas fuerzas de reacción f_{ij} . En este caso, f_{kk} es la fuerza de reacción en la dirección de la elongación (o compresión) prescrita, mientras que f_{ij} con $i \neq j$ son las fuerzas de reacción

necesarias para evitar deslizamiento relativo entre caras opuestas de la celda, es decir, evitar deformación de cortadura inducida por tracción o compresión uniaxial. Para microestructuras perfectamente isótropas, estas fuerzas han de ser nulas o muy pequeñas comparadas con la fuerza en la dirección de la deformación f_{kk} . En caso contrario, la magnitud de f_{ij} puede constituir una medida de la anisotropía del modelo de celda utilizado en el análisis. Por otro lado, las fuerzas de reacción son, por definición, nulas para aquellos grados de libertad que no han sido prescritos, en este caso, c_{ij} con $i = j \neq k$.

- ii. Deslizamiento relativo (cortadura)** en dirección del eje k , entre las dos caras opuestas que son perpendiculares al eje l , con $l \neq k$, en control de desplazamiento, de cuantía s_{kl} :

En este caso, las 9 componentes de los vectores \vec{C}_j son datos.

$c_{ij} = s_{kl}$ si $i=k$ y $j=l$ Es el deslizamiento relativo prescrito en la dirección del eje k , entre 2 caras opuestas de la celda que son perpendiculares al eje $j=l$.

$c_{ij} = 0$ en todos los otros casos.

Todas las simulaciones realizadas en esta Tesis se realizaron en control de posición, por la vía de prescribir adecuadamente desplazamientos para las componentes relevantes, de las nueve que conforman los vectores \vec{C} . Aunque posible, no se efectuaron simulaciones en control de fuerza por la dificultad asociada a inestabilidad del equilibrio que ello conlleva en el caso de incluir daño en el análisis.

3.3.3.c Consideraciones sobre Elementos Cohesivos en la malla.

En la preparación de la malla FEM para ser utilizada en Abaqus incluyendo las condiciones de contorno periódicas, el programa Fortran descrito en el apartado anterior también debe incluir en el modelo numérico, si lo requiere el usuario, los elementos cohesivos de intercara.

Dado que la librería de elementos de ABAQUS sólo contempla elementos cohesivos de interpolación lineal (de 6 nodos en el caso triangular), la conectividad nodal entre estos elementos y los elementos tetraédricos sólidos a uno y otro lado de la interfaz no es posible en forma directa si se utilizan tetraedros cuadráticos de 10 nodos para las fases sólidas.

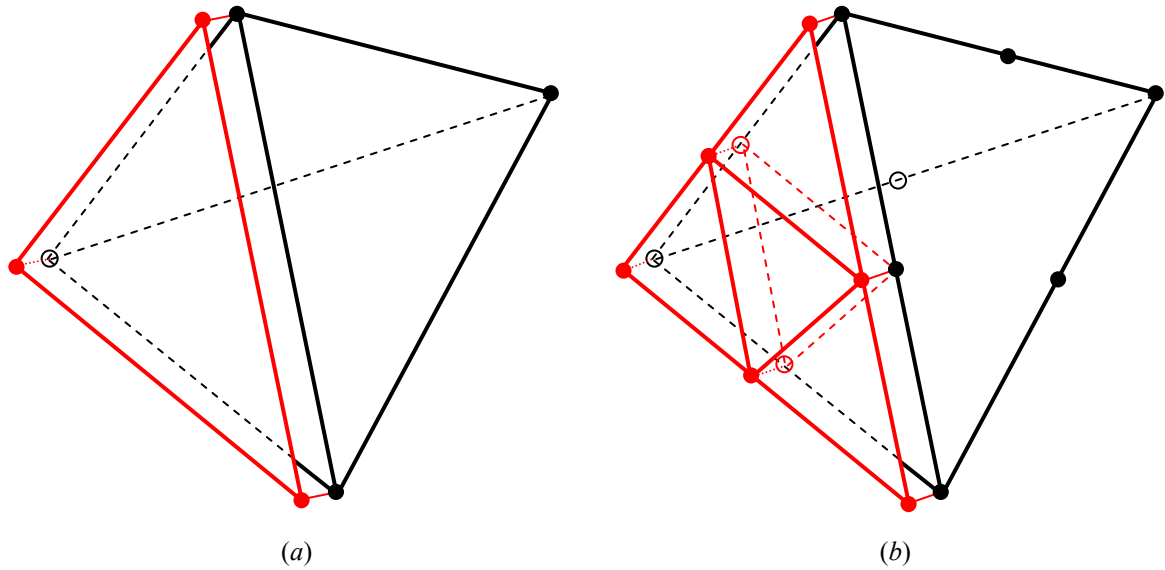


Figura 3.12: (a) Conectividad nodal directa entre un elemento tetraedro lineal de 4 nodos y un elemento cohesivo lineal de 6 nodos. (b) Conectividad nodal directa entre un tetraedro cuadrático de 10 nodos y 4 elementos cohesivos

De entre varias soluciones evaluadas, la que dio mejores resultados consiste en incluir en el programa Fortran de traducción, la posibilidad de embeber cuatro elementos cohesivos lineales entre las caras comunes de cada pareja tetraedros cuadráticos que están a uno y otro lado de la interfaz matriz-partícula, tal como se aprecia en la figura 3.12.

3.3.4 Ecuación Constitutiva de las Fases Sólidas.

Refuerzo de partículas

Para el refuerzo de partículas, se consideró en todos los casos un comportamiento mecánico de tipo elástico lineal, obedeciendo a la Ley de Hook. El módulo de elasticidad y el coeficiente de Poisson utilizados se explicitan en las secciones de resultados.

Matriz metálica

En el caso de la fase matriz, se utilizó generalmente un comportamiento de tipo elasto-plástico con endurecimiento isotrópico de tipo J_2 , en una formulación independiente de la velocidad de deformación y utilizando la clásica descomposición aditiva de la deformación total en sus componentes elástica y plástica. Con estas condiciones, se utilizó el algoritmo de integración de las ecuaciones de la plasticidad incluido por defecto en el software FEM, siendo los únicos parámetros de usuario tanto las constantes elásticas del material como la curva de endurecimiento.

La curva de endurecimiento, a su vez, fue proporcionada en todos los casos a través de la subrutina de usuario UHARD, cuyo funcionamiento es el siguiente:

- i) UHARD recibe de las rutinas constitutivas, en cada incremento y en cada punto de integración, el valor escalar de *deformación plástica equivalente* $\bar{\epsilon}_{eq}^{pl}$
- ii) Calcula el valor del *límite elástico* actual así como su derivada, a partir de expresiones analíticas proporcionadas por el usuario:

$$\sigma_0 = F_1(\bar{\epsilon}_{eq}^{pl}) \quad ; \quad \frac{d\sigma_0}{d\bar{\epsilon}_{eq}^{pl}} = F_2(\bar{\epsilon}_{eq}^{pl}) \quad (3.5)$$

- iii) Finalmente, UHARD devuelve los valores anteriores a las rutinas constitutivas.

En algunos casos y dependiendo del estudio a realizar, las expresiones analíticas proporcionadas por el usuario reflejaron la curva de endurecimiento medida experimentalmente mediante ensayo de tracción uniaxial del material de la matriz sin reforzar. En otros casos, la expresión analítica proporcionada representaba un material abstracto de tipo Ramberg-Osgood, lo que permitió evaluar sistemáticamente distintos valores de coeficiente y exponente de endurecimiento. Las constantes elásticas asignadas a la matriz, así como los detalles y coeficientes específicos de las expresiones utilizadas para su curva de endurecimiento se explicitan donde sea pertinente, en las secciones de resultados.

3.3.5 Interfaz Matriz-Partículas: Implementación del Modelo de Fisura Cohesiva.

Para estudiar la influencia del daño por decohesión, la interfaz entre ambas fases sólidas se representó en el modelo de celda mediante elementos cohesivos tridimensionales de la librería del software comercial ABAQUS.

La modelización cohesiva requiere definir una relación constitutiva que se considera como propiedad de la interfaz y que toma la forma de una ley de tracción-separación, que relaciona la tensión que transmite la fisura cohesiva con la deformación en la fisura. Esta ley se caracteriza por una etapa *inicial* en la que existe una relación lineal-elástica entre tensión y deformación (separación), por un *criterio de iniciación de daño* en la interfaz y, finalmente, por un *proceso de ablandamiento* o degradación que culmina cuando la interfaz ha perdido totalmente su capacidad de transmitir tensión.

En la implementación del Modelo de Fisura Cohesiva utilizada en esta Tesis, la matriz de rigidez cohesiva inicial es de tipo *desacoplado*, el criterio de iniciación del daño se define en

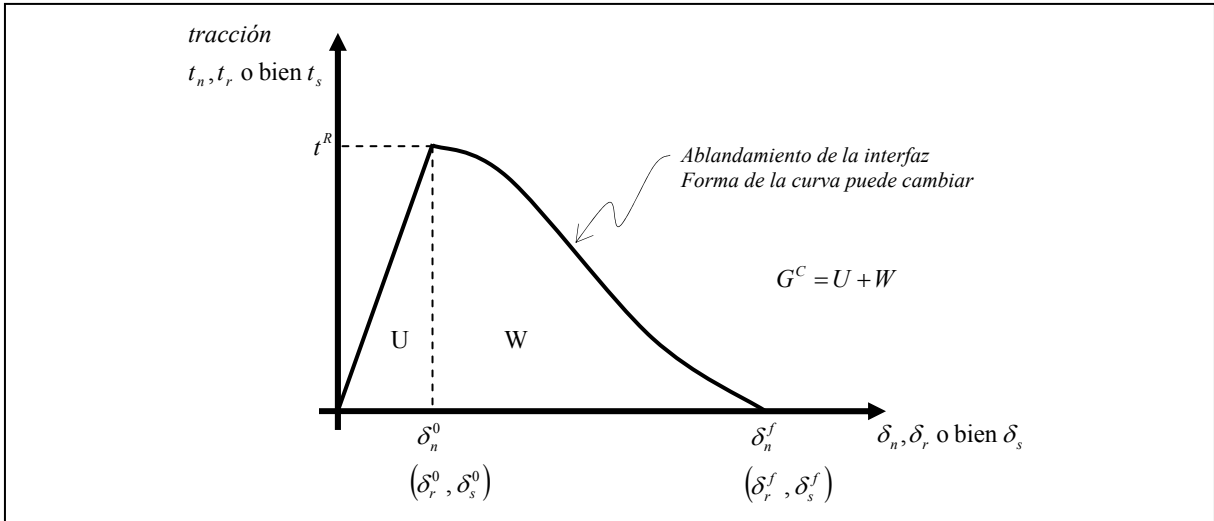


Figura 3.13: esquema representativo de la ley tracción-separación que gobierna el comportamiento constitutivo de un elemento cohesivo. Se indica la apertura (normal o de cortadura) a la que se inicia el proceso de daño, así como la apertura en que la interfaz cohesiva está totalmente dañada.

tensiones y el proceso de daño está controlado por un *parámetro de daño* escalar, cuya evolución en función de la *apertura equivalente* de interfaz determina la forma de la curva de ablandamiento. A continuación se describe en detalle el conjunto de parámetros cohesivos estableciendo, donde sea posible, su relación con la micro estructura del material compuesto.

Los elementos cohesivos tridimensionales utilizados poseen una topología *inicial* de tipo triangular con espesor nulo. Quedan definidos por tres pares de nodos, funciones de interpolación lineales y tres puntos de integración dispuestos como muestra la figura 3.14, tanto en la configuración original como en una configuración deformada, debida a la aplicación de un sistema de cargas.

Los vectores tensión y deformación, así como el parámetro escalar de daño, se calculan en cada punto de integración del elemento cohesivo. Los vectores tensión y deformación tienen tres componentes, una para la dirección *normal* al plano medio virtual y dos direcciones de cortadura, ortogonales entre sí y paralelas a este plano medio. Cada punto de integración tiene asociado una determinada pareja de nodos.

El vector *apertura de interfaz*, en un determinado punto de integración, corresponde al vector *desplazamiento relativo* $\vec{\delta}$ entre los dos nodos asociados a ese punto. En adelante, en referencia a valores calculados en los puntos de integración de elementos cohesivos, se utilizará el término *desplazamiento* siempre entendido como *desplazamiento relativo* o, lo que es lo mismo, *apertura de interfaz*.

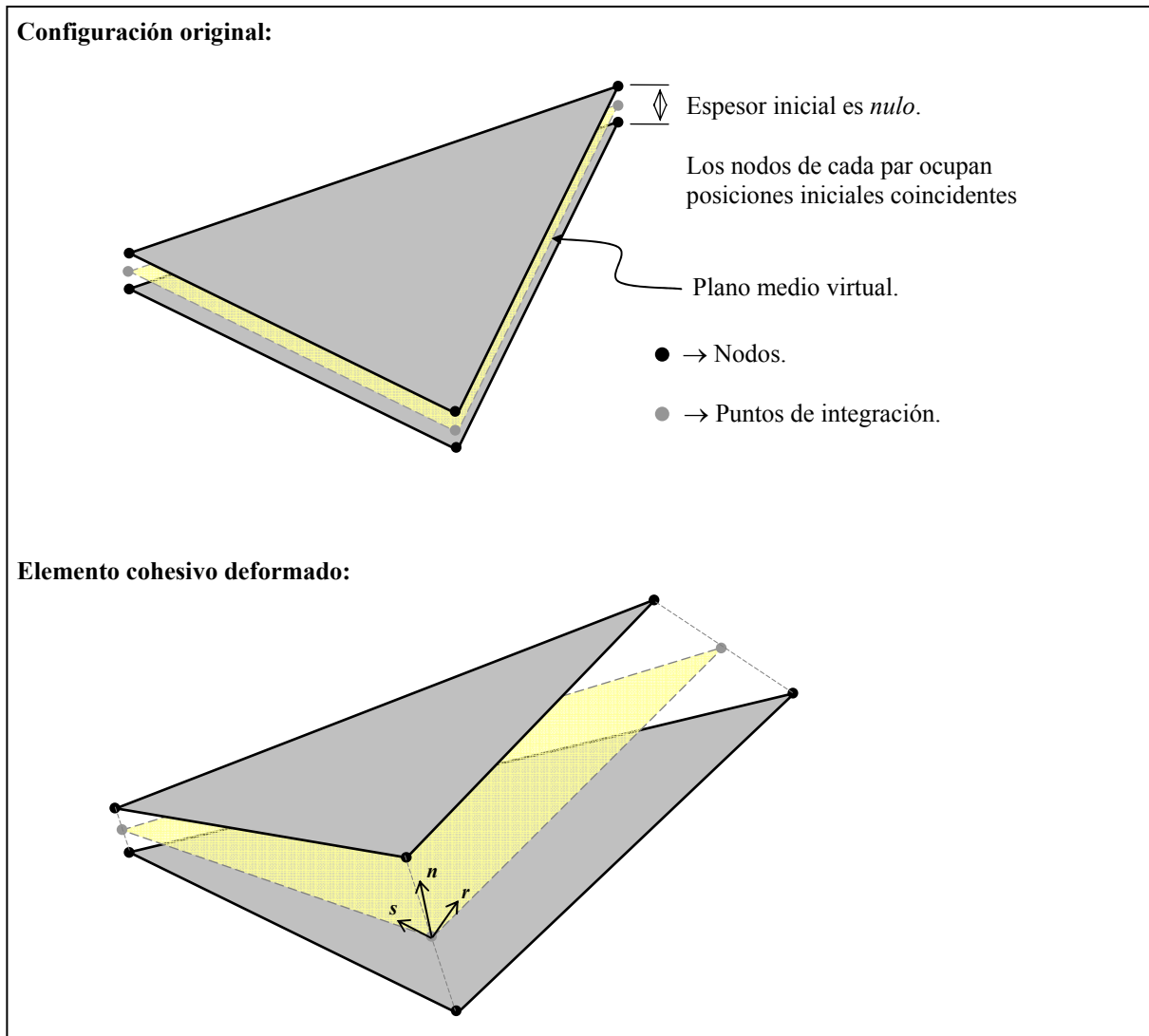


Figura 3.14: Elemento cohesivo en configuración inicial (arriba) y en un estado deformado (abajo). En cada caso, se muestran las posiciones de los nodos y puntos de integración.

3.3.5.a Relación tensión-deformación inicial.

En general, la relación tensión deformación en un elemento cohesivo, antes del inicio del proceso de daño o ablandamiento, viene dada, en el caso 3D, por:

$$\begin{Bmatrix} t_n \\ t_r \\ t_s \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} K_n & K_{nr} & K_{ns} \\ & K_r & K_{rs} \\ sim & & K_s \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_n \\ \varepsilon_r \\ \varepsilon_s \end{Bmatrix} \quad ; \quad \begin{Bmatrix} \varepsilon_n \\ \varepsilon_r \\ \varepsilon_s \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \delta_n/L_0 \\ \delta_r/L_0 \\ \delta_s/L_0 \end{Bmatrix}$$

donde ε_n , ε_r y ε_s son las deformaciones ingenieriles en la dirección normal y en dos direcciones de cortadura, respectivamente. Como los elementos cohesivos tienen inicialmente

un espesor geométrico nulo, se utiliza un espesor constitutivo inicial ($L_0=1$) diferente del espesor geométrico. Con esto, resulta que el desplazamiento relativo (o apertura de la interfaz) es numéricamente igual a la deformación. Por lo tanto, puede escribirse:

$$\begin{Bmatrix} t_n \\ t_r \\ t_s \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} k_n & k_{nr} & k_{ns} \\ & k_r & k_{rs} \\ sim & & k_s \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta_n \\ \delta_r \\ \delta_s \end{Bmatrix} \quad (3.6)$$

siendo δ_n , δ_r y δ_s los desplazamientos en las direcciones normal (apertura) y en las dos direcciones de cortadura, respectivamente. Por simplicidad, dada la dificultad de determinar experimentalmente el grado de acoplamiento entre el comportamiento *normal* y el comportamiento en *cortadura*, en todas las simulaciones realizadas con elementos cohesivos en esta Tesis se utilizó una matriz de rigidez de tipo *desacoplado*, es decir $k_{nr} = k_{ns} = k_{rs} = 0$. Esto significa que un desplazamiento normal no produce tensión de cortadura, a la vez que un desplazamiento de cortadura no origina tensiones normales en la interfaz. La matriz desacoplada de rigidez cohesiva se expresa como sigue:

$$[K] = \begin{bmatrix} k_n & 0 & 0 \\ 0 & k_r & 0 \\ 0 & 0 & k_s \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

siendo las tres rigideces cohesivas k_n , k_r y k_s parámetros cohesivos a definir.

Dos observaciones deben realizarse en relación con el comportamiento lineal elástico de la interfaz antes del inicio del daño y con la interpretación física de la matriz de rigidez cohesiva inicial.

Observación 1. Degradación de la rigidez global de la estructura

La rigidez inicial de los elementos cohesivos degrada la rigidez global de la estructura de la cual ellos forman parte (Drabek y Böhm, 2005 y Zahr y Pérez-Castellanos, 2007). Elementos cohesivos con rigidez inicial alta degradarán en menor medida la rigidez global de la estructura antes del inicio del proceso de daño. En el caso extremo, una rigidez inicial infinita garantiza que no hay apertura de la interfaz sino hasta que se inicie el proceso de ablandamiento o daño. En un modelo numérico sin embargo, la rigidez cohesiva inicial no puede ser infinita. Por otro lado, valores demasiado altos pueden dar origen a problemas de convergencia en la solución del estado tensional en la interfaz.

Observación 2. Interpretación de la rigidez cohesiva inicial.

Debido a que el espesor geométrico inicial es *nulo*, un elemento cohesivo *no* puede ser considerado como un *sólido elástico*, cuyo comportamiento antes del inicio del daño sigue la Ley de Hook. Más bien, un elemento cohesivo debe ser considerado como una *interfaz elástica*, cuyos desplazamientos de cortadura han de ser interpretados como *deslizamiento relativo* entre las fases. Así, para definir el comportamiento elástico de un elemento cohesivo, no son, en absoluto, aplicables los conceptos de *Módulo de Poisson* ν ni de *Módulo de Cortadura* G , con $G = E/2(\nu + 1)$. Por ejemplo, no tiene sentido físico el asignar a la rigidez cohesiva inicial un valor igual al promedio de los módulos de elasticidad de las fases sólidas que están a uno y otro lado de la interfaz cohesiva.

3.3.5.b Resistencia de la interfaz y proceso de Daño.

Si una interfaz modelada mediante elementos cohesivos es sometida a cargas monótonamente crecientes, la respuesta de la interfaz es lineal elástica, según la ec. (3.7) (o la (3.6), en el caso acoplado) hasta alcanzar una condición definida por un *Criterio de Iniciación del Daño* de la interfaz. Una vez satisfecho este criterio, si se fuerza un incremento de los desplazamientos relativos en el elemento cohesivo, la interfaz comenzará a dañarse hasta perder completamente su capacidad para transmitir tensiones.

Se define como *Resistencia Mecánica* de la interfaz cohesiva a los valores de tensión máxima que la interfaz es capaz de transmitir en situaciones de tracción pura y de cortadura pura respectivamente. Se denotan por t_n^R , t_r^R y t_s^R , son considerados *propiedad* de la interfaz y coinciden, para sollicitaciones puras, con el valor de tensión transmitida por la interfaz cohesiva en el instante en que se inicia el proceso de daño.

Con el objeto de tener una referencia vinculada con alguna propiedad conocida del material compuesto, en este trabajo de Tesis se ha optado por definir las resistencias en su relación con la tensión de fluencia de la matriz σ_0 . Así, se tiene:

$$t_n^R = \beta_n \sigma_0 \quad ; \quad t_r^R = \beta_r \sigma_0 \quad ; \quad t_s^R = \beta_s \sigma_0$$

De este modo, β_n , β_r y β_s aparecen como *parámetros cohesivos* que han de ser fijados y que cuantifican la calidad de la interfase. Por simplicidad, en todas las simulaciones efectuadas en esta Tesis se ha considerado $\beta_n = \beta_r = \beta_s = \beta$

Una vez iniciado el daño, la relación tensión-deformación se expresa como:

$$t_n = \begin{cases} (1-D)\bar{t}_n & ; \text{ si } \bar{t}_n > 0 \\ \bar{t}_n & ; \text{ si } \bar{t}_n < 0 \end{cases} \quad (3.8a)$$

$$t_r = (1-D)\bar{t}_r \quad (3.8b)$$

$$t_s = (1-D)\bar{t}_s \quad (3.8c)$$

donde \bar{t}_n , \bar{t}_r y \bar{t}_s son las tensiones que se obtendrían al evaluar directamente las ecuaciones (3.6) o (3.7), para los desplazamientos relativos actuales y D es el *Parámetro de Daño* escalar que varía desde 0 hasta 1, tal como se muestra en la figura 3.15. Para establecer la evolución del parámetro de daño es necesario definir el desplazamiento efectivo o equivalente como:

$$\delta_{eq} = \sqrt{\langle \delta_n \rangle^2 + \delta_r^2 + \delta_s^2} \quad (3.9)$$

donde el operador $\langle \rangle$ denota

$$\langle \delta_n \rangle = \delta_n \quad , \text{ si } \delta_n \geq 0$$

$$\langle \delta_n \rangle = 0 \quad , \text{ si } \delta_n < 0$$

El parámetro de daño D en un determinado instante es función del valor *máximo* que ha alcanzado el desplazamiento equivalente a lo largo de la historia de carga. Es decir, $D = D(\delta_{eq}^{\max})$.

En relación a la figura 3.15, se definen los siguientes valores puntuales de desplazamiento equivalente:

δ_{eq}^0 : es el valor actual del desplazamiento equivalente, justo en el instante en que se satisface el criterio de iniciación del daño.

δ_{eq}^f : es el valor actual del desplazamiento equivalente, justo en el instante en que se la interfaz alcanza un estado completamente dañado, perdiendo toda capacidad de transmitir tensión.

Observación 1: el daño degrada la rigidez

De la ec. (3.8) se deduce que el parámetro de daño D actúa degradando la rigidez cohesiva de la ec. (3.6) o (3.7), al crecer de 0 hasta 1. De producirse, una descarga en un estadio intermedio durante el ablandamiento de la interfaz recorrería un camino lineal cuya pendiente es la rigidez cohesiva inicial, degradada en un factor $1 - D$ debido al daño acumulado hasta el instante de inicio de la descarga, tal como se muestra en la figura 3.15.

Observación 2: forma de la curva de ablandamiento

La forma de la curva de ablandamiento en la ley tracción-separación (figura 3.13 o 3.15), que es considerada una propiedad de la interfaz cohesiva, queda completamente determinada por la forma de la relación funcional $D = D(\delta_{eq}^{max})$ cuando $\delta_{eq}^0 \leq \delta_{eq}^{max} \leq \delta_{eq}^f$, y constituye uno de los parámetros cohesivos a definir por el usuario. La forma específica de esta función será descrita más adelante, en relación con el parámetro cohesivo Energía de Fractura.

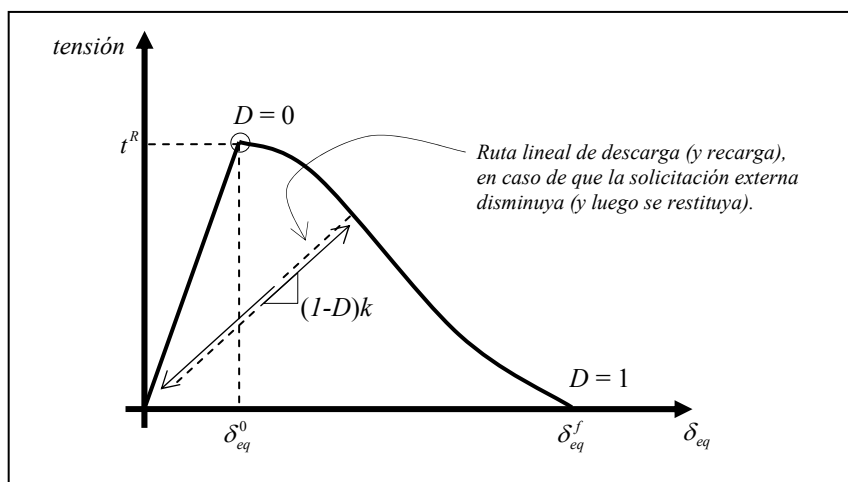


Figura 3.15: el daño degrada la rigidez inicial de la fisura cohesiva en el factor $(1-D)$. Una descarga desde un estadio intermedio es de tipo lineal elástico.

3.3.5.c Calibración de la Rigidez Cohesiva Inicial.

Los valores asignados a la rigidez cohesiva inicial de la ec. (3.7) se buscaron por tanteo, con el objetivo principal de minimizar la degradación de la rigidez global de la estructura antes del inicio del proceso de daño. La cuantificación de la pérdida de rigidez global de la estructura puede hacerse comparando una curva $\sigma-\varepsilon$ numérica obtenida a partir de una malla *sin* elementos cohesivos (nodos compartidos en las interfaces matriz-partícula) con otra obtenida de una malla igual a la anterior en las fases sólidas, pero con elementos cohesivos embebidos en las interfaces y manteniendo *desactivado* el criterio de iniciación de daño. Así, en todos los casos se ha buscado valores suficientemente altos para la rigidez cohesiva inicial de forma que la pérdida de rigidez global de la estructura es pequeña en relación con la referencia, pero suficientemente bajos como para permitir convergencia del modelo.

Con el objeto de disponer de una referencia relacionada con la micro estructura del material compuesto, se ha establecido una *cota inferior* para la rigidez cohesiva inicial de modo que se

mantengan acotados los desplazamientos normales y de cortadura en los elementos cohesivos, imponiendo la siguiente restricción en la etapa lineal elástica, antes del inicio del proceso de daño de la interfaz:

$$\delta_{eq} = \sqrt{\langle \delta_n \rangle^2 + (\delta_r)^2 + (\delta_s)^2} \leq tol \quad (3.10)$$

Se ha fijado esta tolerancia como un *porcentaje pequeño*, α , de alguna longitud representativa de la micro estructura como, por ejemplo, el tamaño medio de partícula \bar{l} , es decir: $tol = \alpha \bar{l}$. En microestructuras con tamaño y esbeltez de partículas constante, el tamaño medio de partícula utilizado es el valor promedio de longitud de las tres aristas de una partícula. En microestructuras generadas con aleatoriedad para el tamaño o la esbeltez de partículas, el tamaño medio de partículas se calculó como el promedio aritmético entre todas las partículas del tamaño promedio de arista de cada partícula.

En una condición de carga monótona, la igualdad en (3.10) se verifica cuando se satisface el *Criterio de Iniciación del Daño*. Utilizando la matriz de rigidez desacoplada de la ec. (3.23), el desplazamiento equivalente de (3.26) se puede escribir como:

$$\delta_{eq} = \sqrt{\left(\frac{\langle t_n \rangle}{k_n}\right)^2 + \left(\frac{t_r}{k_r}\right)^2 + \left(\frac{t_s}{k_s}\right)^2} \leq \alpha \bar{l} \quad (3.11)$$

En *tracción pura* y en la condición de *carga máxima* (inicio del proceso de daño), se tiene que $t_n = t_n^R = \beta_n \sigma_0$ y $\delta_{eq} = \delta_n = \delta_n^0 = \alpha \bar{l}$. Estas dos condiciones permiten establecer una cota inferior para la rigidez cohesiva en dirección normal. En forma análoga, considerando *cortadura pura* en condición de *carga máxima* se establecen cotas inferiores para las rigideces de cortadura. Estas cotas son:

$$k_n \geq \frac{\beta_n \sigma_0}{\alpha \bar{l}} \quad ; \quad k_r \geq \frac{\beta_r \sigma_0}{\alpha \bar{l}} \quad ; \quad k_s \geq \frac{\beta_s \sigma_0}{\alpha \bar{l}} \quad (3.12)$$

Tal como se hizo anteriormente para la resistencia de interfaz (coeficientes β), se consideró por sencillez que las tres rigideces cohesivas son iguales $k_n = k_r = k_s = k$, quedando una cota única para la rigidez cohesiva inicial como:

$$k \geq \frac{\beta \sigma_0}{\alpha \bar{l}} \quad (3.13)$$

En este esquema, los coeficientes β han de ser considerados como una *propiedad mecánica* de la interfaz, representativa de su resistencia mecánica. El parámetro α en cambio (y por

extensión, la rigidez cohesiva) ha de ser considerado sólo como un parámetro del modelo cohesivo y no como una *propiedad* de la interfaz.

3.3.5.d Criterio de Iniciación del Daño.

En apartados anteriores se ha indicado la existencia de una condición límite para el comportamiento lineal elástico inicial en los elementos cohesivos, habiéndose definido también la resistencia mecánica de la interfaz. No se ha establecido sin embargo el modo en que la resistencia mecánica se relaciona con el estado *actual* de tensiones en la fisura para definir el *criterio de iniciación del daño*. Este punto puede definirse mediante criterios basados en tensiones o en deformaciones (desplazamientos). Así mismo, estos criterios pueden basarse en valores *máximos* de las componentes de las tensiones o desplazamientos, o bien, en valores *cuadráticos equivalentes*. Se discute a continuación las implicancias de una u otra formulación.

Criterios basados en valores cuadráticos:

$$i. \text{ Criterio en tensiones: } \left(\frac{\langle t_n \rangle}{t_n^R} \right)^2 + \left(\frac{t_r}{t_r^R} \right)^2 + \left(\frac{t_s}{t_s^R} \right)^2 = 1 \quad (3.14)$$

$$ii. \text{ Criterio en desplazamientos: } \left(\frac{\langle \delta_n \rangle}{\delta_n^0} \right)^2 + \left(\frac{\delta_r}{\delta_r^0} \right)^2 + \left(\frac{\delta_s}{\delta_s^0} \right)^2 = 1 \quad (3.15)$$

Con las rigideces cohesivas iniciales calculadas según (3.7), es directo verificar que los criterios de iniciación de daño en tensiones y en desplazamientos son *equivalentes*, dado que hasta el punto de inicio del daño se verifican simultáneamente:

$$\begin{aligned} t_n &= k_n \delta_n & ; & & t_n^R &= k_n \delta_n^0 \\ t_r &= k_r \delta_r & ; & & t_r^R &= k_r \delta_r^0 \\ t_s &= k_s \delta_s & ; & & t_s^R &= k_s \delta_s^0 \end{aligned}$$

Criterios basados en valores máximos:

$$i. \text{ Criterio en tensiones: } \max \left\{ \frac{\langle t_n \rangle}{t_n^R}, \frac{t_r}{t_r^R}, \frac{t_s}{t_s^R} \right\} = 1 \quad (3.162)$$

$$ii. \text{ Criterio en desplazamientos: } \max \left\{ \frac{\langle \delta_n \rangle}{\delta_n^0}, \frac{\delta_r}{\delta_r^0}, \frac{\delta_s}{\delta_s^0} \right\} = 1 \quad (3.17)$$

Al igual que en el caso de los criterios basados en valores cuadráticos, las rigideces cohesivas iniciales definidas según (3.6) o (3.7), implican que *son equivalentes* los criterios basados en valores máximos de las componentes de tensiones o desplazamientos.

Para el caso 2D, en que se elimina una de las dos direcciones de cortadura, las figuras 3.16 a 3.19 representan esquemáticamente las implicaciones de utilizar un criterio de iniciación del daño basado en valores cuadráticos equivalentes.

Observaciones:

1. En las figuras 3.16 y 3.17, las regiones sub-críticas (antes del inicio del proceso de daño) son ilimitadas para tensiones compresivas muy grandes: la compresión no daña la interfaz, consecuencia del uso del operador $\langle \rangle$ en las definiciones de la tensión con daño y del desplazamiento equivalente, ecuaciones (3.8) y (3.9) respectivamente.
2. La semi-elipse de la figura 3.16 define la capacidad máxima de la interfaz para transmitir tensión. Luego, las tensiones están acotadas, permaneciendo siempre *dentro* de esta región. Además, el incremento progresivo en el parámetro de daño, desde 0 hasta 1, contrae a su vez progresivamente esta región de tensiones posibles hasta, eventualmente, colapsarla en un punto en el origen. No ocurre lo mismo con los desplazamientos (fig.3.17), puesto que una vez dañada la interfaz, ya no tendrán restricciones en el plano δ_n, δ_s .
3. En relación a las figuras 3.18 y 3.19, además de la forma de la región que acota las tensiones, la principal característica de los criterios basados en valores máximos es que implican que la tensión máxima de cortadura que la interfaz puede transmitir es *independiente* del valor actual de la tensión normal de tracción. Del mismo modo, la máxima tracción que la interfaz puede sostener es *independiente* del valor actual de la tensión de cortadura.

Finalmente, debe indicarse que el valor δ_{eq}^0 definido en 3.2.5.b no puede considerarse como una *propiedad* de la interfaz ya que, para un criterio de iniciación determinado y para un conjunto determinado de resistencias mecánicas de interfaz, su valor puede variar en función del estado tensional *actual* en el instante de iniciación del daño.

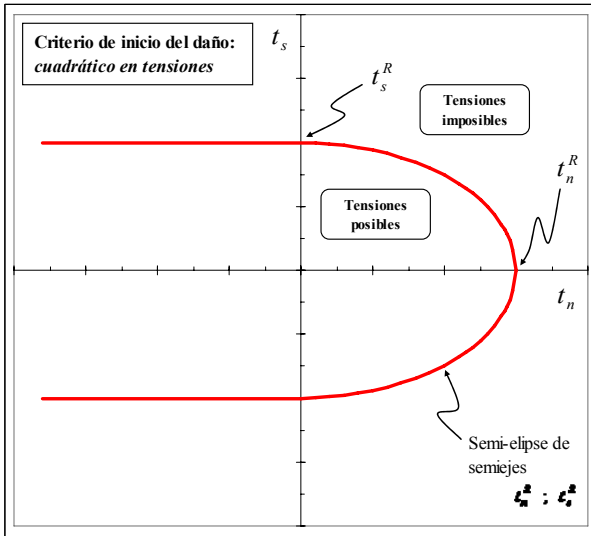


Figura 3.16: Tensiones normales y de cortadura en un elemento cohesivo, cuya iniciación de daño está controlada por un criterio cuadrático.

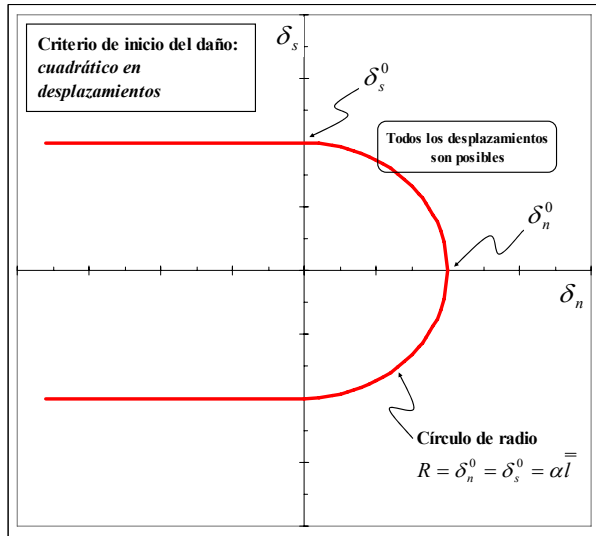


Figura 3.17: Desplazamientos normales y de cortadura en un elemento cohesivo, cuya iniciación de daño está controlada por un criterio cuadrático.

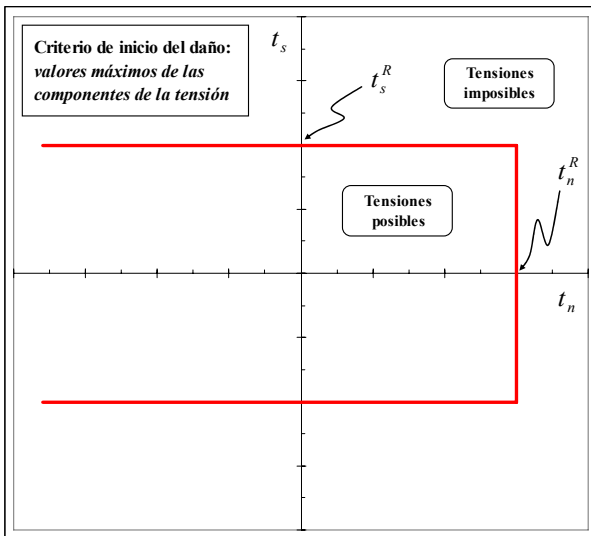


Figura 3.18: Tensiones normales y de cortadura en un elemento cohesivo, cuya iniciación de daño está controlada por un criterio de máximos.

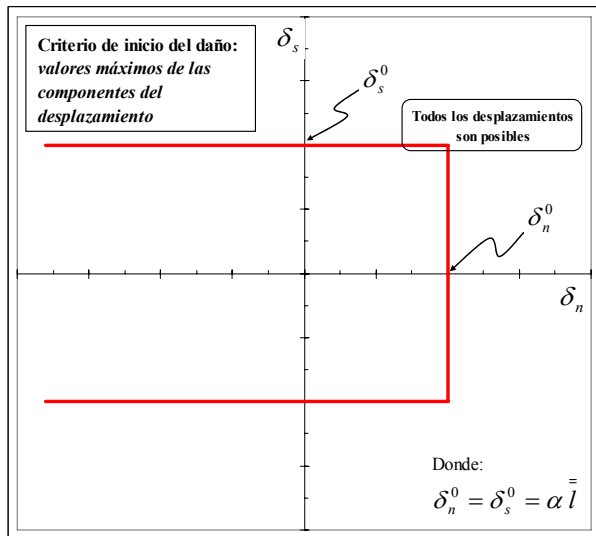


Figura 3.19: Desplazamientos normales y de cortadura en un elemento cohesivo, cuya iniciación de daño está controlada por un criterio de máximos.

En esta Tesis, se ha usado el criterio basado en valores cuadráticos de tensión, haciendo uso de una sola resistencia cohesiva global, a través de un único coeficiente β , del modo definido en el apartado 3.2.5.b. Se dejará como trabajo futuro el estudio de la posible influencia que

puede tener sobre el comportamiento del PMMC a nivel macroscópico el uso de un criterio de inicio de decohesión basado en valores máximos.

3.3.5.e Energía de Fractura.

En referencia a la figura 3.13, la *Energía de Fractura* G^C es el área total bajo la ley tracción separación y se define incluyendo tanto el comportamiento lineal elástico inicial como el proceso de ablandamiento o daño de la interfaz. G^C es considerada una *propiedad* de la interfaz, que ha de ser definida de acuerdo a:

$$G^C = U + W \quad (3.18)$$

donde

U : es la energía potencial elástica almacenada en el elemento cohesivo, hasta el punto de carga máxima, o de iniciación del proceso de daño.

W : puede interpretarse como el trabajo de ablandamiento que las fuerzas externas al elemento cohesivo deben realizar para lograr la degradación completa de la interfaz.

Cuando la interfaz sufre una apertura externamente impuesta monótona y creciente, para cualquier estadio *anterior* a la degradación completa de la interfaz, es útil separar el trabajo realizado en componentes debidas a tensiones normales (n) y de cortadura (sh):

$$G_T = G_n + G_{sh} \quad (3.19a)$$

donde, suponiendo que no hay descargas intermedias:

$$G_n = \int_0^{\delta_n} t_n d\delta_n = U_n + W_n \quad (3.19b)$$

$$G_{sh} = G_r + G_s = \int_0^{\delta_r} t_r d\delta_r + \int_0^{\delta_s} t_s d\delta_s = U_r + W_r + U_s + W_s \quad (3.19c)$$

En el caso de un modo mixto de decohesión, es posible definir la energía de fractura G^C ya sea como un valor constante, o bien, en función de la relación existente entre tracción y cortadura, lo cual hace necesario definir una medida para cuantificar el *mode-mix*. Esta cuantificación puede realizarse ya sea en términos de tensiones (t_n en su relación con t_r y t_s) o en términos de energías (G_n en su relación con G_{sh} o G_T), siendo ambas posibilidades

equivalentes sólo si la matriz de rigidez utilizada para caracterizar el elemento cohesivo es de tipo *desacoplado*. Como medida del *mode-mix*, se empleará aquí la siguiente:

$$X = \frac{G_n}{G_T} \quad (3.20)$$

Esta definición de *mode-mix* X se interpreta como la fracción del trabajo total realizado por las fuerzas externas a la interfaz cohesiva, empleado en producir apertura normal de la interfaz. Del mismo modo, su complemento $1 - X$ representa la fracción del trabajo total realizado por las fuerzas externas a la interfaz cohesiva, empleado en producir deslizamientos de cortadura entre las caras opuestas de la interfaz.

Bajo apertura impuesta monótona y creciente, la interfaz tendrá *degradación completa* cuando el valor actual de G_T , calculado según (3.19), sea igual a la energía de fractura G^C de la interfaz:

$$G_T = G_n + G_r + G_s = G^C \quad (3.21)$$

En el caso particular en que G^C es independiente de X (y, por tanto, se define a través de un único valor), si la forma de la curva de ablandamiento y la resistencia cohesiva están definidas, entonces existe una relación unívoca entre el valor de energía de fractura G^C y la apertura equivalente de interfaz δ_{eq}^f , que fuera definida anteriormente en 3.2.5.b y correspondiente a una interfaz completamente dañada. Debido a esto, al igual que G^C , δ_{eq}^f es considerado una *propiedad* de la interfaz, contrariamente a δ_{eq}^0 , que en ningún caso puede ser considerado como una propiedad de la interfaz (ver apartado 3.2.5.e).

Caso particular: curva de ablandamiento de tipo lineal:

En todas las simulaciones con daño cohesivo realizadas en esta Tesis se ha utilizado el Modelo de Fisura Cohesiva considerando una curva de ablandamiento de tipo *lineal*, con energía de fractura independiente de X , dejando para trabajos futuros un estudio de la influencia que puede tener sobre el comportamiento macroscópico del compuesto la consideración de esta dependencia $G^C = G^C(X)$.

Lo anterior define completamente tanto la relación funcional $D = D(\delta_{eq}^{\max})$ como la vinculación unívoca entre G^C y δ_{eq}^f . A partir de la ecuación (3.8) es sencillo demostrar que si la curva de ablandamiento es una línea recta, entonces la evolución del parámetro de daño debe ser la que se expresa en la ecuación (3.22) y se representa en la figura 3.20:

$$D = D(\delta_{eq}^{max}) = \begin{cases} 0 & ; \text{ si } 0 \leq \delta_{eq}^{max} \leq \delta_{eq}^0 \\ \frac{\delta_{eq}^f}{\delta_{eq}^{max}} \left(\frac{\delta_{eq}^{max} - \delta_{eq}^0}{\delta_{eq}^f - \delta_{eq}^0} \right) & ; \text{ si } \delta_{eq}^0 \leq \delta_{eq}^{max} \leq \delta_{eq}^f \\ 1 & ; \text{ si } \delta_{eq}^f \leq \delta_{eq}^{max} \end{cases} \quad (3.22)$$

La energía de fractura es el área bajo la ley tracción separación en la figura 3.20, lo que determina la relación entre G^C y δ_{eq}^f del siguiente modo:

$$G^C = \frac{1}{2} t^R \delta_{eq}^f \quad (3.23)$$

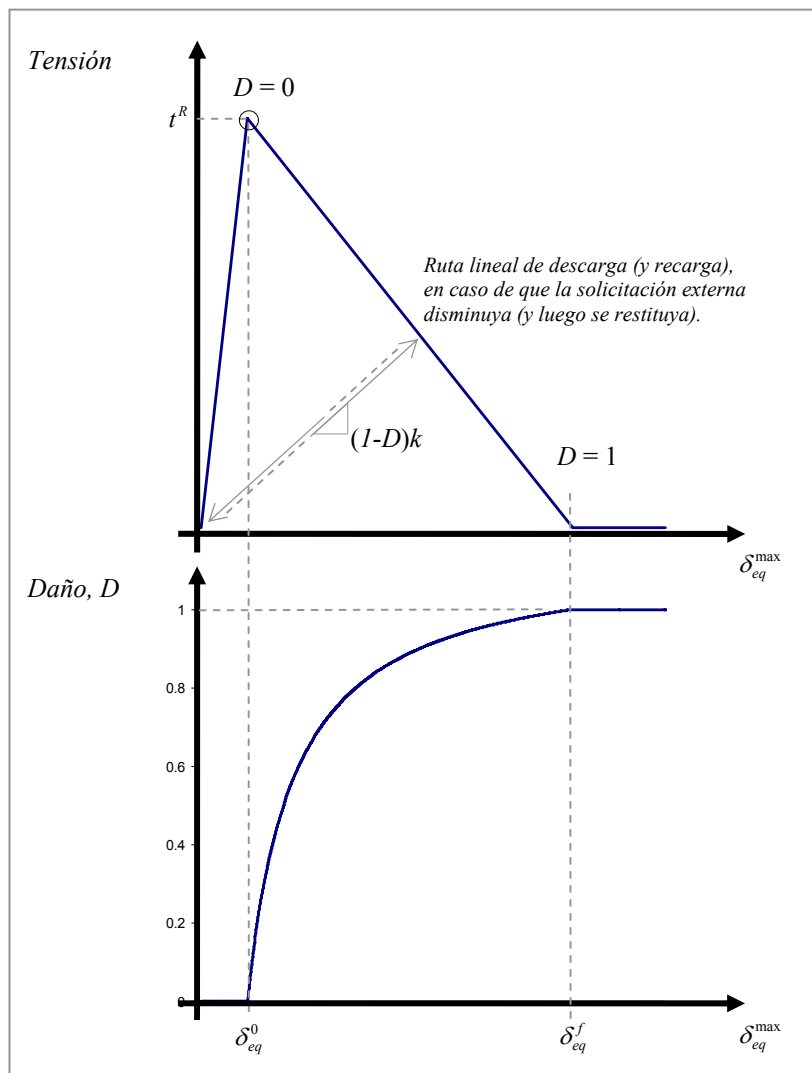


Figura 3.20: Arriba, ley tracción separación incluyendo comportamiento en descarga intermedia. Abajo, evolución del parámetro de daño en función del desplazamiento equivalente.

3.3.6 Medidas Tenso-deformacionales a Nivel Macroscópico.

Los tensores de tensión y de deformación macroscópica asociados a una sollicitación mecánica particular impuesta sobre la celda multipartícula a través de la ec. (3.4), pueden obtenerse de dos maneras: a través de las fuerzas *externas* actuantes en las caras de la celda, o bien, a partir del promedio volumétrico de los microcampos de tensión y deformación en el *interior* del dominio de cálculo. Ambas se explican a continuación, en una notación en que Σ_{ij} y E_{ij} son, respectivamente las componentes de las matrices tensión y deformación macroscópica.

Medida exterior de la tensión y deformación macroscópica.

Dado que las componentes de desplazamiento de los nodos de control del tipo c_{ii} permiten cuantificar el área transversal *actual* de la celda multipartícula deformada, las componentes de la tensión macroscópica se calculan simplemente como el cociente entre la fuerza de reacción y el área transversal actual por la ecuación (3.24), en que L_0 es la arista de la celda en la configuración inicial no deformada. Por su parte, las componentes E_{ij} de la matriz de deformaciones macroscópicas se obtienen de la ecuación (3.25).

$$\Sigma_{ij} = \begin{cases} \frac{f_{ii}}{\prod_{k \neq i} (L_0 + c_{kk})} & \text{si } i = j \\ \frac{f_{ij}}{\prod_{k \neq j} (L_0 + c_{kk})} & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3.24)$$

$$E_{ij} = \begin{cases} \ln \left(1 + \frac{c_{ii}}{L_0} \right) & \text{si } i = j \\ \frac{c_{ij}}{2L_0} & \text{si } i \neq j \text{ y } c_{ij} \ll L \end{cases} \quad (3.25)$$

Nótese que Σ_{ij} , calculado según la ecuación (3.24), constituye una medida *exterior* de la tensión macroscópica en el material compuesto, en el sentido de que la fuerza de reacción medida en el nodo de control correspondiente, es la resultante de todas las fuerzas de interacción que participan en la imposición de las ecuaciones de periodicidad discreta (3.4) y, por lo tanto, actuantes sobre nodos situados en las caras de la celda. Las medidas macroscópicas exteriores fueron evaluadas como post proceso de resultados, de las reacciones

y desplazamientos en los nodos de control, proporcionados directamente por el software de cálculo.

Medida interior de la tensión y deformación macroscópica.

La medida *interior* de las componentes de las matrices de tensión y deformación macroscópica del compuesto se materializa en las expresiones (3.26) y (3.27), en las cuales, el símbolo de aproximación denota su cuantificación en el contexto del Método de Elementos Finitos.

$$\Sigma_{ij} = \frac{1}{V_{\Omega}} \int_{\Omega} \sigma_{ij} dv \approx \frac{1}{V_{\Omega}} \sum_{e \in \Omega} \sigma_{ij}^e V_e \quad (3.26)$$

$$E_{ij} = \frac{1}{V_{\Omega}} \int_{\Omega} \varepsilon_{ij} dv \approx \frac{1}{V_{\Omega}} \sum_{e \in \Omega} \varepsilon_{ij}^e V_e \quad (3.27)$$

- Donde:
- Ω : región de promediación; corresponde al volumen total del RVE.
 - V_{Ω} : volumen actual de la región de promediación Ω .
 - $\sigma_{ij}^e, \varepsilon_{ij}^e$: valor actual de la componente $(\)_{ij}$ del tensor de tensiones o deformaciones, evaluado en el punto de integración e -ésimo del modelo de elementos finitos.
 - V_e : valor actual del volumen asociado al punto de integración e -ésimo del modelo de elementos finitos.

Las medidas macroscópicas interiores basadas en las ecuaciones (3.26) y (3.27), se cuantificaron mediante la herramienta de post-procesamiento de resultados que se describe en el apartado 3.3.7.b.

Observaciones:

- Mediante el Teorema de Gauss, puede demostrarse que las medidas interiores y exteriores del estado tenso-deformacional macroscópico son equivalentes entre sí siempre que la región de integración Ω en (3.26) y (3.27) corresponda al RVE completo. De este modo, ambas medidas macroscópicas pueden considerarse *representativas* del estado tenso-deformacional del compuesto.
- Si la región de promediación Ω se restringe a una subregión contenida en el RVE, por ejemplo, abarcando sólo las partículas de refuerzo o solamente la fase matriz, no puede considerarse, en general, que las medidas interiores definen el estado representativo de las fases. Se profundizará en este aspecto en el capítulo 6.

