

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



**COMPARACIÓN DE DIFERENTES CONDICIONES DE TRACCIÓN
FRONTERA POR MEDIO DE LA TÉCNICA DE ELEMENTO DE
VOLUMEN REPRESENTATIVO.**

POR

MARIO ALBERTO BELLO GÓMEZ

T E S I S

**EN OPCIÓN AL GRADO DE MAESTRIA EN CIENCIAS DE LA
INGENIERÍA MECÁNICA CON ESPECIALIDAD EN MATERIALES**

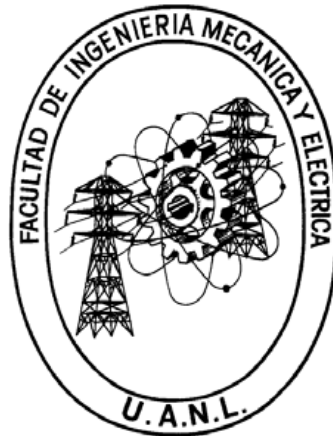
CIUDAD UNIVERSITARIA

MARZO DE 2012

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



**COMPARACIÓN DE DIFERENTES CONDICIONES DE
TRACCIÓN FRONTERA POR MEDIO DE LA TÉCNICA DE
ELEMENTO DE VOLUMEN REPRESENTATIVO.**

POR

MARIO ALBERTO BELLO GÓMEZ

T E S I S

EN OPCIÓN AL GRADO DE MAESTRIA EN CIENCIAS DE LA
INGENIERÍA MECÁNICA CON ESPECIALIDAD EN MATERIALES

CIUDAD UNIVERSITARIA

MARZO DE 2012

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

INDICE

| | |
|---|-----|
| RESUMEN | III |
| NOMENCLATURA | V |
| 1. INTRODUCCIÓN | 1 |
| 1.1 Antecedentes | 1 |
| 1.2 Hipótesis | 3 |
| 1.3 Objetivos | 3 |
| 1.4 Esquema de la Tesis | 4 |
| 2. MARCO TEÓRICO | 5 |
| 2.1 Introducción | 5 |
| 2.2 Material homogéneo | 5 |
| 2.3 Material heterogéneo | 5 |
| 2.4 Técnicas utilizadas para evaluar materiales heterogéneos | 7 |
| 2.4.1 Modelos micromecánicos | 7 |
| 2.4.2 Homogenización | 8 |
| 2.4.2.1 Elemento de volumen representativo (RVE) | 10 |
| 2.4.2.1.1 Determinación del elemento de volumen representativo | 13 |
| 2.4.2.1.2 Enfoque mecánico tradicional del RVE | 16 |
| 2.4.2.1.3 Homogenización mediante un enfoque mecánico tradicional | 19 |
| 2.4.2.2 Método de elementos discretos | 23 |
| 2.5 Elasticidad | 23 |
| 2.5.1 Escalares, vectores matrices y definiciones de tensor | 24 |
| 2.5.2 Deformación: desplazamientos y deformaciones | 24 |
| 2.5.2.1 Deformaciones generales | 25 |
| 2.5.3 Construcción geométrica de la teoría de deformación pequeña | 27 |
| 2.5.4 Esfuerzo y equilibrio | 29 |
| 2.5.5 Comportamiento del material sólido-elástico lineal | 29 |
| 2.5.5.1 Materiales elásticos lineares- Ley de Hooke | 30 |
| 2.5.6 Microplasticidad | 31 |
| 3. EXPERIMENTACIÓN | 33 |

| | | |
|-------|---|----|
| 3.1 | Introducción | 33 |
| 3.2 | Simulación del material heterogéneo | 34 |
| 3.2.1 | Lenguaje de programación Python | 34 |
| 3.3 | Escritura de la subrutina | 35 |
| 3.3.1 | Creación de la geometría y la malla | 37 |
| 3.3.2 | Propiedades de los materiales y condiciones frontera del modelo | 41 |
| 3.3.3 | Obtención de resultados | 50 |
| 4. | RESULTADOS | 58 |
| 4.1 | Introducción | 58 |
| 4.2 | Matriz de esfuerzos y deformaciones promedio | 58 |
| 4.3 | Distribución de casos | 62 |
| 4.4 | Deformación y deformación cortante | 64 |
| 5. | DISCUSIÓN | 69 |
| 5.1 | Introducción | 69 |
| 5.2 | Tamaño