3.3.7 Métodos y Herramientas Diseñados para la Extracción de Resultados Numéricos.

Dos herramientas de producción y extracción de los resultados numéricos fueron diseñadas en el marco de esta Tesis, para solventar aquellas situaciones en que la metodología estándar de procesamiento de resultados del software FEM no permitía extraer determinados parámetros de interés en el análisis micromecánico de PMMC's. Estas se describen a continuación.

3.3.7.a Subrutina de usuario UVARM: variables de usuario en los puntos de integración.

Con el objeto de representar mapas espaciales de variables escalares que el software FEM utilizado no proporciona en su librería estándar de variables de salida, como por ejemplo el *índice de triaxialidad* tensional o el *parámetro de Lode*, se construyó una subrutina de usuario (UVARM en la terminología ABAQUS) que se ejecuta durante el transcurso de simulación, y cuyo funcionamiento es el siguiente:

- i.* UVARM recibe de las rutinas constitutivas, en cada incremento y en cada punto de integración en la que es ejecutada, las variables tenso-deformacionales requeridas por el usuario.
- ii.* Con esta información, se construyen dentro de UVARM las expresiones necesarias para cuantificar las variables escalares de salida definidas por el usuario. Estas son almacenadas en el archivo de resultados de la simulación.

Nótese que las variables calculadas dentro de UVARM sólo actúan como resultados, utilizables a efectos de visualización o post-proceso. Es decir, no participan del proceso de solución ni modifican los resultados tenso-deformacionales básicos.

3.3.7.b Post-procesamiento de resultados.

Se ha construido un programa FORTRAN de post-procesamiento que accede a variables tenso-deformacionales de interés calculadas en los puntos de integración del elemento y almacenadas en el archivo de resultados creado por el software FEM.

El acceso a los resultados se realiza secuencialmente para todos los puntos de integración de una región o subregión del modelo de elementos finitos. Finalizada la lectura de resultados, este programa genera dos clases de salidas: indicadores estadísticos e histogramas de distribución espacial de las variables escalares requeridas por el usuario.

Indicadores Estadísticos: Promedios Volumétricos y Desviación Standard:

Si q es una determinada variable escalar de interés calculada en los puntos de integración, entonces su promedio volumétrico se calcula según la expresión (3.28):

$$\bar{q}^{\Omega} = \frac{1}{V_{\Omega}} \int_{\Omega} q dv \approx \frac{1}{V_{\Omega}} \sum_{e \in \Omega} q_e V_e \quad (3.28)$$

Donde: Ω : región de promediación (matriz, partículas o volumen total del RVE)

V_{Ω} : volumen actual de la región de promediación Ω .

V_e : valor actual del volumen asociado al punto de integración e -ésimo, que pertenece a la región Ω .

\bar{q}^{Ω} : valor actual del promedio volumétrico de la variable en estudio q , en la región Ω .

q_e : valor actual de la variable en estudio q , evaluado en el e -ésimo punto de integración de la región Ω .

La variable q puede ser cualquier campo escalar que haya sido calculado en los puntos de integración por las rutinas constitutivas durante la ejecución de las simulaciones, por ejemplo, las *componentes* σ_{ij} y ε_{ij} de los tensores tensión y deformación, el valor de la tensión equivalente de von Mises, la deformación plástica equivalente, la tensión hidrostática o, incluso, variables escalares que hayan sido definidas mediante la subrutina de usuario UVARM descrita en el apartado anterior. Adicionalmente, para algunas variables escalares particulares, como la tensión de von Mises o la deformación plástica equivalente, el programa de post-procesamiento calcula, además de su promedio volumétrico, su desviación Estándar y sus valores máximo y mínimo en la región de promediación Ω .

Dado que el proceso de solución no lineal es incremental, parametrizado mediante un *tiempo de simulación*, el programa de post-procesamiento aquí descrito efectúa las promediaciones volumétricas en todos los incrementos temporales en los que se almacenó resultados durante la ejecución de la simulación. Por lo tanto, no sólo se calculan los promedios volumétricos sino que se registra además su evolución durante la historia de deformación del RVE.

Nótese que si q corresponde a la componente σ_{ij} o ε_{ij} de los tensores tensión o deformación, entonces la expresión (3.28) se transforma en las expresiones (3.26) o (3.27) cuando la región de promediación corresponde a la totalidad del RVE, de lo que se obtiene la medida *interior* de la tensión y deformación macroscópica del material compuesto, como se expusiera antes, en el apartado 3.3.6.

Histogramas de distribución espacial:

Para su construcción, se define un número m de rangos de análisis para el escalar de interés q en la forma $R_m = [q_m^{\text{inf}}, q_m^{\text{sup}}]$; se define además m contenedores volumétricos V_m , inicializados en cero. De este modo, cuando el programa de post-proceso, en su lectura secuencial de todos los puntos de integración contenidos en la región Ω , evalúa el punto de integración e -ésimo, si $q_e \in R_m$ entonces se actualiza el valor del contenedor volumétrico y se actualiza la fracción volumétrica de la región Ω en la que $q \in R_m$, ecuaciones (3.29).

$$V_m = V_m + V_e \quad ; \quad F_m^q = V_m / V_\Omega \quad (3.29)$$

Tal como en el caso del promedio volumétrico, no sólo se construyen estos histogramas sino que se registra su evolución durante la historia de deformación del RVE. Si q , por ejemplo, corresponde al *índice de triaxialidad* tensional, puede saberse con precisión qué porcentaje de la fase matriz está sometido a triaxialidades pequeñas, intermedias o altas, y cómo evolucionan esos porcentajes en función del tiempo de simulación o de la deformación macroscópica durante la historia de deformación. Si q , en cambio, es la deformación plástica equivalente $\bar{\epsilon}^{pl}$, puede obtenerse la fracción volumétrica de la fase matriz en la cual se ha superado un determinado valor de referencia.

3.3.8 Densidad de Malla y Tipo de Elemento. Análisis Cualitativo.

A pesar de su conocida desventaja de ofrecer una respuesta demasiado rígida, se evaluó inicialmente el comportamiento de elementos tetraédricos lineales para las fases sólidas de matriz y partículas. En términos generales, se encontró que estos elementos ofrecían un buen desempeño en términos de convergencia y rapidez, siendo capaces de resolver casos en que la macro-deformación alcanzó más del 20%. En estas circunstancias, en las que la fase matriz ya ha entrado en régimen elasto-plástico, los elementos lineales fueron capaces de resolver los fuertes *gradientes* de tensión y deformación plástica que se producen en las cercanías de los vértices y aristas de partículas, los cuales actúan como concentradores de tensión.

En cuanto a la calidad de la solución obtenida con estos elementos, se encontró una buena capacidad de predicción de las constantes elásticas del material compuesto, evaluadas frente a datos experimentales. Sin embargo, al adentrarse en régimen elasto-plástico las curvas tensión-deformación numéricas (con los elementos lineales) siempre estaban muy por encima de las curvas experimentales. Aunque, como era de esperar, esta sobreestimación disminuía al refinar la malla, incluso con las mallas más finas no fue posible obtener una respuesta mecánica usable. Debe indicarse en todo caso, que este efecto de sobreestimación fue mucho

más acusado en los modelos 3D que en los 2D en tensión plana, en los que se utilizaron triángulos lineales para las fases sólidas.

Al utilizar tetraedros cuadráticos, el efecto de sobreestimación de la curva σ - ε en régimen elasto-plástico fue mucho menos acusado que con elementos lineales. Así mismo, la dependencia de los resultados frente a la densidad de malla fue menor. Sin embargo, al contrario que los elementos lineales, los elementos cuadráticos (tanto en su formulación estándar como en una formulación *modificada*, que es propietaria de ABAQUS) mostraron una *menor* capacidad para resolver los *gradientes* de tensión y deformación plástica que se producen en las cercanías de los concentradores de tensión antes mencionados. Eventualmente, se alcanzaba un nivel de deformación en el que las rutinas constitutivas eran incapaces de converger en los puntos de integración de aquellos elementos cuadráticos situados en posiciones críticas de la microestructura, generalmente, elementos de la fase matriz ubicados en la *vecindad inmediata* de vértices o aristas de partículas.

La razón estaba en la notable distorsión geométrica que sufrían estos elementos debido al efecto de localización de la deformación plástica. Más aún, se encontró que cuanto más refinada es la malla de elementos finitos, antes en la historia de deformación se alcanza la situación de imposibilidad de convergencia de las rutinas constitutivas. Esto se tradujo en que la deformación macroscópica total que fue posible simular con elementos cuadráticos fue siempre menor que con elementos lineales.

En todo caso, debe indicarse que el volumen ocupado por estos elementos distorsionados era muy pequeño y muy localizado como para degradar apreciablemente la calidad de la solución macroscópica y microscópica. También debe indicarse que este problema de distorsión de elementos cuadráticos no ocurrió cuando el comportamiento de la fase matriz era de tipo elástico lineal.

3.4 Listado-Resumen de las Herramientas Desarrolladas

1. **Herramienta de Generación:** programa Fortran de *elaboración propia* que permite construir las geometrías periódicas multipartícula de la celda. Descrito en apartado 3.2.
2. **Herramienta de Mallado:** *scripts* de *elaboración propia* para la realización del mallado de la geometría en el software comercial Ansys. Descrito en apartado 3.3.2.
3. **Software para análisis por el Método de Elementos Finitos:** en todas las simulaciones FEM se utilizó el paquete comercial Abaqus, en algunos casos, personalizado mediante subrutinas de usuario.
4. **Condiciones de contorno periódicas:** programa Fortran de *elaboración propia* que realiza tanto la traducción de la malla Ansys a formato Abaqus, como la preparación de la malla para su uso junto a las ecuaciones que definen las condiciones de contorno periódicas. Descrito en apartados 3.3.2 y 3.3.3.
5. **Subrutina de usuario Abaqus UHARD:** subrutina de *elaboración propia* programada en Fortran que permite definir la “curva de endurecimiento” de un material elasto-plástico mediante una expresión analítica, contrariamente al método standard basado en la definición del endurecimiento mediante una tabla de valores tensión-deformación. Descrito en apartado 3.3.4.
6. **Subrutina de usuario Abaqus UARM:** subrutina de *elaboración propia* programada en Fortran que permite definir variables de salida personalizadas, a ser calculadas en los puntos de integración de cada elemento finito, en tiempo de ejecución. Descrito en apartado 3.3.7.a.
7. **Herramienta de Post-procesamiento de resultados:** programa Fortran de *elaboración propia* que permite acceder, a posteriori, a las bases de datos creadas por el software FEM, posibilitando la definición de nuevas variables de salida definidas por el usuario, o bien, de variables específicas que no se pueden obtener durante la ejecución de la simulación (por ejemplo, evolución temporal de promedios volumétricos de ciertas variables de interés, en diferentes regiones de promediación). Descrito en apartado 3.3.7.b.

Capítulo 4

Validación de la Herramienta: Resultados Experimentales y Numéricos

Con el objeto de verificar las capacidades predictivas de la herramienta basada en celdas multi partícula descrita en el capítulo anterior, se realizó una serie de ensayos experimentales utilizando material compuesto reforzado con partículas de procedencia industrial. En el presente capítulo se describe la metodología seguida, así como los resultados numéricos y experimentales obtenidos.

4.1 Metodología de Validación y Materiales Utilizados

La validación de la herramienta basada en celdas multi partícula se realizó esencialmente mediante comparación de valores experimentales y numéricos de un conjunto de *variables de control*, a saber, las *constantes elásticas* del compuesto (E y ν) y su *límite elástico* inicial (definido al 0,2% de deformación plástica). Los valores experimentales se obtuvieron de ensayos en tracción uniaxial en máquina universal de ensayos, en condiciones cuasi-estáticas. Los valores numéricos se obtuvieron de simulaciones basadas en celdas sometidas a tracción uniaxial, con condiciones de periodicidad en la frontera y sin elementos cohesivos en la interfaz matriz-partícula (por lo tanto, sin modelar mecanismos de daño en el compuesto).

4.1.1 Consideraciones Previas sobre el Método de Validación.

Si bien mediante simulaciones de celda puede obtenerse curvas *tensión-deformación* en régimen elasto-plástico en todo el rango de deformación plástica, la comparación de tales curvas en rango completo con curvas obtenidas experimentalmente no puede considerarse como un método de *validación* de la herramienta numérica, dado que en el compuesto real siempre actúan los tres mecanismos clásicos de daño en PMMC's durante su deformación plástica, en una combinación compleja que no puede ser conocida a priori.

Diversos autores, al implementar modelos de daño en simulaciones mediante Elementos Finitos, suelen ajustar los parámetros que definen el modelo de daño en uso de modo de conseguir el buen ajuste entre simulación y experimentación, en el supuesto que una vez logrado dicho ajuste puede considerarse a esos valores de parámetros del modelo de daño como *propiedad* del material. Dicha metodología de calibración, aunque extendida, priva en general a los modelos de daño de todo carácter predictivo ya que, especialmente en el caso de modelos complejos de daño que constan de gran cantidad de parámetros, no está demostrado que el conjunto de valores de parámetros que proporciona buen ajuste a datos experimentales sea único.

Debido a estas consideraciones, en este trabajo no se ha considerado como *variable de control* en la validación de la herramienta numérica a la curva *tensión-deformación* en el rango completo de deformación plástica, ni se ha considerado la inclusión de mecanismos de daño en este análisis de validación. Las curvas *tensión-deformación* numéricas y experimentales se proporcionan en el apartado de resultados sólo como referencia, no como medida de la calidad de la predicción.

4.1.2 Materiales y Herramientas.

El material compuesto utilizado está constituido por una matriz de aleación de aluminio reforzada con partículas de carburo de silicio, SiC. Se disponía de materiales compuestos, de origen Aerospace Metal Composites Ltd., con fracciones volumétricas de partículas de 12%, 25% y 35% (valores nominales, proporcionados por el fabricante). Se disponía además de matriz sin reforzar, que también fue ensayada. No se disponía, sin embargo, de datos de parte del fabricante del material relativos a la forma y orientación de las partículas de refuerzo, excepto el hecho de que las partículas poseen aristas.

En todos los ensayos, el módulo de Elasticidad del compuesto se obtuvo como la pendiente de una recta ajustada –mediante la técnica de mínimos cuadrados– a la parte inicial de la curva tensión-deformación. El coeficiente de Poisson no fue medido experimentalmente (aunque sí se obtuvo de las simulaciones). Las medidas fuerza-desplazamiento fueron post procesadas para producir curvas tensión-deformación *verdaderas*, aplicando la suposición usual de incompresibilidad.

Los ensayos se realizaron en máquina universal Instron utilizando probetas roscadas como la de la figura 4.1, mecanizadas a partir de barras extruidas. Siguiendo las recomendaciones de la norma ASTM E-8 “Standard Test Methods for Tension Testing of Metallic Materials [Metric]” (1994) en cuanto a la relación de la longitud del fuste y al diámetro de la probeta, las dimensiones de las probetas son las que se señalan en la figura

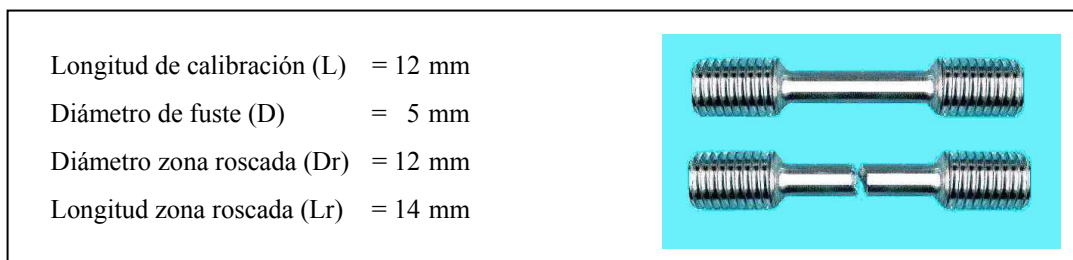


Figura 4.1: Probeta cilíndrica de tracción y otra ensayada hasta la rotura.

Los ensayos se realizaron en control de desplazamiento a temperatura ambiente. En todos los casos, la velocidad del cabezal de la máquina fue de 0,1 mm/min. Para cada fracción volumétrica se realizaron tres ensayos de tracción, encontrándose una pequeña dispersión en los resultados para el módulo de elasticidad.

4.2 Resultados Experimentales, Parte I.

Matriz sin Refuerzo

En la figura 4.2 se muestran los tres ensayos correspondientes a la matriz sin reforzar. No hubo prácticamente variabilidad en la pendiente de la parte elástica inicial, admitiéndose como representativo del Módulo de Elasticidad del material $E_m = 71095$ MPa, que es el correspondiente al “ensayo 02” según la denominación utilizada en la figura 4.2.

Mayor variabilidad presentaron las curvas de endurecimiento en los tres ensayos, siendo en todo caso, prácticamente paralelas entre sí. Las curvas se han representado hasta el valor de deformación de ruptura. En los tres casos fue posible distinguir un pequeño “plateau” inicial, seguido de un endurecimiento asociado a deformación plástica.

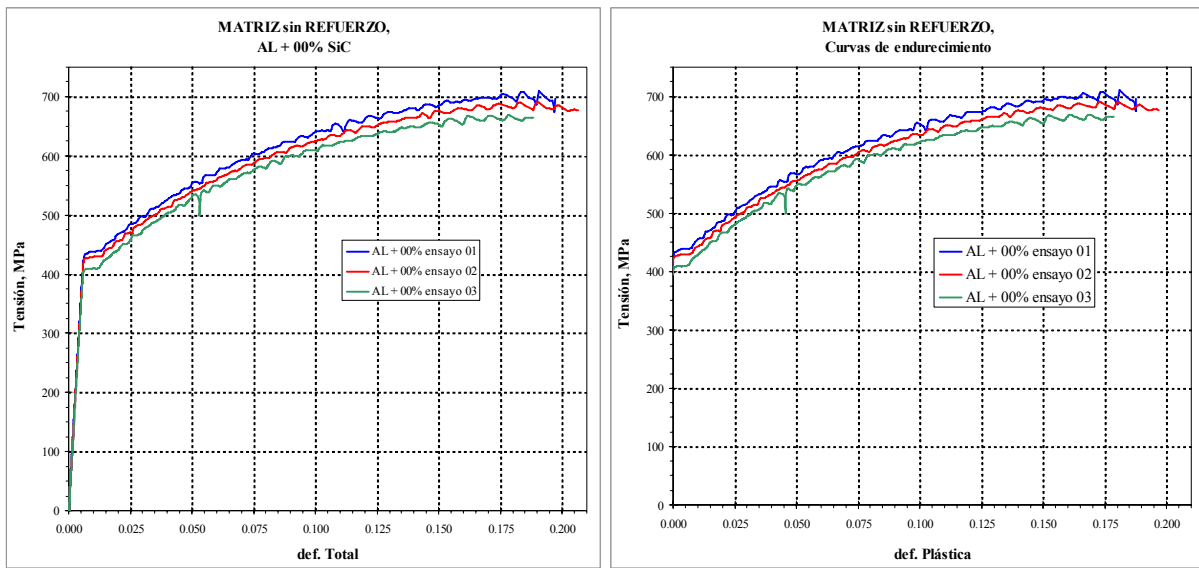


Figura 4.2: Ensayo de tracción uniaxial, probeta de matriz sin reforzar. Tensión verdadera en términos de la deformación total (izq.) y plástica (der.), ambas verdaderas

Así mismo, los tres ensayos presentaron un “rizado” en el rango plástico, probablemente asociado al efecto Portevin-Le Châtelier o PLC (**Portevin y LeChatelier, 1923; Estrin y Kubin, 1998**) y sobre cuya explicación no hay aun consenso científico. Hay varias teorías que lo justifican: la interacción de átomos de soluto con las dislocaciones móviles (que constituyen el origen de la deformación plástica), el movimiento de grandes grupos de dislocaciones y la interacción entre precipitados y dislocaciones. Según la más plausible (en el

caso de las aleaciones de aluminio) teoría de interacción átomos de soluto-dislocaciones, los átomos de soluto (Al, Mn, u otros) se concentran en el frente de las dislocaciones móviles impidiendo su avance. Para reiniciar el movimiento de éstas se requiere de una cantidad de energía superior a su energía de activación. Para disponer de esta energía es necesario incrementar la fuerza aplicada y, por lo tanto, el nivel tensional impuesto al material. Cuando esta condición se alcanza, las dislocaciones reinician bruscamente su movimiento. Se produce entonces un aumento rápido de la deformación en el material (probeta) acompañado de una caída abrupta de la carga aplicada. Este proceso puede producirse varias veces consecutivas dando lugar al “rizado” observado.

Finalmente, se encontró que para este material en particular, la curva de endurecimiento en términos de la deformación plástica no se ajusta adecuadamente a las expresiones usuales de tipo Ramberg-Osgood o Lüdwik. En cambio, se encontró que la zona de endurecimiento después del “plateau” inicial se ajusta de forma excelente a un polinomio de 4º grado, tal como evidencia la figura 4.3, en que se ha representado la curva de endurecimiento del “ensayo 02” así como el ajuste polinomial, con un coeficiente de correlación $R = 0,9991$.

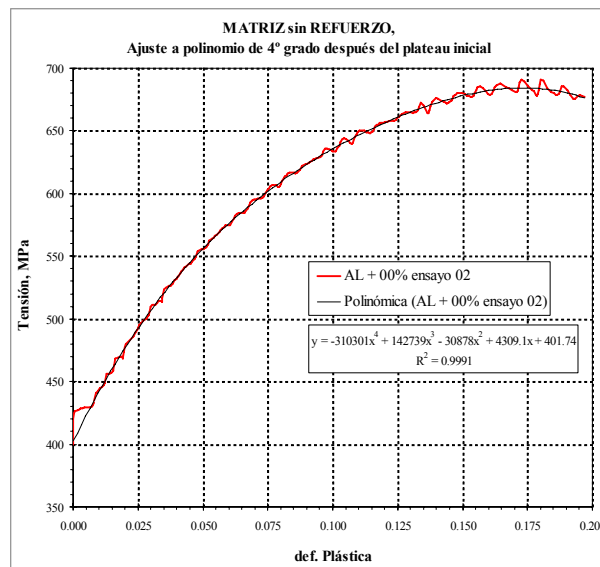


Figura 4.3: Curva de endurecimiento en el ensayo 02, escala de tensiones ajustada. Tensión verdadera en función de def. plástica verdadera.

4.3 Metodología de Simulación Numérica

Para efectos de validación, tres microestructuras periódicas fueron construidas con la herramienta de generación descrita en el capítulo 3, caracterizadas por fracciones volumétricas de refuerzo iguales a las de los materiales estudiados experimentalmente e incluyendo 40 partículas en disposición periódica.

Según datos proporcionados por el fabricante, las partículas utilizadas en estos materiales poseen aristas, lo que fue confirmado por observaciones preliminares en microscopio electrónico. Aunque no se realizó un análisis detallado basado en tratamiento digital de imágenes, estas observaciones preliminares no mostraron pronunciadas esbelteces de partícula ni orientaciones preferentes de las mismas. Esto motivó la construcción de celdas multipartícula con esbeltez constante $R=1$ y, en los casos de $F=12\%$ y $F=25\%$, orientación completamente aleatoria de las 40 partículas. En el caso de $F=35\%$, el algoritmo de generación de celdas multipartícula no fue capaz de encontrar todas las posiciones requeridas de partícula cuando la orientación es completamente aleatoria. Para conseguir la fracción volumétrica deseada, fue necesario restringir la apertura del *cono* de orientaciones utilizando $\alpha=15^\circ$ (ver figura 3.4). De este modo, el eje principal de cada partícula tiene orientación aleatoria, *dentro* de ese cono.

Las simulaciones con celdas multipartícula requieren como dato de entrada el comportamiento constitutivo de las fases sólidas (matriz y partículas). En el caso del refuerzo de partículas, su comportamiento se ha supuesto de tipo lineal elástico, asignándose al Modelo de Elementos Finitos valores de sus módulos de Elasticidad y de Poisson obtenidos de la literatura.

En el caso de la fase matriz, se utilizó un comportamiento elasto-plástico con endurecimiento isotrópico de tipo J_2 , en una formulación incremental e independiente de la velocidad de deformación, utilizando la clásica descomposición aditiva de la deformación total en sus componentes elástica y plástica. Con estas condiciones, se utilizó el algoritmo de integración de las ecuaciones de la plasticidad incluido por defecto en el software FEM, siendo los únicos parámetros de usuario tanto las constantes elásticas del material como la curva de endurecimiento. El módulo de Elasticidad utilizado corresponde al valor medido experimentalmente (ver apartado 4.2). El coeficiente de Poisson en cambio se obtuvo de la literatura ya que no fue medido. Las constantes elásticas utilizadas para matriz y partículas se resumen en la tabla 4.1.

La curva de endurecimiento se ha asignado a los elementos de la fase matriz en el modelo de elementos finitos mediante la subrutina de usuario UHARD, siguiendo la metodología descrita en 3.2.4.b, esto es, definiendo expresiones analíticas para las funciones F_1 y F_2 , que dan, respectivamente, el Límite Elástico actual y su derivada en función de la deformación plástica equivalente. Las expresiones usadas para F_1 y F_2 se calibraron para describir la curva de endurecimiento experimental de la matriz correspondiente al ensayo 02 (ver apartado 4.2) en tres tramos de deformación plástica equivalente: el primer tramo consiste en el “plateau” inicial, el segundo se define mediante un polinomio de 4º grado y alcanza hasta el punto de tensión máxima en la curva experimental y, finalmente, un tramo lineal con pendiente pequeña y positiva, sin cota superior para la deformación plástica equivalente. Los tramos de deformación plástica se muestran en la figura 4.4, así como las funciones F_1 y F_2 .

La razón para definir el último tramo como lineal, apartándose de la curva experimental, es que a partir de un determinado valor de deformación plástica equivalente –correspondiente a la tensión máxima– la tensión predicha por el polinomio de 4º grado en el tramo 2 comienza a decrecer y su derivada pasa a ser negativa, lo cual no puede ser modelado en el contexto de plasticidad clásica de von Mises. Una alternativa podría haber sido considerar plasticidad perfecta, manteniendo constante el valor del límite elástico para toda deformación plástica equivalente superior al valor correspondiente a tensión máxima, sin embargo se ha optado por definir un comportamiento de tipo lineal con pendiente *pequeña* ya que se ha observado que la convergencia del modelo numérico es mejor.

En cada tramo, la subrutina UHARD recibe de las rutinas constitutivas la deformación plástica equivalente, devolviéndoles el valor del límite elástico *actual* así como su derivada:

$$\sigma_0 = F_1(\bar{\varepsilon}^{pl}) = \begin{cases} A_1 \bar{\varepsilon}^{pl} + B_1 & \text{si } 0 \leq \bar{\varepsilon}^{pl} < \bar{\varepsilon}_1^{pl} \\ A_2 (\bar{\varepsilon}^{pl})^4 + B_2 (\bar{\varepsilon}^{pl})^3 + C_2 (\bar{\varepsilon}^{pl})^2 + D_2 \bar{\varepsilon}^{pl} + E_2 & \text{si } \bar{\varepsilon}_1^{pl} \leq \bar{\varepsilon}^{pl} \leq \bar{\varepsilon}_2^{pl} \\ A_3 (\bar{\varepsilon}^{pl} - \bar{\varepsilon}_2^{pl}) + B_3 & \text{si } \bar{\varepsilon}_2^{pl} < \bar{\varepsilon}^{pl} \end{cases} \quad (4.1)$$

$$\frac{d\sigma_0}{d\bar{\varepsilon}^{pl}} = F_2(\bar{\varepsilon}^{pl}) = \begin{cases} A_1 & \text{si } 0 \leq \bar{\varepsilon}^{pl} < \bar{\varepsilon}_1^{pl} \\ 4A_2 (\bar{\varepsilon}^{pl})^3 + 3B_2 (\bar{\varepsilon}^{pl})^2 + 2C_2 \bar{\varepsilon}^{pl} + D_2 & \text{si } \bar{\varepsilon}_1^{pl} \leq \bar{\varepsilon}^{pl} \leq \bar{\varepsilon}_2^{pl} \\ A_3 & \text{si } \bar{\varepsilon}_2^{pl} < \bar{\varepsilon}^{pl} \end{cases} \quad (4.2)$$

En las expresiones anteriores existe un total de 11 parámetros constantes, de los cuales 9 son *datos de usuario* requeridos por la subrutina UHARD, mientras que los 2 restantes son calculados a partir de los primeros de forma que la curva de endurecimiento sea continua en los cambios de tramo. Son datos de usuario los siguientes:

- Límite elástico inicial, tramo 1: $B_1 = 425 \text{ MPa}$
- Deformación plástica equivalente al final del tramo 1: $\bar{\epsilon}_1^{pl} = 0,007$
- Coeficientes del polinomio de 4º grado para el tramo 2, obtenidos por ajuste (a curva de ensayo 02, ver apartado 4.2):

$$A_2 = -310301 \text{ MPa} \quad B_2 = 142739 \text{ MPa} \quad C_2 = -30878 \text{ MPa}$$

$$D_2 = 4309,1 \text{ MPa} \quad E_2 = 401,74 \text{ MPa}$$

- Deformación plástica equivalente al final del tramo 2: $\bar{\epsilon}_2^{pl} = 0,165$
- Pendiente final de la curva de endurecimiento (tramo 3): $A_3 = 80 \text{ MPa}$

Los 2 coeficientes aun por determinar, A_1 y B_3 , se obtienen de las condiciones de continuidad:

$$A_1 = \frac{F_1(\bar{\epsilon}_1^{pl}) - B_1}{\bar{\epsilon}_1^{pl}}, \text{ con } F_1(\bar{\epsilon}_1^{pl}) = 430,4 \text{ MPa} \quad ; \quad B_3 = F_1(\bar{\epsilon}_2^{pl}) = 683,2 \text{ MPa}$$

	E , GPa	ν
Aleación de Al (matriz)	71,095 (experimental)	0,34 (literatura)
Carburo de Silicio (partículas)	410,0 (literatura)	0,16 (literatura)

Tabla 4.1: Constantes elásticas utilizadas en las simulaciones.

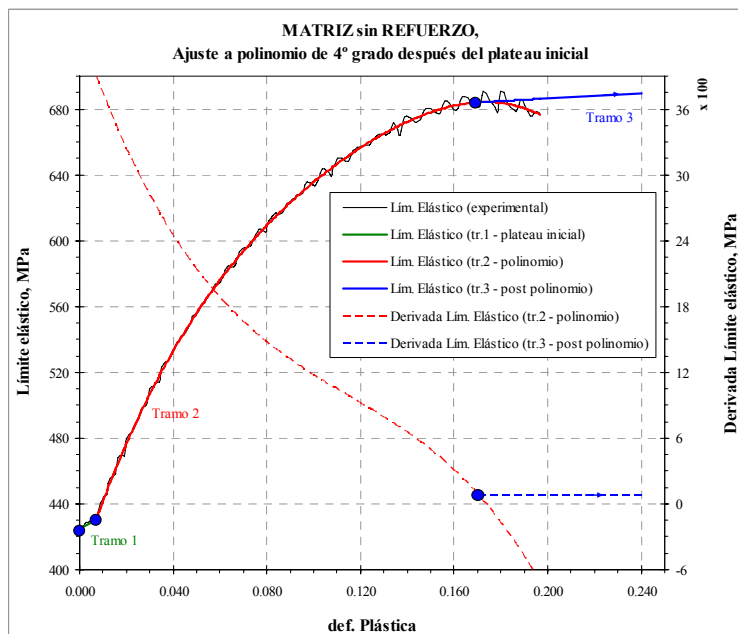


Figura 4.4: Curva de endurecimiento de la matriz. Se muestra la curva experimental así como los ajustes en los tres tramos de deformación plástica. Se muestra así mismo, referidas a la escala de la derecha, la derivada de las curvas de ajuste en los tramos 2 y 3.

4.4 Resultados Experimentales, Parte II.

Variables de Control y Curvas de Endurecimiento

4.4.1 Constantes Elásticas y Límite de Elasticidad.

En la tabla 4.2 se muestran una comparación de las constantes elásticas obtenidas numérica y experimentalmente verificándose, en lo referente al módulo de elasticidad, que el error es relativamente pequeño. En la tabla 4.3 se muestra el límite elástico inicial σ_0 calculado como la tensión correspondiente a una deformación plástica $\varepsilon_{pl} = 0,2\%$. Así mismo, los incrementos con respecto al límite elástico de la matriz se han calculado para un límite elástico de matriz $\sigma_0^{(matriz)}$ de 428 MPa.

	F = 12 %		F = 25 %		F = 35 %	
	E, GPa	ν	E, GPa	ν	E, GPa	ν
Experimental	87,0	no disp.	107,4	no disp.	126,6	no disp.
Numérico	86,6	0,324	108,6	0,303	134,0	0,277
Error c/r exp.	0,46 %	n/a	1,11 %	n/a	5,85 %	n/a

Tabla 4.2: Constantes Elásticas obtenidas numérica y experimentalmente, así como el error relativo respecto al valor experimental.

	F = 12 %		F = 25 %		F = 35 %	
	σ_0 , MPa	Incremento c/r matriz	σ_0 , MPa	Incremento c/r matriz	σ_0 , MPa	Incremento c/r matriz
Experimental	431	1,007	516	1,203	646	1,509
Numérico	458	1,070	518	1,187	650	1,519
Error c/r exp.	6,26 %	n/a	0,38 %	n/a	0,62 %	n/a

Tabla 4.3: Límite Elástico para cada fracción volumétrica, obtenido en forma numérica y experimental, para una deformación plástica del 0,2%.

En todos los casos se observan errores relativos aceptables en el contexto de un estudio experimental, siendo en el caso del Módulo de Elasticidad peor la predicción para una fracción volumétrica del 35%, mientras que en el caso del límite elástico al 0,2% la peor predicción se da para la fracción del 12%.

4.4.2. Comportamiento Tensión-deformación en Tracción Uniaxial.

Todos los ensayos experimentales se realizaron en control de posición, alcanzando en todos los casos la fractura final de la probeta. Las simulaciones con celdas multipartícula se realizaron también en control de posición, hasta alcanzar una deformación macroscópica ligeramente inferior a la deformación de rotura medida experimentalmente. Los valores de deformación se resumen en la tabla 4.4 para las tres fracciones volumétricas de refuerzo.

Las curvas tensión-deformación se han representado tanto en términos de la deformación total como de la deformación plástica en las figuras 4.5 a 4.7. En todos los casos se ha representado a modo de referencia la curva de la matriz sin reforzar. Así mismo, se ha representado la evolución del módulo tangente en función de la deformación total en las figuras 4.8 a 4.10.

	Deformación de rotura (experimental)	Deformación total simulada
$f = 12\%$	0,122 – 0,129	0,095
$f = 25\%$	0,051 – 0,058	0,050
$f = 35\%$	0,021 – 0,022	0,020

Tabla 4.4: Deformación total (logarítmica) máxima alcanzada experimentalmente y deformación impuesta en las simulaciones con celda multipartícula. En el caso

Observaciones:

- i.* En todos los casos, se observa que las simulaciones basadas en celda multipartícula reflejan adecuadamente el límite elástico inicial (como ya se deducía antes de la tabla 4.3). Por otra parte, el “codo” de plasticidad se reproduce razonablemente bien especialmente para las fracciones de refuerzo más altas, de 25% y 35%. En el caso del $F = 12\%$ una inspección cuidadosa de la parte *inicial* de las curvas numérica y experimental revela en su forma cierta influencia del breve “plateau” en la parte inicial de la curva de endurecimiento de la matriz sin reforzar (figura 4.2). Como era de esperar, la esquina relativamente aguda del “codo” de plasticidad de la matriz tiende a suavizarse para el compuesto, conforme aumenta la fracción volumétrica de refuerzo.
- ii.* Para todas las fracciones de refuerzo, al aumentar el rango de deformación plástica las curvas numéricas quedaron por encima de las curvas experimentales, lo cual se explica razonablemente puesto que, como se ha indicado antes, deliberadamente no se modelaron mecanismos de daño en las simulaciones de este estudio de validación. Similar explicación aplica a la evolución del Módulo Tangente, superior en general en el caso numérico, con la salvedad del caso a $F = 25\%$, en que parece haber un punto de cruce entre las curvas de evolución a partir del cual el caso numérico es superior. Los ajustes

polinomiales de las figuras 4.8 y 4.9 tienen el objeto de *filtrar* las oscilaciones asociadas al efecto PLC de la medición experimental (no se han incluido estos ajustes en la figura 4.10 para $F = 35\%$ ya que la curva experimental de evolución es suficientemente clara en su comparación con la curva numérica). experimental se da un rango que refleja los tres ensayos realizados para cada material.

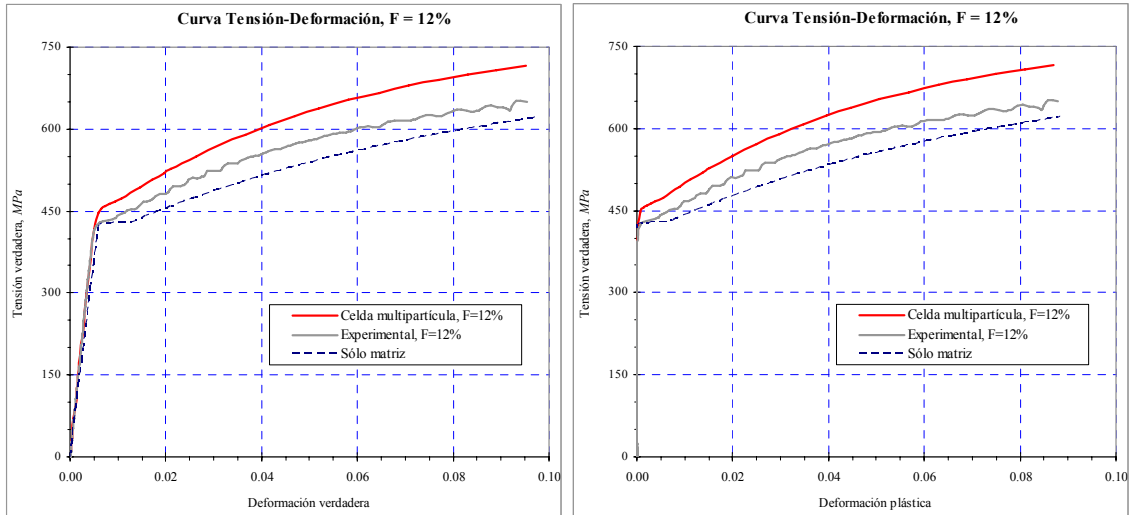


Figura 4.5: Curva tensión-deformación en términos de la deformación *total* y de la deformación *plástica* (endurecimiento del compuesto) para el material compuesto reforzado con 12% de partículas de SiC.

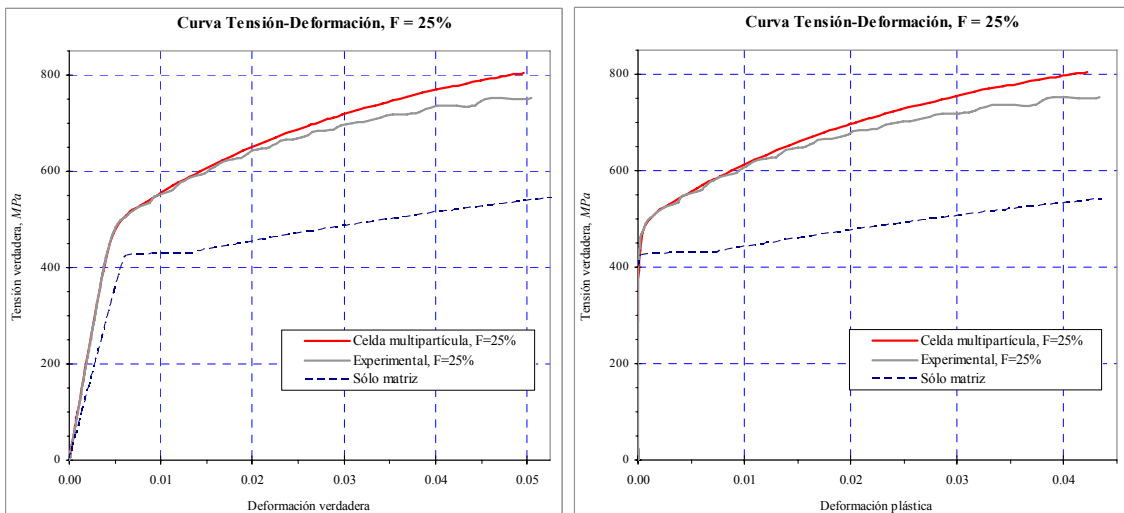


Figura 4.6: Curva tensión-deformación en términos de la deformación *total* y de la deformación *plástica* (endurecimiento del compuesto) para el material compuesto reforzado con 25% de partículas de SiC.

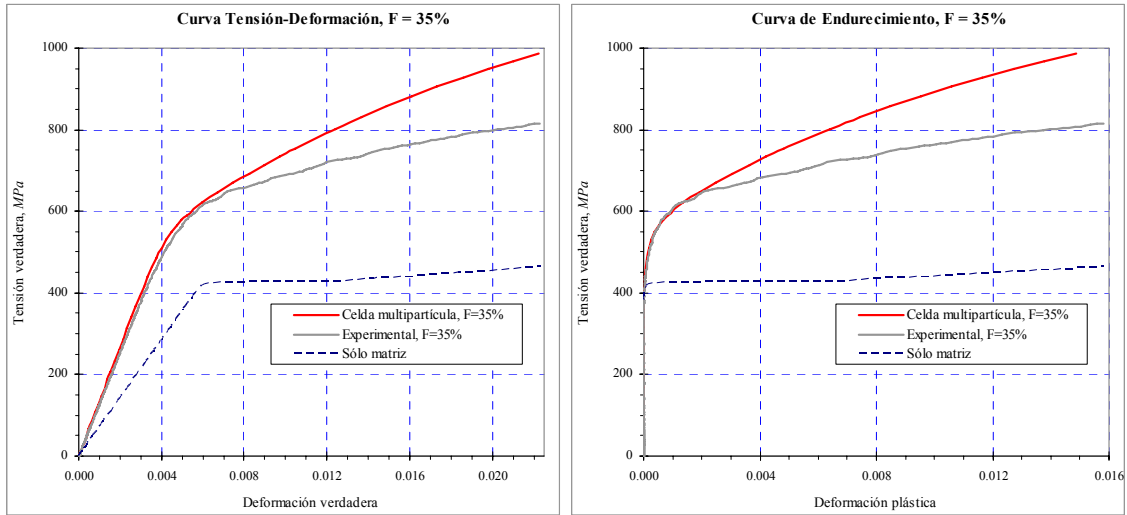


Figura 4.7: Curva tensión-deformación en términos de la deformación *total* y de la deformación *plástica* (endurecimiento del compuesto) para el material compuesto reforzado con 35% de partículas de SiC.

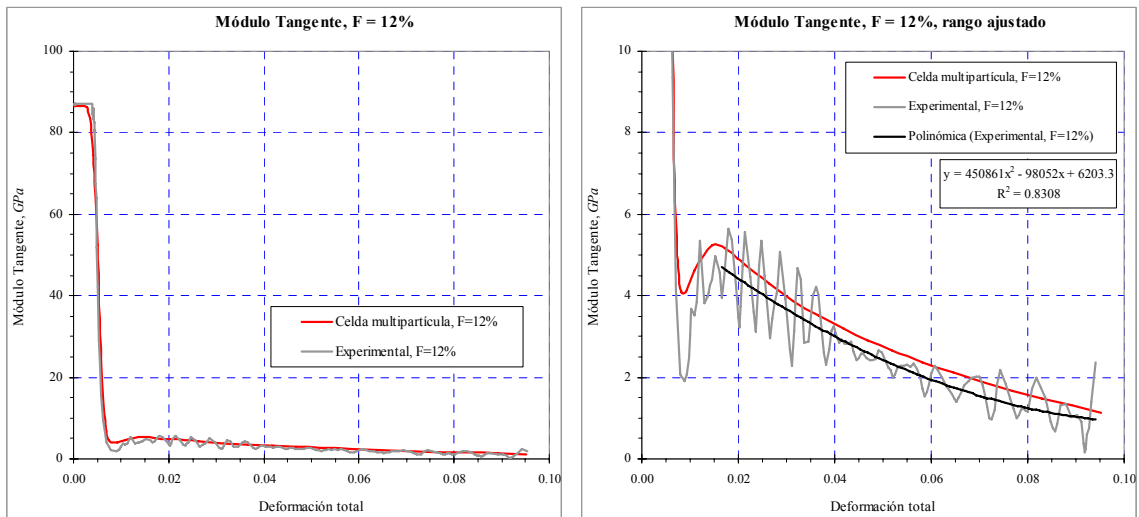


Figura 4.8: Evolución del Módulo Tangente con la deformación *total*, en escala completa y ajustada, para el material compuesto reforzado con 12% de partículas de SiC.

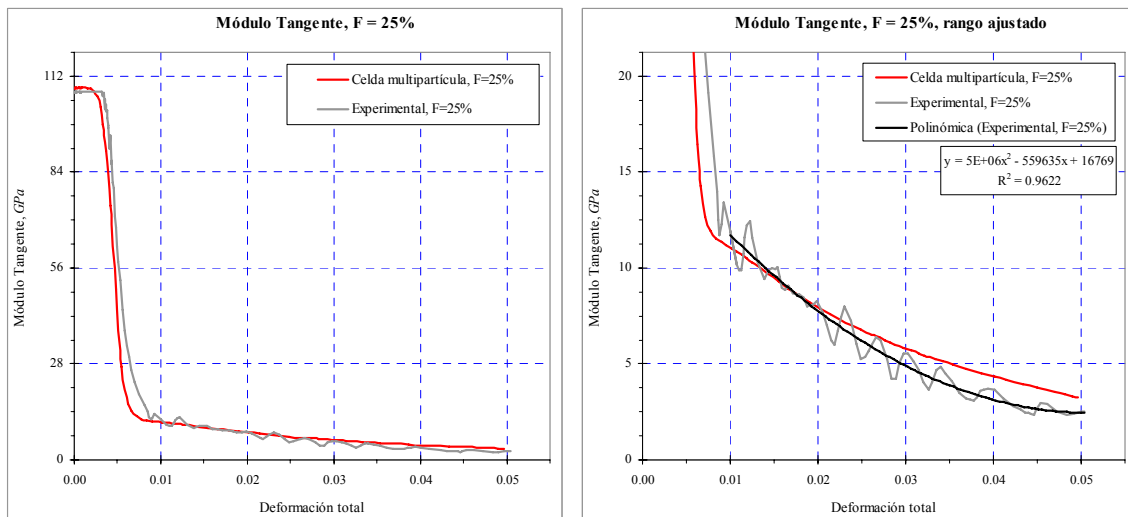


Figura 4.9: Evolución del Módulo Tangente con la deformación *total*, en escala completa y ajustada, para el material compuesto reforzado con 25% de partículas de SiC.

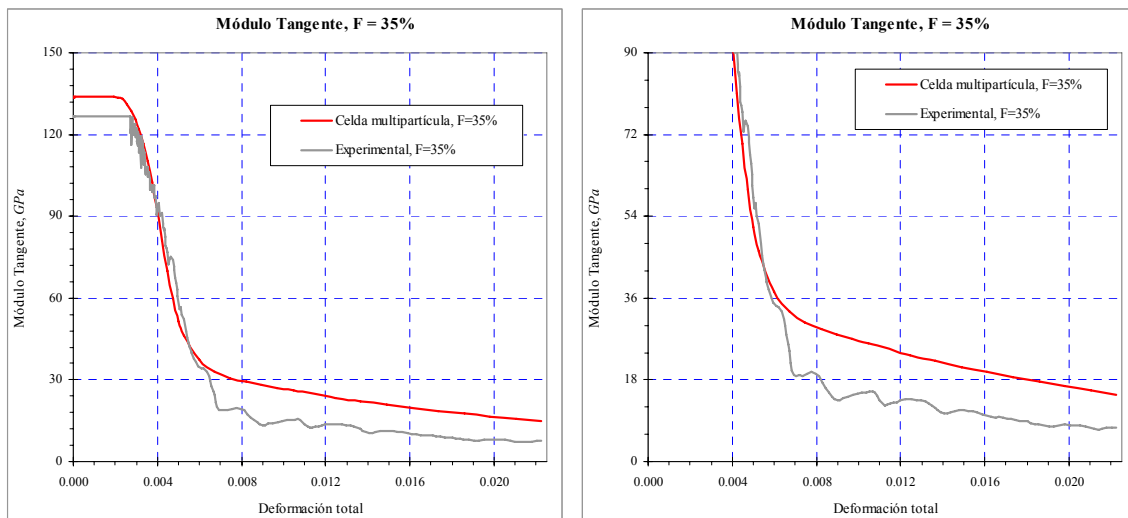


Figura 4.10: Evolución del Módulo Tangente con la deformación *total*, en escala completa y ajustada, para el material compuesto reforzado con 35% de partículas de SiC.

Capítulo 5

Determinación de Constantes Elásticas

En el presente capítulo se aborda el problema de la caracterización del comportamiento mecánico de materiales reforzados con partículas, en régimen elástico lineal, mediante el uso de modelos numéricos de celda multipartícula.

Específicamente, se estudia la influencia que los parámetros microestructurales del compuesto (fracción volumétrica, esbeltez, orientación de partícula e isotropía geométrica) tienen sobre sus constantes elásticas. Recurriendo a la ecuación de Halpin-Tsai, se extienden los resultados desde los valores puntuales de fracción volumétrica utilizados a un rango continuo entre 0 y 30%.

5.1 Metodología y Escenarios Microestructurales

Si L/L_m es una determinada constante elástica de interés del material compuesto normalizada por la constante correspondiente de la fase matriz, se considera, en el caso más general, que L/L_m es función de la fracción volumétrica F , de la microestructura (a través de la disposición, forma y esbeltez del refuerzo) y de alguna medida del *contraste* entre las propiedades de las fases, por ejemplo, L_p/L_m . Este estudio sin embargo, se concentra únicamente en la influencia de los parámetros microestructurales sobre L/L_m , considerando a F , R y la *orientación* de partículas como variables independientes. Todos los resultados que se obtienen en los apartados 5.2 a 5.4 están referidos a un valor único de L_p/L_m . Posteriormente, en el apartado 5.5 se muestra una extensión de los resultados a otros valores de la relación de contraste.

Con este objetivo, se confeccionó un conjunto de 18 *tipos microestructurales* caracterizados, cada uno, por una combinación de fracción volumétrica de refuerzo F , esbeltez R de partícula y condición de orientación. Se consideró tres fracciones de refuerzo ($F = 10\%$, 20% y 30%), tres valores de esbeltez (partículas planas con $R=1/3$, cúbicas con $R=1$ y largas con $R=3$) y dos condiciones posibles y *extremas* para la orientación de las partículas: orientación completamente aleatoria de cada partícula en la celda, o bien, orientación completamente restringida, de modo que todas las partículas son paralelas al eje de carga. En cada celda multipartícula se incluyó un total de 40 partículas de refuerzo. Ejemplos de celdas con partículas en orientación aleatoria o restringida pueden verse en las figuras 3.6 a 3.9 de la sección 3.1.

Como se ha indicado, de los 18 *tipos microestructurales* estudiados 9 corresponden a partículas con orientación aleatoria y 9 a microestructuras con partículas ordenadas. Por otra parte, de los 18 *tipos* estudiados, 12 corresponden a microestructuras geoméricamente isótropas, mientras que los 6 restantes presentan microestructuras parcialmente anisótropas:

- a) Son geoméricamente isótropos los 9 *tipos* con orientación completamente aleatoria de partículas, con independencia del valor considerado para F y R . Esto es así exclusivamente por el elevado número de partículas en la celda ($N = 40$): con esta configuración geométrica no se verifica isotropía si hay un número pequeño de partículas en la celda.
- b) Son geoméricamente isótropos también los 3 *tipos microestructurales* con orientación restringida de partículas y esbeltez $R=1$. La razón es la misma que en el caso anterior, además del hecho de que, puesto cada partícula en la celda es un cubo, es por lo tanto

isótropa con respecto a cualquier sistema local de coordenadas situado en su centro de gravedad.

- c) Presentan anisotropía geométrica los 6 *tipos* con partículas de orientación restringida para $R \neq 1$, es decir, $R=1/3$ y $R=3$ (ver figuras 3.8 y 3.6 para ejemplos de este tipo de geometrías). La pérdida de isotropía geométrica se corresponde generalmente (aunque con excepciones) con una pérdida de isotropía en la respuesta del compuesto frente a sollicitación mecánica, representada por la diferenciación de sus constantes elásticas según el eje macroscópico de carga.

Con el objeto de considerar la posible variabilidad de los resultados debida a la propia naturaleza aleatoria del proceso de generación de celdas multipartícula, para cada *tipo microestructural* fueron construidas y ensayadas numéricamente tres celdas. La sollicitación mecánica impuesta fue de tracción uniaxial hasta una deformación macroscópica del 0,5% en todos los casos. Además, los *tipos* no isótropos fueron ensayados en cortadura pura.

En el caso particular de los 12 *tipos* microestructurales isótropos, se ha considerado que ensayar una celda en las tres direcciones ortogonales X , Y y Z tiene el mismo valor estadístico que ensayar tres celdas diferentes pero del mismo *tipo*, a lo largo de un solo eje, por ejemplo el eje X . Debido a esta equivalencia estadística, las tres simulaciones para el análisis de variabilidad de estos 12 *tipos* se realizaron con un única celda para cada tipo, ensayada en las tres direcciones ortogonales, de lo que resultaron 36 simulaciones.

A diferencia de lo anterior, para los 6 *tipos* anisótropos, una observación cuidadosa de la geometría de estas microestructuras sugiere que la respuesta mecánica en tracción uniaxial a lo largo de los ejes Y y Z son equivalentes estadísticamente entre sí y diferentes de la respuesta a lo largo del eje X . Análogamente, se sugiere equivalencia estadística entre la respuesta en cortadura pura en los planos XY y XZ . Esto fue confirmado mediante cálculos preliminares con celdas simplificadas (con menos partículas y mallas menos refinadas). En la práctica, dada la independencia en el comportamiento a lo largo del eje X , se confeccionó – con vistas al análisis de variabilidad– 3 celdas para cada uno de los 6 *tipos*, siendo cada una ensayada en tracción simple a lo largo de los ejes X e Y , así como en cortadura pura en el plano XY , de lo que resultaron $6 \times 3 \times 3 = 54$ simulaciones.

En todos los casos, de las tres simulaciones para cada *tipo microestructural* se obtuvo el valor promedio, la desviación Standard y los valores mínimo y máximo de cada una de las constantes elásticas de interés. El módulo de elasticidad del compuesto se obtuvo como pendiente de la curva tensión-deformación macroscópica mientras que el módulo de Poisson

se obtuvo del cociente entre la deformación longitudinal *prescrita* sobre la celda y la deformación normal transversal *resultante* de las simulaciones.

Además, en el caso de los 12 tipos geoméricamente isótropos, a partir de los valores obtenidos para E y ν se obtuvo valores para el módulo de compresibilidad K y el módulo de cortadura G del material compuesto.

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad ; \quad G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (5.1)$$

En las 90 simulaciones el comportamiento constitutivo de ambas fases sólidas fue de tipo lineal elástico, con las constantes elásticas indicadas en la tabla 4.1 (sección 4.3). Esto implica que se ha usado un único valor de *contraste* entre las propiedades de las fases, como se indicaba al principio de este apartado.

En cuanto a las mallas utilizadas, se utilizó una cantidad de elementos finitos lo más parecida posible en la discretización de las celdas. Cabe destacar que este parámetro (o, equivalentemente, el tamaño medio de elemento finito) no es controlable de un modo determinista. En las rutinas de mallado, se prescribió un tamaño de elemento al inicio del proceso de mallado igual a 1/20 de la longitud de la arista de la celda, siendo los algoritmos Delunay de triangulación (o tetrahedralización) desde aristas hacia el interior de caras y desde caras hacia el interior de volúmenes los encargados de refinar más o menos la densidad de malla, de acuerdo a las características de la microestructura (cercanía entre partículas, cercanía de vértices o aristas de partículas a caras de la celda, etc.). Para este valor inicial de tamaño de elemento se obtuvo celdas de entre 70000 y 122000 elementos tetraédricos cuadráticos, incluyendo entre 98500 y 130000 nodos.

5.2 Resultados para Tipos Microestructurales Isótropos

Los resultados para los *tipos microestructurales isótropos* se presentan en la figura 5.1, para el módulo de Elasticidad, coeficiente de Poisson y los módulos de Compresibilidad y Cortadura. En esta figura, los puntos representan promedios mientras que las barras de error representan los valores máximos y mínimos extraídos de las 3 simulaciones asociadas a cada *tipo*.

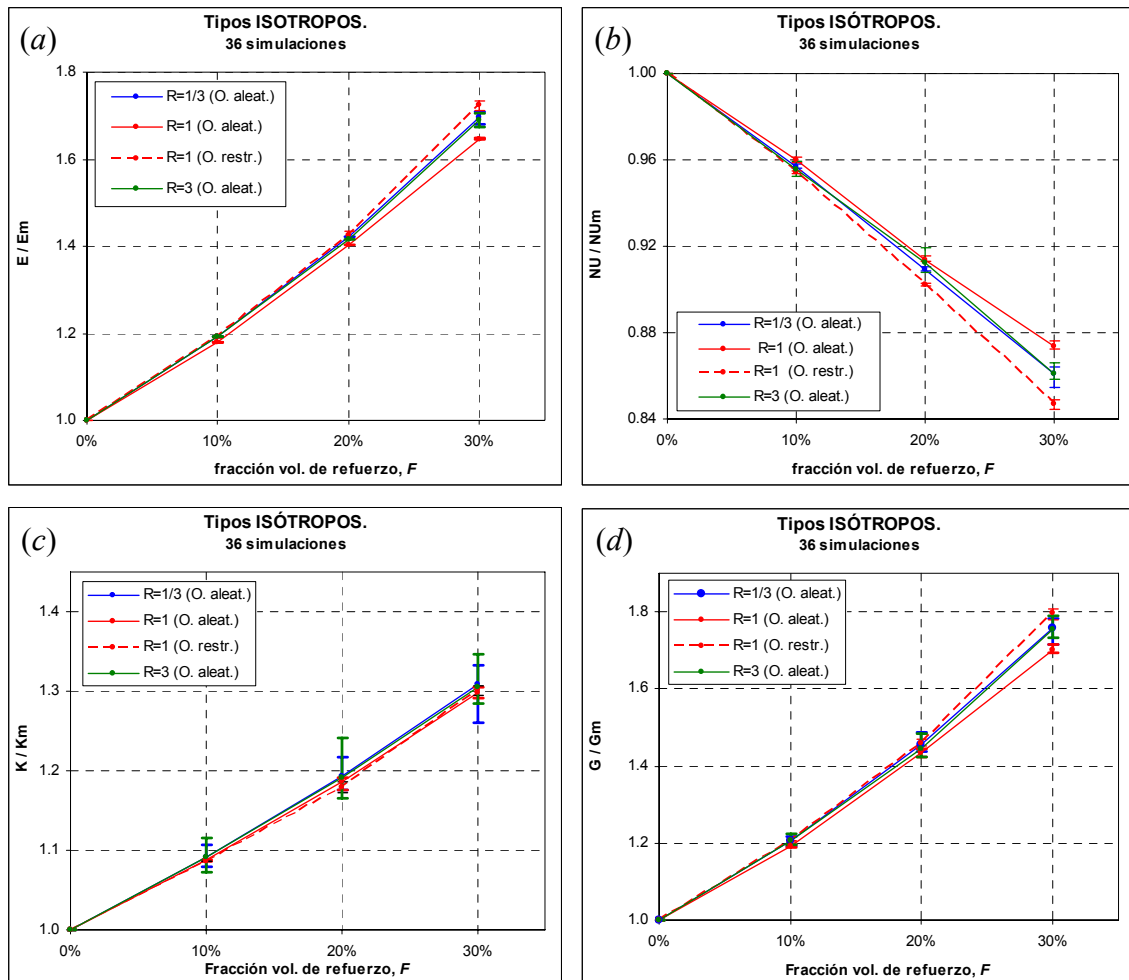


Figura 5.1: Módulo de Elasticidad (a), coeficiente de Poisson (b), módulo de Compresibilidad (c) y módulo de Cortadura (d) del compuesto obtenidos numéricamente, normalizados por el valor correspondiente a la fase matriz.

Observaciones:

- De las figuras 5.1.a y 5.1.b se deduce que tanto para el módulo de elasticidad E como para el coeficiente de Poisson ν , las desviaciones con respecto al promedio –debidas a la naturaleza aleatoria del proceso de generación de celdas– no son significativas, siendo la cuantía de la desviación pequeña en relación al promedio.
- Como se esperaba, E es creciente con la fracción volumétrica de partículas mientras que ν es decreciente, tendencia consistente con datos de la literatura para otras geometrías de partícula (Segurado, 2002; Chawla y otros, 2006).
- En el caso de las curvas para $R=1$ se observa gran influencia de la *condición de orientación* sobre E y ν , resultado llamativo tratándose en ambos casos de

microestructuras isótropas: E es mayor si la orientación de partículas está restringida mientras que ν , por el contrario, es mayor si la orientación es aleatoria.

- Por otra parte, las curvas para E y ν correspondientes a las dos esbelteces extremas ($R=1/3$ y $R=3$) están prácticamente superpuestas entre sí, lo que, sin embargo, no implica una independencia de estas variables con R , ya que estas curvas están alejadas de las dos curvas para esbeltez intermedia $R=1$. La cuantía de este alejamiento, aunque pequeña para $F \leq 20\%$, es creciente con F .
- En el caso de los módulos de Compresibilidad K y Cortadura G , se recuerda que ambas son variables derivadas, calculadas a partir de E y ν . Debido a esto, las desviaciones observables en las figuras 5.1.c y 5.1.d no son sólo resultantes de la naturaleza aleatoria del proceso de generación de celdas sino también del tipo de interacción entre la desviaciones propias de las variables originales, interacción que, a través de las expresiones (5.1), es distinta para K y G .
- En el caso particular de K (figura 5.1.c), se observa gran dispersión en los resultados asociados a $R=1/3$ y $R=3$ en comparación con los dos casos para $R=1$. En cualquier caso, los promedios para esta variable resultaron todos muy cercanos entre sí, evidenciando que, en sentido promedio, K depende casi exclusivamente de F para todas las microestructuras isótropas.
- En el caso del módulo de Cortadura, se puede observar que, aunque ligeramente amplificada, las *tendencias* de evolución de G con F para todos los tipos microestructurales (fig. 5.1.d) son muy similares a aquellas correspondientes al módulo de elasticidad E (fig. 5.1.a).

5.3 Resultados para Tipos Microestructurales Transversalmente Isótropos

El tipo de anisotropía exhibida por las microestructuras con partículas de orientación restringida en esbelteces de $R=1/3$ y $R=3$ corresponde a la denominada *isotropía transversal*, que es un caso particular dentro de los materiales *ortotrópicos*. Los materiales con isotropía transversal se caracterizan por 5 constantes elásticas independientes y 2 constantes elásticas derivadas (a diferencia de 9 constantes independientes para materiales ortotrópicos generales o de 21 constantes independientes para materiales con anisotropía general).

Con el objeto de establecer tanto la notación como el método de extracción de resultados, se presenta a continuación la matriz de flexibilidad de este tipo de materiales, así como la especificación de las constantes independientes y derivadas.

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/E_x & -\nu_{px}/E_p & -\nu_{px}/E_p & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{xp}/E_x & \boxed{1/E_p} & \boxed{-\nu_p/E_p} & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{xp}/E_x & \boxed{-\nu_p/E_p} & \boxed{1/E_p} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2G_{xp} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{1/2G_p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2G_{xp} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{Bmatrix} \quad (5.2)$$

Hay 5 constantes independientes: $E_x, E_p, \nu_{xp}, \nu_p$ y G_{xp}

Hay 2 constantes derivadas: ν_{px} y G_p

Observaciones:

- Se ha resaltado las componentes de la matriz que definen el comportamiento isotrópico en el plano transversal YZ.
- Nótese que en general $\nu_{xp} \neq \nu_{px}$, aunque debe cumplirse la simetría de la matriz, de modo que, necesariamente, $\nu_{px} = \frac{E_p}{E_x} \nu_{xp}$.

La determinación de estas 7 propiedades se realizó mediante tres ensayos numéricos:

(A) Ensayo de tracción 1-axial en eje X:

$$E_x = \frac{\sigma_x}{\varepsilon_x} = \frac{\text{medida numérica}}{\text{medida numérica}}$$

$$\nu_{xp} = \frac{-\varepsilon_y}{\sigma_x/E_x} = \frac{-\varepsilon_y}{\varepsilon_x} = \frac{\text{medida numérica}}{\text{medida numérica}}$$

(B) Ensayo en tracción 1-axial en eje Y:

$$E_p = \frac{\sigma_p}{\varepsilon_y} = \frac{\text{medida numérica}}{\text{medida numérica}}$$

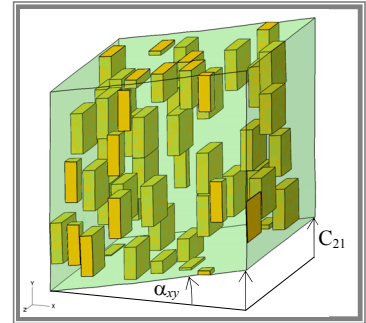
$$\nu_p = \frac{-\varepsilon_z}{\sigma_y/E_p} = \frac{-\varepsilon_z}{\varepsilon_y} = \frac{\text{medida numérica}}{\text{medida numérica}}$$

(C) Ensayo en cortadura plano XY:

siendo α_{xy} la deformación angular, entonces, para una celda de arista unitaria se tiene que:

α_{xy} pequeño $\Rightarrow \varepsilon_{xy} \approx \frac{1}{2} C_{21}$, con C_{21} prescrito (ver 3.3.3.b.ii para interpretación de C_{21}).

$$\Rightarrow G_{xp} = \frac{\sigma_{xy}}{2\varepsilon_{xy}} = \frac{\text{medida numérica}}{\text{medida numérica}}$$



(D) Constantes derivadas: $\nu_{px} = \frac{E_p}{E_x} \nu_{xp}$; $G_p = \frac{E_p}{2(1+\nu_p)}$

Los resultados que se presentan en la figura 5.2 han sido clasificados de modo que las constantes elásticas obtenidos del ensayo (A) $-E_x$ y ν_{xp} y del ensayo (C) $-G_{xp}$ se presentan normalizados por los respectivos valores correspondientes a la fase matriz E_m , ν_m y G_m , mientras que el resto de constantes queda completamente determinado mediante la introducción de tres medidas de la anisotropía:

- $M_1 = \frac{E_p}{E_x}$ que, por la condición de simetría, también satisface $M_1 = \frac{\nu_{px}}{\nu_{xp}}$ (5.3.a)

- $M_2 = \frac{\nu_p}{\nu_{xp}}$ (5.3.b)

- $M_3 = \frac{G_p}{G_{xp}}$ (5.3.c)

Observaciones:

- Siguiendo una tendencia similar a la de los tipos isótropos, el módulo de elasticidad E_x crece con la fracción volumétrica de refuerzo, mientras que el coeficiente de Poisson ν_{xp} decrece con F . Sin embargo, a diferencia de los tipos isótropos, se evidencia ahora una fuerte dependencia de estas constantes con la esbeltez R de partícula.
- La primera medida de anisotropía, M_1 , manifiesta una dependencia tanto de la fracción volumétrica como de la esbeltez, de forma que esta variable crece con F si las partículas son achatadas ($R=1/3$), pero decrece con F si son alargadas ($R=3$), siendo ambas evoluciones no lineales y prácticamente simétricas con respecto al valor de M_1 correspondiente a una condición isótropa ($M_1=1$).

- En el caso de M_2 , la figura 5.2.d también muestra una dependencia simultanea de F y R , aunque opuestas en dirección: M_2 disminuye con F para $R=1/3$, pero aumenta con F para $R=3$, siendo la dependencia con F aproximadamente lineal para ambas esbelteces. A diferencia de M_1 , si bien se verifica que $M_2 (R=1/3) \leq 1 \leq M_2 (R=3)$ para todo valor de F , el valor unitario de $M_2 = 1$ ya no define una línea de simetría.
- El módulo de Cortadura G_{xp} (fig. B.e), medido en simulación numérica en cortadura, resulta ser creciente con F , tal como en los casos isótopos. G_{xp} también es fuertemente dependiente de la esbeltez.
- De la figura 5.2.f, se observa que para $R=1/3$, M_3 es mayor que la unidad y creciente con F en forma no lineal. Sin embargo, en el caso de $R=3$ se verifica que M_3 varía muy poco con F , en forma creciente, manteniendo valores cercanos a la unidad. Este resultado inesperado implica que para $R=3$ la respuesta mecánica a sollicitación en cortadura pura es prácticamente isótropa. No está claro el grado de generalidad de este resultado, aunque podría tratarse de una *casualidad* asociada al valor del contraste entre las propiedades elásticas de las fases constituyentes utilizado en este estudio que, como se indicó en la introducción, tiene un valor único.
- Un análisis de la influencia de la esbeltez para los tipos con isotropía transversal resulta incompleto si sólo se consideran las esbelteces extremas $R=1/3$ y $R=3$, representadas en las figuras 3.8 y 3.9. De lo expresado en la introducción del apartado 5.1 se deduce que variaciones en la esbeltez producen pérdidas de isotropía sólo si las partículas tienen orientación restringida. Así, los tipos microestructurales con $R=1$ y orientación *restringida* han sido catalogados anteriormente como tipos isótopos (y sus resultados presentados en la fig. 5.1). Sin embargo, como estos *tipos* poseen igual *restricción de orientación* que los tipos con isotropía transversal (caracterizados por $R=1/3$ y $R=3$ con orientación restringida), tiene sentido comparar sus resultados. Expresado de otra manera, los *tipos* con $R=1$ y orientación *restringida* podrían ser también catalogados de transversalmente isótopos, cuyas tres medidas de anisotropía son $M_1 = M_2 = M_3 = 1$. En este contexto, una inspección de las figuras 5.1 y 5.2 revela las siguientes dependencias con respecto a R , para cada valor fijo de F :

$$E_x (R=3) > E_x (R=1) > E_x (R=1/3) \quad \text{con} \quad M_1 (R=1/3) \geq M_1 (R=1) = 1 \geq M_1 (R=3)$$

$$v_{xp} (R=3) \approx v_{xp} (R=1) > v_{xp} (R=1/3) \quad \text{con} \quad M_2 (R=3) \geq M_2 (R=1) = 1 \geq M_2 (R=1/3)$$

$$G_{xp} (R=1) > G_{xp} (R=3) > G_{xp} (R=1/3) \quad \text{con} \quad M_3 (R=1/3) \geq M_3 (R=1) = 1 \approx M_3 (R=3)$$

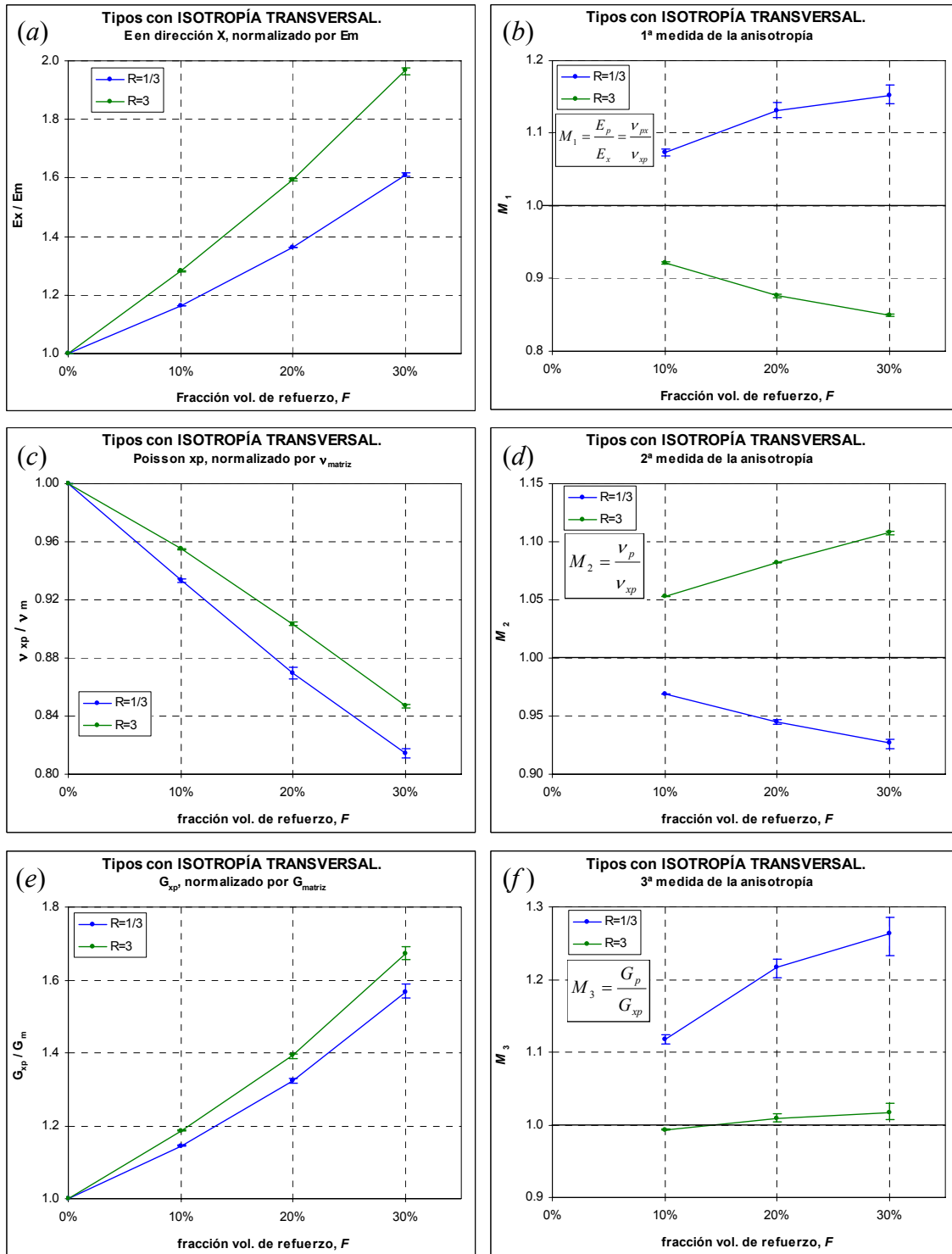


Figura 5.2: Constantes elásticas del compuesto obtenidas de “ensayo A” (a, c) y del “ensayo B” (e), con las correspondientes medidas de anisotropía (b, d y f).

5.4 Aproximación de Resultados: Ecuación de Halpin-Tsai

En los apartados 5.2 y 5.3 se obtuvo valores de constantes elásticas del material compuesto concluyéndose sobre su dependencia de los parámetros microestructurales F , R y *restricción de orientación* a partir de valores puntuales de estos parámetros. Con el objeto de extender los resultados obtenidos a otras fracciones volumétricas de refuerzo y otras esbelteces, se estudió la aplicabilidad de la ecuación de Halpin-Tsai (5.4) para representar las propiedades elásticas del compuesto en función de su microestructura. En la expresión de esta ecuación participan como variables independientes (i) una medida del *contraste* entre las propiedades elásticas de las fases constituyentes, (ii) la fracción volumétrica de refuerzo F , así como (iii) el parámetro escalar s que se relaciona con la forma y orientación del refuerzo.

$$\frac{\ell}{\ell_m} = \frac{1 + s\eta F}{1 - \eta F} \quad \text{con} \quad \eta = \eta\left(\frac{\ell_p}{\ell_m}; s\right) = \frac{\frac{\ell_p}{\ell_m} - 1}{\frac{\ell_p}{\ell_m} + s} \quad (5.4)$$

donde: L : constante elástica de interés en el compuesto (L puede ser E , K o G)
 L_i : constante elástica de interés en la fase i , con $i = \text{partículas, matriz}$.

El parámetro s está relacionado con la forma y orientación del refuerzo de una forma que varía según la condición de carga y de cuál es la constante elástica en estudio. En el caso particular de partículas prismáticas con caras paralelas a las de la celda, como las representadas en las figuras 3.8 y 3.9, esto es, sin aleatoriedad en su orientación, Halpin y Kardos (1976) proponen para s diferentes expresiones en función de la constante elástica a calcular. Estas se reproducen en la tabla 5.1, particularizadas para el tipo de partículas utilizadas en este trabajo y en notación compatible con la matriz de flexibilidad transversalmente isótropa presentada en el apartado anterior.

E_x	$s = 2(l_x/l_y) = 2R$
E_y, E_z ($= E_p$)	$s = 2$
G_{xy}, G_{xz} ($= G_{xp}$)	$s = (l_x/l_y)^{\sqrt{3}} = R^{\sqrt{3}}$
G_{yz} ($= G_p$)	$s = 1$

Tabla 5.1: parámetro s de Halpin-Tsai para partícula sin aleatoriedad en su orientación, donde l_x, l_y, l_z son las aristas de la partícula en cada dirección, con $l_y = l_z$, de modo que $R = l_x/l_y$.

Halpin y Kardos obtuvieron las expresiones contenidas en la tabla 5.1 mediante ajuste a soluciones analíticas obtenidas por Foye (1966) para casos con $R > 1$, quedando pendiente su verificación en el caso $R \leq 1$. Por otra parte, si la orientación de todas las partículas es completamente aleatoria no hay expresiones analíticas para s , debiendo encontrarse su valor mediante ajuste a valores experimentales o numéricos.

En lo que sigue, se utilizará la expresión de Halpin-Tsai para aproximar los módulos E y G de los 18 *tipos microestructurales* estudiados en el apartado anterior con el triple objetivo de (a) verificar la validez de las expresiones de la tabla 5.1 revisando si procede sus valores, (b) aportar valores de s para tipos con partículas ordenadas en los casos con $R < 1$ y (c) aportar valores de s para *tipos* con partículas de orientación aleatoria. Tal como en el apartado anterior, se clasifica los resultados según sus características de isotropía. Las figuras 5.3 y 5.4 muestran en línea segmentada las soluciones FEM (equivalentes a las de las figuras 5.1 y 5.2) y, en línea continua, la gráfica de la ecuación de Halpin-Tsai, trazada con un valor de s que produce buen ajuste a la solución numérica.

La tabla 5.2 reúne los valores de s para todos los tipos microestructurales que son susceptibles de ser comparados con los resultados previos de Halpin-Tsai-Kardos expuestos en la tabla 5.1, es decir, los 6 *tipos* con isotropía transversal (orientación de partícula restringida), así como los 3 *tipos* isótropos con $R=1$ y partículas de orientación restringida. La notación es compatible con la de la matriz de flexibilidad presentada en el apartado anterior, incluso en el caso del los 3 *tipos* isótropos, para el que se ha adoptado simplemente igualdad de valores en cada dirección. Por su parte, la tabla 5.3 agrupa los valores para s correspondientes a tipos microestructurales con orientación aleatoria de partículas (y por lo tanto, isótropos), para los que no hay soluciones previas de referencia.

	R=1/3 Orientación restringida (isotropía transversal)	R=1 Orientación restringida (isotropía)	R=3 Orientación restringida (isotropía transversal)
E_x	H.T.K.: $s = 0.667$ FEM: $s = 1.4$	H.T.K.: $s = 2$ FEM: $s = 2.2$	H.T.K.: $s = 6$ FEM: $s = 5.5$
E_y, E_z ($= E_p$)	H.T.K.: $s = 2$ FEM: $s = 3.9$		H.T.K.: $s = 2$ FEM: $s = 1.8$
G_{xy}, G_{xz} ($= G_{xp}$)	H.T.K.: $s = 0.149$ FEM: $s = 0.9$	H.T.K.: $s = 1$ FEM: $s = 2.3$	H.T.K.: $s = 6.705$ FEM: $s = 1.5$
G_{yz} ($= G_p$)	H.T.K.: $s = 1$ FEM: $s = 4.3$		H.T.K.: $s = 1$ FEM: $s = 1.65$

Tabla 5.2: valores de parámetro s para la ecuación de Halpin-Tsai. **H.T.K.:** valores presentados por Halpin y Kardos (1976), calculados según la tabla 5.1. **FEM:** valores obtenidos en este trabajo mediante análisis numérico de celdas multipartícula.

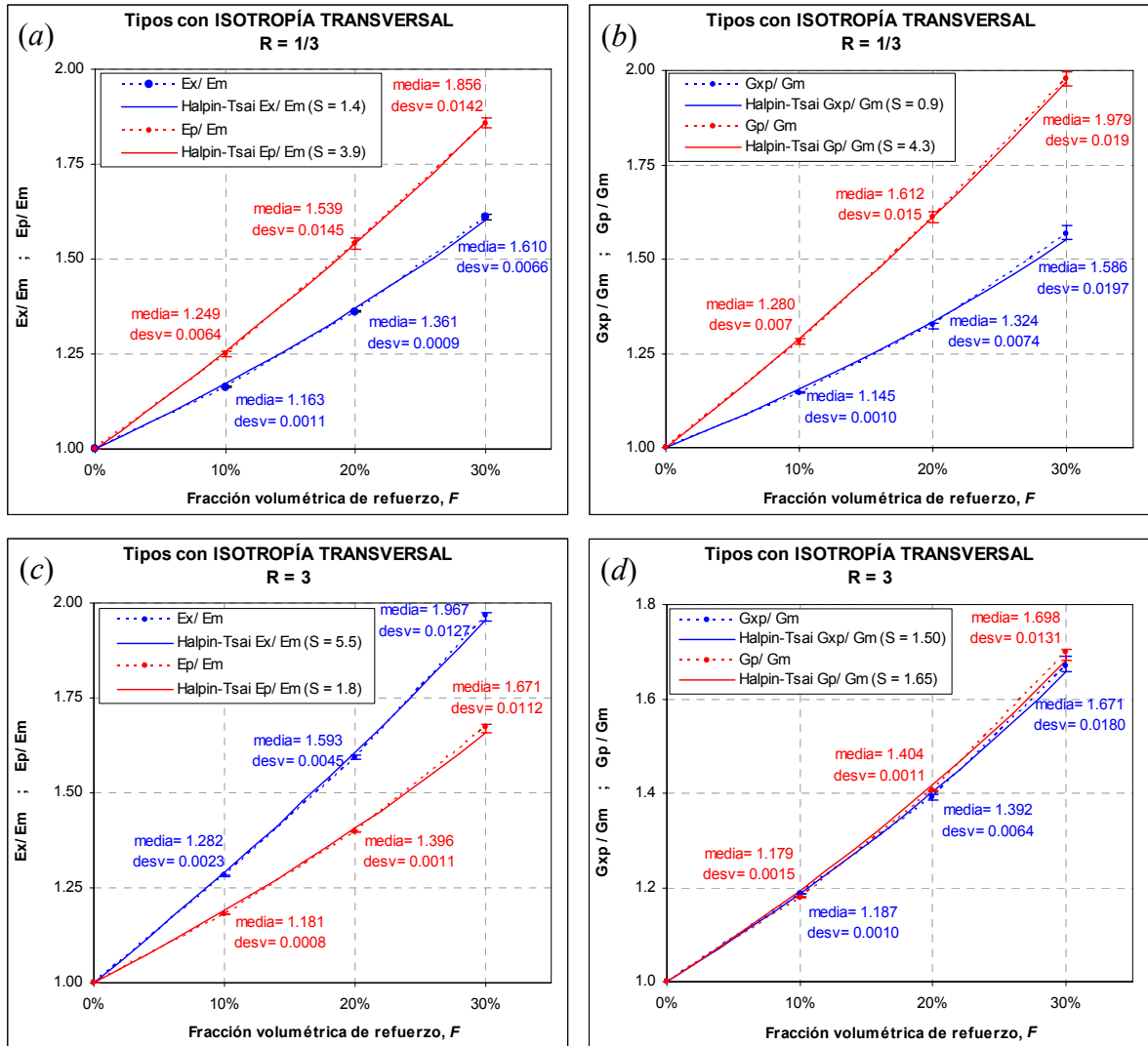


Figura 5.3: aproximación mediante la ecuación de Halpin-Tsai para los tipos con isotropía transversal. Izquierda: módulo de Elasticidad axial y transversal normalizados. Derecha: Módulos de Cortadura en el plano principal XY y en el plano transversal YZ.

	R=1/3 Orientación aleatoria (isotropía)	R=1 Orientación aleatoria (isotropía)	R=3 Orientación aleatoria (isotropía)
<i>E</i>	H.T.K.: <i>no disp.</i> FEM: <i>s</i> = 2.05	H.T.K.: <i>no disp.</i> FEM: <i>s</i> = 1.70	H.T.K.: <i>no disp.</i> FEM: <i>s</i> = 2.00
<i>G</i>	H.T.K.: <i>no disp.</i> FEM: <i>s</i> = 2.15	H.T.K.: <i>no disp.</i> FEM: <i>s</i> = 1.80	H.T.K.: <i>no disp.</i> FEM: <i>s</i> = 2.10

Tabla 5.3: valores de parámetro *s* para la ecuación de Halpin-Tsai obtenidos en este trabajo mediante análisis numérico de celdas multipartícula.

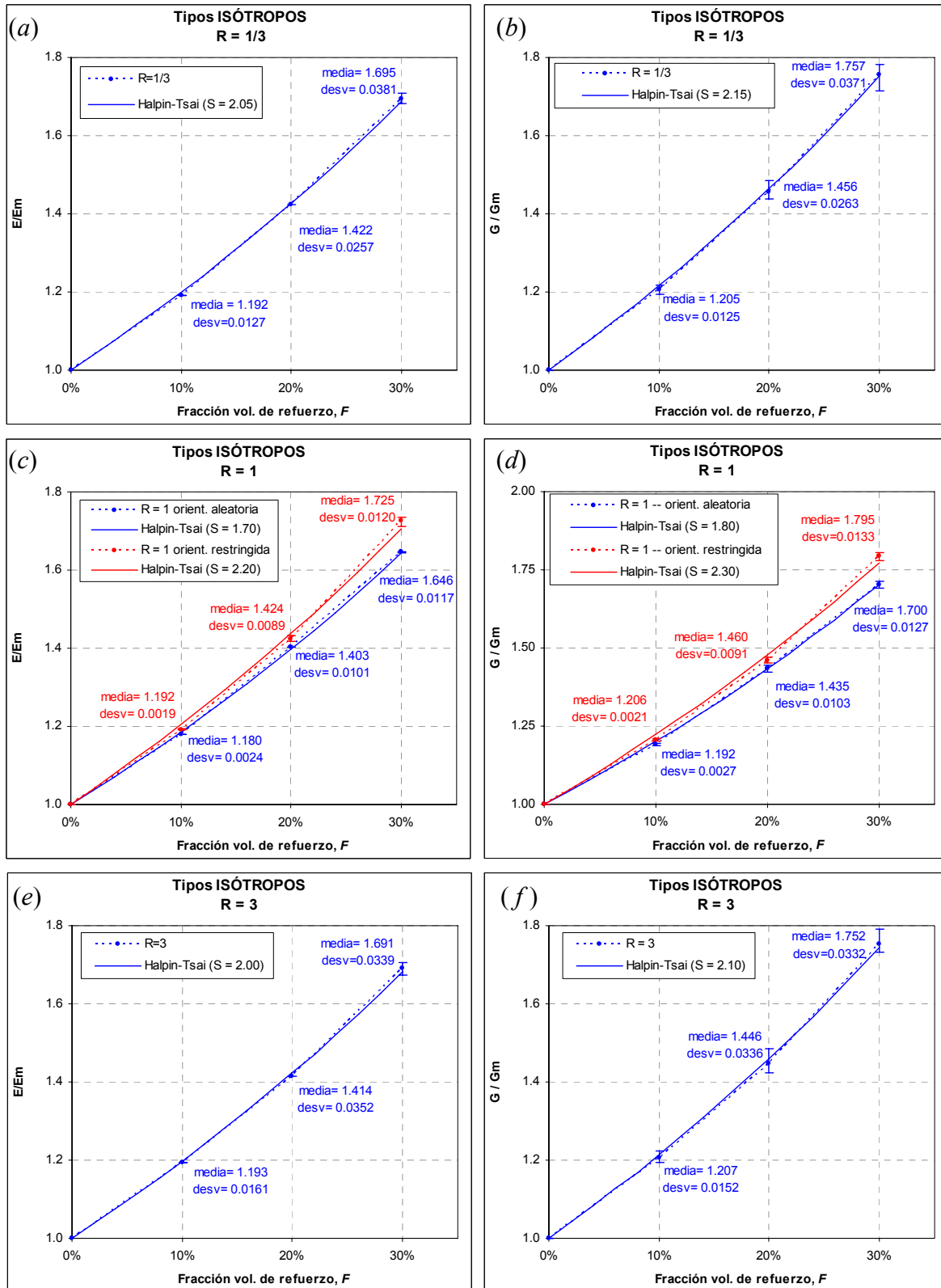


Figura 5.4: ajustes mediante la ecuación de Halpin-Tsai a tipos microestructurales isotrópos. Izquierda (a, c y e): aproximación al Módulo Elástico normalizado. Derecha (b, d y f): aproximación al Módulo de Cortadura normalizado.

Observaciones:

- En las figuras 5.3 y 5.4 se aprecia un buen ajuste entre la ecuación de Halpin-Tsai y los resultados FEM. En casi todos los casos el error cometido por la aproximación H-T es de una cuantía igual o menor que la variabilidad de los resultados numéricos debida a la propia naturaleza aleatoria del proceso de generación de celdas multipartícula.
- Puede considerarse que los valores presentados en las tablas 5.2 y 5.3 para el parámetro de Halpin-Tsai son fiables para fracciones volumétricas de refuerzo entre 0 y 30%. Por el contrario, el buen ajuste de la aproximación H-T no está garantizado para $F > 30\%$ -35%.
- En el caso de los módulos de elasticidad de materiales con orientación restringida, la estimación H.T.K. para s queda razonablemente confirmada sólo para $R \geq 1$, mientras que para $R=1/3$ los valores numéricos prácticamente duplican los valores H.T.K.
- Para los materiales con orientación restringida (tabla 5.2), en el caso de E_x , el parámetro s es creciente con R , mientras que en el caso del módulo transversal E_p , s es decreciente con R según la solución numérica e independiente de R según la estimación H.T.K.
- Para los materiales con orientación restringida (tabla 5.2), en el caso de los módulos de cortadura no existe buen acuerdo entre los valores H.T.K. y aquellos obtenidos mediante análisis de celdas. En el caso de G_{xp} los valores HTK son crecientes con R , mientras que los valores FEM tienen un máximo en $R=1$. Para G_p , los valores FEM son decrecientes con R , mientras que los valores HTK son independientes de la esbeltez.
- En el caso particular de $R=3$ en la tabla 5.2, los valores FEM para s correspondientes a G_{xp} y G_p son relativamente cercanos, en concordancia con las observaciones realizadas en el apartado 5.3 a propósito de la figura 5.2.b. Es decir, materiales con orientación restringida de partículas y esbeltez *grande* muestran una respuesta aproximadamente isótropa frente a sollicitación mecánica en cortadura pura, al menos para materiales que exhiban un contraste entre propiedades similar al estudiado en este trabajo.
- En el caso de los materiales con partículas de orientación aleatoria, en los resultados en la tabla 5.3 se observa una tendencia similar en los valores de s para E y para G , en concordancia con lo apuntado en las observaciones del apartado 5.2, referidos a la figura 5.1. Para ambas constantes elásticas el parámetro s tiene un mínimo en $R=1$ y es ligeramente mayor para G en comparación con E .

5.5 Extensión a Otros Sistemas y Fracciones Volumétricas

Como extensión del método de aproximación desarrollado en el apartado 5.4 a otros sistemas, se realizaron dos estudios adicionales, que se describen en este apartado. En ellos, los resultados etiquetados como FEM denotan resultados obtenidos de nuevas simulaciones de celdas, mientras que resultados etiquetados HT_{NUEVO} denotan resultados obtenidos mediante la predicción de Halpin-Tsai utilizando los nuevos valores de s , de las tablas 5.2 y 5.3.

En primer lugar se realizó un conjunto reducido de nuevas simulaciones FEM, con el objeto de estudiar las constantes elásticas de un material compuesto *ficticio*, cuya matriz está realizada en acero, que está reforzado con partículas prismáticas aleatoriamente orientadas de esbeltez $R=1$ con iguales fracciones volumétricas que aquellas utilizadas en el apartado 5.4. Al mismo tiempo, se utilizó la ecuación de Halpin-Tsai en conjunto con los nuevos valores de s para predecir las constantes elásticas de este nuevo material compuesto. Así, la comparación de las predicciones FEM y HT_{NUEVO} permitió evaluar la *usabilidad* de los nuevos valores del parámetro s , cuando el *contraste* entre las propiedades de la matriz y las partículas del material bajo estudio difiere del utilizado en el proceso de calibración, descrito en el apartado 5.4 (a igualdad en fracción volumétrica).

En segundo lugar, se consideraron las constantes elásticas de los materiales compuestos *reales* que fueron utilizados anteriormente en el capítulo 4, cuyos valores fueron medidos experimentalmente. Estos materiales corresponden a una aleación de aluminio reforzada con partículas de SiC, en tres fracciones volumétricas que difieren de las fracciones utilizadas en el apartado 5.4. Esto permitió evaluar la calidad del esquema de aproximación de Halpin-Tsai con los nuevos valores de s , cuando el material bajo estudio posee diferente fracción volumétrica que aquella utilizada en el proceso de calibración.

5.5.1 Acero Reforzado con Partículas de SiC.

Las propiedades elásticas consideradas para la matriz son $E_m = 210$ GPa y $\nu_m = 0,30$, valores típicos de un acero estructural. El refuerzo de partículas es SiC (tabla 4.1). En el caso de E , esto significa que la relación de contraste es de $L_i/L_m = 1,95$, contrariamente a la aleación de Al utilizada en el apartado 5.4, cuyo contraste es $L_i/L_m = 5,77$.

Las celdas multipartícula analizadas aquí representan tres escenarios microestructurales, caracterizados por partículas con orientación aleatoria, esbeltez $R=1$ en las mismas tres fracciones volumétricas utilizadas en el apartado 5.4 (10%, 20% y 30%). Puesto que éstos

son tipos microestructurales isótropos, E y ν se calcularon de simulaciones en tracción simple del modo explicado en 5.1. Luego, los valores efectivos de G y K se calcularon de E y ν de acuerdo a la ec. (5.1). Debe indicarse que las celdas utilizadas fueron exactamente las mismas que las del apartado 5.2 para los correspondientes escenarios microestructurales; sólo las propiedades elásticas asignadas a la fase matriz fueron diferentes en las nuevas simulaciones.

Se calcularon también valores de E y G a partir de la ec. (5.4) de Halpin-Tsai, utilizando los nuevos valores de s extraídos de la tabla (5.3), esto es, $s = 1,7$ para E , y $s = 1,8$ para G , cuando $R=1$.

Los valores de E y G así calculados se presentan en la tabla 5.4, en comparación con sus contrapartes obtenidas mediante las simulaciones. En ella se observa un excelente acuerdo entre las predicciones FEM y HT_{NUEVO} . Se concluye por tanto, que el esquema de aproximación basado en la ecuación de Halpin-Tsai en conjunto con los nuevos valores del parámetro s constituye un método razonable para estimar las constantes elásticas efectivas, siendo confiable, al menos, para cualquier compuesto cuyos constituyentes poseen un *contraste* entre sus propiedades comprendido entre 1,95 y 5,77 (en el caso de $R=1$ y orientación aleatoria).

	$F = 10\%$		$F = 20\%$		$F = 30\%$	
	E , GPa	G , GPa	E , GPa	G , GPa	E , GPa	G , GPa
FEM	224,9	87,2	241,0	94,4	258,0	102,1
HT_{NUEVO}	225,2	87,7	241,2	95,1	258,1	103,0
Error c/r FEM	0,10 %	0,57 %	0,08 %	0,74 %	0,04 %	0,88 %

Tabla 5.4: Comparación entre las constantes elásticas calculadas de celdas multipartícula y estimadas según el esquema HT_{NUEVO} .

5.5.2 Aleación de Al reforzado con partículas de SiC.

Como se indicara en el capítulo 4, la matriz de este compuesto es Al 6082 y el refuerzo de partículas de carburo de silicio tiene fracciones volumétricas de 12%, 25% y 35%. Las constantes elásticas de estos compuestos se midieron experimental y numéricamente; sus valores se presentan en la tabla 4.2. Nótese que el módulo de elasticidad de la matriz sin reforzar utilizado en las simulaciones de los apartados 5.2 y 5.3 del presente capítulo es precisamente el valor medido experimentalmente para la matriz sin reforzar (tabla 4.1).

Por los motivos explicados en la sección 4.3, las celdas utilizadas contenían 40 partículas de esbeltez $R=1$ y orientación completamente aleatoria en los casos de $F=12\%$ y $F=25\%$, pero sólo parcialmente aleatoria en el caso de $F=35\%$. Obsérvese que, a pesar de la aleatoriedad parcial en la orientación de las partículas, este último caso aun puede considerarse como un tipo microestructural isótropo, dado que $R=1$.

Como antes, se realizó también una predicción del módulo de elasticidad mediante el esquema HT_{NUEVO} . De acuerdo a la tabla 5.3, se utilizó $s = 1,7$ en los casos de $F=12\%$ y $F=25\%$. Dado que no se conoce un valor de s cuando la orientación de partículas es sólo parcialmente aleatoria, las predicciones para el caso de $F=35\%$ se calcularon bajo dos suposiciones extremas: (a) orientación totalmente restringida ($s = 2,2$ – tabla 5.2) y (b) orientación completamente aleatoria ($s = 1,7$ – tabla 5.3). Los resultados se muestran en la tabla 5.5, donde se ha incluido el error relativo tanto respecto de los valores experimentales como de los valores medidos numéricamente. En esta tabla muestra un excelente acuerdo entre las dos predicciones en el caso de $F=12\%$ y $F=25\%$.

En el caso particular de $F=35\%$, sin embargo, la estimación HT_{NUEVO} debe ser considerada con cuidado ya que, como se indicó en las conclusiones finales del apartado 5.4, no existen garantías de un buen ajuste de la aproximación de Halpin-Tsai para $F>30\%$. A pesar de esto, la estimación HT_{NUEVO} para el módulo de Young bajo la suposición de aleatoriedad completa ($s = 2,2$) es mucho más cercana a la medida experimental que la estimación FEM. En cambio, HT_{NUEVO} es más cercana a la estimación FEM bajo la suposición de orientación de partículas completamente restringida ($s = 2,2$), como consecuencia del valor relativamente pequeño del ángulo de apertura $\alpha=15^\circ$.

Se concluye por tanto, que el esquema de aproximación basado en la ecuación de Halpin-Tsai en conjunto con los nuevos valores del parámetro s constituye un método razonable para estimar las constantes elásticas efectivas, siendo confiable, no sólo para cualquier valor de *contraste* comprendido entre 1,95 y 5,77, sino también para cualquier fracciones volumétricas de refuerzo en un rango continuo hasta 30% (en el caso de $R=1$ y orientación aleatoria).

	Módulo de Young E , GPa			
	$F=12\%$	$F=25\%$	$F=35\%$	$F=35\%$
Estimación HT_{NUEVO}	87,1	107,6	126,3 ($s = 1,7$)	131,4 ($s=2,2$)
Error c/r FEM	0,6 %	1,0 %	5,6 %	1,9 %
Error c/r exp.	0,1 %	0,2 %	0,2 %	3,8 %

Tabla 5.5: Aproximación mediante el esquema HT_{NUEVO} , en comparación con los resultados FEM.

Capítulo 6

Comportamiento en Plasticidad

En el presente apartado se aborda el problema de la caracterización del comportamiento mecánico de PMMC's en régimen elasto-plástico. Asignando a la fase matriz un comportamiento elasto-plástico representativo de un material *abstracto* cuya ley de endurecimiento es de tipo potencial (Ramberg-Osgood), se describe el estado tenso-deformacional en el material compuesto y en sus fases constituyentes cuando el compuesto es sometido a un estado macroscópico de tracción uniaxial. Adicionalmente, se estudia la aplicabilidad del método Secante para describir analíticamente el comportamiento no lineal del material compuesto, en el caso en que las partículas de refuerzo son prismáticas y poseen orientación aleatoria.

6.1 Objetivos Generales y Metodología

Si al menos una de las fases (usualmente la fase continua o matriz) presenta un comportamiento constitutivo no lineal con deformación plástica, también el material compuesto muestra una relación constitutiva no lineal entre la tensión y la deformación macroscópicas, relación que ha de ser descrita. Este problema se aborda desde dos perspectivas. La primera de ellas consiste en efectuar una caracterización fenomenológica del comportamiento elasto-plástico efectivo mediante modelos de celda multipartícula. La segunda de ellas consiste en un estudio de la aplicabilidad del método Secante al caso de materiales reforzados con partículas prismáticas en orientación aleatoria.

En el primero de estos enfoques, esta caracterización fenomenológica se realiza en términos de los siguientes elementos, considerando una sollicitación mecánica externa de tracción uniaxial:

- La *curva de endurecimiento*, considerada como una propiedad del compuesto.
- El estado tenso-deformacional *interior* del material compuesto, así como la evolución de dicho estado durante la historia de deformación del material.
- La evolución, durante la historia de deformación, de variables energéticas de interés, asociadas al estado tenso-deformacional.

El objetivo consiste entonces en establecer mediante modelos de celda multipartícula, la influencia que los parámetros microestructurales, así como la curva de endurecimiento de la matriz, tienen sobre estos tres elementos, sin considerar el efecto del daño. Estas tres variables se obtienen de simulaciones en tracción uniaxial, en control de posición, para celdas que contienen 40 partículas.

El estudio relativo a la curva de endurecimiento, efectuado en 6.2, consiste esencialmente en un estudio *fenomenológico* de *influencias*, tendiente a establecer una relación entre la forma de la curva de endurecimiento de la fase matriz y la forma de la curva de endurecimiento del compuesto, así como el modo en que dicha relación se modifica frente a variaciones de algunos parámetros microestructurales. El estudio del segundo y tercer punto, por su parte, tratados en forma integrada en el apartado 6.3, además de dar lugar a una descripción detallada del estado tenso-deformacional *interior*, presenta la idea de *confinamiento energético*, asociada a la producción de tensiones residuales cuyo origen es puramente mecánico, en lugar de térmico.

En todos los casos, el comportamiento constitutivo asignado a las partículas fue lineal elástico con las constantes elásticas de la tabla 4.1, correspondientes a SiC. Las constantes elásticas de la fase matriz se establecieron en $E=210\text{GPa}$ y $\nu=0.3$, valores típicos de un acero estructural.

La curva de endurecimiento de la matriz se ha asignado mediante la subrutina de usuario UHARD siguiendo la metodología descrita en 3.3.4, esto es, definiendo expresiones analíticas para las funciones F_1 y F_2 , que dan, respectivamente, el Límite Elástico actual y su derivada en función de la deformación plástica equivalente. Las expresiones usadas para F_1 y F_2 se calibraron para describir un endurecimiento potencial de tipo Ramberg-Osgood, que en el caso uniaxial se define mediante la ecuación (6.1).

$$\varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon^{pl} = \frac{\sigma}{E} + \varepsilon_{test}^{pl} \left(\frac{\sigma}{\sigma_{test}} \right)^n \quad (6.1)$$

Nótese que en (6.1), el punto $(\varepsilon_{test}^{pl}, \sigma_{test})$ en el plano ε^{pl} - σ define un punto de pivote para la curva de endurecimiento por deformación plástica del material, que es independiente del exponente de endurecimiento, n . En efecto, para cualquier valor de n , ε_{test}^{pl} es la deformación plástica cuando $\sigma = \sigma_{test}$, de modo que si se fija arbitrariamente $\varepsilon_{test}^{pl} = 0,002$, entonces σ_{test} corresponde al límite elástico al 0,2% de deformación plástica que, redefinido como $\sigma_{test} = \sigma_{02}$ es la medida usualmente aceptada para materiales que exhiben un codo suave de inicio de plasticidad. El coeficiente σ_{02} en conjunto con el exponente de endurecimiento n , son considerados como propiedad del material. En el caso 3D y en el contexto de los modelos de elementos finitos utilizados en el presente estudio, las expresiones para F_1 y F_2 se obtienen adaptando la notación de la ec. (6.1), del siguiente modo

$$\sigma_0 = F_1(\bar{\varepsilon}^{pl}) = \sigma_{02} \left(\frac{\bar{\varepsilon}^{pl}}{0,002} \right)^{1/n} \quad (6.2)$$

$$\frac{d\sigma_0}{d\bar{\varepsilon}^{pl}} = F_2(\bar{\varepsilon}^{pl}) = \frac{\sigma_{02}}{0,002 n} \left(\frac{\bar{\varepsilon}^{pl}}{0,002} \right)^{\frac{1-n}{n}} \quad (6.3)$$

donde σ_{02}, n : coeficiente y exponente de endurecimiento, considerados una propiedad de la matriz.

$\bar{\varepsilon}^{pl}$: deformación plástica equivalente *actual*.

σ_0 : límite elástico *actual*, evaluado a $\bar{\varepsilon}^{pl}$

La metodología de análisis y extracción de resultados, los escenarios microestructurales considerados así como las propiedades específicas de materiales se explican, en cada caso, en el apartado 6.2.

El estudio sobre la aplicabilidad del método Secante se desarrolla en el apartado 6.4. En él se incluye una revisión conceptual de las diferentes medidas que han sido utilizadas en la literatura para definir el estado tenso-deformacional *representativo* de cada una de las fases constituyentes, así como una revisión de los fundamentos de este método analítico. Finalmente, se propone una implementación del método Secante, implementación que es novedosa en tanto que hace uso de la caracterización elástica descrita anteriormente, en el capítulo 5, a través de la ecuación de Halpin-Tsai.

6.2 Curva de Endurecimiento del Compuesto

Müeller y Mortensen (2006), recurriendo a simplificaciones del procedimiento de homogeneización secante modificado propuesto por Suquet (1995), mostraron que un compuesto reforzado con *esferas* y cuya matriz presenta endurecimiento potencial, exhibe también una curva de endurecimiento de tipo potencial con el mismo exponente de endurecimiento de la matriz, pero con un coeficiente de endurecimiento que es función del respectivo coeficiente de la matriz, de la fracción volumétrica de refuerzo y del esquema de homogeneización *lineal* utilizado que subyace bajo el procedimiento secante.

En el presente estudio se analiza mediante métodos de celdas si esta aseveración es válida también en el caso de partículas prismáticas. Es decir, se estudia si la curva de endurecimiento del material compuesto obedece a una ley potencial cuando el endurecimiento de la matriz obedece a una ley de este tipo, si se conserva el exponente de endurecimiento de la matriz en todo el rango de deformación plástica bajo estudio o si, por el contrario, el exponente de endurecimiento del compuesto varía con la fracción volumétrica y con la esbeltez de partícula.

El estudio considera inicialmente un conjunto reducido de escenarios microestructurales caracterizados por cinco fracciones volumétricas de refuerzo, esbeltez de partícula fija en $R=1$ y condición de orientación única (orientación de partículas totalmente aleatoria en todos los casos). En ellos, el endurecimiento por deformación de la matriz se definió mediante $\sigma_{02} = 400$ MPa y $n = 10$. Posteriormente, para una fracción volumétrica intermedia, se extiende el estudio a otros dos valores extremos de esbeltez, $R=1/3$ y $R=3$, conservando la condición de orientación completamente aleatoria de partículas.

Caso	$F, \%$	R	σ_{02}, MPa	n_{matriz}
1	10	1	400	10
2	15	1	400	10
3	20	1	400	10
4	25	1	400	10
5	30	1	400	10
6	20	1/3	400	10
7	20	3	400	10

Tabla 6.1. Escenarios microestructurales para los cuales se ha obtenido la curva de endurecimiento por deformación plástica del material compuesto.

En todos los casos, la curva de endurecimiento del compuesto, $\sigma-\varepsilon^{pl}$, se ha obtenido de la *medida exterior* de la tensión y deformación macroscópica, ecuaciones (3.24) y (3.25). El módulo de elasticidad E del compuesto se obtuvo de la pendiente inicial de la curva $\sigma-\varepsilon$, de modo que la deformación plástica ε^{pl} se obtuvo de la diferencia entre las componentes total y elástica de la deformación macroscópica, en la dirección de la carga.

Los curvas $\sigma-\varepsilon$ obtenidas numéricamente se muestran en la figura 6.1 en términos de la deformación total y plástica, mientras que los parámetros de la expresión de Ramberg-Osgood se muestran en función de la fracción volumétrica de refuerzo para los las distintas zonas de ajuste en la figura 6.2 y en la tabla 6.2, donde se detalla además el coeficiente de correlación del ajuste de parámetros.

Observaciones:

El límite elástico del compuesto, definido para $\varepsilon^{pl} = 0,002$, es creciente con la fracción volumétrica, mientras que el exponente de endurecimiento es función de la fracción volumétrica de manera decreciente, contrariamente a la aproximación de Müeller y Mortensen para partículas esféricas, en que el exponente es independiente de F .

Como se esperaba, los valores de σ_{02} directamente obtenidos de las simulaciones son, para todo efecto práctico, equivalentes a aquellos estimados por ajuste potencial en el rango restringido *inicial*, en torno a $\varepsilon^{pl} = 0,002$. Por el contrario, el ajuste en el rango final, extrapolado a hasta $\varepsilon^{pl} = 0,002$ tiende a sobreestimar el límite elástico obtenido mediante FEM.

La expresión de Ramberg-Osgood no representa fielmente el endurecimiento del compuesto en todo el rango de deformación. La razón es que los parámetros de endurecimiento ajustan muy bien a la expresión de Ramberg-Osgood sólo en rangos restringidos de deformación plástica, pero difieren en los distintos rangos.

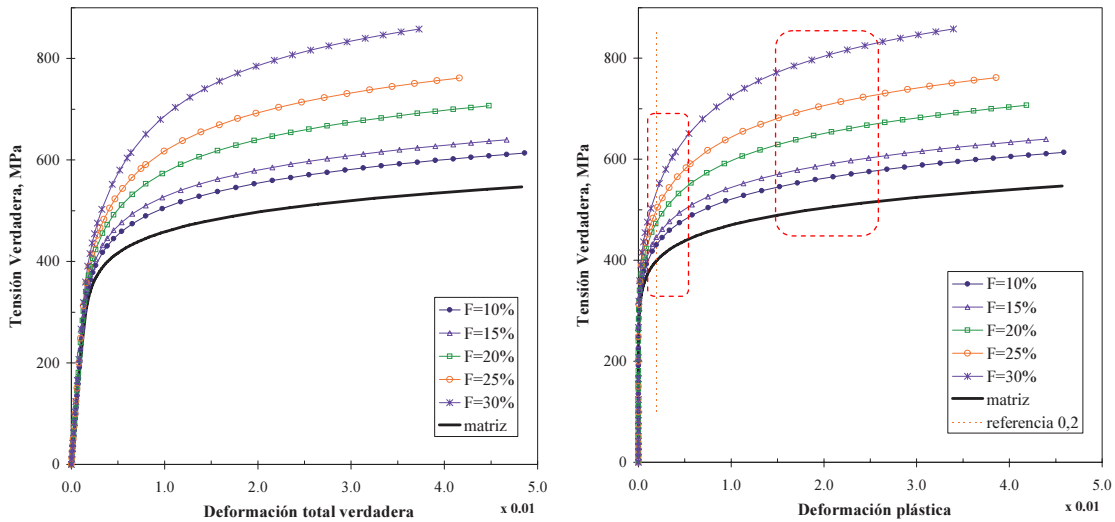


Figura 6.1 Curvas tensión-deformación verdadera, obtenidas numéricamente. En la curva de endurecimiento, en términos de la deformación plástica, se indican dos regiones de ajuste a una expresión potencial.

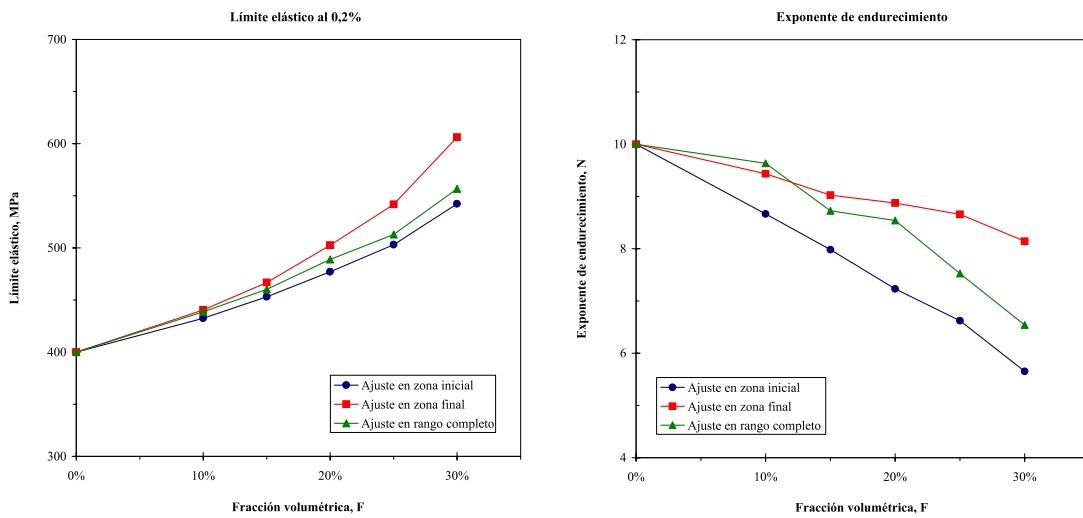


Figura 6.2 Parámetros de la ley de endurecimiento de Ramberg-Osgood, obtenidos mediante ajuste en el rango completo de deformación, así como en dos rangos restringidos al inicio y final de la historia de deformación.

F	R	Ajuste en Zona Inicial			Ajuste en Zona Final		
		σ_{02}, MPa	n	R^2	σ_{02}, MPa	n	R^2
0%	1	400,0	10,00	n/a	400,0	10,00	n/a
10%	1	432,5	8,67	0,9999	440,5	9,43	1,0000
15%	1	453,1	7,98	0,9998	466,9	9,03	0,9999
20%	1	477,2	7,23	0,9997	502,4	8,87	0,9998
25%	1	503,1	6,62	0,9993	541,7	8,66	0,9996
30%	1	542,2	5,65	0,9994	606,3	8,14	0,9992
20%	1/3	479,1	5,10	0,9995	495,7	8,05	1,0000
20%	3	479,8	6,97	0,9998	494,3	7,92	1,0000

Tabla 6.2 Coeficiente y exponente de la ley de endurecimiento Ramberg-Osgood, obtenidos mediante ajuste a resultados numéricos, en las dos regiones de ajuste.

6.3 Estado Tenso-deformacional Interior

6.3.1 Descripción del Estado Tenso-deformacional Interior.

Diversos estudios sugieren que cuando un PMMC es sometido a un estado macroscópico de tracción uniaxial, en cada fase en el *interior* del material hay una distribución espacial compleja de tensiones que no son de tipo uniaxial, pudiendo incluir, sobre todo en las cercanías de caras o aristas de partículas, gradientes más o menos intensos tanto de las componentes de los tensores locales de tensión y deformación como de medidas escalares relacionadas (tensión equivalente de von Mises o deformación plástica equivalente). Esta situación tiene lugar con independencia de la linealidad o no linealidad del comportamiento constitutivo de las fases del compuesto.

En el caso particular de que todas las fases del material presenten un comportamiento constitutivo puramente elástico lineal, y de que la sollicitación mecánica macroscópica sea de tracción uniaxial monótonamente creciente, la forma de esta compleja distribución espacial del estado tenso-deformacional *interior* no variará durante el proceso de carga sino que, únicamente, las variables relevantes antes mencionadas serán *escaladas* gradualmente, en una proporción dictaminada por la progresiva incrementación de la sollicitación uniaxial externa, siendo este fenómeno consecuencia directa del principio de superposición vigente en el contexto de Elasticidad Lineal. Expresado de otra manera, este “*factor de escala incremental*” tiene, en cada *instante* del proceso de sollicitación externa, un valor único en todo punto *interior* del RVE bajo análisis.

Si la fase matriz, en cambio, posee un comportamiento constitutivo no lineal con deformación plástica y endurecimiento por deformación (tal como en el caso estudiado en el apartado anterior, 6.1), ocurrirá además que la forma de la distribución espacial del estado tenso-deformacional *interior* evolucionará conforme se incrementa progresivamente la sollicitación externa, de forma que las variables tensionales relevantes a nivel local ya no se relacionan con la tensión macroscópica mediante un *factor de escala incremental* único en todo punto interior del RVE. La razón es el efecto de localización de la deformación plástica en la matriz, que depende, a su vez, tanto de las propiedades de endurecimiento de la matriz como de las características geométricas de la microestructura (geometría, esbeltez y orientación de partículas).

Una de las formas posibles de medir la complejidad de la distribución espacial del campo tensional interior es a través un tratamiento estadístico de determinadas variables tensionales encontrando, en cada instante del proceso de sollicitación mecánica, su media volumétrica y desviación standard en el interior del RVE, así como sus valores máximo y mínimo. Las variables tensionales aquí consideradas como *indicadores estadísticos* son las componentes de los tensores tensión y deformación, la tensión equivalente de von Mises y el índice de triaxialidad. Este tratamiento estadístico se realizó mediante el programa de post-procesamiento de resultados, según el esquema señalado en 3.3.7.b “*Indicadores Estadísticos*”, considerando separadamente como región de promediación al material compuesto y a sus fases constituyentes.

Debe indicarse que, tanto en el caso de la tensión equivalente de von Mises como en el del índice de triaxialidad tensional, en el contexto del presente estudio estas variables pueden calcularse de dos maneras: (a) a partir de los invariantes del promedio volumétrico del tensor de tensión, o bien, (b) a partir del propio valor local de cada una de ellas, calculando su promedio volumétrico, desviación y valores máximo y mínimo. Evidentemente, en general estas dos medidas difieren entre sí, teniendo sólo la segunda de ellas el carácter de *indicador estadístico*.

Otra forma posible –más condensada– para estudiar la distribución espacial del campo tensional interior es a través de *histogramas de distribución espacial* del índice de triaxialidad (que puede ser considerado como un campo escalar a ser evaluado en cada punto material del dominio de cálculo), según el esquema señalado en 3.3.7.b “*Histogramas...*”. La evolución de la forma de la distribución espacial puede estudiarse mediante la evolución de estos histogramas durante la historia del proceso de carga.

A modo de ejemplo, estas dos metodologías se aplican a continuación a los resultados correspondientes al caso nº3, de aquellos enumerados en la tabla 6.1, asociados a una celda de

$N=40$ partículas caracterizada por $F=20\%$, $R=1$ y orientación aleatoria de partículas, sometida a una sollicitación macroscópica de tracción uniaxial.

6.3.1.a Descripción basada en Indicadores Estadísticos.

Para este caso, las figuras 6.3 a 6.7 ejemplifican el análisis basado en *Indicadores Estadísticos*. Ellas muestran la evolución durante el proceso de aplicación de la carga, de los promedios volumétricos de las componentes de los tensores locales de tensión y deformación, calculados separadamente en cada fase constituyente (figs. 6.3 y 6.4) y en el compuesto (fig. 6.5). En el caso particular de las componentes de tensión y deformación *en la dirección de la carga*, la figura 6.6 ejemplifica la relación entre ellas, en varios instantes del proceso de carga, verificando que la “regla de las mezclas” es aplicable en el caso de la tensión y la deformación promedio de las fases y del compuesto. La figura 6.7, por su parte, muestra la evolución del índice de triaxialidad calculado a partir de los invariantes del promedio volumétrico de tensiones y como promedio volumétrico propiamente tal. La evolución de la tensión equivalente de von Mises se deja para el próximo apartado sobre la definición de medidas representativas.

De acuerdo a lo expresado en 3.3.6, la figura 6.5 corresponde a la *medida interior* de la tensión y deformación macroscópica del material compuesto, dado que los promedios volumétricos se calcularon en la totalidad del volumen de la celda multipartícula, siendo coincidente con la *medida exterior* de la tensión macroscópica representada en la figura 6.1 para $F=20\%$. Como se esperaba, la única componente no nula de tensión es aquella en la dirección macroscópica de carga, mientras que las únicas componentes no nulas de deformación son aquellas correspondientes a la dirección de la carga y a las contracciones transversales derivadas del efecto Poisson.

Debe indicarse que, en especial en los casos de las figuras 6.3 y 3.4, las curvas denotan valores promedios alrededor de los cuales existe una enorme variabilidad. En el caso de la fase matriz por ejemplo, el promedio de la componente S_{11} en la dirección de la carga macroscópica, tiene un valor de alrededor de 550 MPa al finalizar la sollicitación, mientras que los valores máximo y mínimo en todos los puntos de Gauss de la fase matriz fueron de alrededor de 18000 MPa y -11000 MPa respectivamente. Existen dos causas que explican estos elevados valores, una de ellas es física y se materializa en el hecho de que no se han modelado en estas simulaciones mecanismos de daño del material compuesto, lo cual para este caso (deformación macroscópica del 6%, correspondiente al tiempo de simulación $t=1$ en la figura 6.6) hubiese aliviado en cierta medida los valores extremos de tensión. La segunda causa es de tipo numérico, y se relaciona con la incapacidad de los elementos finitos tetraédricos cuadráticos, descrita cualitativamente ya en el apartado 3.2.7, de resolver con

precisión los intensos gradientes de tensión y deformación que tienen lugar en zonas de la matriz muy cercanas a vértices o aristas de partículas. En estas zonas, los tetraedros cuadráticos sufren una distorsión excesiva que degrada la calidad de las medidas tenso-deformacionales calculadas en sus puntos de Gauss. El volumen de estas zonas de excesiva distorsión elemental es muy pequeño como para degradar apreciablemente la precisión del promedio volumétrico, sin embargo sí que muestran su influencia en los valores extremos antes indicados para la tensión.

Con respecto al índice de triaxialidad, la figura 6.7 ejemplifica las relaciones que a continuación se exponen, y que ocurrieron en todas las simulaciones de la tabla 6.1. Si $\langle T \rangle_{\Omega}$ con $\Omega = \text{matriz}$ o partículas es el promedio volumétrico en la fase Ω , $T(\langle \sigma \rangle_{\Omega})$ es el índice de triaxialidad calculado a partir de los invariantes del promedio volumétrico del tensor de tensiones y Σ es la medida interior o exterior de la tensión macroscópica en el compuesto, se verifica que:

$$\langle T \rangle_m \leq T(\langle \sigma \rangle_m) \quad ; \quad \langle T \rangle_p \leq T(\langle \sigma \rangle_p) \quad (6.4a)$$

$$T(\langle \sigma \rangle) = T(\Sigma) = \frac{1}{3} \quad (6.4b)$$

$$\langle T \rangle = F \langle T \rangle_p + (1 - F) \langle T \rangle_m \quad (6.4c)$$

La expresión (6.4.a) constituye un resultado puramente numérico; la expresión (6.4.b) es la constatación de que la medida interior de la tensión macroscópica refleja la sollicitación mecánica de tracción uniaxial prescrita sobre la celda multipartícula. La expresión (6.4.c) es resultado de la promediación volumétrica de una variable escalar como el índice de triaxialidad. No puede sin embargo establecerse, para el compuesto, una relación jerárquica general entre $T(\langle \sigma \rangle)$ y $\langle T \rangle$, aunque para el ejemplo particular reflejado en la figura 6.7 se verifica que $\langle T \rangle \geq T(\langle \sigma \rangle)$.

Finalmente, es interesante observar que las componentes de cortadura de los promedios volumétricos de tensión en las fases matriz y partículas, son de una cuantía despreciable frente a las tensiones normales, situación que ocurrió en todas las celdas de la tabla 6.1, no sólo para este ejemplo correspondiente a $F=20\%$. De este modo, de la comparación de las figuras 6.3 y 6.4 con la 6.5, se concluye que cuando el material compuesto es sollicitado en tracción uniaxial, las fases constituyentes están en un estado tensional *multiaxial* que, en sentido

promedio, no exhibe tensiones de cortadura. Las direcciones de los ejes principales de tensión del compuesto y de sus fases pueden, por lo tanto, considerarse como prácticamente coincidentes.

Los promedios volumétricos de los tensores de tensión en las fases y en el compuesto pueden expresarse matricialmente del siguiente modo:

$$\begin{aligned}
 \text{Matriz: } \quad \Sigma_m = \langle \sigma \rangle_m &= \begin{bmatrix} \sigma_x^m & 0 & 0 \\ & \sigma_y^m & 0 \\ \text{sim} & & \sigma_y^m \end{bmatrix} & \text{donde } \sigma_x^m, \sigma_y^m > 0 \\
 \\
 \text{Partículas: } \quad \Sigma_p = \langle \sigma \rangle_p &= \begin{bmatrix} \sigma_x^p & 0 & 0 \\ & \sigma_y^p & 0 \\ \text{sim} & & \sigma_y^p \end{bmatrix} & \text{donde } \sigma_x^p > 0 ; \sigma_y^p < 0 \\
 \\
 \text{Compuesto: } \quad \Sigma = \langle \sigma \rangle &= \begin{bmatrix} \Sigma_x & 0 & 0 \\ & 0 & 0 \\ \text{sim} & & 0 \end{bmatrix} & \text{donde } \Sigma_x > 0
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

En estas condiciones, la tensión equivalente de von Mises, calculada a partir de los promedios volumétricos del tensor de tensión, se expresa como:

$$\begin{aligned}
 q_m &= q_m(\Sigma_m) = \left| \sigma_x^m - \sigma_y^m \right| \\
 q_p &= q_p(\Sigma_p) = \left| \sigma_x^p - \sigma_y^p \right| \\
 q &= \sigma_x
 \end{aligned} \tag{6.6}$$

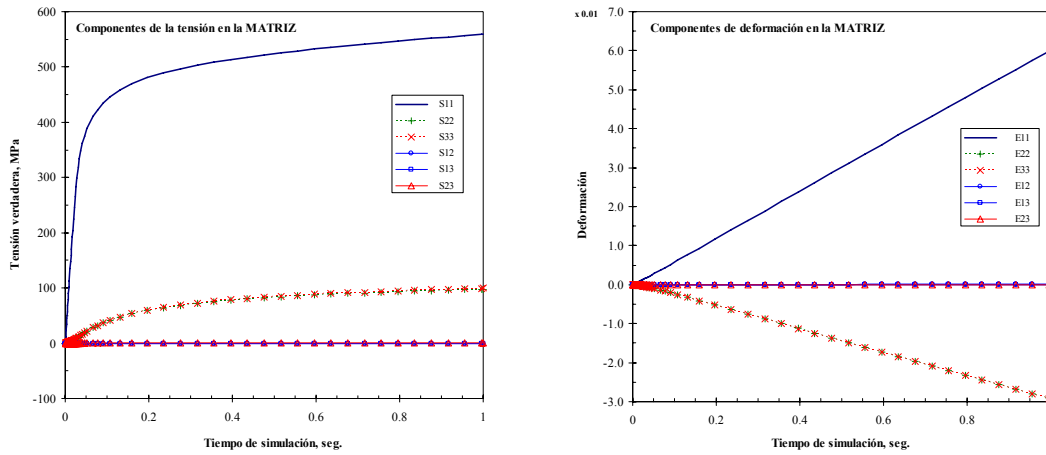


Figura 6.3 Evolución de los promedios volumétricos de las componentes locales de los tensores **tensión** y **deformación total** en la fase **matriz**.

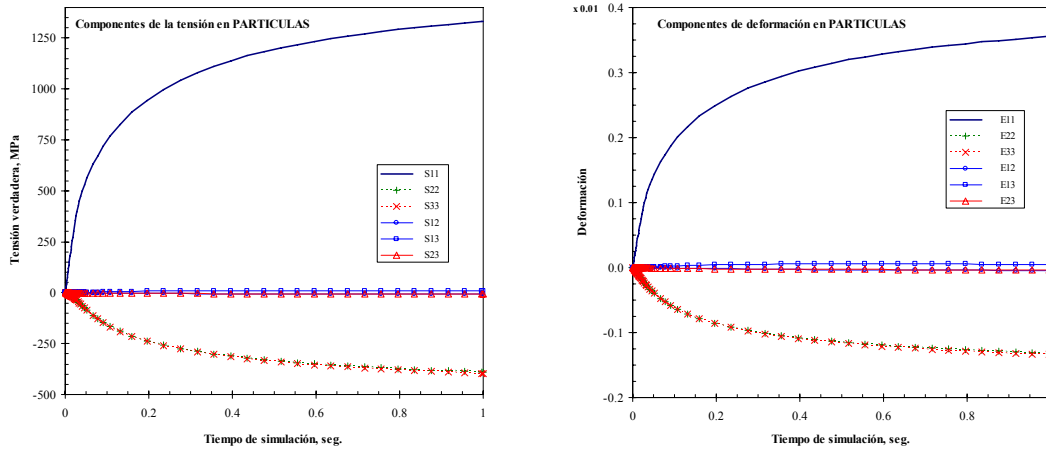


Figura 6.4 Evolución de los promedios volumétricos de las componentes locales de los tensores **tensión** y **deformación total** en las **partículas**.

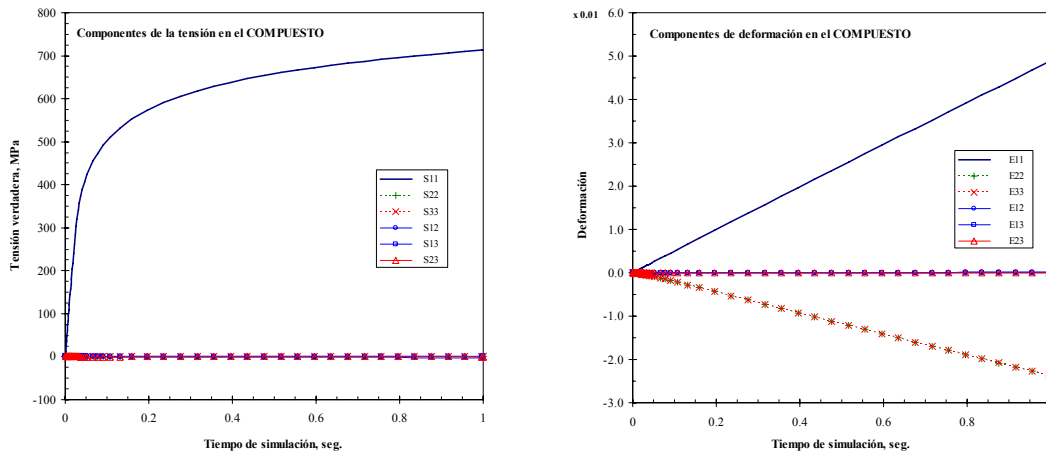


Figura 6.5 Evolución de componentes promediadas de **tensión** y **deformación total** en el **material compuesto**. En el caso de la tensión, la única componente no nula es aquella en la dirección de la carga.

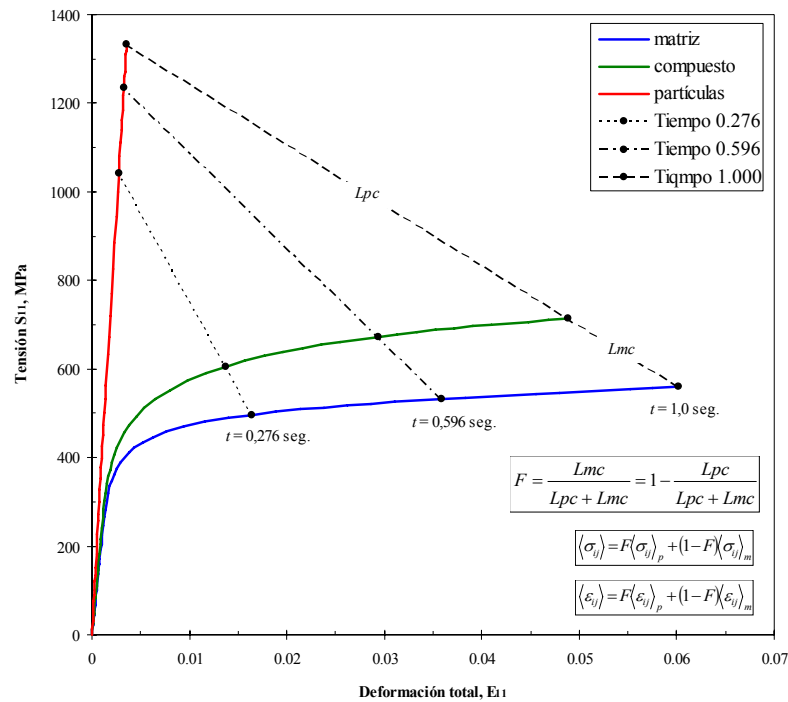


Figura 6.6 partición de tensiones y deformaciones entre la matriz y las partículas. Aunque se ejemplifica con las componentes en la dirección macroscópica de carga, la misma relación basada en la regla de las mezclas rige para las otras componentes.

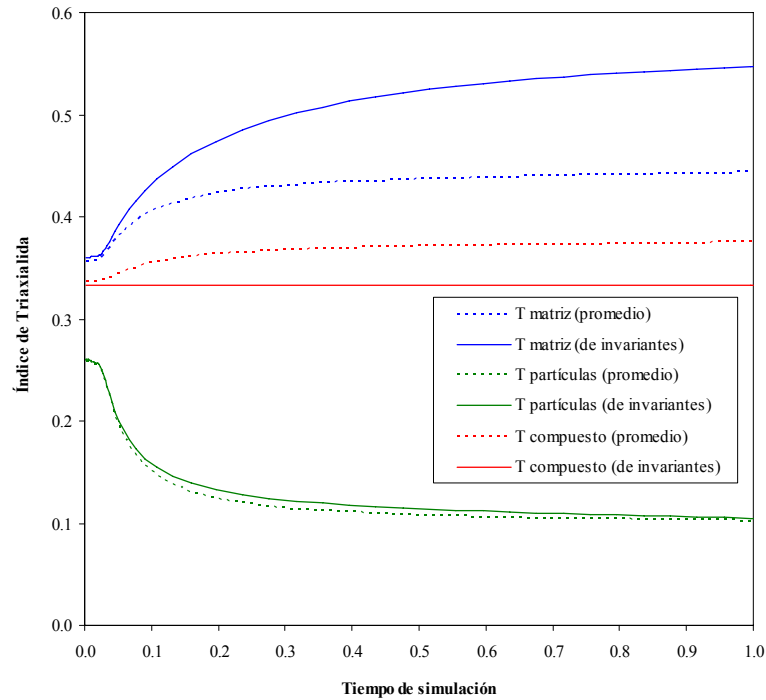


Figura 6.7 Evolución del índice de triaxialidad en las fases y en el compuesto calculadas, en cada caso, como promedio volumétrico y a partir de los invariantes del promedio volumétrico del tensor de tensiones.

6.3.1.b Descripción basada en Histogramas de Triaxialidad.

Los histogramas de triaxialidad en las fases constituyentes y en el compuesto se presentan en la figura 6.8. La información contenida en estos histogramas permite asignar a distintos intervalos de índice de triaxialidad, una frecuencia de ocurrencia, ya sea en la totalidad del volumen interior del RVE, como en una subregión del mismo (matriz o partículas). En el caso de la fase matriz, se observa que al inicio de la historia de deformación, aproximadamente un 85% del volumen de matriz está sometido a un estado tensional cuyo índice de triaxialidad se concentra en el rango $0,20 < T < 0,40$ con una desviación relativamente pequeña en torno a ese valor. Es claro, además, que esta distribución espacial del índice de triaxialidad en la matriz prácticamente no varió durante los estadios iniciales de la deformación macroscópica, en que predomina un comportamiento eminentemente elástico.

Sin embargo, a medida que avanza la deformación y comienza a tener lugar un aumento de la deformación plástica tanto en la fase matriz como a nivel macroscópico, la dispersión en el índice de triaxialidad en el interior de la matriz comienza a aumentar, de forma que decrece la fracción de volumen de matriz en el intervalo central de triaxialidad $0,20 < T < 0,40$ a la vez que crece el volumen de matriz sujeto a triaxialidades más altas y más bajas, en intervalos adyacentes al anterior. Si se combina esta información con aquella de la figura 6.7, resulta claro que, una vez iniciada la plastificación masiva en la fase matriz, el valor promedio del índice de triaxialidad comienza a crecer, a la vez que crece también su respectiva desviación estándar.

En el caso de las partículas, los histogramas muestran una evolución similar a la de la matriz, en el sentido de que en los estadios iniciales de macro-deformación, cerca del 90% del volumen de refuerzo está sometido a tensiones con valores del índice de triaxialidad muy concentrado en el intervalo central $0,20 < T < 0,40$ y dispersándose a medida que aumenta la deformación plástica del compuesto. El valor medio de la triaxialidad en las partículas sin embargo, decrece en cuanto progresa la deformación plástica del compuesto, contrariamente a lo que ocurre con la matriz (figura 6.7).

En todo caso, debe tenerse en cuenta que la *constancia* en la distribución espacial del índice de triaxialidad durante la fase elástica inicial de la historia de deformación es completamente consistente con el fenómeno descrito en los párrafos iniciales de este apartado, en el sentido de que si el comportamiento constitutivo de las fases es elástico lineal, entonces existe un “*factor de escala incremental*” que tiene un valor único en todo punto *interior* del RVE bajo análisis y que relaciona el incremento de la deformación macroscópica con el incremento de las tensiones y deformaciones locales.

De manera análoga, el aumento progresivo de la dispersión en la distribución espacial del índice de triaxialidad, que tiene lugar cuando aumenta en importancia la deformación plástica frente a la deformación elástica del compuesto (y de la matriz, en forma correspondiente), redonda en que el “factor de escala incremental” deja de tener valor único en todo punto interior del RVE.

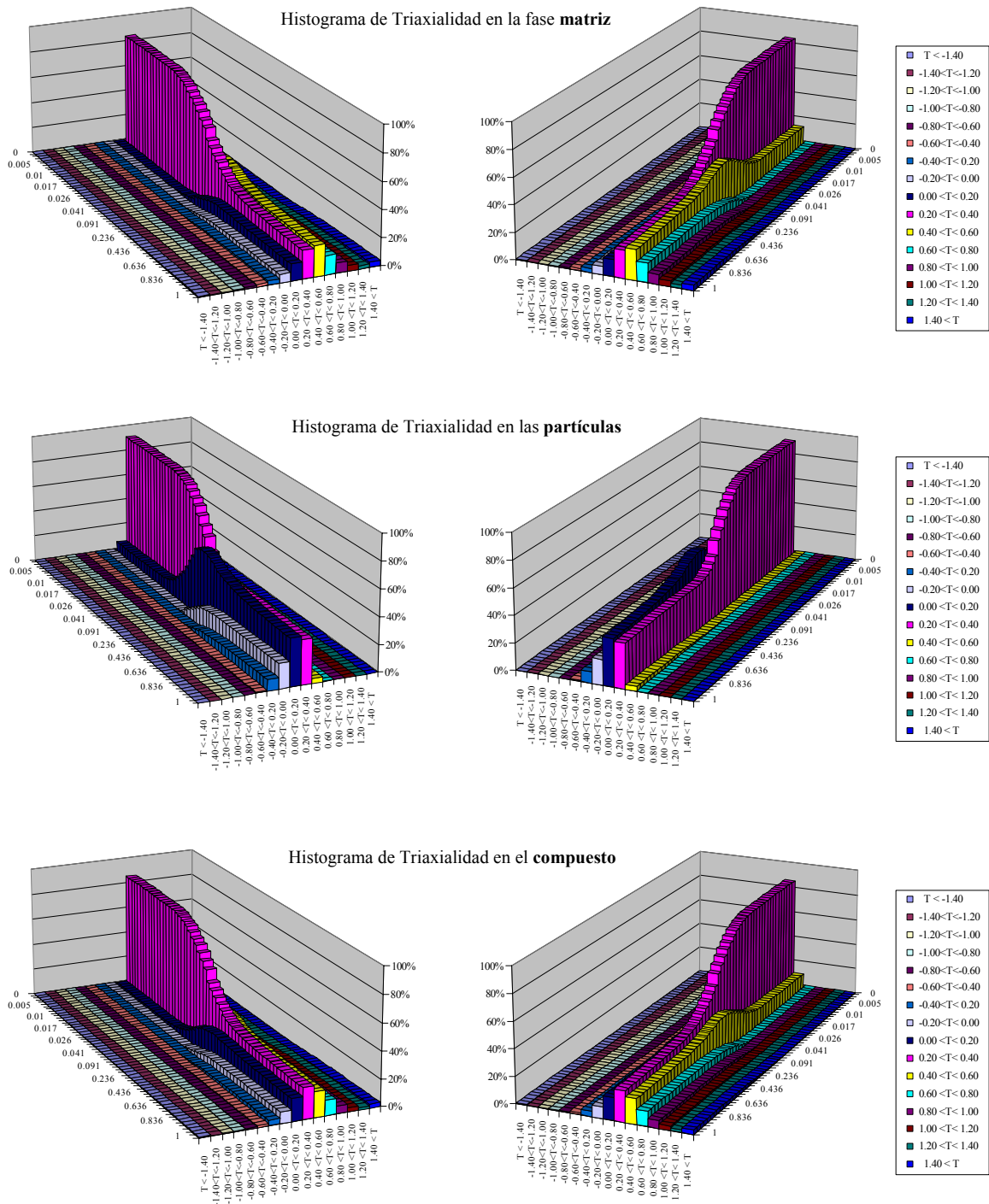


Figura 6.8 Histogramas de Triaxialidad en las fases separadas y en el material compuesto.

6.3.2 Evolución de Variables Energéticas.

En el apartado anterior se describió el estado tenso-deformal multiaxial que existe en el interior del compuesto y su evolución, cuando el material es sometido a una sollicitación macroscópica uniaxial. Para el mismo material y sollicitación mecánica, se estudia a continuación la evolución durante la historia de deformación de los balances entre determinadas variables energéticas. Estos balances se cuantificaron a partir de variables medidas tanto en la frontera como en el interior del RVE bajo análisis. Las variables energéticas consideradas fueron las siguientes:

W_{ef} : trabajo total o efectivo efectuado por las fuerzas externas, por unidad de volumen del RVE.

W_{σ} : trabajo total efectuado por la tensión local en el interior del RVE.

EE_{ef}^{el} : energía potencial elástica, por unidad de volumen de compuesto. Es la fracción “recuperable” del trabajo total W_{ef} realizado por las fuerzas externas.

W_{ef}^{dis} : trabajo total “disipado” en el compuesto, por unidad de volumen de compuesto.

EE_p^{el} : energía de deformación almacenada en el interior de las partículas, por unidad de volumen de partículas.

EE_m^{el} : energía de deformación almacenada en el interior de la matriz, por unidad de volumen de matriz.

W_m^{pl} : trabajo disipado en deformación plástica en la matriz, por unidad de volumen de matriz.

Para estas definiciones puede plantearse balances energéticos tanto para las variables efectivas como para las variables “interiores”. Si F es la fracción volumétrica de partículas, entonces:

$$\text{Balance para variables efectivas: } W_{ef} = EE_{ef}^{el} + W_{ef}^{dis} \quad (6.7.a)$$

$$\text{Balance para variables interiores: } W_{\sigma} = F EE_p^{el} + (1 - F) EE_m^{el} + (1 - F) W_m^{pl} \quad (6.7.b)$$

$$\text{Balance global: } W_{ef} = W_{\sigma} \quad (6.7.c)$$

El balance global de la expresión (6.7.c) se deriva del hecho de que el trabajo total realizado por las fuerzas externas debe ser igual al trabajo total efectuado por el campo de tensiones $\sigma = \sigma(x)$ en el interior del RVE.

No se ha considerado una disipación plástica en las partículas dado que su comportamiento constitutivo es lineal elástico. En el contexto de las simulaciones de celda multipartícula, estas variables energéticas se calcularon según se explica a continuación.

Variables Efectivas, asociadas a la tensión macroscópica:

W_{ef} se puede calcular a partir de las fuerzas de reacción y los desplazamientos en los nodos de control o, en forma equivalente, a partir de la tensión y la deformación macroscópicas, estando ambos métodos relacionados según las expresiones (3.24) y (3.25). Así, si el eje macroscópico de carga es el eje j y \vec{C}_j y \vec{f}_j son los vectores desplazamiento y fuerza de reacción del nodo de control j -ésimo, entonces W_{ef} se expresa en forma incremental mediante la expresión (6.8)

$$dW_{ext} = \frac{1}{V} \vec{f}_j \cdot d\vec{C}_j = \Sigma : dE \quad (6.8)$$

Por otro lado, si E^{el} y E^{pl} son las componentes elástica y plástica de la deformación macroscópica, la energía potencial elástica y el trabajo disipado efectivos pueden calcularse incrementalmente como

$$dEE_{ef}^{el} = \Sigma : dE^{el} \quad (6.9)$$

$$dW_{ef}^{dis} = \Sigma : dE^{pl} \quad (6.10)$$

El módulo de elasticidad E del compuesto se obtuvo de la pendiente inicial de la curva macroscópica Σ - E , de modo que la deformación plástica E^{pl} se obtuvo de la diferencia entre las componentes total y elástica de la deformación macroscópica, en la dirección de la carga. Como no se han modelado procesos de daño, E se mantiene constante durante todo el proceso de sollicitación mecánica. Dado que la carga macroscópica es uniaxial, entonces el valor actual integrado para la energía potencial elástica efectiva se puede calcular en cada instante de la simulación según (6.11), expresión en la que los índices repetidos *no* implican suma, sino componente en la dirección macroscópica de carga.

$$EE_{ef}^{el} = EE_{ef}^{el}(t) = \frac{1}{2} \frac{(\Sigma_{jj}(t))^2}{E} = \frac{1}{2} E (E_{jj}(t))^2 \quad (6.11)$$

Variables Interiores, asociadas a la tensión local:

El trabajo total efectuado por la tensión local W_{σ} , las energías elásticas en el interior de las fases matriz y partículas, EE_m^{el} y EE_i^{el} respectivamente, así como el trabajo disipado en plasticidad en la fase matriz W_m^{pl} , fueron calculadas por el software de elementos finitos a

partir de la solución tenso-deformacional obtenida por las rutinas constitutivas, en cada punto de integración del modelo numérico. Así, si el índice e denota el punto de integración e -ésimo en la región Ω , entonces:

$$dW_{\sigma} = \frac{1}{V_{\Omega}(t)} \int_{\Omega} \sigma : \dot{\varepsilon} dv dt \approx \frac{1}{V_{\Omega}} \sum_{e \in \Omega} \sigma_e : \dot{\varepsilon}_e v_e dt \quad \text{para } \Omega = \text{RVE} \quad (6.12)$$

$$dEE_{\Omega}^{el} = \frac{1}{V_{\Omega}(t)} \int_{\Omega} \sigma : \dot{\varepsilon}^{el} dv dt \approx \frac{1}{V_{\Omega}} \sum_{e \in \Omega} \sigma_e : \dot{\varepsilon}_e^{el} v_e dt \quad \text{para } \Omega = m, p. \quad (6.13)$$

$$dW_m^{pl} = \frac{1}{V_m(t)} \int_m \sigma : \dot{\varepsilon}^{pl} dv dt \approx \frac{1}{V_m} \sum_{e \in m} \sigma_e : \dot{\varepsilon}_e^{pl} v_e dt \quad (6.14)$$

A partir de la expresión (6.13) se define, para efectos de representación, una variable auxiliar que denota la energía elástica *almacenada* en el interior del compuesto, por unidad de volumen de compuesto como:

$$EE_{int}^{el} = F EE_p^{el} + (1 - F) EE_m^{el} \quad (6.15)$$

A partir de las expresiones (6.8) a (6.15), se obtuvo la evolución de todas las variables energéticas en función del tiempo de simulación. Un subconjunto de estas se muestran en la figura 6.9, para una celda con $N=40$ partículas de esbeltez $R=1$ en orientación aleatoria y $F=20\%$ de volumen de partículas.

En todos los experimentos numéricos realizados, correspondientes a los escenarios microestructurales citados en la tabla 6.1, se verificaron las siguientes relaciones:

$$EE_{ef}^{el} \leq F EE_p^{el} + (1 - F) EE_m^{el} \equiv EE_{int}^{el} \quad (6.16a)$$

$$W_{ef}^{dis} \geq (1 - F) W_m^{pl} \quad (6.16b)$$

$$EE_{ef}^{el} + W_{ef}^{dis} = F EE_p^{el} + (1 - F) \{ EE_m^{el} + W_m^{pl} \} \quad (6.16c)$$

Observaciones:

- En las expresiones (6.16.ab), la igualdad sólo se verifica para $F=0$ y $F=100\%$. La igualdad (6.16.c) es un resultado esperado que se ha reproducido aquí únicamente para enfatizar que los resultados numéricos verifican el balance global de la expresión (6.7c)
- La desigualdad (6.16.a) es de notable interés, puesto que implica que no toda la energía elástica almacenada en el interior del RVE es susceptible de ser recuperada en un proceso

de descarga elástica: después de realizada la descarga, habrá tensiones residuales dentro del RVE cuyo promedio es nulo, pero cuya energía de deformación asociada no lo es.

- La desigualdad (6.16.b) implica que la disipación total de energía en el RVE no se debe solamente a la disipación por deformación plástica en la fase matriz, sino que también se debe a un efecto de “confinamiento” de una porción de la energía elástica que existe en el interior de las fases.
- Las desigualdades (6.16ab) pueden transformarse en igualdades introduciendo un término positivo conveniente, que permita cuantificar el efecto de confinamiento antes mencionado. Definiendo EE^{conf} como la *Energía Elástica Confinada*, las desigualdades (6.16ab) se reescriben del siguiente modo:

$$EE_{ef}^{el} = F EE_p^{el} + (1 - F)EE_m^{el} - EE^{conf} \quad (6.17a)$$

$$W_{ef}^{dis} = (1 - F)W_m^{pl} + EE^{conf} \quad (6.17b)$$

Nótese que con esta modificación, al sumar (6.17a) y (6.17b) se recupera la expresión (6.16c)

- La energía elástica confinada EE^{conf} , es vista como si fuese trabajo disipado. Así, la deformación plástica del compuesto, a nivel macroscópico, E^{pl} es el resultado del trabajo disipado total, no solo del trabajo disipado en la plastificación de la matriz. En la figura 6.10 se muestra la evolución de EE^{conf} durante el proceso de sollicitación mecánica, no sólo para el caso antes indicado de $F=20\%$ y $R=1$, sino también para $R=1/3$ y $R=3$, todas ellas con partículas en orientación aleatoria (es decir, son tipos microestructurales isótropos). Esta figura sugiere, por una parte, que EE^{conf} comienza a manifestarse sólo cuando comienza a tener importancia la componente plástica de la deformación macroscópica frente a la componente elástica. Por otra, sugiere que el efecto de confinamiento energético aumenta cuando se utilizan partículas de esbeltez $R \neq 1$.
- De las figuras 6.9 y 6.10 se deduce que la cuantía de EE^{conf} es pequeña frente al trabajo disipado en plasticidad de la matriz o frente al trabajo efectivo total, aunque es grande comparada con la energía elástica en el interior del compuesto. Para la celda considerada en la figura 6.9, para una deformación macroscópica total en torno al 5%, la energía confinada es aproximadamente un 45% de la energía elástica total almacenada en el interior de la matriz y las partículas.
- Como observación adicional (no relacionada con PMMCs), nótese que en las implementaciones del modelo constitutivo de Gurson-Tveergaard-Needleman para metales

que presentan porosidad, usualmente se considera la igualdad en la expresión (6.16b) para así estimar la cuantía de la deformación plástica equivalente en la fase matriz. En este modelo constitutivo, F representa una fracción volumétrica de microvacíos. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que dichos microvacíos se nuclean por el mecanismo de decohesión de partículas de segundas fases. La igualdad en la expresión (6.16b) probablemente sea una aproximación justificada siempre que la fracción volumétrica de partículas capaces de nuclear microvacíos sea suficientemente baja, pudiendo existir un efecto de confinamiento similar al descrito en las observaciones anteriores.

Como verificación, se realizó una simulación de un proceso completo de carga-descarga basada en celdas multipartícula. La simulación se realizó en dos etapas sucesivas: en primer lugar una etapa de carga, realizado en *control de posición* (tal como en todas las simulaciones anteriores), seguida de una descarga en *control de fuerza*. Al inicio del proceso de descarga, la condición de desplazamiento prescrito en un nodo de control es sustituida por una condición de *fuerza prescrita*, aplicando una fuerza puntual que decrece hasta cero desde un valor que, inicialmente, es igual al valor de la fuerza de reacción que se obtuvo al final de la etapa previa de carga (para más detalles sobre el método de control en *descargas* puede consultarse el apartado 7.5.1.c).

Los resultados de esta simulación se presentan en la figura 6.11, en que se ha graficado la distribución de la tensión equivalente de von Mises en una determinada sección transversal de la celda, en distintos momentos del proceso carga-descarga. Es claro que en el interior de la celda existen tensiones no nulas al finalizar la descarga, aun cuando la tensión macroscópica ha desaparecido.

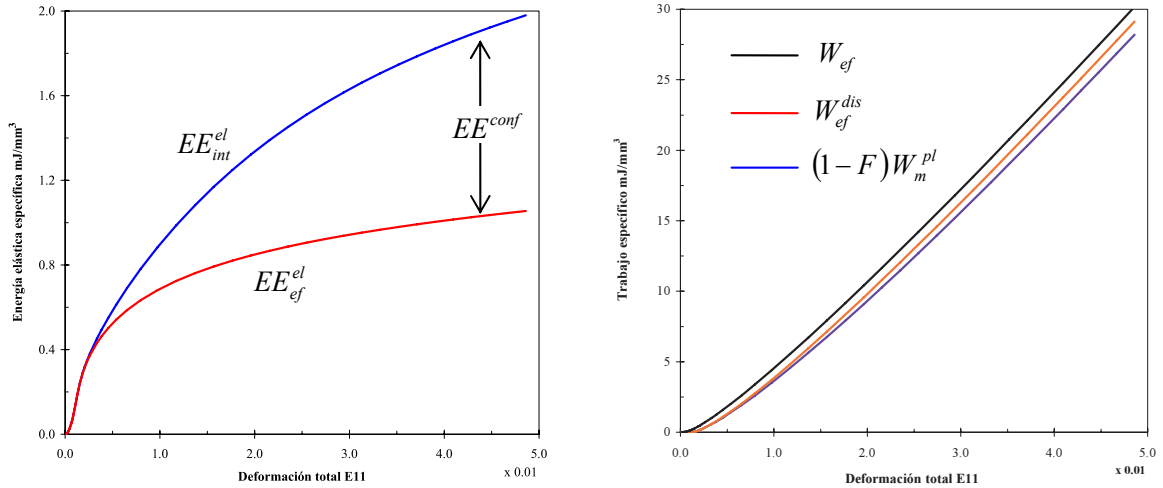


Figura 6.9 Evolución de las energías elásticas efectiva e interior, así como de los trabajos efectivos y disipados, en función de la deformación macroscópica. Los resultados corresponden a una celda 40 partículas con orientación aleatoria, $F=20\%$ y $R=1$.

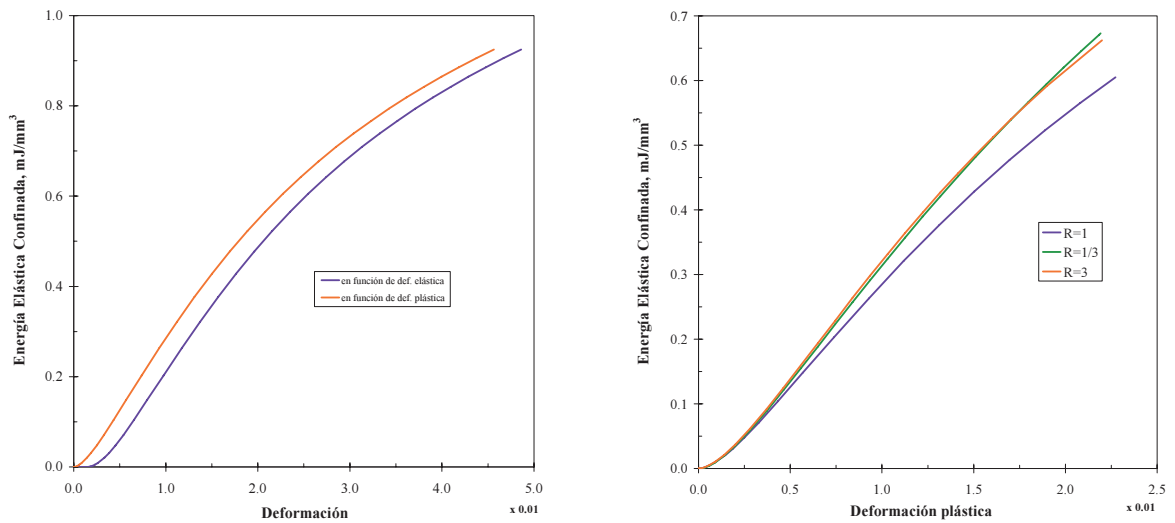


Figura 6.10 *Izquierda:* evolución de la energía elástica confinada en función de la deformación macroscópica *total* y *plástica*, para el caso $F=20\%$ y $R=1$.

Derecha: energía elástica confinada para escenarios microestructurales con distintas esbelteces, $R=1/3$, $R=1$ y $R=3$.

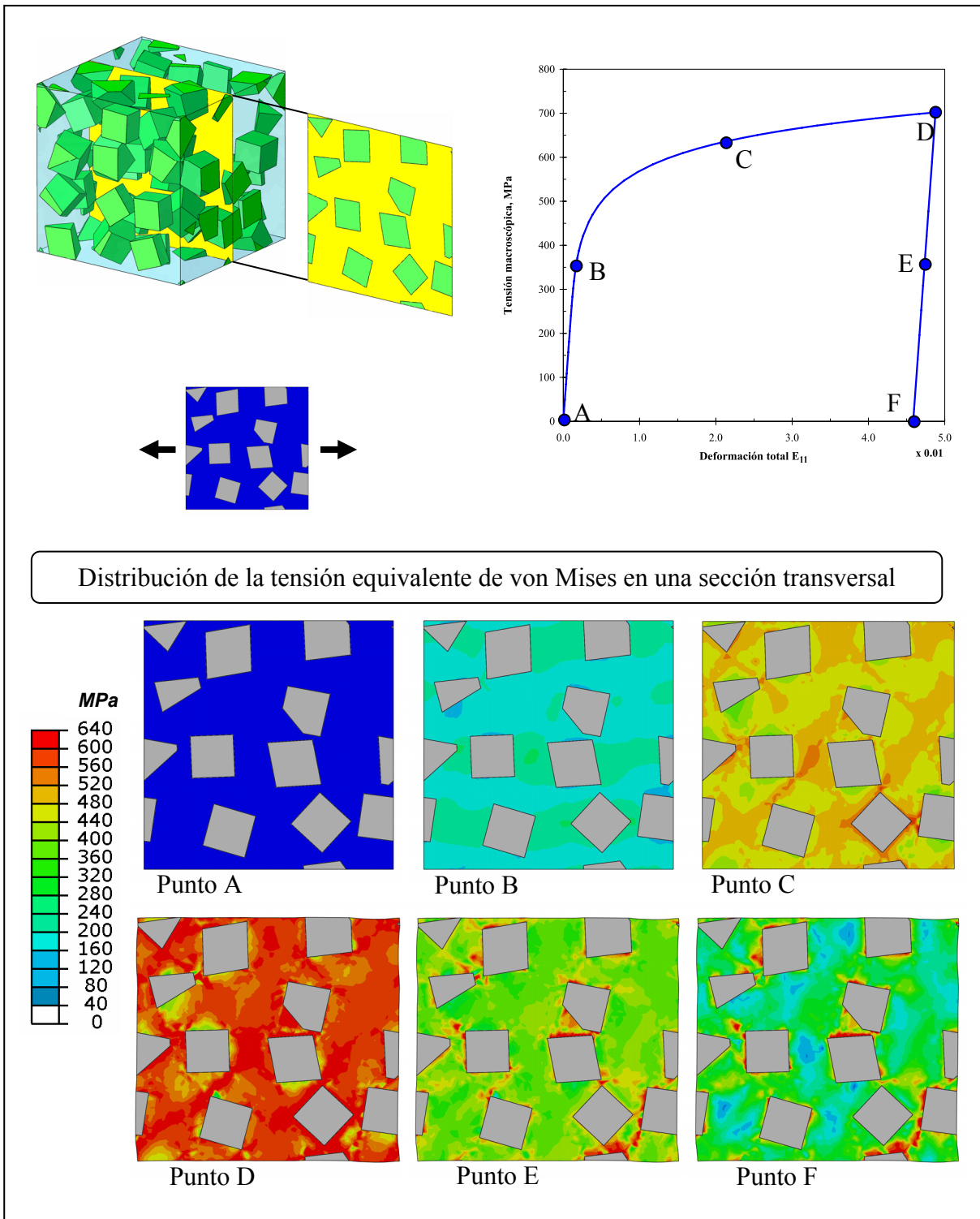


Figura 6.11 Distribución de la tensión de von Mises en una sección transversal en distintos instantes de un proceso de carga y posterior descarga. Se observan tensiones residuales al finalizar la descarga.

6.4 Sobre la definición de Medidas Representativas y la Aplicabilidad del Método Secante

En el caso de PMMC's constituidos de matriz y de partículas de refuerzo, puede considerarse que el estado tensional representativo o macroscópico del material compuesto corresponde al promedio volumétrico de cada una de las componentes del tensor de tensiones σ , calculado sobre la totalidad del volumen de compuesto. En el contexto del análisis de celdas, este estado representativo corresponde a la medida *interior* de la tensión según la ec. (3.26), que es equivalente además a la medida *exterior* de la ec. (3.24), calculada a partir de las reacciones en los nodos de control.

6.4.1 Medidas Representativas en las Fases Constituyentes.

A diferencia de lo que ocurre con el compuesto, una definición precisa del estado tenso-deformacional *representativo* de cada fase no es directa. En el caso particular en que cada fase presenta un comportamiento constitutivo lineal elástico, la práctica totalidad de los Modelos de Campo Medio ha considerado que el estado representativo de cada fase corresponde al *promedio volumétrico de los tensores tensión y deformación*, calculado en cada fase. En estos modelos, esta definición estaba justificada en que, como la matriz de rigidez que es propiedad de cada fase es independiente de la deformación, los promedios volumétricos de la tensión y la deformación se relacionan entre sí mediante la matriz de rigidez elástica de la fase en la que ha tenido lugar dicha promediación volumétrica. Es esta consideración, a menudo omitida en el desarrollo de este tipo de modelos analíticos, la que ha permitido establecer los métodos de homogeneización que dan la matriz de rigidez del compuesto en términos de aquellas de las fases y de la fracción volumétrica de refuerzo, basándose en distintas estimaciones de los Tensores de Concentración (ver sección 2.2.1). Sin embargo, debe tenerse en cuenta que el hecho de que la independencia de las rigideces elásticas de las fases con la deformación permita obtener la rigidez del compuesto, no implica que el promedio volumétrico de la tensión en una fase sea una medida rigurosa de su estado representativo, fundamentalmente, porque cada fase constituyente del compuesto no puede ser considerada únicamente como *material*, sino que ha de ser considerada como *estructura*, esto es, *material, geometría y condiciones de contorno*.

En el caso en que al menos una de las fases presente un comportamiento constitutivo no lineal, caracterizado por la dependencia de su matriz de rigidez tangente (y secante) con la deformación, se puede demostrar que, en general, los promedios volumétricos de la tensión y

la deformación en dicha fase no se relacionan entre sí con la misma ley constitutiva que es propiedad de la fase, cuando se considera que esa fase es una estructura.

Nótese que el trabajo total por unidad de volumen efectuado por la tensión en el interior de una región Ω , corresponde al promedio volumétrico trabajo específico a nivel local. En efecto, en términos incrementales,

$$dW_{\Omega} = \frac{1}{V_{\Omega}} \int_{\Omega} \sigma : \dot{\varepsilon} dv dt = \langle \sigma : \dot{\varepsilon} \rangle_{\Omega} dt \quad (6.18)$$

Sin embargo, con independencia de la linealidad del comportamiento constitutivo de las fases constituyentes, puede demostrarse que, en general, el promedio volumétrico del trabajo específico efectuado por la tensión difiere del trabajo específico obtenido a partir de los promedios volumétricos de la tensión y la deformación en una cuantía que es función de las condiciones de contorno (*cdc*) actuantes sobre la región de promediación (ec. (6.19), donde $\Omega = \text{matriz, partículas}$ o la totalidad del RVE)

$$\langle \sigma : \dot{\varepsilon} \rangle_{\Omega} - \langle \sigma \rangle_{\Omega} : \langle \dot{\varepsilon} \rangle_{\Omega} = G(\text{cdc en } \partial\Omega) \quad (6.19)$$

En general, la función G es $G \neq 0$ para condiciones de contorno arbitrarias, aunque existen condiciones de contorno *particulares* que garantizan que $G=0$. En el caso de que $\Omega = \text{RVE}$, $G=0$ cuando se prescriben tracciones uniformes en $\partial\Omega$, desplazamientos uniformes en $\partial\Omega$, o bien, *cdc* periódicas. La demostración puede encontrarse en Nemat Nasser y Muneo Hori (1999) y está fundamentada en trabajos Hill (1963, 1967) y Mandel (1980). El hecho de que en el caso del compuesto $G=0$ para las citadas *cdc* justifica que el promedio volumétrico de la tensión y la deformación sean medidas adecuadas de la tensión y la deformación macroscópicas. Sin embargo, si $\Omega = \text{matriz}$ o *partículas*, entonces $\partial\Omega$ contiene a la interfaz entre las fases, en la cual no se verifican las *cdc* particulares previamente citadas. Así, $G \neq 0$ para las fases constituyentes aun cuando el compuesto en su totalidad esté sujeto a tracciones o desplazamientos uniformes en su frontera, o a *cdc* periódicas. El trabajo específico efectuado por la tensión en las fases no puede por lo tanto obtenerse del promedio volumétrico en las fases de la tensión y la deformación.

Se sostiene en el presente trabajo que una definición razonable del estado tenso-deformacional *representativo* de una fase del compuesto, debe reproducir adecuadamente la evolución, durante la historia de deformación del compuesto, del trabajo específico de deformación en dicha fase.

6.4.2 Fundamentos del Método de Homogeneización Secante.

Entre los métodos de la Teoría de Campo Medio para comportamiento elasto-plástico de compuestos reforzados con partículas se encuentran los métodos Secante y Tangente. El segundo de ellos tiende a sobreestimar la respuesta mecánica del compuesto, de modo que en general se recurre a los modelos de tipo Secante. Este ya fue descrito en forma general en el capítulo introductorio. A continuación se detalla los fundamentos de este método con el fin de estudiar su aplicabilidad al caso de PMMC's reforzados con partículas prismáticas como los estudiados en esta Tesis, en que la matriz posee comportamiento constitutivo de tipo no lineal, mientras que las partículas poseen comportamiento elástico lineal.

Sea V un Elemento Representativo de Volumen del material compuesto, de modo que $V = U(V_r)$, donde $r =$ matriz, partículas. Nótese que el comportamiento constitutivo en cada fase es un dato del problema; se representará en lo que sigue mediante una función G^r del siguiente modo:

$$\varepsilon(x) = G_r(\sigma(x)) \quad \text{para } x \in V_r \quad (6.20)$$

El problema a resolver consta entonces de dos partes: un *problema local* y un *problema de homogeneización asociado*. Estos se explicitan en la figura 6.12.

Observación: dado que las funciones G_r dependen de la tensión y ésta, a su vez, depende de la posición, G_r depende implícitamente de la posición. El problema de homogeneización de la figura 6.12 puede, por lo tanto, considerarse como un problema de homogeneización de un compuesto formado por *infinitas* fases no lineales.

Se introduce en este punto una linearización secante para las fases, de modo que la ecuación constitutiva de las fases se reescribe como

$$\varepsilon(x) = M_r^{sec}(\sigma(x)) : \sigma(x) \quad \text{para } x \in V_r \quad (6.21)$$

En el caso de las partículas, el tensor de flexibilidad de la expresión (6.21) es evidentemente independiente de la tensión, ya que se ha considerado partículas elásticas lineales. En la matriz no lineal en cambio, el tensor de flexibilidad sí depende de la tensión de un modo definido por la propia ley constitutiva del material de la matriz. Por ejemplo, para matrices Ramberg-Osgood, como las consideradas en apartados anteriores de este capítulo, la flexibilidad secante se expresa según (6.22)

Problema Local:

Encontrar, para una determinada condición de contorno en ∂V , los campos $\sigma = \sigma(x)$, $\varepsilon = \varepsilon(x)$ y $u = u(x)$, que satisfacen

$$\begin{aligned} \varepsilon(x) &= G_r(\sigma(x)) & x \in V_r & \text{ con } r = \text{matriz, partículas} \\ \varepsilon(x) &= \frac{1}{2}(\nabla \otimes u + (\nabla \otimes u)^T) & x \in V & \\ \nabla \sigma(x) &= 0 & x \in V & \end{aligned}$$

Problema de Homogeneización asociado:

Consiste en encontrar, para las funciones conocidas G_r del problema local, la función G que satisface

$$E = G(\Sigma) \quad \text{donde} \quad \Sigma = \langle \sigma \rangle_V \quad ; \quad E = \langle \varepsilon \rangle_V$$

Obsérvese que, con independencia de la *cdc* impuesta en ∂V , la medida representativa de la tensión y deformación macroscópica del compuesto corresponde a la media volumétrica sobre la totalidad de V .

Figura 6.12: problemas *local* y de *homogeneización* originales.

$$M_m^{sec} = \frac{1}{3K_m} \mathbf{J} + \frac{1}{2G_m^{sec}} \mathbf{K} \quad \text{donde} \quad G_m^{sec} = G_m^{sec}(q_m) = \frac{1}{\frac{1}{G_m} + 3 \frac{\varepsilon_0^{pl}}{\sigma_0} \left(\frac{q_m}{\sigma_0} \right)^{n-1}} \quad (6.22)$$

siendo $q_m = q_m(x)$ la tensión de von Mises local.

En todo caso, con independencia del comportamiento constitutivo particular escogido para la matriz y las partículas, puede reescribirse los problemas local y de homogeneización haciendo uso de la linearización del comportamiento de las fases, como se muestra en la figura 6.13, en la que se ha mantenido, por generalidad, la posibilidad de que ambas fases sean no lineales.

Observación: El problema de homogeneización de la figura 6.13 sigue siendo un problema de homogeneización de *infinitas* fases no lineales, puesto que, al menos en el caso de la matriz, su flexibilidad secante sigue dependiendo implícitamente de la posición a través de tensión local.

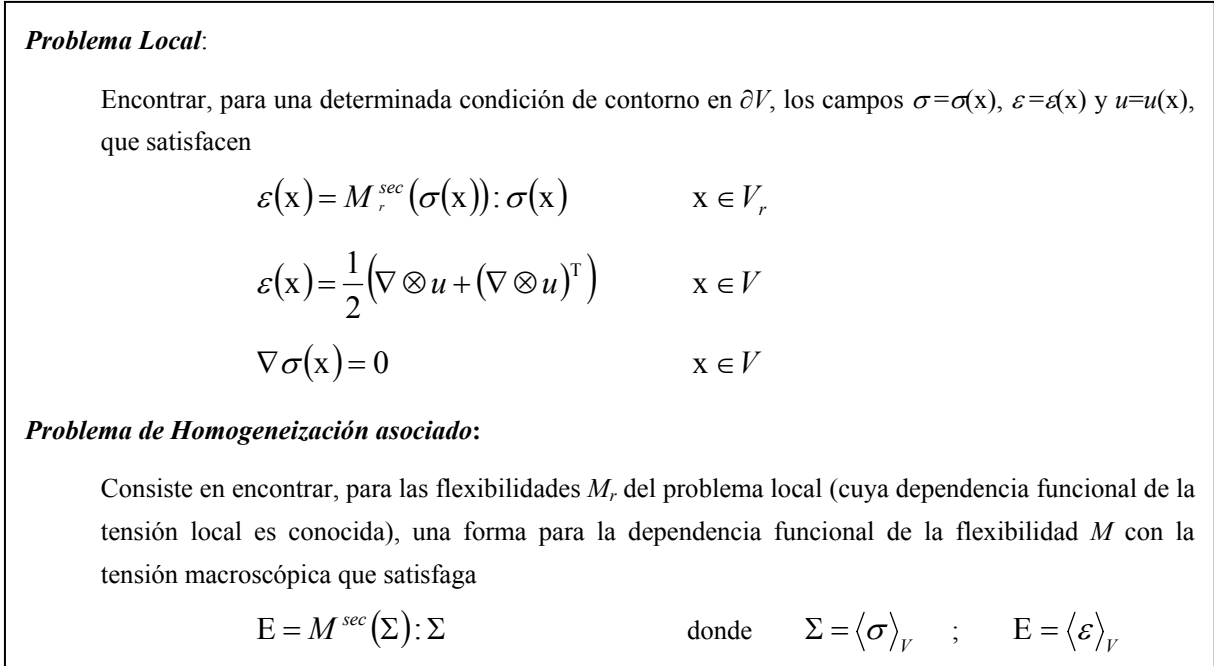


Figura 6.13: problemas local y de homogeneización modificados.

Simplificación fundamental:

Se introduce ahora en el método secante la siguiente simplificación: supóngase que para cada valor de la tensión macroscópica Σ , se reemplaza el material de aquellas fases no lineales por un material *lineal*, adecuadamente escogido (cuya flexibilidad es, por tanto, independiente de la tensión local y de la posición).

Este nuevo material compuesto, constituido ahora únicamente por fases cuyo comportamiento constitutivo es lineal, se denomina “Compuesto Lineal de Comparación” (CLC). Si la única fase con comportamiento constitutivo no lineal es la matriz, el CLC se construye sustituyendo:

$$M_r^{sec} = M_r^{sec}(\sigma(x)) \quad \text{por} \quad M_{r.CLCL}^{sec} = cte \quad \forall x \in V_r \quad r = \text{matriz}$$

Con esta simplificación, y considerando además que para las partículas $M_{p.CLCL}^{sec}$ es simplemente la flexibilidad elástica M_p , definida mediante la ley de Hook con las propiedades elásticas de la partícula, los problemas local y de homogeneización se reescriben como indica la figura 6.14.

Observación: La flexibilidad secante de la fase matriz del CLC es independiente de la tensión local (y por tanto de la posición), sin embargo, es función de la tensión macroscópica Σ . Estos hechos tienen dos implicaciones:

Problema Local:

Encontrar, para una determinada condición de contorno en ∂V , los campos $\sigma = \sigma(x)$, $\varepsilon = \varepsilon(x)$ y $u = u(x)$, que satisfacen

$$\varepsilon(x) = M_{r.CLC}^{sec} : \sigma(x) \quad x \in V_r \quad \text{con } r = \text{matriz, partículas}$$

$$\varepsilon(x) = \frac{1}{2} (\nabla \otimes u + (\nabla \otimes u)^T) \quad x \in V$$

$$\nabla \sigma(x) = 0 \quad x \in V$$

Problema de Homogeneización asociado:

Consiste en encontrar, para las flexibilidades constantes M_r del problema local evaluadas a la tensión macroscópica Σ , un valor para la matriz de flexibilidad M del compuesto, que satisfaga

$$E = M^{sec} : \Sigma \quad \text{donde} \quad \Sigma = \langle \sigma \rangle_V \quad ; \quad E = \langle \varepsilon \rangle_V$$

Figura 6.14: problemas *local* y de *homogeneización* planteados en el material *Compuesto Lineal de Comparación*.

- i.* La primera es que, para cada valor de Σ , el problema de homogeneización de la figura 6.14 es ahora un problema de homogeneización de *dos* fases lineales, pudiendo resolverse, para cada valor de Σ , por alguno de los métodos de homogeneización lineales descritos en los apartados 2.2.1.a y 2.2.1.b, que dan la flexibilidad del compuesto en términos de las flexibilidades elásticas de las fases y de las características microestructurales. Mediante la relación funcional genérica de la expresión (6.23) se denotará en adelante a este método de homogeneización lineal que subyace bajo el método Secante.

$$M^{sec} = M^{sec} (M_{m.CLC}^{sec}, M_p, F, R) \quad (6.23)$$

- ii.* La segunda es que el problema de homogeneización es no lineal en la historia de la sollicitación mecánica macroscópica y debe, por tanto, resolverse por iteraciones.

Como se ha indicado, el tensor de flexibilidad en la fase matriz del CLC varía con la tensión macroscópica Σ . La forma de esta dependencia –necesaria para una implementación práctica del método de homogeneización Secante– se ha establecido en la literatura de dos maneras, conducentes a los métodos Secante Clásico y Modificado. Ambos enfoques consideran que la flexibilidad de la matriz depende de una medida *representativa* de la tensión de von Mises en la fase matriz, medida que ha de relacionarse a su vez, con la tensión macroscópica. La diferencia entre ambos enfoques radica en la definición adoptada para esta medida.

Método Secante Clásico: considera como medida representativa de la tensión de von Mises en la matriz, aquella calculada a partir del promedio volumétrico del **tensor de tensiones** en esta fase. Así,

$$q_m^I = \sqrt{\frac{3}{2}(\mathbf{K} : \Sigma_m) : (\mathbf{K} : \Sigma_m)} \quad \text{con} \quad \Sigma_m = \langle \sigma \rangle_{m.CLIC} \quad (6.24a)$$

Método Secante Modificado: considera como medida representativa de la tensión de von Mises en la matriz, aquella calculada a partir del promedio volumétrico del **momento de segundo orden del tensor de tensiones** en esta fase.

$$q_m^{II} = \sqrt{\frac{3}{2}\mathbf{K} :: \Sigma_m^2} \quad \text{con} \quad \Sigma_m^2 = \langle \sigma \otimes \sigma \rangle_{m.CLIC} \quad (6.24b)$$

Adicionalmente, Segurado (2004) introdujo, en el contexto de modelos de celda multipartícula de compuestos reforzados con *esferas*, una **tercera medida** representativa de la tensión en la fase matriz, que corresponde al promedio volumétrico de la tensión de von Mises en dicha fase.

$$q_m^{III} = \langle q \rangle_m \quad \text{con} \quad q = q(\mathbf{x}) = \frac{3}{2}(\mathbf{K} : \sigma) : (\mathbf{K} : \sigma) \quad ; \quad \sigma = \sigma(\mathbf{x}) \quad (6.24c)$$

En las expresiones (6.24a) y (6.24b), el indicativo CLC se ha incluido para enfatizar el hecho fundamental de que estos promedios volumétricos se calculan sobre la fase matriz del *Compuesto Lineal de Comparación*, no sobre la fase correspondiente del material compuesto *original* con constituyentes no lineales. La consecuencia de esto es que en el método Secante Clásico, el valor de Σ_m se obtiene de la tensión macroscópica Σ y del tensor de concentración a través de la ec. (6.25a), mientras que en el método Secante Modificado, Σ_m^2 se obtiene de los resultados de Kreher (1990) y Buryachenko (1996), ec. (6.25b).

$$\Sigma_m = \langle \sigma \rangle_{m.CLIC} = B_m : \Sigma \quad (6.25a)$$

$$\Sigma_m^2 = \langle \sigma \otimes \sigma \rangle_{m.CLIC} = \frac{1}{1-F} \Sigma : \frac{\partial M^{sec}}{\partial M_{m.CLIC}^{sec}} : \Sigma \quad (6.25b)$$

En el método Secante Clásico, el tensor de concentración de la tensión en la matriz del CLC, a utilizar en la ec. (6.25a), puede expresarse a partir de la ecs. (2.7 y 2.10) como

$$B_m = \frac{1}{1-F} \left\{ (M_{m.CLIC}^{sec} - M_p)^{-1} : (M^{sec} - M_p) \right\} \quad (6.26)$$

En el método Secante Modificado, por su parte, las derivadas presentes en la expresión (6.25b) podrán evaluarse una vez se haya escogido un método de homogeneización de constantes elásticas que provea una expresión analítica para (6.23).

Para q_m^{III} sin embargo, no hay forma de calcular su valor mediante promediación en el CLC, de modo que esta medida no puede ser usada en el contexto del método de homogeneización Secante. Se ha incluido aquí como referencia.

Como se ha indicado, en el caso particular de matrices que endurecen de acuerdo a una ley potencial Ramberg-Osgood, la definición adoptada para la tensión representativa en la matriz define la flexibilidad de la fase matriz según la ec. (6.22). Esto significa que el método Secante, en sus dos versiones, utiliza una determinada medida representativa de la tensión en una fase no lineal *en conjunto* con la ecuación constitutiva que es *propiedad* de dicha fase, y que tiene validez en el compuesto original únicamente a nivel local.

6.4.3 Comparación Numérica de las Medidas Representativas en la Matriz.

Si bien q_m^I y q_m^{II} han de obtenerse mediante promediación en el CLC, es razonable suponer que si el propio concepto de *Compuesto Lineal de Comparación* es una buena aproximación para describir el comportamiento mecánico del compuesto original, entonces estas medidas podrían ser estimadas mediante análisis FEM de celdas multipartícula (cuyos resultados son, de hecho y salvo los errores numéricos asociados a todo procedimiento numérico, la solución del Problema Local de la figura 6.12, en el compuesto original).

En base a esta suposición, mediante la simulación de celdas multipartículas, se han estimado y comparado las tres medidas representativas de la tensión equivalente en la matriz del compuesto. Para cada una de ellas, se ha estimado también el trabajo disipado en la deformación plástica de la fase matriz, al ser usadas en conjunto con la ecuación constitutiva que es propiedad de la matriz. Estas disipaciones pueden ser comparadas con el valor obtenido directamente del análisis de celdas mediante la expresión (6.14), representada anteriormente en la figura 6.9 para el caso particular de una celda de $F=20\%$, $R=1$ y $N=40$ partículas de orientación aleatoria. Para esta misma celda, se muestran en la figura 6.15 la evolución de las tres medidas de la tensión de referencia en la matriz, en conjunto con sus respectivas estimaciones del trabajo disipado en plasticidad en la fase matriz.

Segurado (2004) mostró que, en el caso de partículas esféricas, la segunda y tercera medida representativa son muy cercanas entre sí, siendo la tercera ligeramente superior. En el caso de compuestos reforzados con partículas prismáticas, la diferencia es aun menor, estando ambas curvas prácticamente superpuestas.

Lo mismo ocurre en el caso del trabajo disipado, donde las estimaciones deducidas de la segunda y tercera medidas de la tensión son muy cercanas entre sí. Ambas estimaciones, sin embargo, difieren en una cuantía no despreciable de la referencia numérica, calculada según la expresión (6.14).

Como nota aclaratoria, obsérvese que la abscisa en la figura 6.15 es el *tiempo* en que transcurre la sollicitación mecánica, de modo que el trabajo disipado representado en la figura 6.15 derecha no tiene relación alguna con el *área* bajo las curvas 6.15 izquierda.

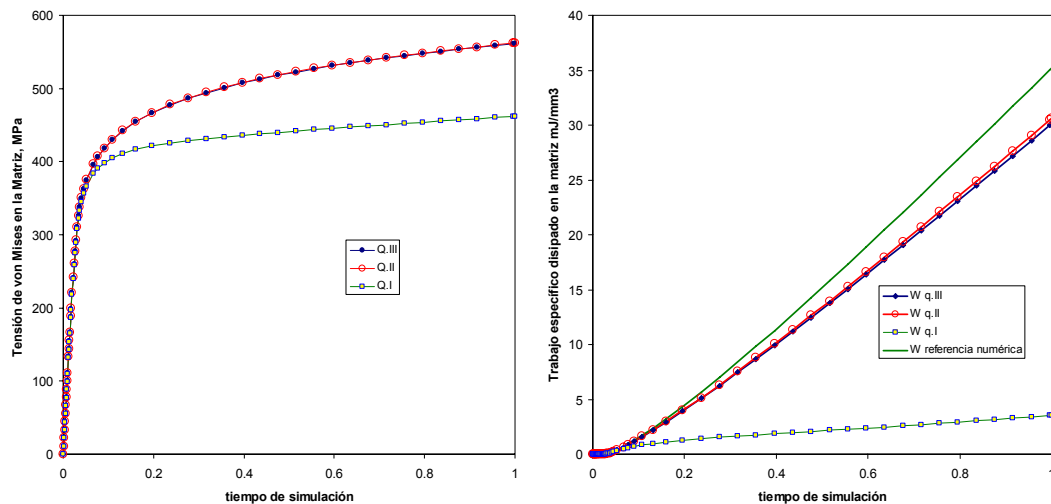


Figura 6.15: comparación de las tres medidas representativas para la tensión equivalente en la matriz, y el trabajo disipado en plasticidad estimado a partir de cada una de ellas.

De la ec. (6.22) se deduce que la flexibilidad secante de la matriz es creciente con la tensión de referencia q_m , de modo que si su valor es demasiado bajo, se estimará que la matriz es demasiado rígida, lo que, en consecuencia, conducirá a una estimación demasiado rígida de la respuesta mecánica del compuesto.

Lo anterior aplica especialmente en el caso de la primera medida de la tensión representativa, puesto que la notable cuantía de la subestimación en el trabajo disipado en comparación con la referencia numérica, sugiere que el valor de q_m^I es, en efecto, demasiado bajo, determinando que el método Secante Clásico estime una respuesta demasiado rígida del compuesto.

En el caso de q_m^{II} , aunque también hay una subestimación del trabajo disipado, ésta es de menor cuantía, de modo que, a pesar de esta limitación, aun podría ser de utilidad práctica disponer de un modo de implementar el método Secante Modificado en el caso de partículas prismáticas. Esto es lo que se describe a continuación. Por completitud, se describe también una implementación del método Clásico, aunque el interés mayor reside en el método Secante Modificado.

6.4.4 Una Implementación Particular del Método Secante.

En términos de implementación práctica, las ecuaciones (6.22) a (6.26), que complementan los problemas local y de homogeneización de la figura 6.14, permiten resolver iterativamente una sollicitación mecánica macroscópica, tanto bajo tensión macroscópica Σ prescrita como bajo deformación macroscópica E prescrita. Si se considera como *estado convergido*, uno en el que:

Se conoce en el compuesto: Σ, E, M^{sec}

Se conoce en la matriz: $E_m = \langle \varepsilon \rangle_{m.CLC}, \Sigma_m = \langle \sigma \rangle_{m.CLC}, q_m$ y $M_{m.CLC}^{sec}(q_m)$

Se conoce en las partículas: $E_p = \langle \varepsilon \rangle_{p.CLC}, \Sigma_p = \langle \sigma \rangle_{p.CLC}$

Entonces, frente a una variación *prescrita* de la tensión macroscópica Σ a partir de este estado actual *convergido*, las ecuaciones (6.24) y (6.25), en conjunto con (6.22), determinan una variación de la flexibilidad de la fase matriz del CLC, lo que determina a su vez una variación del tensor de concentración B_m a través de (6.26) y, finalmente, de la flexibilidad secante efectiva del compuesto a través de (6.23). Iterando sobre este ciclo, se logra eventualmente un nuevo estado convergido. Se opera de manera similar frente a una variación prescrita de la macro-deformación E .

Nótese que la ecuación (6.23) constituye una expresión abstracta que toma una forma analítica más o menos explícita dependiendo del método de homogeneización lineal adoptado, existiendo un gran número de expresiones aplicables a partículas esféricas o elipsoidales, generalmente basadas en estimaciones del tensor de concentración de la tensión B_m a partir del tensor de Eshelby. No se conoce, en esta línea, un conjunto de expresiones analíticas específicamente aplicables a partículas prismáticas en orientación aleatoria. Si bien esto podría realizarse utilizando alguno de los recientes métodos (Wennan Zou y otros, 2010) para la estimación del tensor de Eshelby para geometrías complejas no elipsoidales, se vislumbra que su propia naturaleza numérica podría ser una seria desventaja en términos de coste computacional y no está claro que conduzcan, al final, a expresiones sencillas para estimar el

tensor de concentración, y por consiguiente, la flexibilidad efectiva de modo manejable. Por otra parte, podría usarse también para (6.23) los límites de Hashin-Shtrikman (ver apartado 2.2.1.d), que son los límites más ajustados que puede obtenerse cuando se desconoce información sobre la geometría de partículas.

En esta Tesis, sin embargo, se propone utilizar la caracterización fenomenológica elástica desarrollada previamente en el capítulo 5 de este trabajo, a través de la ec. (5.4) de Halpin-Tsai. Esta fórmula permite evaluar no sólo la expresión abstracta (6.23), sino también las derivadas que aparecen en la ec. (6.25b), para todas las configuraciones microestructurales para las cuales existen valores conocidos para el parámetro s , en particular, aquellas mencionadas en las tablas 5.2 y 5.3. Esto es lo que se explica a continuación, considerando, por simplicidad, sólo aquellos casos en que el comportamiento elasto-plástico es de tipo isótropo. En estos casos, los tensores de flexibilidad secante que aparecen en (6.23) y en las derivadas de (6.25b) se expresan según (6.22) en el caso de la fase matriz, y según (6.27) en el caso del compuesto.

$$M^{sec} = \frac{1}{3K} \mathbf{J} + \frac{1}{2G^{sec}} \mathbf{K} \quad (6.27a)$$

En relación con la ec. (6.23), es evidente que el tensor de flexibilidad secante del compuesto puede obtenerse de la expresión (5.4) de Halpin-Tsai, asimilando

$$\ell \sim K \quad ; \quad \ell_m \sim K_m \quad ; \quad \ell_p \sim K_p \quad \text{o bien} \quad \ell \sim G^{sec} \quad ; \quad \ell_m \sim G_m^{sec} \quad ; \quad \ell_p \sim G_p$$

Nótese que en las expresiones anteriores se ha omitido el superíndice *sec* en los módulos de compresibilidad, dado que se considera que esta propiedad es independiente de la deformación. Lo mismo ocurre con el módulo de cortadura de las partículas elásticas, contrariamente a lo que ocurre con el módulo de cortadura tanto de la matriz como del compuesto. Con estas consideraciones, la ec. (6.23) se transforma en la (6.27bc)

$$K = K_m \frac{1 + s_k \eta F}{1 - \eta F} \quad \text{con} \quad \eta = \eta \left(\frac{K_p}{K_m}; s_k \right) = \frac{\frac{K_p}{K_m} - 1}{\frac{K_p}{K_m} + s_k} \quad (6.27b)$$

$$G^{sec} = G_m^{sec} \frac{1 + s_g \eta F}{1 - \eta F} \quad \text{con} \quad \eta = \eta \left(\frac{G_p}{G_m^{sec}}; s_g \right) = \frac{\frac{G_p}{G_m^{sec}} - 1}{\frac{G_p}{G_m^{sec}} + s_g} \quad (6.27c)$$

donde los valores de s_k y s_g se pueden obtener de las tablas 5.2 y 5.3.

En relación con las derivadas que aparecen en (6.25b), puede considerarse que:

- a. El módulo de *compresibilidad* del compuesto sólo depende de los módulos de *compresibilidad* de las fases constituyentes y de la microestructura (a través de F y R).
- b. El módulo de *cortadura* del compuesto sólo depende de los módulos de *cortadura* de las fases constituyentes y de la microestructura (a través de F y R).

Es decir, no existe una dependencia cruzada de K con G_m^{sec} , ni de G^{sec} con K_m . En estas circunstancias, puede demostrarse, recurriendo a (6.25b), que la expresión (6.24b) se puede reescribir como

$$q_m'' = \sqrt{\frac{3}{1-F} \frac{\partial(1/2G^{sec})}{\partial(1/G_m^{sec})}} \Sigma : \mathbf{K} : \Sigma \quad (6.28)$$

Haciendo uso de las propiedades siguientes:

$$\mathbf{S} = \mathbf{K} : \Sigma \quad ; \quad q = \sqrt{\frac{3}{2}} \mathbf{S} : \mathbf{S} \quad ; \quad \Sigma : \mathbf{S} = \mathbf{S} : \mathbf{S}$$

puede reescribirse (6.28) del siguiente modo:

$$q_m'' = \sqrt{\frac{1}{1-F} \frac{\partial(1/G^{sec})}{\partial(1/G_m^{sec})}} q \quad (6.29)$$

Es decir, la tensión escalar representativa en la fase matriz a ser utilizada en el método Secante Modificado puede obtenerse de la tensión macroscópica equivalente de von Mises, a través de la derivada del módulo de cortadura secante efectivo. Reordenando términos de la expresión (5.4) de Halpin-Tsai y derivando, se tiene que:

$$\frac{\partial(1/\ell)}{\partial(1/\ell_m)} = \frac{1-\eta F}{1+s\eta F} - F \frac{\ell_p}{\ell_m} \left\{ \frac{s+1}{(1+s\eta F)(s+\ell_p/\ell_m)} \right\}^2 \quad (6.30)$$

donde, como antes, se asimila $\ell \sim G^{sec}$; $\ell_m \sim G_m^{sec}$; $\ell_p \sim G_p$

Observaciones:

- Con lo anterior se dispone ahora de todos los ingredientes necesarios para poder evaluar las ecuaciones (6.22) a (6.26) que definen el método secante, tanto Clásico como Modificado, a través de la ecuación de Halpin-Tsai.
- Una posible limitación asociada a la metodología expuesta la constituye el hecho de que los valores de parámetro s fueron calibrados en el capítulo 5 para un rango concreto en los valores de la relación de *contraste* entre las propiedades elásticas de matriz y partículas. No está garantizado, sin embargo, que la relación de *contraste* en la ec. (6.27), entre el módulo de cortadura de las partículas y el módulo de cortadura secante de la matriz, esté siempre dentro del rango en el que fue calibrado el parámetro s .
- En el Anexo B se describe en detalle la algoritmia necesaria para implementar el método Secante en conjunto con la ecuación de Halpin-Tsai, cuando el método iterativo e incremental está controlado en deformaciones macroscópicas prescritas.

Capítulo 7

Daño por Decoherión en PMMCs

En el presente capítulo se aborda mediante modelos de celda multipartícula el estudio del daño por decoherión matriz-partícula. El objetivo del estudio consiste en describir, desde un punto de vista fenomenológico, la influencia que los parámetros del modelo de daño implementado para la interfaz tienen sobre el comportamiento macroscópico del compuesto, describiendo la degradación tanto del límite elástico como del módulo de Young.

7.1 Introducción

En los capítulos anteriores de resultados (capítulos 4, 5 y 6), la modelación del comportamiento del material compuesto no ha incluido los efectos de ninguno de los tres mecanismos de daño que pueden afectar a este tipo de materiales, a saber, la fractura de partículas, la decohesión entre matriz y partículas y el daño dúctil en la matriz del material. En materiales reales sin embargo, estos mecanismos suelen presentarse, teniendo como consecuencia una degradación progresiva tanto del límite elástico como del módulo de Young del compuesto, durante la historia de deformación macroscópica

En el presente capítulo se estudia el efecto del daño por decohesión entre matriz y partículas sobre el comportamiento mecánico del material compuesto. El estudio de métodos de modelación de los otros dos mecanismos de daño se deja como trabajo futuro.

El enfoque utilizado consiste en situar elementos finitos de *intercara* en las interfaces matriz-partícula de celdas multipartícula, cuyo comportamiento constitutivo se definió a través del Modelo de Fisura Cohesiva (MFC). Los parámetros de este modelo fueron descritos extensamente en el apartado 3.2.5 en su relación con ciertas características microestructurales del compuesto. En el contexto del MFC, algunos de sus parámetros son considerados como una *propiedad* de la interfaz cohesiva, mientras que otros tienen únicamente un carácter funcional u operativo:

Son *propiedad* de la interfaz:

- A. Resistencia Mecánica de la Interfaz, t^R , definida en 3.2.5.b y estimada a través del parámetro β de la ecuación (3.13).
- B. Forma de la curva de ablandamiento, representada en general en la figura 3.12.
- C. Energía de Fractura, G^C , definida en 3.2.5.e.
- D. Criterio de Iniciación del Daño, descrito en 3.2.5.d.

Son parámetros con carácter *operativo*:

- E. Rigidez Cohesiva Inicial, descrita en 3.2.5.a y 3.2.5.c y calibrada en 7.3.1.
- F. Viscosidad Numérica de Daño, descrita y calibrada en 7.3.2.

En todas las simulaciones realizadas se consideró una *curva de ablandamiento* (parámetro B) de tipo lineal al modo de la figura 3.19, así como un *criterio de iniciación de daño* de tipo cuadrático en tensiones según la ec. (3.14), representada en la figura 3.15 para un caso

bidimensional. La *rigidez cohesiva inicial* (E) por su parte, fue calibrada de acuerdo a lo indicado en 3.2.5.c, de modo que, una vez hallado un valor aceptable para ella, éste se usó en todas las simulaciones del presente capítulo.

Con estas consideraciones, el objetivo principal de este capítulo consiste en establecer, mediante variación sistemática tanto de la *Resistencia de Interfaz* (A) como de la *Energía de Fractura* (C), el modo en que estos parámetros influyen sobre variables macroscópicas tales como la curva de endurecimiento y el módulo de Young del material compuesto.

Por otro lado, también es de interés estudiar cómo influyen las citadas propiedades cohesivas sobre la evolución de algunas variables energéticas, particularmente, la fracción del trabajo total efectuado por las fuerzas externas que se disipa en los procesos de decohesión matriz-partícula durante la historia de deformación.

Nótese que, en acuerdo con las observaciones planteadas en el apartado 4.1.1, no se buscará en el presente capítulo establecer valores para los parámetros A a D, que produzcan buen ajuste frente a datos tensión-deformación obtenidos experimentalmente.

Si bien la intención original consistía en establecer estas influencias en el caso tridimensional, la metodología fue implementada, con distinto grado de éxito, tanto para modelos 2D (tensión y deformación plana) como 3D.

En el caso 2D las mallas FEM de las fases sólidas utilizaron triángulos de interpolación lineal con mallas bastante refinadas para minimizar el efecto de sobreestimación de la rigidez asociado a este tipo de elementos. Se consideró un escenario microestructural en que la fracción de superficie de refuerzo de partículas es de $F=30\%$ y la esbeltez de partícula fue de $R=1$. En estos casos bidimensionales fue posible obtener resultados para una gama relativamente amplia de combinaciones de valores de t^R y G^C , experimentando relativamente pocas dificultades de convergencia.

En el caso 3D sin embargo, se encontró numerosos problemas numéricos –de convergencia y de implementación– que impidieron evaluar una gama amplia de combinaciones de t^R y G^C . Los modelos tridimensionales, sin embargo, sí permitieron observar un efecto que tiene lugar cuando se implementan modelos constitutivos que incorporan Mecánica de Daño en su formulación, en la simulación de procesos de carga-descarga, y cuya descripción es de interés, no tanto por su relevancia en relación con el comportamiento mecánico de PMMCs, sino por las implicaciones que puede tener en la formulación e implementación de modelos de Daño.

El capítulo consta de cuatro apartados. El primero, “Consideraciones previas...”, es eminentemente teórico y proporciona una reinterpretación de algunos conceptos de la

Mecánica del Daño. Se describe dos posibles definiciones para una medida del daño macroscópico en el material compuesto. En base a ellas, se describe además un modo para cuantificar la fracción del trabajo total efectuado por las fuerzas externas que se ha disipado en un proceso de daño. En el segundo apartado, “Implementación del modelo cohesivo en 2D”, se describe la influencia de viscosidad de daño y se presentan los resultados sobre la influencia de t^R y G^C en tensión plana. En el tercero, “Implementación del modelo cohesivo en 3D”, se describe las dificultades numéricas observadas junto con algunos resultados preliminares basados en elementos lineales.

Finalmente, en el cuarto y último apartado, “Modelización incluyendo descargas”, se describe un problema asociado a Mecánica de Daño, asociado a falta de unicidad en la solución numérica del campo tenso-deformacional cuando se modela las descargas elásticas incluyendo el efecto del daño.

7.2 Consideraciones Previas: Elementos de Mecánica del Daño

7.2.1 Medida Macroscópica del Daño.

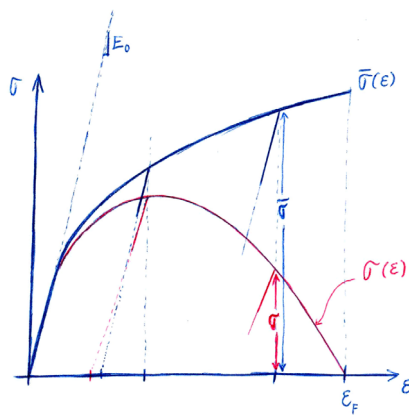
Interesa en este apartado definir una *medida* del Daño progresivo que puede sufrir un material (sólido) arbitrario durante una determinada sollicitación mecánica. Para estos efectos, es necesario considerar que el material efectivo –observable a escala macroscópica y cuyo comportamiento mecánico *medible* incluye el efecto del daño– está, a su vez, constituido a escala microscópica por un agregado abstracto formado por uno o varios “materiales sanos” y por uno o varios “mecanismos de daño” actuantes. Para definir una medida del daño a escala macroscópica debe conocerse, por una parte, el comportamiento constitutivo de los materiales constituyentes sanos y, por otra, cuáles son los parámetros del comportamiento constitutivo macroscópico que son afectados por los citados mecanismos de daño.

En lo que sigue, se considerará que el comportamiento constitutivo de los constituyentes sanos es conocido y que los mecanismos de daño actuantes a escala microscópica pueden actuar degradando tanto el módulo de elasticidad como el límite de elasticidad efectivos. Puesto que el comportamiento constitutivo de los constituyentes sanos se ha supuesto conocido, puede también suponerse *conocido* (mediante homogeneización) el comportamiento macroscópico o efectivo que el material tendría en ausencia de mecanismos de daño. Así, este comportamiento de *referencia*, sin daño, queda definido completamente a

través del módulo de elasticidad inicial E_0 y de la curva de endurecimiento del material $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\varepsilon)$

Finalmente, se considerará que el comportamiento macroscópico del material, incluyendo el efecto del daño, queda completamente definido por su módulo de elasticidad $E=E(\varepsilon)$ –que puede ahora variar con la deformación– y por su curva de endurecimiento $\sigma = \sigma(\varepsilon)$.

En este contexto, se introduce ahora la definición de dos medidas del Daño del material efectivo, a partir de los efectos que los mecanismos de daño presentes a escala microscópica tienen sobre el comportamiento macroscópico. Si se cuantifica cada *efecto* mediante un *Parámetro Escalar de Daño*, entonces se define el “Daño en Tensión” y el “Daño en Módulo” según se indica en la figura 7.1.



Daño en Tensión:

$$D_{\sigma} = D_{\sigma}(\varepsilon) = 1 - \frac{\sigma(\varepsilon)}{\bar{\sigma}(\varepsilon)} \quad \text{con} \quad 0 \leq D_{\sigma} \leq 1 \quad (7.1)$$

Daño en Módulo de Elasticidad:

$$D_E = D_E(\varepsilon) = 1 - \frac{E(\varepsilon)}{E_0} \quad \text{con} \quad 0 \leq D_E \leq 1 \quad (7.2)$$

Figura 7.1 Definiciones del Daño en Tensión y del Daño Módulo.

Observaciones:

- i.* En el caso particular de materiales compuestos reforzados con partículas, los mecanismos de daño actuantes a escala microscópica son los ya citados en la introducción: decohesión matriz-partícula, fractura de partículas o nucleación crecimiento y coalescencia de microvacíos en la matriz dúctil. En cualquier caso y como se ha indicado anteriormente, la medida del daño se realiza a partir del efecto combinado que estos mecanismos tienen sobre el comportamiento macroscópico del compuesto.
- ii.* Ambos parámetros escalares de daño dan cuenta de una *degradación*, en un caso del límite elástico del material, y en el otro, del módulo de Young. En el contexto de la Mecánica del Daño, las *evoluciones* de D_E y D_{σ} con la deformación macroscópica ε , son consideradas como *propiedad* del material.

- iii. La definición para el “Daño en Tensiones” presupone una hipótesis de iso-deformación para la comparación entre la tensión transmitida por el material y la tensión de referencia, contrariamente a la definición de Lemaitre, según la cual la tensión de referencia ha de evaluarse en la zona más solicitada, en la microescala. Se mantiene en aplicación, en todo caso, el principio de Deformación Equivalente (Lemaitre, 1971), que en el presente trabajo se interpreta del siguiente modo: “el comportamiento constitutivo de los *constituyentes sanos* no se ve modificado por los *mecanismos de daño* actuantes en el seno del material”.
- iv. Si bien las definiciones (7.1) y (7.2) se han formulado para un material genérico de tipo *sólido*, en que tienen sentido físico los conceptos de módulo de Young y de límite de elasticidad, estas pueden extenderse a materiales no sólidos, tales como las interfaces cohesivas descritas en el apartado 3.3.5 mediante una reinterpretación adecuada de los parámetros de dicho modelo. Así, la interfaz cohesiva puede considerarse como un agregado formado por una “interfaz sana”, cuya respuesta es proporcional en tensiones y sin deformación plástica, más un mecanismo de daño que degrada tanto la resistencia mecánica como la rigidez de la interfaz sana. El modelo descrito en 3.3.5 considera implícitamente además que el Daño en Tensión y el Daño en Rigidez tienen *igual evolución* con la deformación, con lo cual el comportamiento constitutivo de la interfaz cohesiva queda completamente determinado al definir el comportamiento lineal elástico de la “interfaz sana” y la ley de evolución con la deformación de un *único* Parámetro Escalar de Daño.

En el caso más general de materiales sólidos que experimentan procesos de daño durante la deformación, las evoluciones de D_E y D_σ con la deformación macroscópica ε , pueden ser diferentes. En todo caso, pueden establecerse las siguientes hipótesis:

- a. El material no presenta daño al inicio de la historia de deformación, por lo tanto,

$$D_\sigma(0) = D_\varepsilon(0) = 0$$

- b. Cuando el material está completamente dañado, a la deformación ε^F , se tiene,

$$D_\sigma(\varepsilon^F) = D_\varepsilon(\varepsilon^F) = 1 \text{ donde ha de considerarse a } \varepsilon^F \text{ como } \textit{propiedad} \text{ del material.}$$

- c. El daño sólo puede crecer durante la historia de deformación, aunque la sollicitación mecánica eventualmente disminuya,

$$\left. \frac{dD_\sigma}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_{\max}} \geq 0 \quad ; \quad \left. \frac{dD_E}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_{\max}} \geq 0 \quad \text{para} \quad 0 \leq \varepsilon_{\max} \leq \varepsilon^F$$

donde ε_{\max} es una medida del máximo valor que ha alcanzado la deformación durante la historia de deformación.

- d. No negatividad de la deformación plástica: cualquier descripción analítica de las evoluciones de $D_\sigma(\varepsilon)$ y de $D_E(\varepsilon)$, debe garantizar, al menos, una evolución *físicamente razonable* de la deformación plástica. Esto se ejemplificará más adelante.

7.2.2 Trabajo Disipado por los Mecanismos de Daño.

Interesa a continuación, cuantificar la fracción del trabajo total aportado por las fuerzas externas que se disipa en los mecanismos de daño durante el proceso de deformación de un RVE de un material arbitrario. El desarrollo que a continuación se expone se basa en el principio de conservación de la energía y emplea las siguientes definiciones, en el supuesto de tensión macroscópica uniaxial:

$W_{ext}(\varepsilon)$: trabajo efectuado por las fuerzas externas.

$W_\sigma(\varepsilon)$: trabajo efectuado por la tensión.

$E^{el}(\varepsilon)$: energía de deformación elástica

$W^{pl}(\varepsilon)$: trabajo de deformación plástica

$W^d(\varepsilon)$: trabajo disipado en daño

$E_0, E(\varepsilon)$: módulo de elasticidad inicial y degradado por efectos del daño, respectivamente.

Cuando un sólido está sometido a cargas exteriores éstas realizan un trabajo que es almacenado en el sólido en forma de energía elástica o disipado en deformación plástica y en daño. El principio de conservación de la energía establece que “el trabajo realizado por las fuerzas externas $W_{ext}(\varepsilon)$ es igual al trabajo efectuado por la tensión $W_\sigma(\varepsilon)$ en el interior del RVE”. Este último es, a su vez, igual a la suma de la energía de deformación elástica (recuperable) y del trabajo disipado tanto en deformación plástica como en los mecanismos de daño que tengan lugar en el interior del RVE. Esto se expresa tanto en términos totales

integrados hasta la macro-deformación ε , como en términos incrementales, ecs. (7.3) y (7.4), respectivamente.

$$W_{ext}(\varepsilon) = W_{\sigma}(\varepsilon) \quad \text{o bien} \quad dW_{ext} = dW_{\sigma} \quad (7.3)$$

$$dW_{\sigma} = dE^{el} + dW^{pl} + dW^d \quad (7.4)$$

Obsérvese que en un proceso de sollicitación uniaxial controlado por deformación monótonamente creciente, puede considerarse que $dW^{pl}, dW^d \geq 0$ puesto que ambos incrementos corresponden a disipaciones de energía. No puede sin embargo concluirse en términos absolutos sobre el signo de dE^{el} ; es positivo en estadios iniciales de la historia de deformación y negativo en estadios más avanzados, debido a la concurrente progresión de los mecanismos de daño, que tienen el efecto de *liberar* parte de la energía elástica almacenada.

Utilizando la suposición de tracción uniaxial, la descomposición aditiva de la deformación total (en sus componentes elástica y plástica) así como las medidas de cuantificación del efecto del daño introducidas anteriormente, puede expresarse lo siguiente:

$$\text{Deformación total:} \quad \varepsilon = \varepsilon^{el} + \varepsilon^{pl} \quad \text{o bien} \quad d\varepsilon = d\varepsilon^{el} + d\varepsilon^{pl} \quad (7.5)$$

$$\text{Deformación elástica:} \quad \varepsilon^{el} = \frac{\sigma}{E} = \frac{\bar{\sigma}}{E_0} \cdot \frac{1 - D_{\sigma}}{1 - D_E} = \bar{\varepsilon}^{el}(\varepsilon) \cdot \frac{1 - D_{\sigma}(\varepsilon)}{1 - D_E(\varepsilon)} = \varepsilon^{el}(\varepsilon) \quad (7.6)$$

donde el término $\bar{\varepsilon}^{el}(\varepsilon)$ denota la deformación elástica que el material exhibiría a la deformación total ε , en ausencia de mecanismos de daño.

$$\text{Deformación plástica:} \quad \varepsilon^{pl} = \varepsilon - \varepsilon^{el}(\varepsilon) = \varepsilon - \frac{\bar{\sigma}}{E_0} \cdot \frac{1 - D_{\sigma}}{1 - D_E} = \varepsilon^{pl}(\varepsilon) \quad (7.7)$$

No negatividad de la deformación plástica: nótese que dado que se ha supuesto sollicitación de tracción uniaxial, si se utiliza expresiones analíticas para $\bar{\sigma}(\varepsilon)$, $D_{\sigma}(\varepsilon)$ y $D_E(\varepsilon)$, éstas deben cumplir que la deformación plástica sea siempre positiva. Puede verificarse que esta condición queda garantizada si

$$\varepsilon^{pl} \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad D_E(\varepsilon) \leq 1 - \frac{\bar{\sigma}(\varepsilon)}{\varepsilon E_0} \{1 - D_{\sigma}(\varepsilon)\}$$

lo cual establece una relación entre las formas de la evolución de los parámetros de Daño con la deformación macroscópica, a través del comportamiento mecánico efectivo que el material mostraría en ausencia de mecanismos de daño.

Con las definiciones anteriores puede explicitarse ahora todos los términos energéticos:

Trabajo total efectuado por la tensión:

$$dW_{\sigma} = \sigma d\varepsilon \quad (7.8)$$

Energía potencial elástica:

$$E^{el} = \frac{1}{2} E(\varepsilon) (\varepsilon^{el})^2 \quad (7.9a)$$

$$dE^{el} = \frac{1}{2} \left\{ (\varepsilon^{el})^2 \frac{dE}{d\varepsilon} + 2\varepsilon^{el} E \frac{d\varepsilon^{el}}{d\varepsilon} \right\} d\varepsilon = \frac{1}{2} (\varepsilon^{el})^2 dE + \varepsilon^{el} E d\varepsilon^{el} \quad (7.9b)$$

Trabajo disipado en plasticidad:

$$dW^{pl} = \sigma d\varepsilon - \sigma d\varepsilon^{el} \quad (7.10)$$

Finalmente, el trabajo disipado por los mecanismos de daño puede expresarse de tres maneras alternativas, equivalentes entre sí: de la conservación de energía en el RVE, ec.(7.4), y de las expresiones (7.8) a (7.10), se obtiene la expresión (7.11a). Mediante (7.6), puede escribirse también (7.11b) y (7.11c).

Trabajo disipado por los mecanismos de daño:

$$dW^d = -\frac{1}{2} (\varepsilon^{el})^2 dE \quad (7.11a)$$

$$dW^d = -\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{E} \right)^2 dE \quad (7.11b)$$

$$dW^d = -\frac{1}{2} \frac{\bar{\sigma}^2(\varepsilon)}{E_0} \left(\frac{1-D_{\sigma}(\varepsilon)}{1-D_E(\varepsilon)} \right)^2 \frac{dD_E}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (7.11c)$$

donde, puesto que $dE \leq 0$, resulta que $dW^d \geq 0$ (como se esperaba).

Observaciones:

- i.* La expresión (7.11a) muestra la dependencia del trabajo disipado en daño con la deformación elástica y la variación del módulo de Young. Por su parte, (7.11b) evidencia que el trabajo disipado en el daño o ablandamiento del material sólo es medible experimentalmente cuando tiene lugar alguna degradación de la rigidez material, puesto que en ella, la tensión σ es la tensión efectiva que incluye el efecto del daño y que se mide directamente en un ensayo, mientras que E es el módulo de Young actual, que incluye también el efecto del daño, y que puede medirse, por ejemplo, por el método de descargas elásticas intermedias.
- ii.* Si se dispone de expresiones analíticas para el comportamiento constitutivo del material de referencia sin daño, $\bar{\sigma}(\varepsilon)$, y para las evoluciones $D_E(\varepsilon)$ y $D_\sigma(\varepsilon)$, el trabajo disipado en daño puede calcularse mediante (7.11c).
- iii.* Si bien las expresiones (7.11) se han formulado para un material genérico de tipo *sólido*, éstas pueden extenderse a las interfaces cohesivas descritas en el apartado 3.3.5 mediante una reinterpretación adecuada de los parámetros de dicho modelo: en consonancia con la observación *iv* del apartado anterior, $\bar{\sigma}(\varepsilon)$ se asimila a $t(\delta)$ de la ec. (3.6), $D_E = D_\sigma = D$ se asimila al daño en rigidez cohesiva (ec. (3.8) y figura 3.15) y su evolución se describe analíticamente según la expresión (3.22) cuando el ablandamiento cohesivo es lineal (figura 3.19). Con estas consideraciones, puede utilizarse (7.11c) en los modelos numéricos para calcular el trabajo disipado en la decoherión de las interfaces matriz-partícula modeladas mediante elementos finitos de intercara.
- iv.* Dado que se ha supuesto que en un material sólido genérico las evoluciones de los daños D_E y D_σ con la deformación pueden ser diferentes, podría concebirse un material abstracto capaz de deformar plásticamente, en el que los mecanismos de daño degradan únicamente el límite elástico, pero no el módulo de Young. De acuerdo a la expresión (7.11) en cualquiera de sus tres versiones, en un material semejante no hay trabajo disipado en los mecanismos de daño, siendo la deformación plástica el único proceso de disipación de energía.

Un ejemplo de una construcción abstracta de este tipo la constituye el modelo GTN, que describe el proceso de nucleación, crecimiento y coalescencia de microvacíos, a través de un potencial de plastificación que incluye el efecto de la porosidad y la tensión hidrostática. Dicho modelo considera a la *porosidad* como una variable de estado que puede aumentar conforme aumenta la deformación plástica, degradando progresivamente del límite elástico del material. Así, la porosidad es una medida de los citados procesos de

nucleación crecimiento y coalescencia de microvacíos. Este modelo, sin embargo, no considera que el módulo de elasticidad se degrade por efecto del crecimiento de la porosidad, de modo que la expresión (7.11) sugiere que no se disipa trabajo en este tipo de mecanismo de daño dúctil. El trabajo empleado en el crecimiento de la porosidad es, en este caso, parte del trabajo disipado en la deformación plástica del material que circunda a los microvacíos. Si bien el modelo GTN no es propiamente un modelo basado en Mecánica del Daño, puesto que la *porosidad* no es equivalente a un Parámetro Escalar de Daño al modo de la ec. (7.1), se ha citado aquí para ejemplificar que mecanismos de daño que no degradan el módulo de Young, sólo pueden disipar energía a través de deformación plástica, de modo que la expresión (7.11) no permite cuantificar la disipación de energía.

El modelo GTN se concibió para materiales metálicos esencialmente homogéneos, en los que el proceso de nucleación de poros tiene su origen en la decohesión de inclusiones o partículas de segundas fases presentes en el seno del material. En estos materiales está justificada la suposición de que el crecimiento de porosidad no degrada el módulo de Elasticidad, puesto que la fracción volumétrica de partículas capaces de nuclear microvacíos es normalmente bastante baja en comparación, por ejemplo, con las fracciones volumétricas de refuerzo que se utiliza habitualmente en PMMC's. En este trabajo, sin embargo, se mostrará que el proceso de decohesión matriz-partícula nuclea poros cuyo posterior crecimiento por deformación plástica, sí puede inducir una disminución del módulo elástico efectivo del material compuesto. En estos casos, el trabajo disipado debe estimarse mediante la ecuación (7.11a) o la (7.11b).

7.3 Implementación del Modelo Cohesivo: Calibración de los Parámetros Operativos

Como se indicó en el apartado introductorio del presente capítulo, el MFC incluye dos parámetros de tipo operativo, cuya influencia es necesario conocer. Esto se realiza en el presente apartado, por simplicidad, mediante celdas multipartículas bidimensionales.

7.3.1 Influencia de la Rigidez Cohesiva Inicial.

Con el objeto de demostrar la influencia de α de la ec. (3.11) –y por ende de las rigideces cohesivas iniciales– en la rigidez global de la estructura, se realizó un primer conjunto de

simulaciones de ensayos de tracción uniaxial utilizando 2 celdas multipartículas 2D, que incluyen $N = 40$ partículas ocupando una fracción de superficie del 30 %, con esbeltez $R=1$. En las celdas, la orientación y posición de las partículas es aleatoria y se permitió a la esbeltez variar de acuerdo a una distribución normal de probabilidad. Se impuso una sollicitación de tracción uniaxial en conjunto con condiciones de contorno periódicas, hasta una deformación macroscópica del 1%.

Ambas celdas son exactamente iguales tanto en geometría como en su malla FEM en la matriz y en las partículas, siendo la única diferencia entre ambas, el que una de las celdas considera *nodos compartidos* en las interfaces matriz-partícula mientras que la otra incluye elementos cohesivos *indañables* en dichas interfaces. Esto último se logra incorporando elementos cohesivos en la malla FEM, pero manteniendo desactivada su capacidad de *evolución* del daño, desactivando por tanto la ecuación (3.8) –que da cuenta del ablandamiento o degradación de la interfaz– y manteniendo en su lugar siempre la (3.6). De este modo, cualquier diferencia de comportamiento entre ambas celdas es atribuible sólo a la presencia de los elementos cohesivos, cuyo comportamiento elástico-lineal es gobernado por sus rigideces cohesivas iniciales, ecuaciones (3.6) y (3.7).

El material de las partículas es el que se cita en la tabla 4.1, mientras que para la matriz se asignó un comportamiento Ramberg-Osgood a través de las ecuaciones (6.1) y (6.2) con parámetros $E_m = 210$ GPa, $\nu=0.3$, $\sigma_{02} = 400$ MPa y $n=10$. Para fijar el valor de las rigideces cohesivas iniciales en la ec. (3.13), se eligió arbitrariamente $\beta = 1,5$ junto con 4 valores para α , lo que dio origen a los cuatro valores de rigidez cohesiva que se muestran:

$$\begin{array}{ll} \alpha_1 = 0,1 \% & ; \quad k_n = k_s = 60.000.000 \text{ MPa/mm} \\ \alpha_2 = 0,05 \% & ; \quad k_n = k_s = 120.000.000 \text{ MPa/mm} \\ \alpha_3 = 0,01 \% & ; \quad k_n = k_s = 600.000.000 \text{ MPa/mm} \\ \alpha_4 = 0,005 \% & ; \quad k_n = k_s = 1.200.000.000 \text{ MPa/mm} \end{array}$$

En la figura 7.2 aparecen las curvas tensión-deformación correspondientes al material compuesto *indañable sin elementos cohesivos* (etiquetado como “*nodos compartidos - mat compuesto*”) y al material compuesto con *elementos cohesivos indañables* con los 4 valores de rigidez cohesiva antes indicados (‘ α -01 a 04’). Además, se ha incluido, a modo de referencia, la relación tensión-deformación que es propiedad de la matriz.

Valores demasiado altos para α (que comportan valores pequeños de rigidez cohesiva) pueden degradar la rigidez *global* de la estructura, incluso hasta niveles inferiores a los del material base. Es claro entonces que valores altos de rigidez cohesiva son necesarios para reproducir adecuadamente la mejora de propiedades mecánicas del material compuesto con respecto al

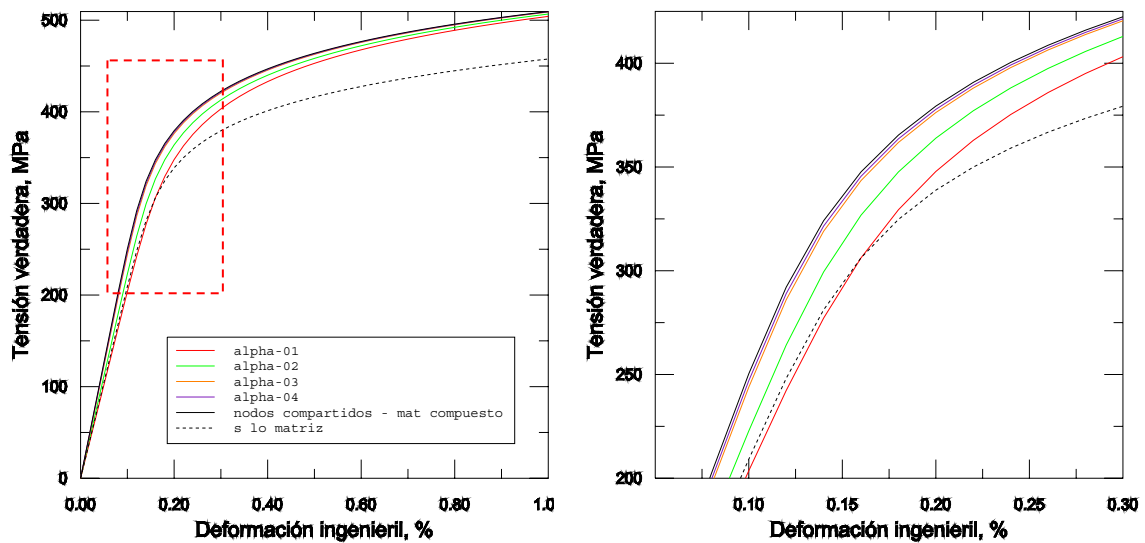


Figura 7.2 (Izq.) Curvas tensión deformación utilizando cuatro distintos valores de rigidez cohesiva inicial. El rectángulo señala la región de transición elasto-plástica. (Der.) Vista ampliada en la zona de transición elasto-plástica de la curva tensión deformación.

material sin reforzar. El valor de rigidez cohesiva correspondiente a α_4 se utilizó para definir la rigidez cohesiva en todas las subsiguientes simulaciones con daño del presente capítulo, tanto en 2D como en 3D.

7.3.2 influencia de la Viscosidad de Daño y de la Densidad de Malla.

Utilizar valores muy pequeños de energía de fractura G^C , por la vía de utilizar un valor pequeño para el trabajo de ablandamiento W , tiene por consecuencia que el proceso de ablandamiento de la interfaz es extremadamente abrupto, dando origen a que el elemento cohesivo deja de transmitir tensión en forma prácticamente inmediata, una vez satisfecho el criterio de iniciación de daño. Tales circunstancias dificultan enormemente la convergencia del modelo FEM, originando casi invariablemente que los algoritmos de incrementación automática utilicen incrementos temporales muy pequeños, realizando en cada uno de ellos gran cantidad de iteraciones de equilibrio.

Con el objeto de mejorar la convergencia en estos casos, es posible recurrir al uso de la técnica de *regularización viscosa* que, en este contexto, implica que en lugar del parámetro de daño D , se utiliza D^* , calculado en cada incremento como:

$$D^* = D - \nu \frac{dD^*}{dt} \quad (7.12)$$

siendo ν una constante que define la *viscosidad de daño*, nuevo parámetro del modelo cohesivo cuyo significado e influencia en los resultados ha de ser estudiado.

Por otro lado, también se ha observado que, además de la energía de fractura, la densidad global de la malla de elementos finitos tiene influencia en la habilidad de convergencia del modelo FEM. Para medir cualitativamente la influencia del tamaño de malla y de la viscosidad de daño en el comportamiento de los elementos cohesivos del software ABAQUS, se utilizó la misma geometría multipartícula 2D y elementos cohesivos mencionada en el apartado anterior, con los mismos constituyentes para las fases sólidas. En este caso, el modelo fue analizado *activando* el criterio de iniciación de daño y utilizando 3 valores de viscosidad de daño para tres densidades de malla, lo que originó un total de 9 resultados. Los resultados se interpretaron a partir de la curva σ - ε macroscópica, mostrando el punto de inicio de daño así como el subsiguiente camino de ablandamiento.

La resistencia cohesiva, t^R , se asignó en un valor igual a 1.5 veces el límite elástico de la matriz (400 MPa) tanto para la apertura normal como de cortadura de la interfaz, utilizando el criterio de inicio de daño cuadrático en tensiones (ver apartado 3.2.5). La energía de fractura se asignó en un valor intencionadamente pequeño de 10.6 J/m², asociado a una fractura relativamente frágil de la interfaz. Se escogió este valor para inducir la situación de mayor dificultad posible en cuanto a convergencia de la solución numérica (dado que de valores altos de energía de fractura se espera ablandamientos macroscópicos más “suaves”). En consonancia con lo indicado en el apartado anterior, la Rigidez Cohesiva Inicial utilizada fue de 1,2·10⁹ MPa/mm, con el objeto de minimizar la degradación artificial de la rigidez global de la estructura antes del inicio del proceso de daño.

Los resultados se presentan en la figura 7.3. Como comparación, se han incluido también en las gráficas la curva tensión-deformación de la matriz sin reforzar, así como del material compuesto “indañable”, el cual se ha modelizado mediante compartición de nodos en las interfaces matriz-partícula.

Es evidente que tanto la viscosidad como la densidad de malla afectan los resultados, tanto en términos del punto de iniciación del daño macroscópico como de la forma de la curva macroscópica de ablandamiento del compuesto. A tamaño de malla fijo, un incremento en el valor de viscosidad de daño parece ralentizar el incremento del parámetro de daño en las interfaces cohesivas, desplazando hacia la derecha el camino de ablandamiento.

La figura 7.4 por su parte, muestra una ampliación de las curvas en torno a la zona donde se inicia la decohesión, siendo posible observar tanto los sutiles primeros eventos de decohesión como la iniciación masiva del daño macroscópico.

A viscosidad de daño fija, un refinamiento de la malla parece retrasar en el eje de deformación el inicio del daño masivo que ablanda el material. En términos generales, se observa que una variación en la densidad de malla a viscosidad de daño fija produce una mayor variación en los resultados que una variación en la viscosidad a tamaño de malla fijo.

Finalmente, debe mencionarse que la convergencia del modelo numérico es especialmente difícil al utilizar valores pequeños de viscosidad. Por ejemplo, en el caso de la malla más gruesa, la simulación no pudo completarse al utilizar el valor más pequeño de viscosidad. Sin embargo, una refinación de la malla, manteniendo constante la viscosidad, parece ayudar a la convergencia reduciendo el número de iteraciones de equilibrio para cada incremento temporal en el proceso de solución no lineal (ver, por ejemplo, la posición del punto final en la curva σ - ε con la malla 3 usando el valor más pequeño de viscosidad, que en comparación con el mismo punto de la malla 1, está mucho más cerca del valor prescrito del 1% para la macro-deformación total).

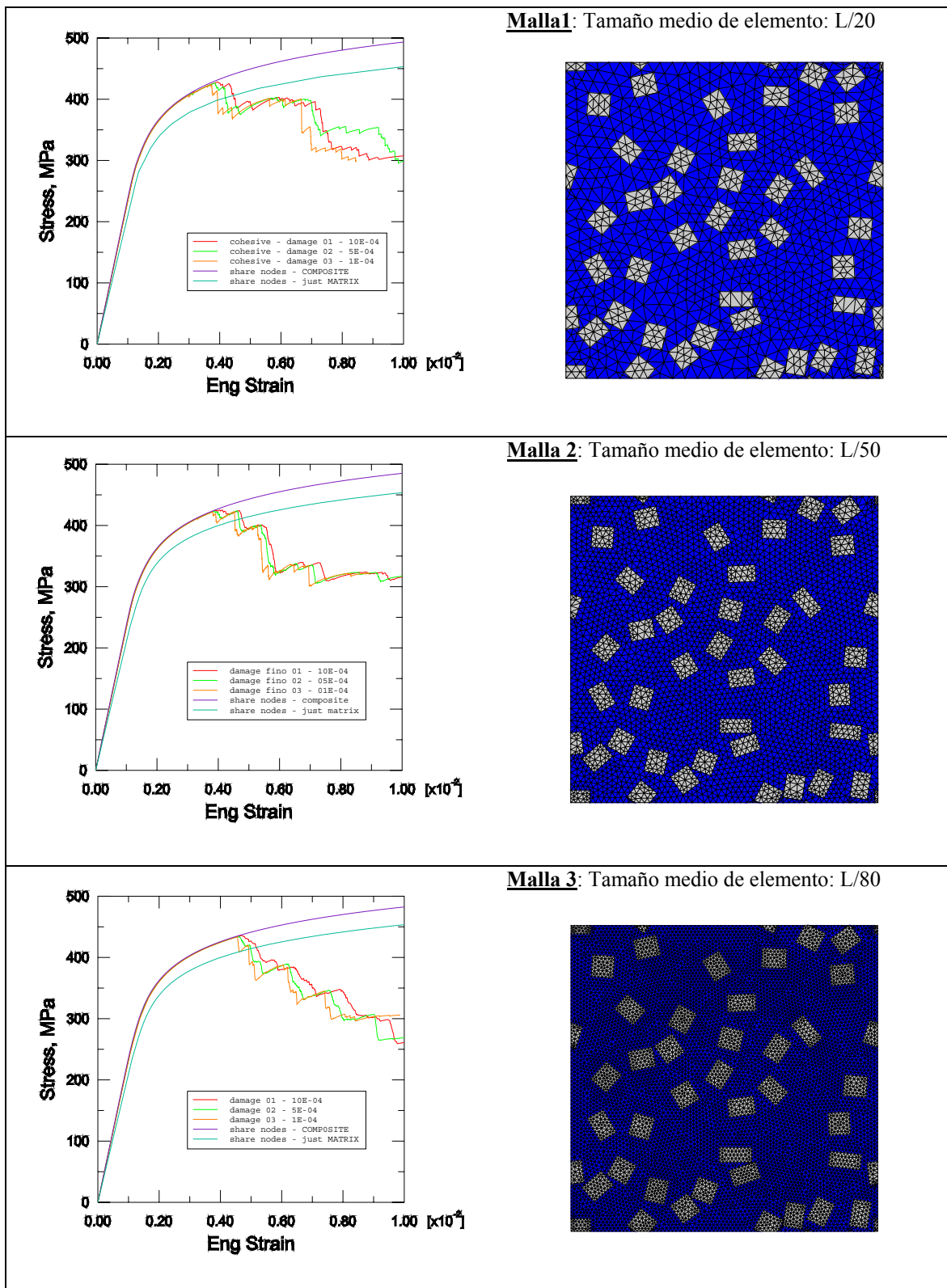


Figura 7.3. Estudio de la influencia de la densidad de malla y la viscosidad de daño.

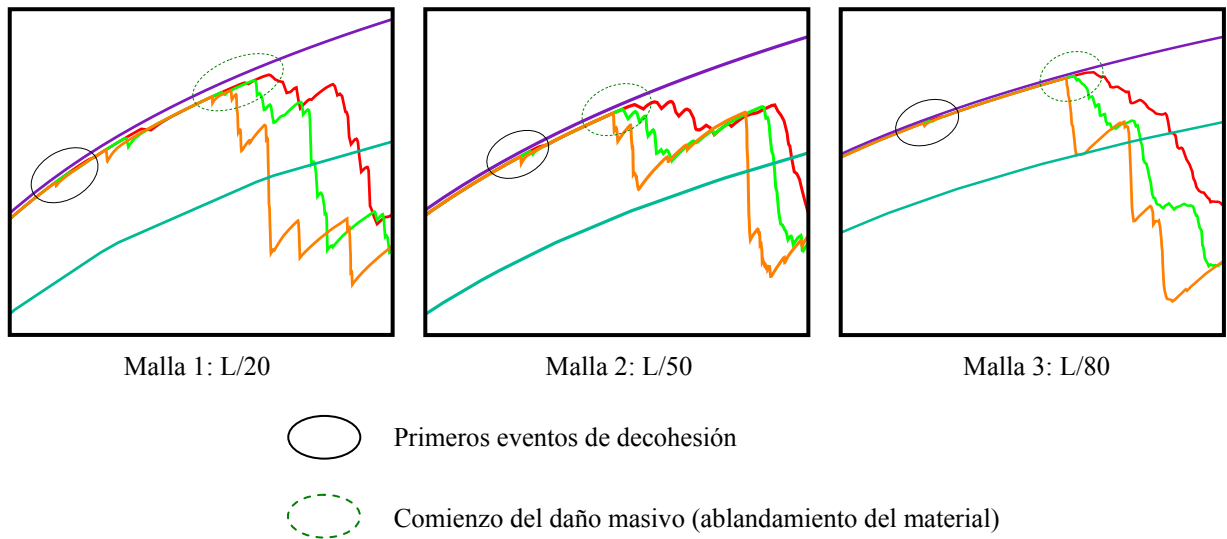


Figura 7.4: Zoom en la zona de inicio del daño macroscópico observable.

7.4 Daño por Decohesión: Modelado 2D

Para una celda multipartícula 2D con 40 partículas ocupando una fracción de superficie del 30%, se realizó un conjunto de simulaciones tendientes a determinar la influencia de la Resistencia Cohesiva y de la Energía de Fractura en el comportamiento macroscópico del compuesto.

7.4.1 Metodología.

El estudio se realizó a partir de dos conjuntos de simulaciones, en uno de los cuales se varió t^R a G^C constante y a la inversa en el otro. Los valores se resumen en la tabla 7.1, en la que se indica también el valor del coeficiente β que da la relación entre la resistencia cohesiva de la interfaz y el límite elástico de la matriz, $\sigma_{02m} = 400$ MPa.

	Influencia de Resistencia Cohesiva [$G^C = 500$ mJ/mm ² = cte.]		Influencia de la Energía de Fractura [$t^R = 500$ MPa = cte. $\beta = t^R / \sigma_{02m} = 1.25$]
	t^R , MPa	$\beta = t^R / \sigma_{02m}$	G^C , mJ/mm ²
1	200	0.50	250
2	300	0.75	500
3	400	1.00	1000
4	500	1.25	2000
5	600	1.50	3000

Tabla 7.1 Valores de los parámetros cohesivos utilizados en los estudios de sensibilidad.

En todas las simulaciones el comportamiento constitutivo de las fases sólidas es el mismo utilizado en el apartado anterior 7.3; para la rigidez cohesiva inicial se utilizó el valor más alto de los estudiados en 7.3.1 mientras que a la viscosidad de daño se le asignó el valor de $5 \cdot 10^{-4}$. Todas las simulaciones se realizaron hasta una deformación macroscópica total del 5%, utilizando elementos finitos en tensión plana y en deformación plana.

Las influencias se analizaron en términos de los siguientes resultados básicos:

- a. **Curva tensión-deformación** macroscópica.
- b. **Trabajo total disipado** en la decoherión matriz-partícula, calculado por el software de elementos finitos en cada punto de integración de los elementos cohesivos y sumando todas estas contribuciones, obteniendo así un valor total de trabajo disipado en el RVE para cada uno de los incrementos temporales.
- c. Parámetro escalar de **Daño en Tensión**, $D_s = D_s(\varepsilon)$. Este se obtuvo mediante la expresión (7.1), comparando a iso-deformación la tensión macroscópica del material dañado, con la tensión de referencia de un compuesto equivalente que no sufre daño. Esta tensión de referencia se obtuvo mediante simulación de la misma celda multipartícula, pero manteniendo *desactivado* el criterio de iniciación de daño.
- d. **Porosidad**: cuando todo o parte de una interfaz decohesiona completamente, puede considerarse que se ha creado una superficie libre en el interior del compuesto, a través de la cual no es posible la transferencia de carga desde la matriz a la correspondiente partícula. Dado que la matriz circundante deforma plásticamente, esta superficie libre cambiará de forma aumentando, eventualmente, el volumen contenido dentro de ella.

En la solución de elementos finitos, el volumen V_S de las fases sólidas se puede cuantificar en cada instante a partir del volumen de los elementos finitos de las fases matriz y partícula. El volumen total del compuesto deformado, por otra parte, se puede calcular a partir del desplazamiento de los nodos de control que gobiernan la sollicitación mecánica a través de las ecuaciones de periodicidad discreta (3.4). Si c_{ij} son las componentes de los tres nodos de control (según se describe en el apartado 3.3.3.b), entonces el volumen actual del RVE deformado en el caso 3D, que incluye el volumen de los poros nucleados por decoherión, se cuantifica según la expresión (7.13), mientras que la porosidad se puede cuantificar mediante (7.14).

$$V_{RVE} = (L_0 + c_{11})(L_0 + c_{22})(L_0 + c_{33}) \quad (7.13)$$

$$f_p = 1 - \frac{V_S}{V_{RVE}} \quad (7.14)$$

En las celdas 2D aquí consideradas, a los elementos finitos de la matriz y las partículas se les asignó un espesor constitutivo $t_0 = 1$ tanto en tensión como deformación plana, mientras que la arista de la celda es $L_0 = t_0 = 1$. De este modo, los desplazamientos c_{11} y c_{22} de (7.13) corresponden a la deformación macroscópica ingenieril. La componente c_{33} , correspondiente a la deformación normal perpendicular al plano de trabajo, tiene diferente significado en deformación plana y tensión plana. En deformación plana puede considerarse naturalmente que $c_{33} = 0$. En este caso, al aplicar (7.13) y (7.14) a una celda multipartícula indañable en deformación plana, se reprodujo $f_p = 0$, como se espera de un material indañable.

En tensión plana sin embargo, no existe un modo general de evaluar c_{33} . Se han hecho las siguientes tres hipótesis y sus implicancias se han medido a partir de la ec. (7.14), evaluada de una celda indañable en tensión plana, en cuyo caso se espera reproducir $f_p \approx 0$.

$$\text{Hip. 1} \quad c_{33} = 0 \quad \rightarrow \text{ esto produjo } f_p^{(1)} > 0$$

$$\text{Hip. 2} \quad (L_0 + c_{22}) = (L_0 + c_{33}) \quad \rightarrow \text{ esto produjo } f_p^{(2)} \neq 0 \text{ y, en algunos casos, } f_p^{(2)} < 0$$

$$\text{Hip. 3} \quad c_{33} = t_0 \langle \varepsilon_{33} \rangle_{RVE} \quad \rightarrow \text{ esto produjo } f_p^{(3)} > 0 \text{ aunque de valor pequeño.}$$

Dado el pequeño valor obtenido para $f_p^{(3)}$, junto al hecho adicional de que $|f_p^{(3)}| < |f_p^{(1)}| < |f_p^{(2)}|$ se adoptó la *tercera hipótesis* para cuantificar la porosidad f_p de la ec.(7.14) en los modelos que sí incluyeron el daño en tensión plana. Nótese que los promedios volumétricos asociados a la Hipótesis seleccionada fueron calculados mediante la herramienta de postproceso de resultados descrita en 3.3.7.b.

7.4.2 Resultados.

Los resultados básicos **a** a **d**, antes indicados como medida de la influencia de la resistencia cohesiva y de la energía de fractura se presentan, respectivamente, en las figuras 7.5 y 7.6 para los casos en *tensión plana*. Los resultados en deformación plana se han omitido aquí por brevedad, dado que muestran tendencias cualitativamente similares con respecto a tensión plana, cambiando sólo el hecho de que las curvas tensión-deformación macroscópicas son algo más elevadas.

De las curvas tensión-deformación con daño puede concluirse que un aumento en la resistencia cohesiva de la interfaz retrasa el inicio de la degradación del límite elástico del compuesto en el eje de deformación, resultando evidente que la resistencia cohesiva puede considerarse como una medida de la *calidad* de la interfaz matriz-partícula.

La energía de fractura por su parte, no modifica sustancialmente, en la historia de deformación, el instante en el que se inicia el daño masivo observable a nivel macroscópico. Más bien, una vez iniciado el daño masivo, aumentos en la energía de fractura suavizan la pendiente del *camino de ablandamiento* macroscópico del compuesto.

Las influencias mencionadas de t^R y G^C sobre el inicio y la forma del ablandamiento del material compuesto se pueden observar también en las curvas de evolución con la deformación del Daño en Tensión, D_σ . Es característico el hecho de que la *rapidez* del crecimiento del daño con la deformación es alta en los estadios iniciales del daño macroscópico, pero decrece durante el resto de la historia de deformación. En el caso particular de la figura 7.5b, y sobre todo para resistencias cohesivas bajas, parece haber un valor de *saturación* en el valor de D_σ , que es menor que la unidad.

$$D_\sigma^{sat} \approx 0,8 < 1,0$$

Aunque se hubiera producido una decoherión completa de todas las interfaces, es normal que la degradación de la capacidad del compuesto de transmitir tensión no sea completa, dado que no se ha modelado el daño dúctil en la matriz.

En el caso del trabajo disipado en el daño por decoherión, ambos estudios de sensibilidad mostraron que existe un valor de saturación para W^d . La evolución $W^d = W^d(\varepsilon)$ puede describirse cualitativamente, definiendo un punto de inflexión y un valor de saturación.

$$\frac{dW^d}{d\varepsilon} \geq 0 \quad \forall \varepsilon \geq 0 \quad ; \quad \frac{d^2W^d}{d\varepsilon^2} \begin{cases} \geq 0 & \text{para } 0 \leq \varepsilon < \varepsilon_{\text{inflexión}} \\ = 0 & \text{para } \varepsilon = \varepsilon_{\text{inflexión}} \\ \leq 0 & \text{para } \varepsilon > \varepsilon_{\text{inflexión}} \end{cases}$$

Así, la figura 7.5b muestra que un aumento en la resistencia cohesiva desplaza a la derecha el punto de inflexión de la evolución de $W^d(\varepsilon)$, a la vez que disminuye el valor de saturación W_{sat}^d a partir del cual W^d ya no aumenta con la deformación. La figura 7.6b por su parte muestra que un aumento en la energía de fractura a resistencia cohesiva constante también desplaza hacia la derecha el punto de inflexión, a la vez que hace crecer el valor de saturación para W^d .

Es interesante, en todo caso, comparar los valores efectivos de saturación del trabajo disipado en daño con una cota superior teórica, que puede estimarse del siguiente modo: en el caso 2D, si l_1 y $l_2 = l_1/R$ son las dos aristas de las partículas rectangulares de esbeltez R (no se considera variabilidad en el tamaño de partícula por simplicidad), entonces puede demostrarse que el área total ocupada por las interfaces matriz-partícula por cada unidad de volumen de material compuesto es A_t , calculado de la ec. (7.15), siendo F la fracción de superficie ocupada por las partículas.

$$A_t = \frac{2(R+1)F}{l_1} = \frac{\text{mm}^2 \text{ de interfaz}}{\text{mm}^3 \text{ de mat. compuesto}} \quad (7.15)$$

$$G_{\max}^C = G^C A_t \quad (7.16)$$

El producto de A_t por la energía de fractura G^C da el valor máximo de trabajo que es posible disipar en el proceso de decohesión de las interfaces, y se alcanza cuando *todos* los elementos cohesivos presentes en el modelo de elementos finitos han decohesionado completamente.

En todas las celdas analizadas en el presente estudio ocurrió que el valor de saturación para el trabajo efectivamente disipado por decohesión fue siempre mucho menor que el máximo teóricamente disponible para ser disipado. Esto se muestra en la tabla 7.2, donde se han evaluado estas fracciones al final de la sollicitación mecánica impuesta ($e_{ing} = 5\%$). Este resultado era esperado, puesto que no todas las interfaces tienen igual propensión a decohesionar, propensión que, para cada interfaz, es función de la orientación de la partícula en que se sitúa, así como de su *posición* en dicha partícula. Además, es natural que los eventos de daño tiendan a localizarse dentro de la celda de análisis, factor que también contribuye a que el valor de saturación sea menor al máximo teóricamente disponible.

	Influencia de Resistencia Cohesiva [$G^C = 500 \text{ mJ/mm}^2 = \text{cte.}$]		Influencia de la Energía de Fractura [$t^R = 500 \text{ MPa} = \text{cte. } \beta = t^R / \sigma_{02m} = 1.25$]	
	t^R , MPa	W_{sat}^d / G_{\max}^C	G^C , mJ/mm ²	W_{sat}^d / G_{\max}^C
1	200	17.47 %	250	8.72 %
2	300	11.53 %	500	8.10 %
3	400	11.49 %	1000	8.36 %
4	500	8.10 %	2000	7.97 %
5	600	4.59 %	3000	6.87 %

Tabla 7.2 Relación entre el valor de saturación del trabajo disipado por decohesión y el valor máximo teórico en cada caso analizado, evaluado a la deformación máxima impuesta sobre la celda, del 5% ingenieril.

Sensibilidad frente a variaciones en la Resistencia Cohesiva t^R | tensión plana

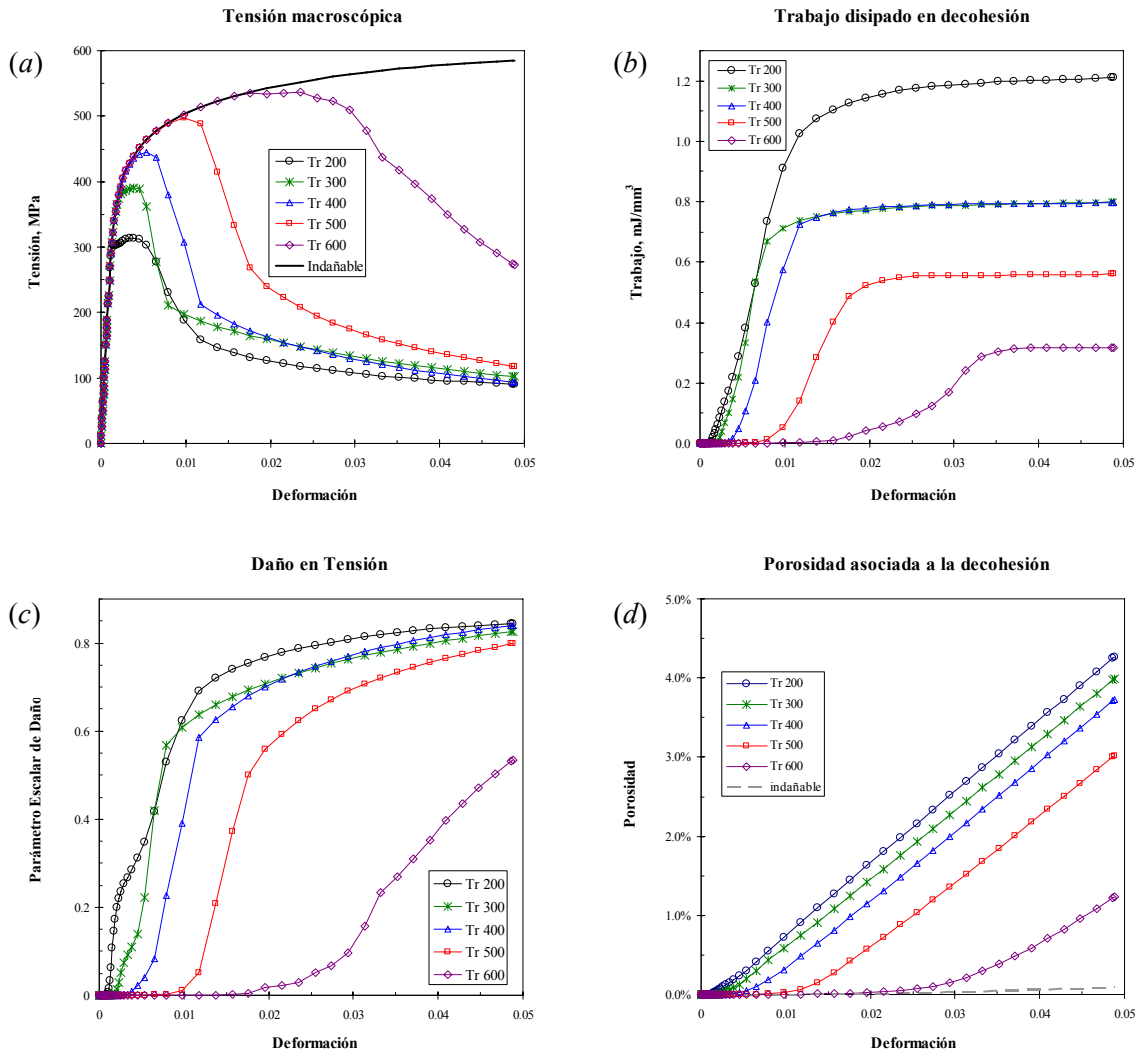


Figura 7.5 Influencia de la resistencia mecánica de interfaz t^R , a energía de fractura constante de valor $G^C = 500 \text{ mJ/mm}^2$

Es llamativo el hecho de que en el caso del estudio de variaciones de G^C la proporción W_{sat}^d / G_{max}^C es prácticamente constante en los tres primeros casos. En los dos últimos casos ($G^C = 2000$ y $G^C = 3000 \text{ mJ/mm}^2$) esta fracción es algo inferior, lo que se explica porque en realidad en estos no se alcanzó la saturación a la deformación macroscópica impuesta del 5% ingenieril. En todo caso, W_{sat}^d / G_{max}^C parece depender más fuertemente de la resistencia que de la energía de fractura.

En cuanto a la porosidad nucleada a partir de la decoherión matriz-partícula, se observa tanto en 7.5d como 7.6d que su evolución con la deformación se caracteriza por un tramo inicial de suave curvatura que comienza en el inicio del daño macroscópicamente observable, que se

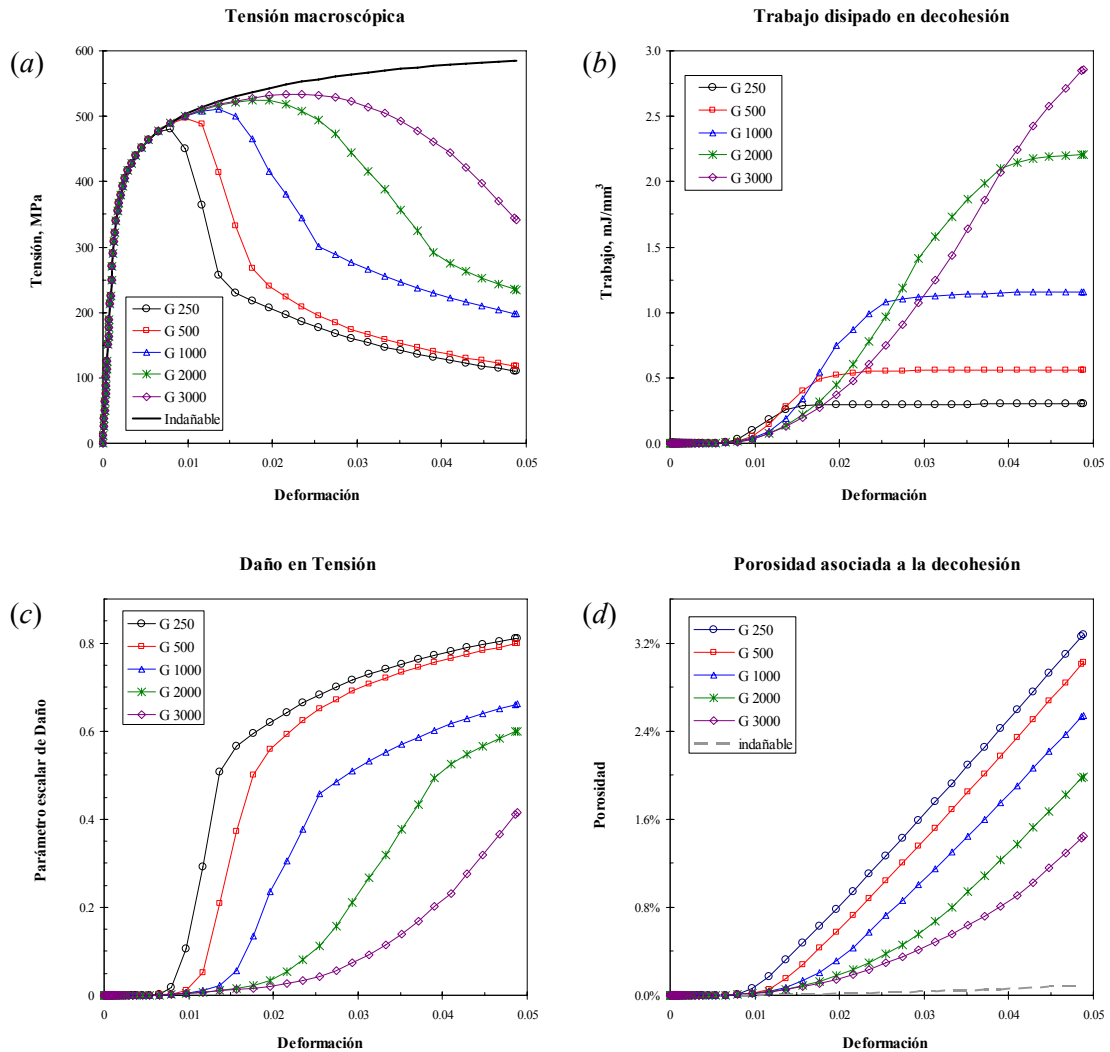
Sensibilidad frente a variaciones en Energía de Fractura G^C | tensión plana

Figura 7.6 Influencia de la energía de fractura G^C , a resistencia cohesiva constante de valor $t^r = 500$ MPa

transforma luego en una recta creciente, cuya pendiente parece ser independiente tanto de la energía de fractura como de la resistencia mecánica de la interfaz cohesiva.

Dado que esta porosidad se ha nucleado por la *completa* decohesión de uno o varios elementos cohesivos en la interfaz, parece razonable suponer que la rapidez del crecimiento de la porosidad esté controlada sólo por las propiedades de endurecimiento de la matriz, así como su deformación plástica y estado tensional en la vecindad de estos poros, y no por los parámetros cohesivos. En el próximo apartado se profundizará sobre las consecuencias de este crecimiento en la porosidad.

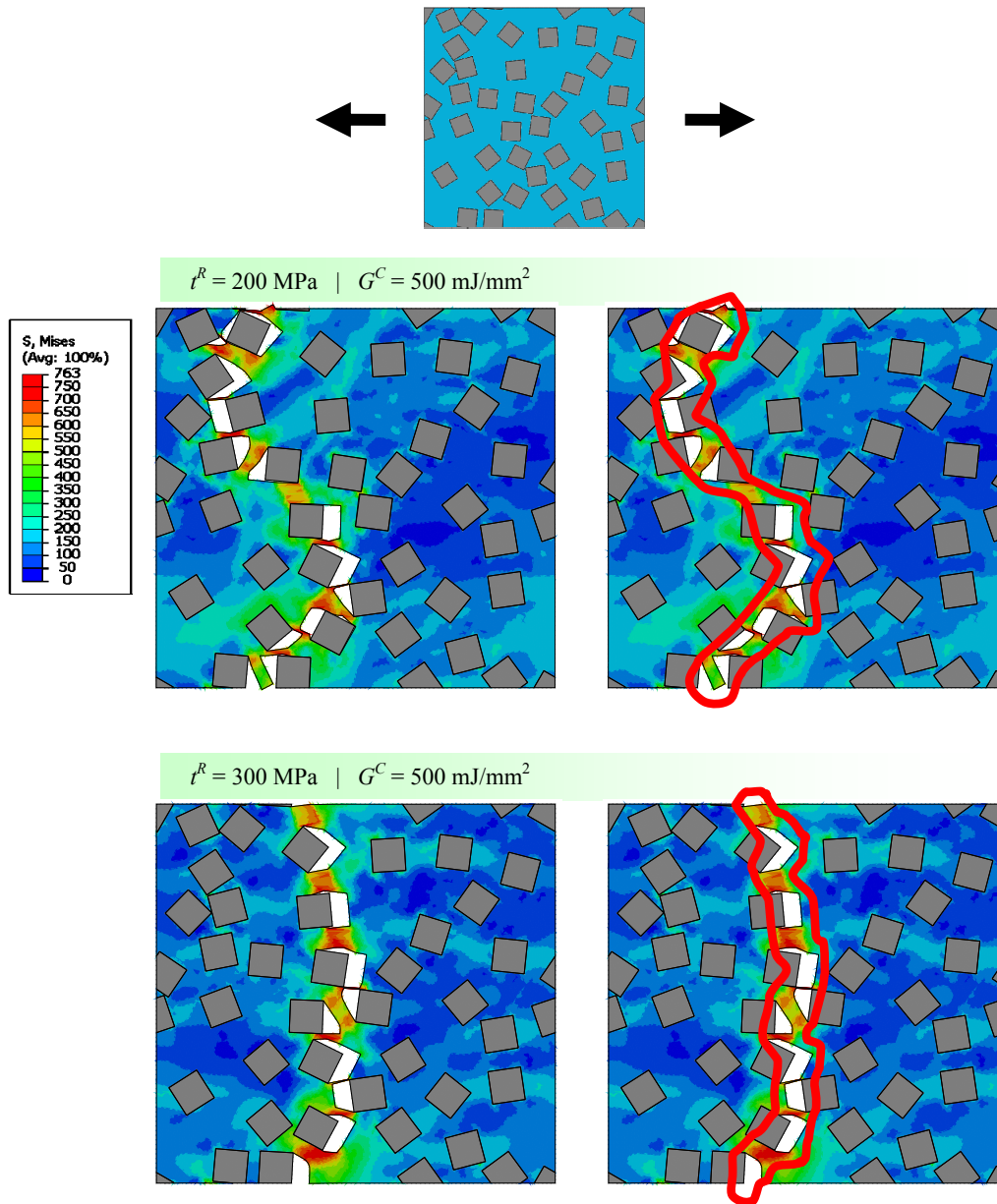


Figura 7.7 Celda 2D en la configuración original (arriba) y deformada (centro y abajo) en dos casos, mostrando que la secuencia de interfaces que decohesionan cambia en función de los parámetros cohesivos.

Finalmente, al observar las curvas tensión deformación de la figura 7.5 para variaciones frente a la resistencia es llamativo el hecho de que la curva para $t^R = 300 \text{ MPa}$ interseca en dos puntos a la curva para $t^R = 200 \text{ MPa}$ y en un punto a la curva $t^R = 400 \text{ MPa}$. Esto puede explicarse a partir de la inspección de los patrones de decoherión presentes en las celdas multipartícula deformadas. A modo de ejemplo, se presenta en la figura 7.7 la celda multipartícula original y deformada en los casos $t^R = 200 \text{ MPa}$ y $t^R = 300 \text{ MPa}$, correspondientes a una deformación macroscópica intermedia de $\varepsilon = 0,025$. Puede observarse

que cambios en la resistencia de la interfaz modificaron la secuencia y el lugar donde ocurrieron los eventos de decohesión, de modo que las interfaces decohesionadas tendieron a ordenarse (localizarse) en planos aproximadamente perpendiculares a la dirección macroscópica de carga, pero en posiciones distintas en el interior del material compuesto.

Debe indicarse que los cambios en estos patrones de decohesión ocurrieron tanto frente a variaciones de t^R como de G^C , aunque fueron más acusados en el primer caso. La causa de este efecto reside en la localización de la deformación plástica durante la historia de la sollicitación mecánica: si el comportamiento constitutivo de la matriz fuese lineal y elástico, no se espera que variaciones en los parámetros cohesivos modifiquen el lugar donde ocurre la decohesión, sino sólo el instante del proceso de carga en el que dichos eventos se inician y la forma de la curva macroscópica de ablandamiento.

7.4.3 Degradación del Módulo Efectivo. Un Resultado Particular.

En el apartado anterior se estudió la influencia de t^R y G^C sobre el comportamiento macroscópico de un compuesto, en términos de cuatro resultados básicos, entre los que se encontraba el parámetro de daño en tensión, D_σ . No se analizó, sin embargo, la degradación en el módulo de elasticidad efectivo del compuesto con la deformación cuando tiene lugar el daño por decohesión.

Dado que la disipación de energía asociada a la decohesión ha sido cuantificada según se explicó en el apartado anterior, y que la decohesión es el único mecanismo de daño actuante en el seno del compuesto, podría postularse que la degradación del módulo de elasticidad macroscópico durante la deformación está gobernada por la expresión (7.11b). Implícitamente, esta hipótesis supone que el único mecanismo por el cual se degrada el módulo efectivo es la pérdida de la capacidad de transferencia de carga desde la matriz a las partículas de refuerzo.

Como experimento, se utilizará una versión en diferencias finitas de la ec. (7.11b) en conjunto con las curvas $W_d = W_d(\varepsilon)$ presentadas en las figuras 7.5b y 7.6b para estimar la evolución del módulo efectivo del compuesto $E = E(\varepsilon)$ bajo la hipótesis antes indicada. Así, a partir de tablas de valores de la forma $(\varepsilon_i, \sigma_i, W_i^d)_{i=1,\dots,n}$ obtenidos numéricamente, se puede expresar:

$$E_{i+1} = E(\varepsilon_{i+1}) = E_i - \frac{W_{i+1}^d - W_i^d}{\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_i}{E_i} \right)^2} \quad ; \quad D_{E.hip} = D_{E.hip}(\varepsilon_{i+1}) = 1 - \frac{E_{i+1}}{E_0} \quad (7.17 a,b)$$

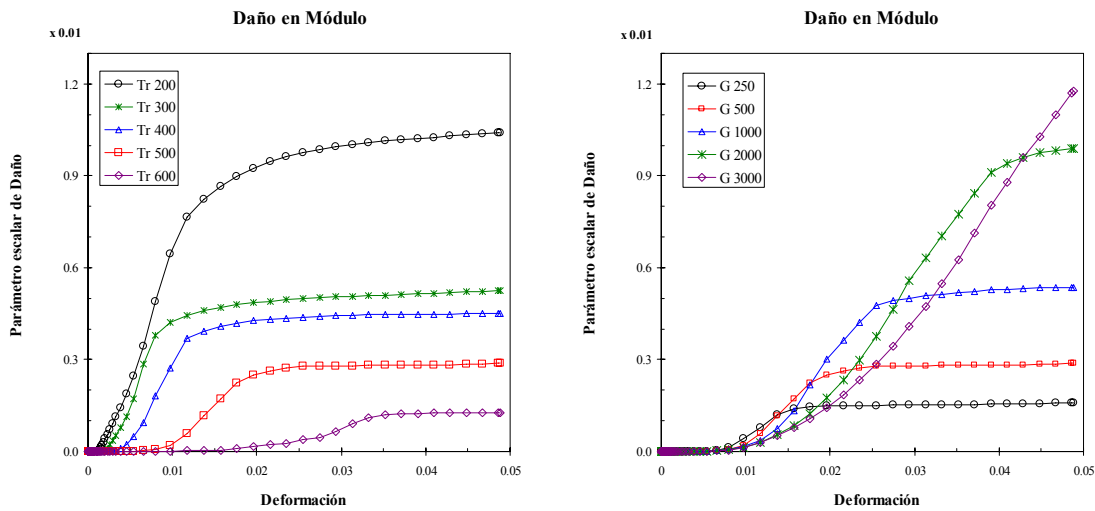


Figura 7.8 Evolución de D_E con la deformación, en el supuesto de que esta degradación se debe únicamente a la decoherión matriz-partícula.

donde E_0 se ha medido como la pendiente al inicio de la curva tensión deformación (cuando aun no se ha iniciado el incremento del daño) y donde el subíndice “ E_{hip} ” en (7.17b) enfatiza la hipótesis subyacente a esta expresión. La evolución del Daño en Módulo así obtenida se representa en la figura 7.8, tanto para el análisis a $t^R = cte.$ como $G^C = cte.$

De la figura 7.8, resulta llamativo que los valores del Daño en Tensión de las figuras 7.5c y 7.6c son notablemente mayores a los valores del Daño en Módulo, calculados bajo la hipótesis antes formulada.

Para el caso particular de $t^R = 500 \text{ MPa}$ y $G^C = 500 \text{ mJ/mm}^2$ (único resultado que es común a las figuras 7.5 y 7.6), en el que el daño en Módulo tiene el valor de $D_{E,hip} = 0,00287$ (fig. 7.8), se ha realizado la simulación de un proceso de descarga elástica desde la deformación prescrita de $\varepsilon = 0,05$ hasta un valor de deformación total determinado por la pendiente del retroceso lineal elástico y por el valor de la tensión macroscópica desde la que se inicia la descarga. La pendiente de la línea de descarga es, por tanto, el módulo de Elasticidad efectivo (dañado) al final del proceso previo de carga. El resultado se presenta en la figura 7.9

El valor final de D_E obtenido como pendiente de la recta de descarga puede considerarse como un valor de referencia dado que se ha obtenido directamente de la solución numérica. Sin embargo, de su comparación con $D_{E,hip}$ se verifica que

$$D_E = 1 - \frac{163,2}{251,8} = 0,352 \gg D_{E,hip} = 0,00287$$

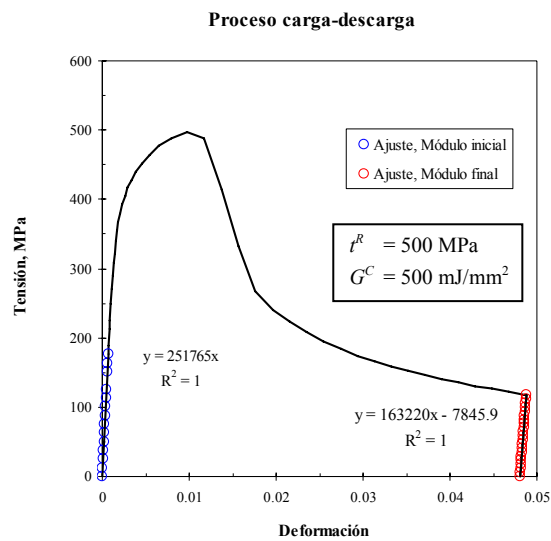


Figura 7.9 Simulación del proceso de carga y descarga. Se incluye los ajustes para obtener los módulos elásticos inicial y final.

Lo anterior implica que la hipótesis de que la degradación del módulo de Elasticidad sólo se debe a la imposibilidad de transferencia de carga desde la matriz a las partículas no es correcta.

El trabajo disipado en el proceso de daño de las interfaces cohesivas, W^d , no es suficiente para explicar la degradación del módulo de Elasticidad del compuesto realmente ocurrida durante la sollicitación mecánica.

El único efecto posible ha de estar relacionado con la porosidad. Como se observaba anteriormente, en el apartado 7.2.2, cuando se produce la decohesión completa de todo o parte de una interfaz se produce una superficie libre que contiene un poro. Frente a incrementos de la sollicitación mecánica macroscópica el volumen de estos poros nucleados por decohesión aumenta de un modo que ha de estar controlado, esencialmente, por la deformación plástica de la matriz circundante de un modo *conceptualmente* análogo al descrito por Rice y Tracy, con la salvedad de que estos autores consideraron el crecimiento de poros inicialmente esféricos embebidos en una matriz elasto-plástica infinita.

El mecanismo de degradación de E , entonces, podría describirse cualitativamente como un proceso en dos instancias:

- i. En primera instancia, la decoherión produce degradación de E porque impide la transferencia de carga desde la matriz a las partículas de refuerzo cuyas interfaces han decohesionado.
- ii. En segunda instancia, el tamaño de los poros asociados a las partículas que ya han decohesionado crecerá por efecto de la deformación plástica de la matriz circundante, crecimiento que degrada aun más el módulo de elasticidad efectivo.

La gran diferencia antes mencionada entre los valores de D_E y $D_{E.hip}$, que está asociada a una combinación específica de parámetros cohesivos ($t^R = 500$ MPa y $G^C = 500$ mJ/mm²), sugiere que, en este caso particular, la contribución de *segunda instancia* a la degradación de E es más importante que la contribución en *primera instancia*. Aunque para cualquier otra combinación de parámetros cohesivos también se espera que $D_E > D_{E.hip}$, la cuantía de la diferencia puede cambiar, con lo que puede cambiar también el balance entre las dos instancias contribuyentes a la degradación de E .

Por otro lado, debe indicarse que los resultados obtenidos en este apartado están asociados a una solución bidimensional en *tensión plana*, siendo evidente que la celda de partículas *cuadradas* de espesor constitutivo unitario no es exactamente representativa de una situación con partículas *cúbicas* distribuidas en el espacio tridimensional. Se sospecha, sin embargo, que en el caso 3D con partículas cúbicas, la degradación de E durante la deformación también obedece al mecanismo de dos instancias descrito cualitativamente en las líneas precedentes.

La evolución real del Módulo efectivo E o, equivalentemente, de DE con la deformación se podría haber obtenido mediante simulación de descargas elásticas en *varios* puntos intermedios de la historia de deformación, en lugar de la única descarga realizada desde el valor final $\varepsilon = 0,05$ (ver figura 7.9). A través de la expresión (7.11), esto permitiría obtener la evolución del trabajo disipado en daño *total*, incluyendo la degradación de E debida al incremento de la porosidad, en lugar de las evoluciones reflejadas en las figuras (7.5b) y (7.6b) para W^d , en las que sólo se incluye la disipación debida a los eventos de decoherión. Esto no fue posible en la práctica por razones que se describirá en el próximo apartado.

7.5 Implementación del Modelo Cohesivo en 3D. Modelado Incluyendo Descargas

Dado que la ocurrencia de fenómenos de daño en un compuesto real resulta en una disminución de su módulo de Elasticidad, degradación que aumenta progresivamente con la

deformación macroscópica del compuesto, se planteó obtener la evolución del módulo de Elasticidad del compuesto con la deformación utilizando el método de celdas en 3D en conjunto con el modelo de fisura cohesiva, a través del método clásico de las descargas elásticas intermedias.

En líneas generales, la simulación de procesos de *carga* con celdas 3D siguió la misma metodología explicada en el apartado anterior para modelos 2D. Sin embargo, debido al alto coste computacional y a notables dificultades de convergencia de los modelos 3D con daño – que requerían un elevado número de iteraciones de equilibrio para obtener la solución en cada incremento temporal del proceso de sollicitación mecánica–, el valor de la deformación total impuesta sobre las celdas 3D fue bastante menor que el utilizado en el apartado anterior para celdas 2D, a la vez que no pudo estudiarse una gama amplia de combinaciones de t^R y G^C .

A pesar de lo anterior, la simulación de *descargas* elásticas intermedias sí permitió observar un efecto que puede ser importante en términos de la formulación e implementación de modelos constitutivos basados en Mecánica del Daño: si una descarga se inicia desde valores pequeños de la deformación, la descarga tiene el esperado comportamiento lineal; sin embargo, si la descarga se inicia desde deformaciones algo mayores, pueden producirse fuertes no-linealidades al inicio del camino de descarga, acompañados de incrementos inesperados del daño local en el interior del material.

Así, en este apartado se describe el modo en que se prescribieron las condiciones de contorno para simular una *descarga* elástica intermedia, se presentan algunos resultados de simulaciones de los procesos de carga-descarga y se expone, finalmente, observaciones sobre el comportamiento del Modelo de Daño durante la descarga.

7.5.1 Metodología y Consideraciones Numéricas.

7.5.1.a Modelo de celda utilizado y malla de elementos finitos.

Se construyó una celda 3D con 40 partículas cúbicas (esbeltez constante $R=1$) y una fracción volumétrica de refuerzo $F=12\%$. Nótese que es ésta la misma celda utilizada antes, en el capítulo 4, para validar el método de celdas frente datos experimentales. Sólo se diferencia por el comportamiento constitutivo asignado a la matriz y por la presencia de elementos cohesivos.

La malla de las fases sólidas se construyó utilizando tetraedros de interpolación lineal, cuadrática, así como tetraedros “cuadráticos modificados” de la librería de ABAQUS. Las mallas con elementos lineales siempre fueron mucho más refinadas que aquellas con

elementos cuadráticos con el objeto de minimizar la sobreestimación de rigidez estructural asociada a este tipo de elementos. Sin embargo, incluso con las mallas más refinadas, la solución tensional estuvo muy por encima de los dos casos con elementos cuadráticos.

Los modelos basados en elementos cuadráticos presentan, por su parte, el problema de la conectividad nodal con los elementos cohesivos de interfaz, cuyas funciones de forma son lineales. Esto se resolvió del modo explicado en el apartado 3.3.3.c y representado en la figura 3.12. Evidentemente, la compatibilidad y continuidad del campo de desplazamientos entre las superficies de los elementos cohesivos y las superficies de los tetraedros sólidos a uno y otro lado de la interfaz está asegurada únicamente en los nodos de la malla de elementos finitos, lo que matemáticamente puede implicar una presencia ficticia de *micro-fisuras* o de *micro-interpenetraciones* en el interior de la celda multipartícula deformada, aun cuando no se hayan iniciado los procesos de daño por decoherión propiamente tales. Esto se representa esquemáticamente en la figura 7.10.

Nótese en todo caso, que la transferencia de carga entre elementos adyacentes se realiza a través de los nodos, de modo que las *micro-fisuras* o *micro-interpenetraciones* presentes en el seno del material (debidas a la incompatibilidad de desplazamientos antes mencionada) no dan origen a concentraciones de tensión como las que se producen en torno al vértice de una fisura real.

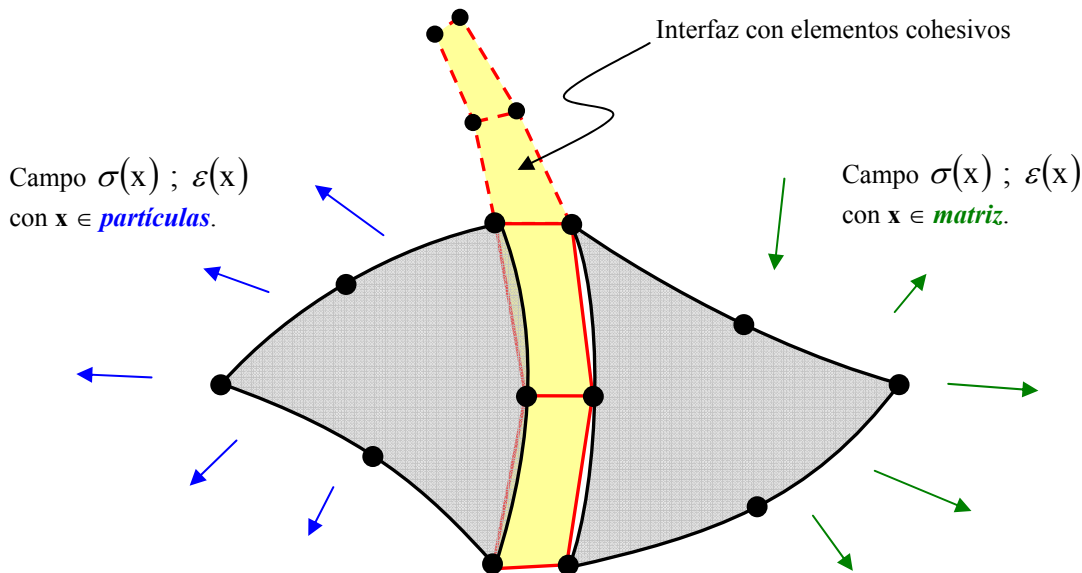


Figura 7.10 Representación esquemática de *micro-fisuras* y *micro-interpenetraciones* entre elementos cohesivos (de interpolación lineal) y tetraedros (de interpolación cuadrática) cuando aun no se ha iniciado el proceso de daño.

Aunque, por brevedad, sólo se presentará los resultados y observaciones realizadas a partir de soluciones con elementos cuadráticos, debe indicarse que, al menos cualitativamente, las evoluciones de los procesos de daño predicha por los modelos con tetraedros lineales son similares a las de los modelos basados en elementos cuadráticos, con la ventaja adicional de que hay más dificultades de convergencia en estos últimos.

7.5.1.b Comportamiento constitutivo: fases sólidas e interfaz cohesiva.

Para matriz y partículas se consideró el mismo comportamiento que en el apartado anterior: para las partículas se consideró un comportamiento lineal elástico con $E_p = 410$ GPa y $\nu_p = 0,16$. Para la matriz se asignó un comportamiento Ramberg-Osgood a través de las ecuaciones (6.1) y (6.2) con parámetros $E_m = 210$ GPa; $\nu_m = 0,3$; $\sigma_{02} = 400$ MPa y $n=10$.

En el caso de las interfaces cohesivas, la matriz de rigidez cohesiva utilizada es de tipo desacoplado (y por lo tanto, diagonal). La rigidez cohesiva inicial es de $1,2 \cdot 10^9$ MPa/mm con independencia del modo de carga; con este valor la presencia de elementos cohesivos de interfaz no modifica la rigidez del compuesto antes del inicio del daño. Se utilizó un criterio de iniciación de daño cuadrático en tensiones, con una resistencia cohesiva de $t^R = 600$ MPa (1,5 veces el límite elástico de la matriz) tanto para el modo de tracción pura como para los modos de cortadura. La curva de ablandamiento es de tipo lineal, con un valor de energía de fractura de $G^C = 50$ J/m².

7.5.1.c Condiciones de contorno y Método de Control.

Todas las simulaciones se realizaron utilizando condiciones de contorno periódicas a través de la ec. (3.4), aunque el método de control (*posición o fuerza*, según se explicó en 3.3.3.b) varió de acuerdo a lo siguiente:

Simulaciones en CARGA:

Las simulaciones del proceso de *carga* modelaron una sollicitación macroscópica de tracción uniaxial a lo largo del eje X . Para evitar dificultades de inestabilidad en el equilibrio de fuerzas a nivel macroscópico –asociadas a la modelización del daño por decohesión– todas las simulaciones en *carga* se realizaron en *control de posición*. Obsérvese además que este fue el método empleado anteriormente en los capítulos 4, 5, 6, así como en los apartados 7.3 y 7.4.

Se prescribió c_{11} creciente en el tiempo a velocidad constante hasta el valor 0,005 ($e_{ing} = 0,5\%$ en la dirección del eje X), obteniéndose como resultante el valor de la reacción f_{11} . Se prescribió además $c_{ij} = 0 \forall i \neq j$, para impedir deslizamientos relativos entre caras opuestas de

la celda (deformación de cortadura). Por último, c_{22} y c_{33} se han considerado resultantes del análisis, permitiendo cuantificar la contracción transversal de la celda.

La tensión y deformación macroscópicas se calcularon a partir de su medida exterior, definida mediante las ecs. (3.24) y (3.25)

Simulaciones en DESCARGA:

En ausencia de fenómenos de daño y, por lo tanto, sin degradación de la rigidez global del material representado por la celda multipartícula, se espera que un proceso de descarga subsiguiente a un proceso previo de carga siga un camino de descarga lineal en el plano σ - ε , cuya pendiente es igual al módulo de elasticidad inicial del material. Sin embargo, la presencia de fenómenos de daño degrada progresivamente la rigidez del material, de modo que justo antes de iniciar una descarga no se conoce exactamente la cuantía del retroceso elástico de la deformación macroscópica. Una prescripción excesiva para el retroceso elástico en una descarga en *control de posición* podría dar lugar a la entrada de la celda en un régimen de compresión macroscópica.

Debido a esto, el método de control natural para una simulación del proceso de *descarga* es el *control de fuerza*. La metodología es la siguiente: se realiza una simulación previa del proceso de *carga* (en control de posición, como se describiera más arriba) hasta cierto valor de interés de la deformación macroscópica. Para llevar a cabo una descarga en *control de fuerza* se sustituye, en el nodo de control, la fuerza de reacción f_{11} –obtenida al final de la simulación en *carga*– por una fuerza puntual, de igual cuantía (para mantener el equilibrio al inicio de la descarga), fuerza que se hace disminuir progresivamente hasta cero, consistiendo el proceso de descarga en control de fuerza precisamente en esta disminución.

Como método alternativo, para llevar a cabo una *descarga* en *control de posición* se prescribe, sobre la misma componente de desplazamiento del nodo de control que controlaba el previo proceso de carga, un valor de desplazamiento ligeramente inferior al que ese nodo tenía al iniciar la descarga; para asegurar que la descarga elástica no implica una entrada en compresión, como estimación del retroceso elástico puede usarse $\Delta c_{11} = -\rho (\sigma/E_0)L_0$, con ρ *pequeño* para evitar entrar en compresión (en todo caso, en el rango $0 < \rho \ll 1$) y donde σ es la tensión macroscópica al inicio de la descarga, E_0 el módulo elástico macroscópico inicial y L_0 la longitud inicial de arista de la celda.

Como se verá en el siguiente apartado, se realizaron simulaciones en descarga utilizando ambos métodos de control en distintos experimentos numéricos.

7.5.2 Resultados de las Simulaciones Carga-Descarga.

Se han considerado dos situaciones diferenciadas. Por una parte, se consideró como referencia un material indañable (con nodos compartidos en las interfaces). Por otra, se consideró un material con interfaces dañables de acuerdo a los parámetros cohesivos descritos en el apartado anterior.

Utilizando este modelo se han realizado simulaciones de un ensayo de tracción obteniéndose las gráficas σ - ε que se muestran en la figura 7.11a. Es claro que a partir de cierto punto, la simulación que incorpora el efecto del daño produce una curva de endurecimiento progresivamente más baja que la curva del material indañable, como se esperaba. Para el material dañable, se realizaron tres simulaciones del proceso de descarga, cada una a partir de distintos valores de deformación.

Primera descarga: se simuló una descarga total, en *control de fuerza*, desde una deformación 0.213%; en la descarga se alcanzó una deformación de 0.05% verificándose elasticidad lineal durante todo el proceso.

Segunda descarga: se simuló una descarga total, también en *control de fuerza*, desde una deformación 0.3%; en esta descarga la deformación se redujo hasta un valor de 0.123%. A diferencia de la primera descarga, a su inicio se observó (figura 7.11b) un ligero aumento de la macro-deformación seguido de una pequeña incurvación, verificándose elasticidad lineal durante el resto del proceso de descarga.

Tercera descarga: se realizó también en *control de fuerza*, desde una deformación 0.399%; en la simulación se presentaron grandes dificultades de convergencia, llegándose a interrumpir la simulación después de un determinado número de incrementos temporales, en los que *aumentó* la deformación macroscópica con *disminución* de la tensión macroscópica correspondiente (figura 7.11b).

La figura 7.11a muestra también valores para las pendientes de los caminos de descarga, obtenidos de rectas de regresión correspondientes a la zona elástica inicial (E_0) y a los tramos lineales de las dos descargas que sí pudieron completarse (E_1 y E_2). Como se esperaba, la pendiente de las líneas decrece cuanto mayor es la deformación desde la que se inicia la descarga, reflejando el aumento de daño macroscópicamente observable en el material compuesto.

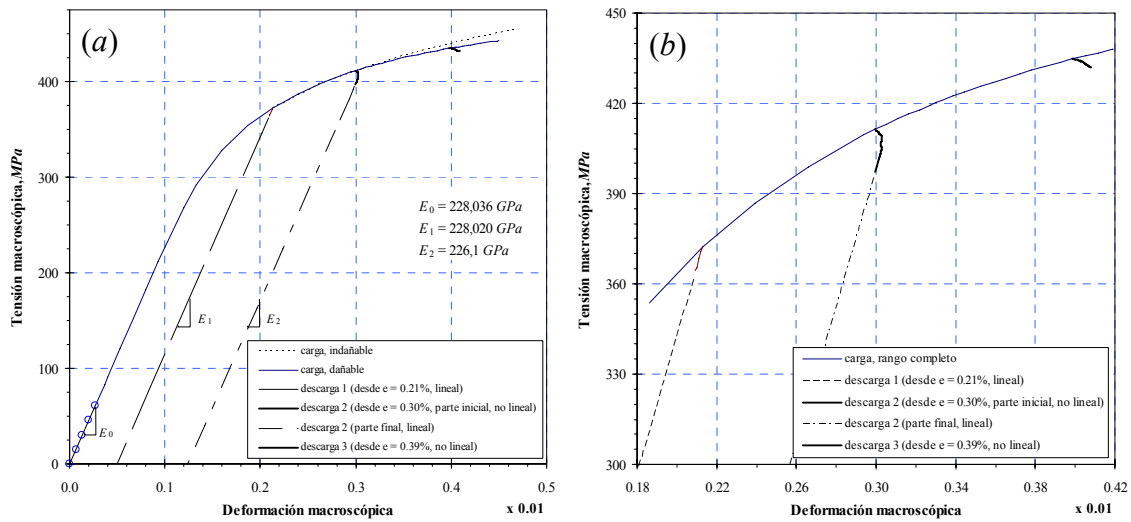


Figura 7.11 Curvas σ - ε incluyendo descargas. *a)* escala completa. *b)* zoom en la zona de inicio de las descargas.

El análisis de los resultados de las simulaciones realizadas conduce a las conclusiones preliminares siguientes. Cuando la descarga se inicia desde un relativamente bajo nivel de macro-deformación, el camino de descarga es perfectamente lineal. Sin embargo, cuando la descarga se inicia desde valores algo más altos de deformación, se observa una no linealidad muy marcada al *comienzo* del camino de descarga acompañada de aumentos locales de la variable de daño.

Como ejemplo, la figura 7.12 muestra el modelo multipartícula justo al inicio de la segunda descarga (desde la deformación de 0.3%), identificándose una partícula que había comenzado ya a decohesionar durante la etapa previa de carga. Esta figura muestra, además, imágenes de la citada partícula de muestra en tres instantes de la simulación de esta descarga. Una inspección de los mapas de la distribución espacial del parámetro escalar de daño en esta figura reveló que incrementos locales de área dañada (interfaz decohesionada) tuvieron lugar durante la parte inicial no lineal de la descarga (desde $t = 0$ hasta $t = 0,03$); la decohesión no progresa durante el tramo final (desde $t = 0,03$ hasta $t = 1,0$). Las zonas oscuras denotan áreas totalmente decohesionadas, incapaces por tanto de transmitir tensión entre matriz y partícula.

Una vez finalizada esta fase de no linealidad, caracterizada numéricamente por grandes dificultades de convergencia y por la necesidad de numerosas iteraciones de equilibrio, parece producirse un cierto “ordenamiento” en el campo tenso-deformacional interior del material, de tal modo que la línea de descarga pasa a ser recta hasta el final de la descarga, mejorando a la vez la convergencia de la simulación. Conviene mencionar que esta idea de “ordenamiento” corresponde a una explicación puramente intuitiva, no rigurosa, del fenómeno observado.

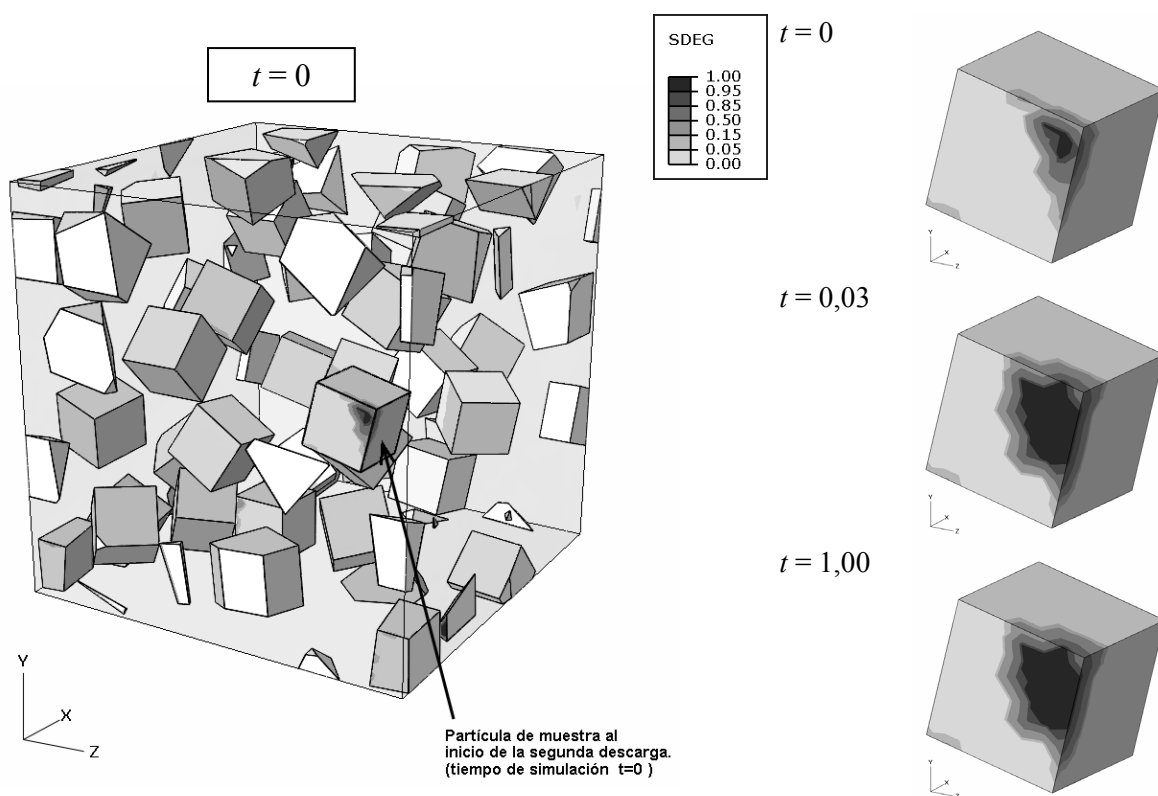


Figura 7.12 Izquierda: celda multipartícula justo al inicio de la simulación de la segunda descarga. Se representa el mapa del parámetro escalar de daño.

Derecha: evolución durante la descarga del parámetro de daño local D en la partícula de muestra. Las zonas más oscuras denotan interfaces dañadas.

Con el objeto de analizar las causas de la fuerte no linealidad detectada en el caso de la descarga que inicia en 0.399%, se llevaron a cabo, como *experimentos numéricos*, otras dos simulaciones de esta descarga cuyas condiciones se describen a continuación (la figura 7.13 muestra un detalle de sus resultados).

En un *primer experimento* se analizó la posible influencia de la tolerancia utilizada en el proceso numérico de solución de las ecuaciones de equilibrio. Para ello, en la simulación se dividió el proceso de descarga en dos etapas. En la **primera etapa** se planteó un proceso de *estabilización* consistente en mantener fija la deformación macroscópica de la celda (inmovilizando el nodo de control en el valor de desplazamiento que éste tenía al final del proceso previo de *carga*), pero obligando al código de cálculo a realizar nuevas iteraciones de equilibrio, por la vía de restringir las tolerancias utilizadas en la solución del problema no lineal de equilibrio (que el código ejecuta mediante un algoritmo full-Newton). En la **segunda etapa** se planteó el proceso de descarga en control de fuerza propiamente tal, al modo descrito en apartados anteriores.

Entre los numerosos parámetros de control de la solución utilizados en ABAQUS, el más significativo consiste en la comparación en cada iteración de la componente más grande del vector de fuerzas residuales, \bar{R} , con un valor que se obtiene como porcentaje de una fuerza nodal de referencia, $F_{t.av}$. Así, las iteraciones de Newton correspondientes a un determinado incremento temporal del proceso de solución incremental, se consideran *convergadas* cuando se satisface la desigualdad (7.18), donde GL : n° de grados de libertad del modelo FEM.

$$\max \left\{ |R_j| \right\}_{j=1, \dots, GL} \leq \alpha |F_{t.av}| \quad (7.18)$$

En (7.18), la referencia $F_{t.av}$ se calcula como promedio de un promedio, siendo actualizada en cada iteración de equilibrio: es el promedio en el tiempo de simulación del promedio de las fuerzas nodales (sean fuerzas externas o internas). Por defecto $\alpha = 0,5\%$, siendo éste el valor usado en todas las simulaciones previas de esta Tesis. Para la etapa de estabilización en este experimento numérico se utilizó un valor de $0,02\%$.

Este experimento estaba motivado en la idea intuitiva de “ordenación” del campo tenso-deformacional interior, algo que se esperaba lograr con la etapa de estabilización, previa a la descarga propiamente tal.

Durante la etapa de estabilización sin embargo, se observó que la fuerza de reacción en el nodo de control disminuyó en una cuantía no despreciable (segmento vertical en la figura 7.13). La segunda etapa del experimento no llegó a realizarse pues debió interrumpirse el proceso de estabilización, dados los valores muy pequeños de incrementos temporales encontrados por el algoritmo de incrementación automática del software de Elementos Finitos. Examinando los mapas de daño, se observaron incrementos locales de esta variable. Es decir, el daño aumentó durante la estabilización a macro-deformación constante, dando origen a un decremento en la macro-tensión soportada por la celda, desde 435 hasta 422 MPa.

El *control de posición* no es el método más natural en descargas pues se requiere conocer de antemano el retroceso máximo admisible. Sin embargo, y para analizar la influencia que el sistema de control pudiera tener en el proceso de descarga, se realizó un **segundo experimento numérico** en el que se llevó a cabo una descarga en *control de posición* (utilizando las tolerancias que, por defecto, ofrece el código de cálculo). En este caso, la descarga resultó no lineal con una ligera incurvación inicial de la línea de descarga, acompañada de un aumento local del daño; la pendiente media del tramo recto de la línea de descarga resultó varias veces *superior* al valor del módulo de elasticidad inicial, E_0 . Lo que demuestra que la disminución registrada en la macro-tensión fue mucho mayor que la que correspondería al retroceso prescrito de la deformación macroscópica (incluso si no se

estuviera en presencia de daño). Esto sólo se puede explicar por un aumento del daño *durante* esta descarga efectuada en control de posición.

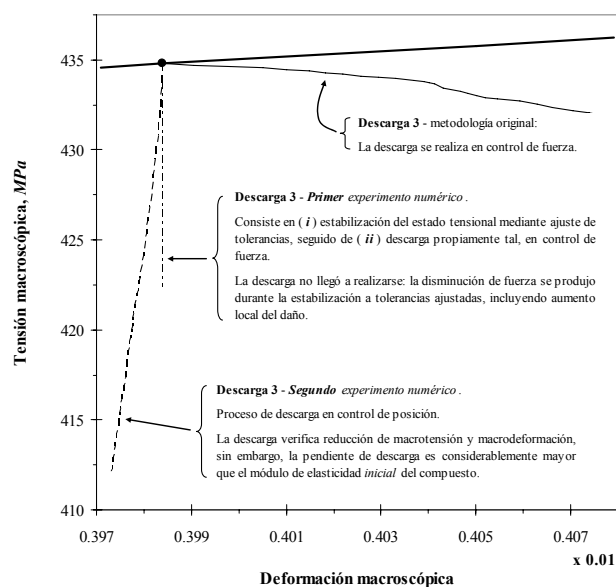


Figura 7.13. Gráfica σ - ϵ detallando la *tercera* descarga. Se muestra el intento de descarga original en control de fuerza, así como los dos experimentos numéricos.

7.5.3 Mecánica del Daño en Descarga.

Una vez concluido que, en cualquiera de las variantes analizadas, en el comienzo del proceso de descarga se producía una fuerte no linealidad acompañada de un inesperado aumento local del daño, a continuación se analiza el problema desde el punto de vista de la Mecánica del Daño. Para ello se ha estudiado la definición del modelo constitutivo cohesivo usado en los elementos de interfaz.

Una posible explicación

El modelo cohesivo utilizado en todas las simulaciones previas consiste en una ley tracción-separación con una parte inicial lineal y elástica, un criterio de iniciación de daño definido en tensiones y una curva de ablandamiento lineal. Esta ley se representa en la figura 7.14 mediante la línea continua que une los puntos *OAB*. En ella, el punto *A* representa el criterio de iniciación de daño ($D_A = 0$), mientras que *B* representa la apertura de una interfaz totalmente dañada ($D_B = 1$). En la gráfica inferior se representa la evolución del parámetro de daño *D* en función de la apertura de la interfaz.

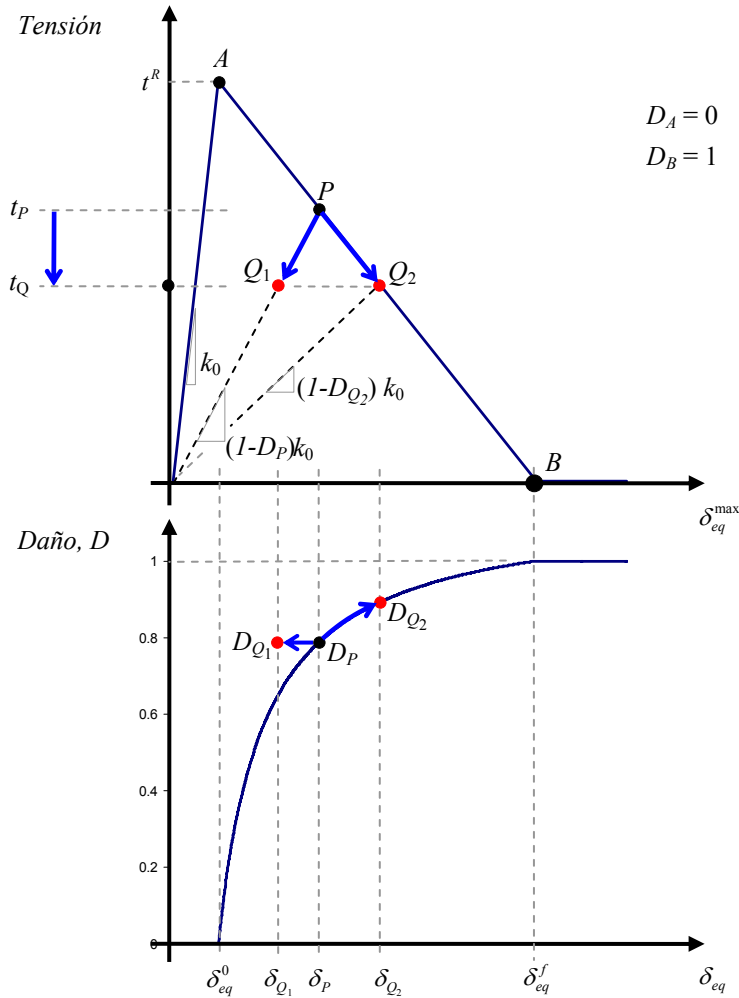


Figura 7.14. Ley tracción-separación (arriba) y su correspondiente ley de evolución del Parámetro Escalar de Daño (abajo).

Sea P , en la figura 7.14, un punto al que se ha llegado a través del camino OAP , mediante aplicación de un proceso de carga monótonamente creciente en *control de posición* (esto es, con apertura *prescrita* de la interfaz cohesiva). El punto P representa un estado de equilibrio entre las tracciones externas ejercidas sobre la interfaz por quien ha prescrito la separación y las tensiones internas transmitidas por la interfaz cohesiva. Nótese que la apertura de interfaz en P ha superado la apertura de iniciación del daño, de modo que $0 < D_P < 1$. La rigidez de la interfaz se ha degradado en un factor $1-D_P$, como se indica en la figura 7.14.

Supóngase ahora que las tracciones externas disminuyen por alguna razón (control de fuerza), causando el decremento $\Delta t = t_Q - t_P < 0$ en la tensión interna transmitida por la interfaz indicado en la fig.7.14. En una implementación práctica de este modelo cohesivo, frente a este decremento Δt el algoritmo que calcula la solución constitutiva debe ser capaz de obtener la

nueva apertura de interfaz, así como la variación de las variables internas que el modelo considere, que mantienen el equilibrio de fuerzas.

Obsérvese que, si en la solución constitutiva participan simultáneamente como incógnitas tanto la apertura de interfaz δ como el parámetro escalar de daño D , existen dos soluciones que garantizan el equilibrio de fuerzas en la nueva configuración, correspondientes a los puntos Q_1 y Q_2 . El camino de descarga PQ_1 ocurre con disminución de la apertura a *daño constante*, de modo que $D_{Q_1} = D_P$, siendo ésta la situación físicamente esperable. El camino PQ_2 en cambio, ocurre con un aumento tanto de la apertura como del parámetro de daño, de modo que $D_{Q_2} > D_P$, siendo ésta una situación que no tiene sentido físico, aunque es matemáticamente admisible si, como se ha supuesto, ambas variables participan en las iteraciones constitutivas y el único criterio de solución es el equilibrio de fuerzas.

En cambio, si a partir del punto P se realiza un proceso de descarga *en control de posición* (es decir, prescribiendo un cierre de la apertura de la interfase), no sólo queda naturalmente descartada una solución que implique aumento de la apertura de la interfaz, sino que queda descartada una solución que implique aumento en el parámetro de daño, puesto que, por definición, éste sólo puede variar cuando el estado tenso-deformacional está *sobre* la línea AB . Por lo tanto, es claro que la solución, en este caso de *descarga en control de posición*, es única (punto Q_1).

Es de destacar, no obstante, que un elemento cohesivo perteneciente a la interfaz de una partícula que está embebida en el interior de una celda multipartícula, se encuentra siempre en un contexto de *control de fuerza* puesto que, aunque se esté llevando a cabo una descarga macroscópica en *control de posición* (a través de desplazamientos prescritos para el nodo de control), el entorno de la interfaz está transmitiendo al elemento cohesivo una historia de tensiones, no está prescribiendo en éste un desplazamiento. Se concluye entonces que, sin importar el método de control utilizado, en la *descarga* macroscópica de una celda multipartícula siempre se dan las condiciones que conducen a una pérdida de unicidad en la solución del estado tenso-deformacional, no sólo de los elementos finitos cuyo comportamiento constitutivo incluye un parámetro escalar de daño en evolución, sino también, por extensión de todos los elementos restantes del modelo de elementos finitos.

Experimentos numéricos en un modelo uni-elemento

Para constatar estas observaciones, se consideró un modelo constituido por un único elemento cohesivo sobre el que actúan fuerzas iguales aplicadas sobre los cuatro vértices y normales al plano del elemento, como se muestra en la figura 7.15.

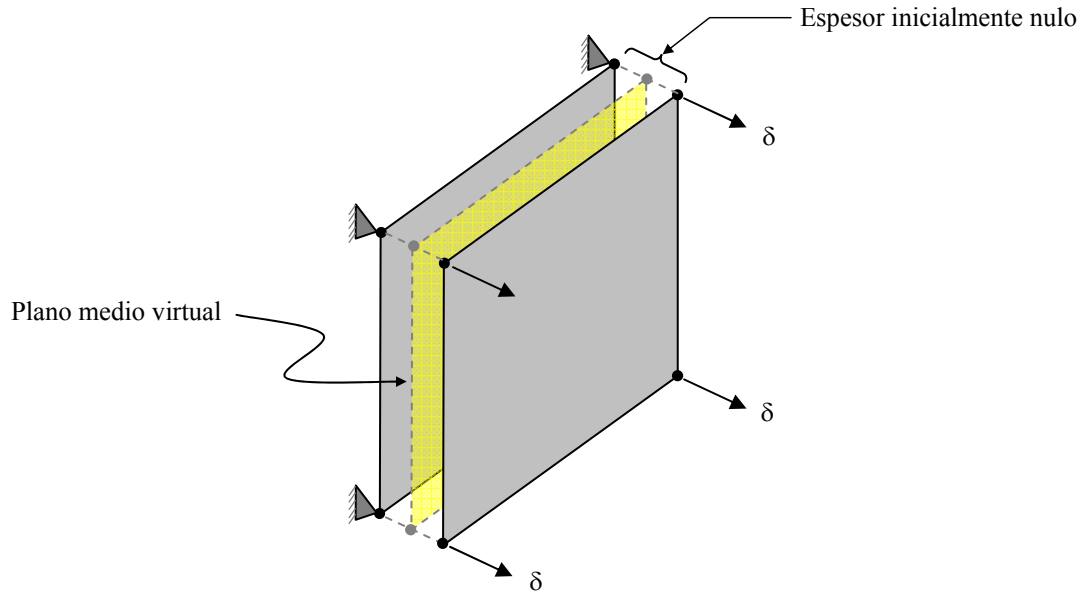


Figura 7.15. Modelo constituido por un único elemento cohesivo utilizado en experimentos numéricos de verificación.

Con este modelo se llevó a cabo un conjunto de experimentos numéricos esquematizados en la figura 7.16; en ella, el punto A representa el estado tracción-separación del elemento cohesivo en el momento en el que se inicia la descarga. En todos los experimentos, la carga se realizó en control de posición.

Detalle de los cuatro experimentos numéricos:

- a. *Carga hasta un valor de apertura menor que el punto de iniciación de daño seguida de descarga en control de fuerza.-* La descarga se produjo, como era de esperar, por la rama elástica inicial (vector A_0O , fig. 7.16).
- b. *Carga hasta un valor de apertura, δ_A , mayor que el punto de iniciación de daño, δ_0 , pero menor que el punto de interfaz totalmente dañada, δ_f , seguida de una descarga en control de fuerza.-* Se simularon descargas desde diferentes valores de apertura en el intervalo $\delta_0 < \delta_A \leq \delta_f$. En todos los casos la descarga dio lugar a un aumento de la apertura del elemento acompañado de un aumento en el parámetro de daño D (lo que corresponde a una descarga en la dirección del vector AC, fig. 7.16).
- c. *Carga hasta un valor de apertura δ_A seguida de una descarga en control de posición.-* La descarga se produjo por una línea de descarga lineal-elástica cuya pendiente es la rigidez inicial reducida por el factor $1-D$, esto es, en la dirección del vector AD, fig. 7.16.

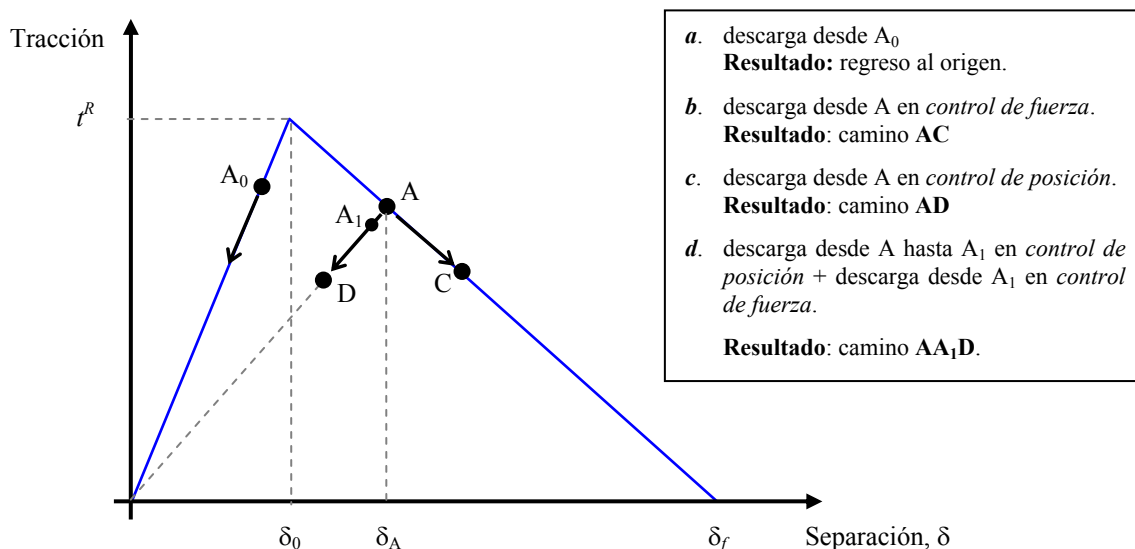


Figura 7.16 Caminos de descarga en los cuatro experimentos numéricos basados en un único elemento cohesivo.

- d. *Carga hasta un valor de apertura δ_A seguida de una descarga en dos etapas.*- La **primera etapa** consistió en prescribir un *pequeño* cierre de la apertura (esto es, una *pequeña* descarga en control de posición). La **segunda etapa** consistió en una descarga en control de fuerza a partir del punto final de la descarga previa en control de posición. El camino de descarga en esta última etapa correspondió a un cierre de interfaz, sin aumento del daño, por una línea cuya pendiente es la rigidez inicial reducida por el factor $1-D$, (vector AD). Esto demuestra que el parámetro de daño no participó en las iteraciones de equilibrio cuando la descarga en control de fuerza se realiza desde un punto (final de la primera etapa) que no está *en* la curva de ablandamiento.

7.5.4 Observaciones.

- i. Se ha intentado estudiar, mediante elementos cohesivos insertados en las interfaces matriz-partícula de celdas multipartícula 3D, la evolución del módulo de Young del material compuesto por el método de descargas elásticas intermedias. Se encontró que si se simula un proceso de descarga a partir de un valor relativamente bajo de macro-deformación, el camino de descarga en la gráfica tensión-deformación obtenida puede considerarse perfectamente lineal. Sin embargo, si el proceso de descarga se inicia para

niveles más altos de deformación, el camino de descarga muestra una marcada no-linealidad inicial.

- ii.* En la simulación de un proceso de descarga puede haber soluciones múltiples de las ecuaciones de equilibrio cuando se modela la evolución $D = D(\varepsilon)$. alguna de las soluciones puede corresponder a un camino de descarga no lineal con incremento de daño. El daño aumenta localmente durante las primeras etapas en las que el proceso de descarga muestra no-linealidad, tanto si se impone *control de carga* como *control de posición*.
- iii.* El análisis de la naturaleza del modelo constitutivo utilizado en las interfaces sugiere que la no-unicidad en la solución del campo de tensiones y deformaciones en el interior de la celda multipartícula se deriva, a su vez, de una falta de unicidad en la solución constitutiva calculada en los puntos de integración de los elementos cohesivos. Si bien este efecto se ha observado en elementos cohesivos, es razonable suponer que la falta de unicidad puede ser común a todos los modelos constitutivos que incorporan en su formulación un parámetro escalar de Daño que evoluciona con la deformación, cuando se implementan en un *contexto de control de fuerza*, en el que las fuerzas externas son decrecientes.
- iv.* Debe indicarse que todos los resultados obtenidos a lo largo de la Tesis, incluyendo los del presente capítulo sobre la influencia del daño, se efectuaron mediante una implementación del método de Elementos Finitos basada en las tres consideraciones siguientes: (a) integración *implícita* de las ecuaciones de movimiento, (b) no se ha considerado la influencia de ningún tipo de *efectos inerciales* (a los elementos de las fases sólidas no se les ha asignado densidad) y (c) no se ha considerado ninguna dependencia de la *velocidad de deformación* en las propiedades de endurecimiento de la fase matriz. En este punto, no está claro si la modificación de alguna de estas tres consideraciones fundamentales podría eliminar el problema de falta de unicidad en la solución del estado tenso-deformacional detectado en el apartado 7.5.
- v.* En términos generales, una implementación numérica de modelos de daño, en el contexto señalado en el párrafo precedente, que resulte efectiva indistintamente tanto en la simulación de procesos de carga como de descarga, debería incorporar provisiones que permitan reconocer, en cada punto de Gauss de cada elemento cuyo comportamiento constitutivo incorpore daño, si la disminución en las fuerzas externas *a ese elemento* se debe a su proceso de daño interno, o si obedece a una disminución en la sollicitación mecánica externa impuesta sobre la totalidad de la estructura de la que dicho elemento forma parte, de modo de poder *retirar* la variable daño de las iteraciones de Newton,

manteniéndola constante. No se vislumbra, sin embargo, un modo sencillo de implementar lo anterior en un modelo de elementos finitos formulado en desplazamientos, dado que, esencialmente, sería necesario vincular de alguna forma efectos *locales* con causas *remotas*.

- vi.** En relación a la observación anterior, una posible forma de vincular los mencionados efectos *locales* con sus causas *remotas* podría ser la implementación de modelos no locales de daño, u otros basados en gradientes, en los que la solución del estado tenso-deformacional en un punto material incluye, de alguna forma, información sobre el estado tenso-deformacional en su entorno, lo cual implica definir una longitud característica cuyo sentido físico no es conocido a priori.
- vii.** En relación a las observaciones anteriores (iv) y (v), se intuye en este punto, aunque su constatación o negación se dejan como “trabajo futuro”, que la introducción en el modelo numérico de efectos inerciales podría constituir un posible vínculo entre los mencionados efectos *locales* y sus causas *remotas*, que permita eliminar el problema de falta de unicidad en descarga.
- viii.** Si se tiene en cuenta que el procedimiento de solución no lineal incremental resuelve, en cada incremento temporal, un cierto número de iteraciones de Newton, una posibilidad para *impulsar* un proceso numérico de *descarga* hacia un camino de descarga lineal sin que se produzca incremento del daño, podría consistir en la imposición de las siguientes condiciones:
 - Que en cada incremento temporal se realice un número N de iteraciones de Newton, con $N > N_1$, siendo N_1 un parámetro definido por usuario (que podría ser considerado como uno más de los *parámetros operativos* del modelo constitutivo, en la terminología utilizada en el apartado introductorio de este capítulo), quedando, a su vez, definido por los *criterios de parada* usuales, ya sean basados en el vector de fuerzas residuales u otros.
 - Que durante esas primeras N_1 iteraciones de equilibrio, no participe el parámetro de daño D en las iteraciones constitutivas de aquellos elementos que incorporan daño en su formulación.

Evidentemente, la dificultad de este enfoque reside precisamente en la dificultad de estimar a priori el valor de N_1 sin “encarecer” excesivamente el tiempo de cálculo

Capítulo 8

Conclusiones y Trabajos Futuros

8.1 Conclusiones

Con el objeto de estudiar el comportamiento mecánico y los procesos de daño de PMMCs, se ha desarrollado una herramienta para la elaboración de modelos de celda multipartícula, entre cuyas características se encuentran la capacidad de producir distribuciones aleatorias de partículas prismáticas en el espacio bi o tridimensional, así como la posibilidad de reflejar en las celdas resultantes, características microestructurales tales como la fracción volumétrica de partículas, su esbeltez y el grado de aleatoriedad en su orientación.

Los modelos de celda multipartícula construidos con la herramienta de generación desarrollada durante la Tesis se han utilizado en la determinación de las constantes elásticas efectivas del compuesto, a partir de aquellas de sus fases constituyentes y de la información disponible sobre su microestructura. Esto permitió estudiar sistemáticamente la influencia de la fracción volumétrica y la esbeltez, tanto para compuestos cuya respuesta mecánica en elasticidad es isótropa como transversalmente isótropa. Recurriendo a la ecuación de Halpin-Tsai, los resultados pudieron extenderse desde los valores puntuales de fracción volumétrica utilizados en las celdas multipartícula analizadas a un rango continuo entre 0 y 30%. Además, si bien la ecuación de Halpin-Tsai está bien establecida en la literatura como método de aproximación para compuestos con refuerzo de fibras, se han propuesto en el presente trabajo nuevos valores para sus parámetros, que la hacen aplicable a otros escenarios microestructurales.

Para aquellos casos en los que el compuesto está constituido por una matriz que deforma plásticamente y endurece por deformación, se mostró que la curva de endurecimiento del compuesto puede ser obtenida mediante análisis numérico de celdas. Se mostró que, cuando el endurecimiento por deformación de la fase matriz es de tipo potencial, el endurecimiento del compuesto obedece sólo aproximadamente a una ley potencial, cambiando los valores efectivos del coeficiente y exponente de endurecimiento según el rango del ajuste. Más importante, se mostró que en un rango de ajuste restringido (en el que el endurecimiento sí puede considerarse potencial), el valor efectivo del exponente de endurecimiento es función de la fracción volumétrica de partículas elásticas.

En el contexto del estudio del comportamiento no lineal del compuesto, se ha descrito el estado tenso-deformacional en el *interior* del material, describiendo los gradientes de tensión y deformación en aquellas zonas de la fase matriz cercanas a vértices o aristas de partículas. Para estos efectos, se han desarrollado dos metodologías descriptivas: una basada en el uso de *indicadores estadísticos* y otra basada en el uso de *histogramas* de distribución de variables locales.

En el primer caso se estudió la evolución de los promedios volumétricos de los tensores tensión y deformación en las fases constituyentes, cuando la matriz presenta un comportamiento constitutivo no lineal, con deformación plástica. En el segundo caso se estudió la variabilidad del índice de triaxialidad en el interior de las fases constituyentes, lo que permitió cuantificar el hecho de que, conforme se incrementa la deformación macroscópica, aumenta sensiblemente el grado de dispersión del valor local de este índice (sobre todo en la matriz), pudiendo producirse zonas de muy alta y muy baja triaxialidad. Esta información puede resultar de utilidad en caso de que se desee estudiar la influencia de los mecanismos de daño dúctil de la fase matriz sobre el comportamiento mecánico efectivo, máxime, teniendo presente que los parámetros de los modelos constitutivos que incorporan daño pueden ser en algunos casos dependientes de la triaxialidad.

Estudiando la evolución de diversas variables energéticas durante la sollicitación mecánica, se ha descrito de un efecto de *confinamiento energético* debido a la deformación plástica en la fase matriz, efecto que se ha relacionado con la producción de tensiones residuales en el interior del material compuesto. Para cuantificar este fenómeno se ha introducido el concepto de *energía elástica confinada*, que es una energía almacenada en el interior del material, de naturaleza elástica, pero que no puede ser liberada en un proceso de descarga subsiguiente a una etapa previa de carga.

También en el contexto del estudio del comportamiento no lineal del compuesto sin incluir el efecto del daño, se ha estudiado y propuesto un modo de implementar el método Secante Modificado de Suquet en el caso particular de partículas prismáticas en orientación aleatoria. La particularidad del enfoque aquí presentado es que utiliza, como método de homogeneización lineal subyacente, el método de aproximación de constantes elásticas basado en la ecuación de Halpin-Tsai, descrito en el segundo párrafo de estas conclusiones. En la consecución de esta meta, se han revisado algunos aspectos conceptuales, particularmente, la influencia que tiene no linealidad del comportamiento constitutivo de las fases sobre la definición de medidas representativas adecuadas de la tensión y la deformación en dichas fases.

Se ha implementado un modelo cohesivo para definir el comportamiento constitutivo de la interfaz matriz-partícula, posibilitando así el estudio de la influencia de este mecanismo de daño sobre la respuesta mecánica efectiva del compuesto en tracción uniaxial. En este contexto, se ha observado que la decohesión produce una degradación de la rigidez material y del límite elástico del compuesto. Particularmente, en el caso de la rigidez material, el mecanismo por el que opera esta degradación se ha descrito como un proceso en dos instancias. La primera de ellas está asociada al hecho de que la decohesión impide transmitir tensión desde la matriz a las partículas de refuerzo. La segunda instancia se asocia al hecho de

que el volumen contenido entre las superficies de interfaz decohesionada (esto es, poros nucleados por la decohesión) puede crecer debido a la deformación plástica de la matriz circundante. Recurriendo a consideraciones energéticas se pudo evaluar aproximadamente la importancia relativa de estas dos instancias en la degradación de la rigidez efectiva, encontrándose, para el caso particular estudiado, que la contribución de segunda instancia puede ser tan importante como la primera.

8.2 Trabajos Futuros

Dentro de los puntos que a continuación se indican como trabajo futuro, se encuentran tanto actividades puntuales a realizar, como posibles líneas de trabajo que pueden requerir un desarrollo más extenso.

- Incorporar en las aristas de las partículas un radio de curvatura, lo suficientemente pequeño como para no desvirtuar las razones que motivaron el uso de partículas prismáticas, pero lo suficientemente grande como para que la distorsión que sufren los elementos finitos de la fase matriz situados en la *vecindad inmediata* de aristas y vértices de partícula no perjudique la capacidad global de convergencia de los modelos numéricos, tal como se describió cualitativamente en el apartado 3.3.8. Esto permitiría resolver valores mayores de deformación macroscópica que aquellas consideradas en el capítulo 6, sobre todo cuando se utilizan partículas de esbeltez $R \neq 1$. Si bien este enfoque podría resultar en modelos con un mayor número de grados de libertad a resolver (efecto de mallas potencialmente más refinadas) y, por tanto, con mayores requerimientos de memoria y potencia de proceso, la mejora en la habilidad de convergencia podría contener los tiempos totales de cálculo.
- Implementar en un algoritmo el método de homogeneización Secante, del modo propuesto en el apartado 6.4.4 y que utiliza como método elástico subyacente a la ecuación de Halpin-Tsai, calibrada según se describió en el apartado 5.4. Por una parte, esto permitiría el uso *autónomo* de esta implementación del método Secante para estimar analíticamente, por ejemplo, la respuesta del compuesto en tracción simple o en cortadura pura. Por otra parte, la implementación propuesta en este trabajo podría ser usada como ecuación constitutiva dentro de un código de elementos finitos, reconociendo, en todo caso, que el método Secante es, esencialmente, un modelo de elasticidad no lineal.
- En el ámbito del estudio de la curva de endurecimiento del compuesto, puede estudiarse en más detalle la influencia de la esbeltez de las partículas y, particularmente, de su orientación en el espacio. Se vislumbra posible, por ejemplo, cuantificar mediante celdas

multipartícula el grado de anisotropía en el *límite elástico* del compuesto, cuando la esbeltez es distinta de la unidad y las partículas están orientadas en una dirección predominante, como en las figuras 3.8 y 3.9.

- En el ámbito del modelado de la decohesión matriz-partícula, puede también estudiarse más detalladamente la influencia de considerar valores diferentes para las *resistencias cohesivas* en modos puros (denominadores en la expresión (3.14)). Del mismo modo, podría también estudiarse el efecto de utilizar valores diferentes de *energía de fractura* en modos puros, normal o de cortadura, a través de definir una dependencia de la energía de fractura con el parámetro X , introducido en la expresión (3.20).
- También en el contexto del estudio del daño en celdas multipartícula, puede investigarse modificaciones de implementación de modelos de daño, de modo de evitar la pérdida de unicidad detectada en la solución numérica del estado tenso-deformacional, cuando se modelan descargas elásticas intermedias en un proceso de sollicitación mecánica, tal como se observó en el capítulo 7.
- Investigar el modo de incluir en el análisis de celda multipartícula, la capacidad de modelar la fractura frágil de partículas. Se vislumbra que el denominado X-FEM, extensión del método de Elementos Finitos basada en el concepto de *partición de la unidad*, introducido por Melenk y Babuska (1996), puede constituir una herramienta adecuada en este sentido; sobre asuntos de implementación de X-FEM en fractura, consultar Belytschko y Black (1999), Huang, Sukumar y Prévost (2003), Sukumar y Prévost (2003) y ABAQUS 2009.
- Investigar el modo de incluir en el análisis de celda multipartícula, la capacidad de modelar el daño dúctil en la fase matriz. Una posibilidad es utilizar un modelo constitutivo para esta fase que contemple esta posibilidad, como por ejemplo, el modelo GTN, posiblemente complementado con la información sobre la distribución espacial del índice de triaxialidad obtenida en el presente trabajo, en el capítulo 6. Otra posibilidad es recurrir a un modelo constitutivo basado en la Mecánica del Daño, que utilice un parámetro escalar de daño cuya evolución esté controlada por la deformación plástica, y que degrade la rigidez material en los puntos de integración de los elementos de la fase matriz.

Anexos

ANEXO A Obtención de las ecuaciones que garantizan periodicidad

Lo expresado en el apartado 3.2.1 y referido a la figura 3.8 impone un conjunto de restricciones en la frontera, para el campo de desplazamientos que lleva a la celda desde la configuración original hasta la configuración deformada, de modo que se garantice la repetibilidad espacial de la celda deformada. Estas restricciones constituyen las ecuaciones para las condiciones de contorno periódicas, que serán deducidas a partir de las siguientes definiciones, referidas a la figura A.1:

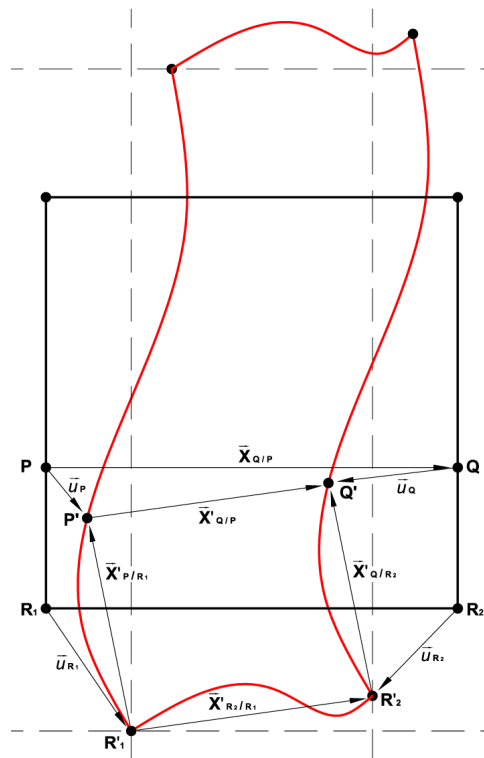


Figura A.1. Definiciones relevantes para los vectores participantes en las condiciones de contorno periódicas.

Definiciones relevantes en la cara izquierda:

- P : punto arbitrario sobre la cara izquierda
- R_I : punto de referencia en la cara izquierda
- \vec{X}_P : vector posición de P , en la *configuración original*.
- \vec{X}'_P : vector posición de P , en la *configuración deformada*.
- $\vec{X}_{P/R_I}, \vec{X}'_{P/R_I}$: vectores *posición relativa* de P respecto de su punto de referencia R_I , en la *configuración original* y en la *configuración deformada*, respectivamente.
- $\vec{U}_P = \vec{X}'_P - \vec{X}_P$: vector desplazamiento, desde P hasta P' .

Definiciones relevantes en la cara derecha:

Se definen en la cara derecha las mismas cantidades que en la izquierda, pero cambiando P por Q y R_I por R_2 , donde:

- Q : punto de la cara derecha, que en la *configuración original* es correspondiente a P .
- R_2 : punto de referencia en la cara derecha, que en la *configuración original* es correspondiente a R_I .

Con estas definiciones, la posición de P en la *configuración original* (A.1) y en la *configuración deformada* (A.2) son:

$$\vec{X}_P = \vec{X}_{R_I} + \vec{X}_{P/R_I} \quad (\text{A.1})$$

$$\vec{X}'_P = \vec{X}'_{R_I} + \vec{X}'_{P/R_I} \quad (\text{A.2})$$

Restando (A.2) – (A.1) queda:
$$\vec{U}_P = \vec{U}_{R_I} + \vec{X}'_{P/R_I} - \vec{X}_{P/R_I} \quad (\text{A.3})$$

Reordenando términos:

$$\vec{X}'_{P/R_I} = \vec{U}_P - \vec{U}_{R_I} + \vec{X}_{P/R_I} \quad (\text{A.4})$$

Con un desarrollo similar, se puede obtener la posición relativa de Q (que es punto correspondiente a P) con respecto a su referencia R_2 , en la *configuración deformada*:

$$\vec{X}'_{Q/R_2} = \vec{U}_Q - \vec{U}_{R_2} + \vec{X}_{Q/R_2} \quad (\text{A.5})$$

Observaciones:

- (1) En la *configuración original*, la condición de **correspondencia** entre P y Q y entre R_1 y R_2 tiene la siguiente consecuencia:

$$\vec{X}_{P/R_1} = \vec{X}_{Q/R_2} \quad (\text{A.6})$$

- (2) En la *configuración deformada*, habrá **compatibilidad de forma** entre caras opuestas de la celda si la posición relativa de P con respecto a *su* punto de referencia R_1 es igual a la posición relativa de Q con respecto a *su* punto de referencia R_2 , es decir:

$$\vec{X}'_{P/R_1} = \vec{X}'_{Q/R_2} \quad (\text{A.7})$$

De las ecuaciones (A.4) y (A.5), junto con las condiciones (A.6) y (A.7), se deduce que:

$$\vec{U}_Q - \vec{U}_P = \vec{U}_{R_2} - \vec{U}_{R_1} \quad (\text{A.8})$$

Como P es un punto *arbitrario* sobre la cara izquierda de la celda:

$$\boxed{\vec{U}_Q - \vec{U}_P = \vec{C}} \quad (\text{A.9})$$

donde \vec{C} es un vector *constante* $\forall P \in$ arista izquierda, siendo Q un *punto correspondiente* a P en la *configuración inicial*.

La ecuación (A.9) define las condiciones de periodicidad para el campo de desplazamientos en las aristas verticales opuestas de la celda, quedando asegurada la compatibilidad de formas entre celdas adyacentes (en la dirección X) por la constancia del vector \vec{C} y, por tanto, la repetibilidad (en la dirección del eje X) de la celda generadora deformada.

Es útil expresar la ec. (A.9) en términos de los vectores posición relativa entre P y Q del siguiente modo:

$$(\vec{X}'_Q - \vec{X}'_Q) - (\vec{X}'_P - \vec{X}'_P) = \vec{C} \quad (\text{A.10})$$

Reordenando:

$$(\vec{X}'_Q - \vec{X}'_P) - (\vec{X}_Q - \vec{X}_P) = \vec{C} \quad (\text{A.11})$$

Finalmente:
$$\vec{X}'_{Q/P} - \vec{X}_{Q/P} = \vec{C}$$
 (A.12)

En forma equivalente, para R_1 y R_2 , se tiene:

$$\vec{X}'_{R_2/R_1} - \vec{X}_{R_2/R_1} = \vec{C} \tag{A.13}$$

Expresando (A.12) o (A.13) en componentes:

$$\begin{matrix} L' \\ \delta_y \end{matrix} - \begin{matrix} L \\ 0 \end{matrix} = \begin{matrix} c_x \\ c_y \end{matrix} = \vec{C} \tag{A.14}$$

donde: $L' - L = \Delta L_x$

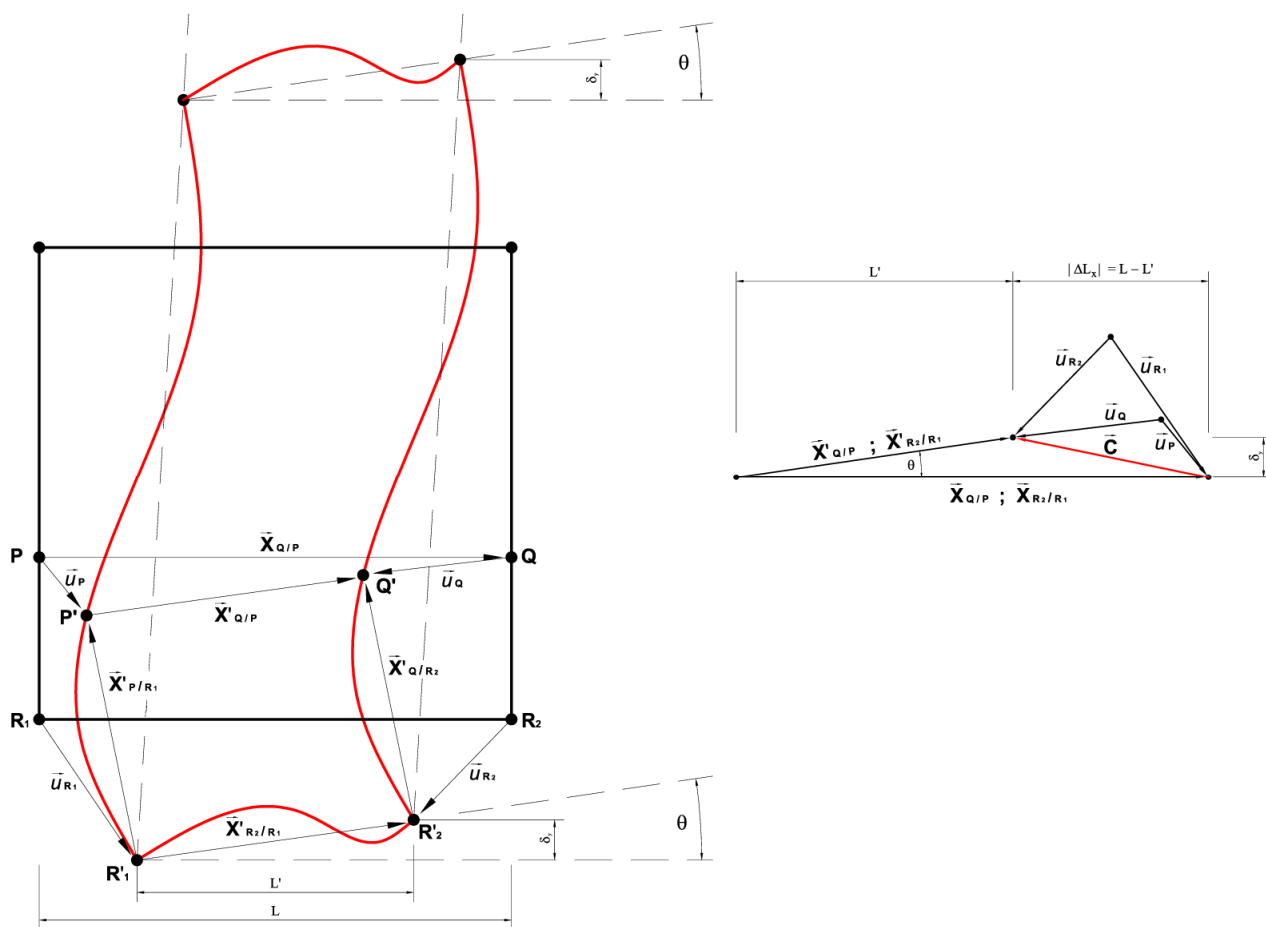


Figura A.2. Constancia del vector \vec{C} y su composición vectorial

De la figura A.2, las componentes de \vec{C} se interpretan del siguiente modo:

c_x : acercamiento (o alejamiento) de las caras verticales. Se asocia a la deformación ε_x en sentido promedio:

$$c_x = \Delta L_x \approx \varepsilon_x L \quad (\text{A.15})$$

c_y : deslizamiento relativo entre las caras verticales. Se asocia a la distorsión angular promedio de la celda:

$$c_y = \delta_y = L' \tan(\theta) \quad (\text{A.16})$$

Extensión al caso 3D.

Las ecuaciones para las condiciones de contorno periódicas en el caso 3D, para una celda de periodicidad prismática se obtienen con desarrollos similares al anterior para cada una de las 3 parejas de caras opuestas.

En una celda generadora cuyas caras son perpendiculares a los ejes del sistema de coordenadas, donde P_i es un punto arbitrario situado en una cara normal al eje i (con $i = 1, 2, 3$) y Q_i el punto que, en la *configuración original*, es *correspondiente* a P_i en la cara opuesta, las ecuaciones que garantizan repetibilidad de la celda son las siguientes:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Periodicidad entre las caras normales al eje x (eje 1):} & \vec{U}_{Q_1} - \vec{U}_{P_1} = \vec{C}_1 \quad (\text{A.17}) \\ \text{Periodicidad entre las caras normales al eje y (eje 2):} & \vec{U}_{Q_2} - \vec{U}_{P_2} = \vec{C}_2 \quad (\text{A.18}) \\ \text{Periodicidad entre las caras normales al eje z (eje 3):} & \vec{U}_{Q_3} - \vec{U}_{P_3} = \vec{C}_3 \quad (\text{A.19}) \end{array} \right.$$

ANEXO B Algoritmia para el método Secante

1. **Objetivo:** describir la relación no lineal entre la macro-tensión y la macro-deformación en el compuesto, discretizando la historia de deformación en un índice k .

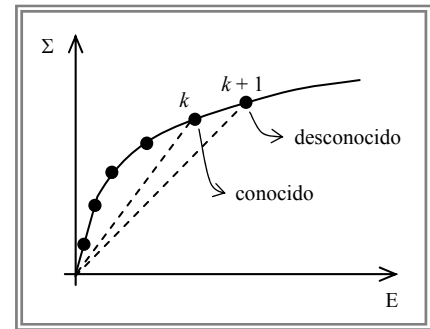
2. **Estado conocido:** punto k -ésimo de la historia de deformación. Es decir, se conoce:

a) Estado tensional del compuesto y de las fases:

$$\left(\Sigma^{(k)}, E^{(k)} \right) ; \left(\Sigma_m^{(k)}, E_m^{(k)} \right) ; \left(\Sigma_p^{(k)}, E_p^{(k)} \right)$$

b) Flexibilidad secante del compuesto y de la matriz, así como la flexibilidad del refuerzo de partículas:

$$M^{s^{(k)}} ; M_m^{s^{(k)}} ; M_p$$



c) Tensor de Concentración de la Tensión para la matriz: $B_m^{(k)}$

3. **Desviación del equilibrio:** el usuario *prescribe* una desviación del equilibrio ΔE_k^{k+1} , de modo que el tensor de deformaciones $E^{(k+1)}$ es conocido:

$$E^{(k+1)} = E^{(k)} + \Delta E_k^{k+1}$$

4. **Incógnita:** estado en el punto $k+1$ de la historia de deformación.

a) Estado tensional del compuesto y de las fases:

$$\Sigma^{(k+1)} ; \left(\sigma_m^{(k+1)}, E_m^{(k+1)} \right) ; \left(\Sigma_p^{(k+1)}, E_p^{(k+1)} \right)$$

b) Flexibilidad secante del compuesto y de la matriz, así como la flexibilidad del refuerzo de partículas:

$$M^{s^{(k+1)}} ; M_m^{s^{(k+1)}}$$

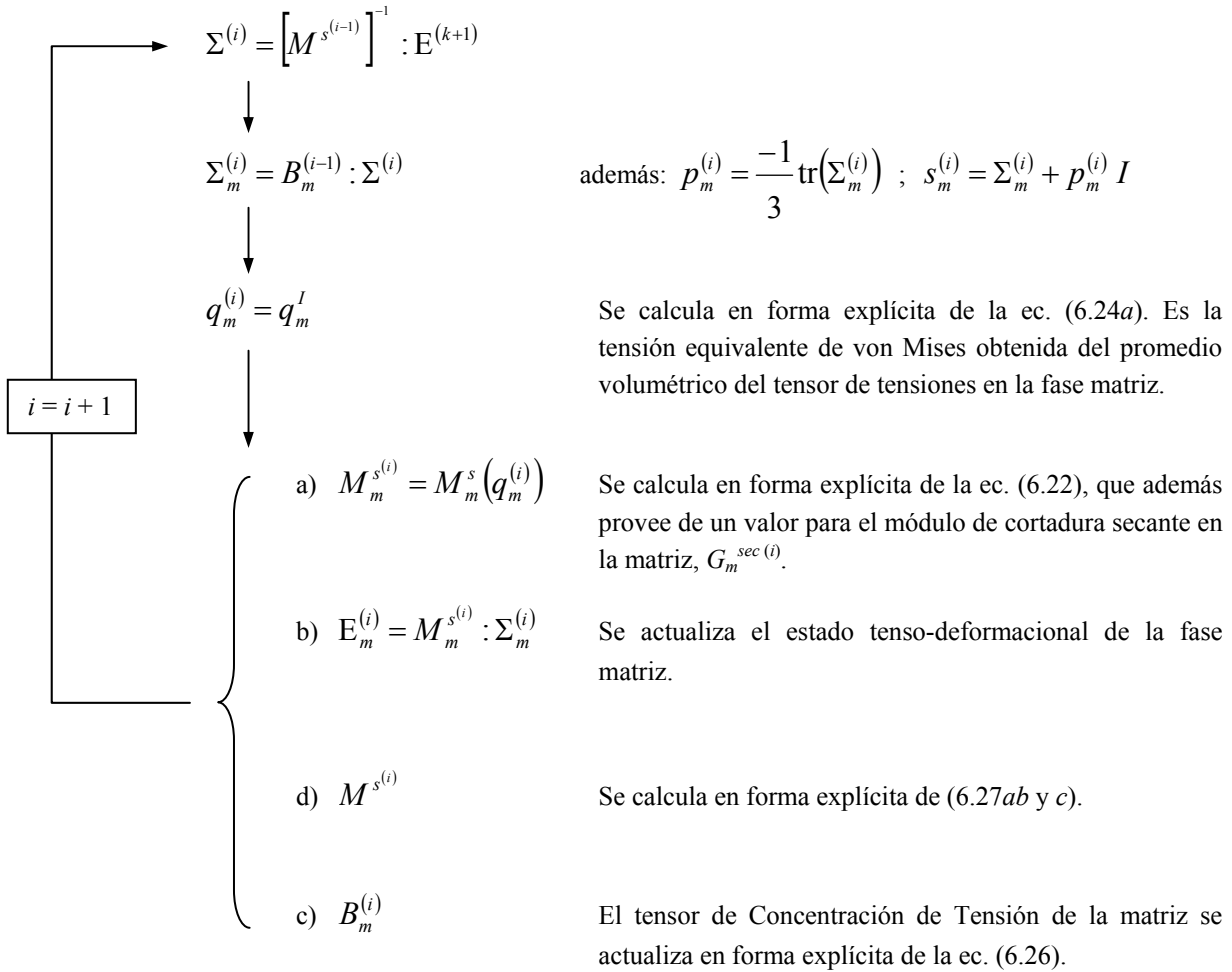
c) Tensor de Concentración de la Tensión para la matriz: $B_m^{(k+1)}$

Nótese que la flexibilidad del refuerzo elástico, M_p , se mantiene constante con la deformación macroscópica del compuesto. Sin embargo, tanto M^s como M_m^s varían con la deformación del compuesto, siendo desconocidos sus valores una vez aplicado el incremento prescrito en la deformación ΔE_k^{k+1} .

5. Algoritmo Iterativo para el método Secante Clásico: índice de iteración es i .

a) Inicialización ($i = 0$): $M^{s^{(i=0)}} = M^{s^{(k)}} ; M_m^{s^{(i=0)}} = M_m^{s^{(k)}} ; B_m^{(i=0)} = B_m^{(k)}$

b) Iteraciones ($i = 1, 2, 3, \dots$):



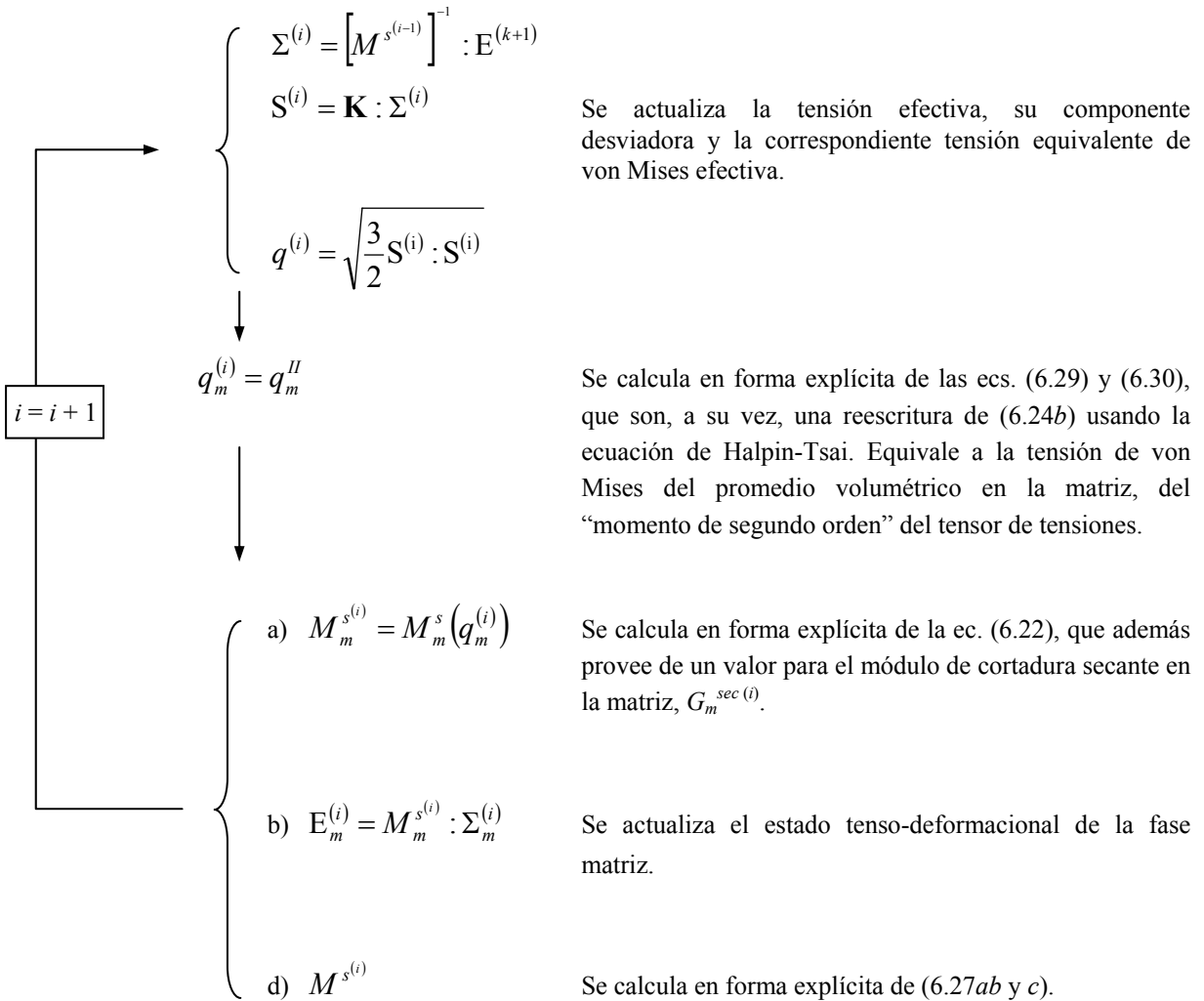
Observaciones:

- El algoritmo se detiene cuando $\Sigma^{(i)}$ ya no cambia, en cuyo caso se fija $\Sigma^{(k+1)} = \Sigma^{(i)}$
- El estado tensional de las partículas de refuerzo *no participa* en las iteraciones.
- Cuando se encuentra la solución, el estado tenso-deformacional del refuerzo se obtiene de la Teoría de Campos Medios, ec. (2.5), o bien, de los Tensores de Concentración de Tensión y de Deformación para el refuerzo, ec. (2.6).

6. Algoritmo Iterativo para el método Secante Modificado: índice de iteración es i .

a) Inicialización ($i = 0$): $M^{s(i=0)} = M^{s(k)}$; $M_m^{s(i=0)} = M_m^{s(k)}$; $B_m^{(i=0)} = B_m^{(k)}$

b) Iteraciones ($i = 1, 2, 3, \dots$):



Observaciones:

- El algoritmo se detiene cuando $\Sigma^{(i)}$ ya no cambia, en cuyo caso se fija $\Sigma^{(k+1)} = \Sigma^{(i)}$
- A diferencia de lo que ocurría en el caso del método Clásico, en esta implementación del método Modificado no es necesario actualizar el tensor de concentración B_m , a menos que sea necesario por algún motivo particular, en cuyo caso puede obtenerse de la ec. (6.26) al finalizar las iteraciones.
- El estado tensional de las partículas de refuerzo *no participa* en las iteraciones. Cuando se encuentra la solución, el estado tenso-deformacional del refuerzo se obtiene de la Teoría de Campos Medios, ec. (2.5), o bien, de los Tensores de Concentración de Tensión y de Deformación para el refuerzo, ec. (2.6).

Referencias Bibliográficas

ABAQUS/Standard. Version 6.8.2. Simulia Dassault Systèmes. 2008

ABAQUS/Standard. Version 6.9.2. Simulia Dassault Systèmes. 2009 (referencia X-FEM)

Argon A.S., Im J. and Saflogu R. 1975. "Cavity formation from inclusions in ductile fracture". *Metallurgical Transaction 6A*, 825-837

Arsenault R.J. and Everett R., 1990. "Tensile and Compressive Properties of Metal Matrix Composites". *Metal Matrix Composites: Mechanisms and Properties*, Academic Press.

ASTM E-8 (1994) "Standard Test Methods for Tension Testing of Metallic Materials [Metric]"

Bahout L., Maire E. and Fourgères R., 2004. "Damage initiation in model metallic materials: X-ray tomography and modelling". *Acta Materialia* 52: 2457-2487

Bao G., 1992. "Damage due to fracture of brittle reinforcement in a ductile matrix". *Acta Metall. Mater.*, 40, 2547-2555.

Belytschko, T. y Black, T., 1999. "Elastic Crack Growth in Finite Elements with Minimal Remeshing". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. Vol. 45, 601–620

Bensoussan A. and Lions J.L., 1978, "Application des inéquations variationnelles en contrôle stochastique". Dunod, Paris

Benveniste, Y. 1987, "A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials", *Mechanics of Materials*. Vol. 6, Issue 2, 147–157

Bridgman, P.W. 1952. "Studies in large plastic flow and fracture", MacGraw-Hill, 1952.

Burgeois, N. 1994. "Caractéristion et modélisation micromécanique du comportement et de l'endommagement d'un composite à matrice métallique: Al/SiCp". Tesis Doctoral Ecole Centrale des Arts et Manufactures, Châtenay-Malabry.

Böhm H., Han W., Eckschlagger A., 2004. Multi-inclusion unit cell studies of reinforcement stresses and particle failure in discontinuously reinforced ductile matrix composites. *Comp. Model Eng. Sci.*, 5-20

Brockenborough J. and Zok F., 1995. On the Role of Particle Cracking in Flow and Fracture of Metal Matrix Composites, *Acta Metall.*, 43, 11-20.

Brown L.M. and Embury J.D. 1973. The initiation and growth of voids at second phase particles. *Proceeding of the 3rd International Conference on Strength of Metals and Alloys*. 1973.

Buryachenko V., 1996, The overall elastoplastic behaviour of multiphase materials with isotropic components. *Acta Mechanica* 119: 93-117

Cahn R., Haasen P. and Kramer E., 1993, *Materials Science and Technology: Structure and Properties of Composites*, VCH, Weinheim, Germany, 13, 139-150.

Chawla N., Shidu, R.S. and Ganesh V.V., 2006. Three-dimensional visualization and microstructure-based modelling of deformation in particle-reinforced composites. *Acta Materialia*, Vol 54, Issue 6. pp 1541-1548.

Christensen R. and Lo K., 1979. Solutions for effective shear properties of three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Volume 27, pp: 315 – 330. (Corregido en 1986, volumen 34, pp 639).

Clyne T. and Withers P. 1993. *An Introduction to Metal Matrix Composites*, Cambridge University Press.

Daniel I. and Ishai O. 1994. *Engineering Mechanics of Composite Materials*, Oxford University Press. New York.

Downes F. and King J., 1991, *Metal-matrix Composites: Processing, Microstructure and Properties* cap. The effect of SiC particle size on the fracture toughness of a MMC, 305-310 RisNational Laboratory, Roskilde

Drabek, T. and Böhm H.J., 2005. "Damage models for studying ductile matrix failure in composites". *Computational Materials Science*. Vol. 32, 329–336

Drugan W. and Willis J., 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*. Vol. 44, 497-524

Drugan W., 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*. Vol. 48, 1359-1387

El-Saied Y., Fernández-Sáez J. and Pérez-Castellanos J. L. 2003. "Some Aspects of Damage and Failure Mechanisms at High Strain-rate and Elevated Temperature of Particulate

Magnesium Matrix Composites”. *Journal of Composites. Part B: Engineering*. Vol. 34, pp 551-560

Eshelby J. 1957, “The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems”, *Proc. Roy. Soc. A*, 241A, 376-396.

Estrin Y., Kubin L.P. 1998, “Plastic instabilities: classification and physical mechanisms”. *Res. Mech.* 1998; 23: 197-221.

Evans A., San Marchi C. and Mortensen A. 2003. “Metal Matrix Composites in Industry. An introduction and a survey”. 440 p., Hardcover

Foye R.L. 1966. “An evaluation of various engineering estimates of the transverse properties of unidirectional composites”. *Tenth National SAMPE Symposium*, San Diego, Cal.

Galli M., Botsis J. and Janczak-Rush J. 2008. “An elastoplastic three dimensional homogenization model for particle reinforced composites”. *Computational Materials Science*, Vol. 41, pp 312-321.

González C. and LLorca J. 2000. “A Self-Consistent Approach to the Elasto-Plastic Behaviour of Two-Phase Materials Including Damage”. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 48, 675-692.

González C. and Llorca J. 2003. “An analysis of the effect of hydrostatic pressure on the tensile deformation of aluminum-matrix composites”. *Materials Science and Engineering A* Volume 341, Issues 1-2, 20 pp: 256-263

González C., Segurado J., and LLorca J. 2004. “Numerical Simulation of Elastic-plastic Deformation of Composites: Evolution of Stress Microfields and Implications for Homogenization Models”. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52, pp 1573-1593.

Gurson A.L. 1977. “Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth. Part I – Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media”. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 9, 2-15.

Halpin J.C. and Kardos J.L. 1976. “The Halpin-Tsai Equations: A review”. *Polymer Engineering and Science*. Vol. 16, n°5, 344-352.

Halpin J.C. and Tsai S.W. 1967. U.S. Air Force Materials Laboratory Rept. AFML TR 67-423.

- Harrigan W. 1994. "Metal Matrix Composite Applications. Mechanical Properties of Metallic Composites" (Ed. Ochiai, S.), Marcel Dekker, New York, 759-773.
- Hashin, Z. 1983. "Analysis of composite materials - A survey". *J. Appl. Mech.*, 50, 481-505
- Hashin Z. and Shtrikman S., 1963. "A variational approach to the theory of elastic behaviour of multiphase materials". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. 11, 127-140
- Hill, R. 1963. "Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. 11, 357-372
- Hill, R. 1964, "Theory of mechanical properties of fibre-strengthened materials: I. Elastic behaviour", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. 12, 4 , 199-212
- Hill, R. 1965, "A self-consistent mechanics of composite materials". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 13, 4, 213-222.
- Hill R. 1967. "The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. 15, 79-95
- Hori M. and Nemat-Nasser. 1999 "On two micromechanics theories for determining micromacrorelations in heterogeneous solids". *Mechanics of Materials*, 31, pp. 667-682.
- Huang, R., Sukumar, N. y Prévost, J. 2003. "Modeling quasi-static crack growth with the extended finite element method Part II: Numerical applications". *International Journal of Solids and Structures*. Vol. 40, 26, 7539-7552
- Hull D. and Clyne T. 1996. "An Introduction to Composite Materials", *Cambridge University*.
- Ibrahim I., Mohamed F. and Lavernia E. 1991, "Particulate Reinforced Metal Matrix Composites: a Review", *J. Mater. Sci.*, 26, 1137-1156.
- Kachanov, L. M. 1958. "Time of the rupture process under creep conditions". *Izv. Akad. Nauk. S.S.S.R. Otd. Tekh. Nauk.*, Vol. 8, 26-32.
- Kari S., Berger H. and Gabbert U. 2007. "Numerical evaluation of effective material properties of randomly short cylindrical fibre composites". *Computational Materials Science*. Vol. 39, 198-204.
- Kari S., Berger H., and Gabbert U., Guinovart-Díaz R., Bravo-Castillejo J. and Rodríguez-Ramos R. 2008. "Evaluation of influence of interphase material parameters on effective

material properties of three phase composites". *Composite Science and Technology*, 68, pp. 684-691

Koplik, J. y Needleman, A. 1988. "Void growth and coalescence in porous plastic solids", *International Journal of Solids and Structures*. 24, 835-853.

Kreher W., 1990. "Residual stresses and stored elastic energy of composites and polycrystals". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. 38: 115-128

Kröner E. 1958. "Berechnung der Elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls". *Zeitung Physik* 51, pp 504-518

Lemaitre J. 1971. "Evaluation of dissipation and damage in metals submitted to dynamic loading". *Proceedings of ICMI*. Kyoto, Japan. Publicado por Society of Materials Science.

Lemaitre J. 1985, "A Continuum Damage Mechanics Model for Ductile Fracture". *Journal of Engineering Materials Technology*, 107, 83-89.

Liu D.S. and Lewandowski, J.J. 1993. "The effects of Superimposed Hydrostatic Pressure on Deformation and Fracture: Part II. Particulate-Reinforced 6061 Composites". *Metallurgical Transactions A*. Volume 24A

LLorca J. and González C., 1998, "Microstructural Factors Controlling the Strength and Ductility of Particle-Reinforced Metal Matrix Composites", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. 46, 1, 1-28.

Lloyd D. 1994. "Particle Reinforced Aluminium and Magnesium Matrix Composites", *Int. Mat. Rev.*, 39, 1-23.

Maire E., Embury J. and Wilkinson D. 1997. "Modelling of Damage in Particulate Metal Matrix Composites", *Key Eng. Mat.*, 127-131, 1167-1174.

Mandel, J., 1980. "Généralization dans R9 de la règle du potential plastique pour élément polycrystallin". *Comptes rendues de l'Academie des Sciences*, Vol.20, 481-484.

McDanel D., Serafini T. and DiCarlo J. 1986. Polymer, Metal and Ceramic Matrix Composites for Advanced Aircraft Engine Applications. *J. Mater. Energy Sys.*, 8, 80-91.

Melenk, J. y Babuska, I. 1996. "The Partition of Unity Finite Element Method: Basic Theory and Applications," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. Vol. 39, 289-314

- Mital S., Murthy P. and Golberg R., 1996, Micromechanics for Particulate Reinforced Composites, *NASA Technical Memorandum*, 107276, August.
- Mochida T., Taya M. and Obata M. 1991. "Effect of damaged particles on the stiffness of a particle/metal matrix composite". *JSME International Journal*, vol. 34, pp: 187 – 193.
- Moorthy S. and Ghosh S., 1998. Particle cracking in discretely reinforced materials with the Voronoi cell finite element model. *International Journal of Plasticity*, Volume 14, Issue 8, pp: 805 – 827.
- Mori T. and Tanaka K., 1973. Average stress in the matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metall. Mater.* 21, pp: 571 – 574.
- Mueller R. and Mortensen A. 2006. Simplified prediction of the monotonic uniaxial stress–strain curve of non-linear particulate composites. *Acta Materialia* 54 pp. 2145-2155
- Needleman A., 1987, A continuum model for void nucleation by inclusion debonding. *Journal of Applied Mechanics* 54: 525-531
- Nemat-Nasser S. and Hori M., 1999. Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials, *ELSEVIER SCIENCE B.V.*
- Nutt S. and Needleman A., 1987, Void nucleation at fibre ends in Al-SiC composites. *Scripta Metallurgica et Materialia* 21: 705-710
- Pierard O., LLorca J., Segurado J. and Doghri I. 2007. "Micromechanics of Particle reinforced Elasto-viscoplastic Composites: Finite Element Simulations Versus affine Homogenization". *International Journal of Plasticity*. 23 , pp 1041-1060.
- Pinho-da-Cruz J., Oliveira J.A., Teixeira-Dias F., 2009, "Asymptotic homogenisation in linear elasticity. Part I: Mathematical formulation and finite element modeling". *Computational Materials Science* 45 1073-1080
- Portevin, A., and LeChatelier, F. 1923, "Comptes Sur un phénomène observé lors de l'essai de traction d'alliages en cours de transformation". *Comptes rendues de l'Academie des Sciences, Paris* 1923; 176: 507-510.
- Rabotnov, Y.N. 1969. "Creep problems in structural members". North-Holland.
- Reuss, A. 1929. "Berechnung der Flieggrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle", *Z. Angew. Math. Mech.*, 9, 49.

Rice J. R. and Tracey D. M. 1969. "On the Ductile Enlargement of Voids in Triaxial Stress Fields". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 17, pp. 201–217.

Rousselier G. 1981, "Finite Deformation constitutive relations including ductile fracture damage. Three Dimensional Constitutive Relations and ductile fracture", *Editado por Nemat-Nasser S. Nort Holland, Amsterdam*. 331-355.

Sánchez-Hubert J. and Sánchez-Palencia E. 1992. "Introduction aux Méthodes Asymptotiques et à l'Homogénéisation – Application à la Mécanique des Milieux Continus" *Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise*, Masson, Paris, France.

Segurado J. 2004. "Micromecánica computacional de materiales compuestos reforzados con partículas". *Tesis Doctoral, Universidad Politécnica de Madrid*.

Segurado J. and LLorca J., 2002. "A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Volume 50, Issue 10, pp. 2107-2121.

Segurado J. and LLorca J. 2005. "A computational micromechanics study of the effect of interface decohesion on the mechanical behavior of composites". *Acta Materialia*. Volume 53, Issue 18, pages 4931-4942

Sukumar, N. y Prévost, J. 2003. "Modeling quasi-static crack growth with the extended finite element method Part I: Computer implementation". *International Journal of Solids and Structures*. Vol. 40, 26, 7513-7537

Suquet P. 1995. "Overall properties of non-linear composites: A modified secant moduli theory and its link with Ponte-Castaneda's nonlinear variational procedure". *C.R. Academic Science. Paris. Serie Iib 320*: 563-571

Suresh S., Mortensen A. and Needleman A., 1993, "Fundamentals of Metal-Matrix Composites". *Butterworth-Heinemann, USA*.

Stubbington C. 1988. "Materials Trends in Military Airframes", *Met. Mater.* 4, 424-431.

Taya M., Arsenault R.J., 1989. "Metal Matrix Composites". Oxford: Pergamon.

Thomason, P.F. 1990. "Ductile fracture of metals". *Pergamon Press*.

Torquato S., 1998, "Effective stiffness tensor of composite media: II. Applications to isotropic dispersions". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Vol. 46: 1411-1440.

- Tvergaard V. 1981. "Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions". *International Journal of Fracture*. 17, 389-407.
- Tvergaard V., 1982. "On localization in ductile materials containing spherical voids". *International Journal of Fracture* 18 237-252
- Tvergaard V., 1990, "Effect of fibre debonding in a whisker-reinforced metal". *Material Science and Engineering A* 125: 203-213
- Tvergaard V. y Hutchinson J., 1993, "The influence of plasticity on mixed mode interface toughness". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41: 1119-1135
- Tvergaard V. and Needleman A. 1984. "Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar". *Acta Metallurgica* 32: 157-179.
- Voigt, W. 1910. *Lehrbuch der Kristallphysik*. Teubner, Berlin.
- Wei W. 1992. "High Temperature MMCs for Aero-Engines: Challenge and Potential", *Met. Mater.* 8, 430-435.
- Weibull W. and Becher P. 1951. "A statistical distribution function of wide applicability". *Journal of Applied Mechanics*, 18, pages 293 – 299.
- Withers P., Smith A., Clyne T. and Stobbs W. 1990. "A Photoelastic Examination of the Validity of the Eshelby Approach to the Modelling of MMC's, Fundamental Relationships Between Microstructure and Material Properties of Metal-Matrix Composites", (Eds. Liaw, P. y Gungor, M.), *The Minerals, Metal and materials Society* 225-239.
- Zahr Viñuela J. and Pérez-Castellanos J.L. 2007. "Modelo multipartícula para el análisis del comportamiento mecánico de materiales compuestos reforzados con partículas". *Anales de Mecánica de la Fractura*. Vol.: II, Pag. 482- 488
- Zhang, Z.L. y Hauge, M. 1996, "Fitting the Gurson parameters by using a physical void coalescence mechanics". ECF11. *Mechanisms and Mechanics of Damage and Failure*. Vol. 2, 941-947
- Wennan Zou, Qichang He, Mojia Huang, Quanshui Zheng. 2010, "Eshelby's problem of non-elliptical inclusions". *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 58, Issue 3, Pages 346-372

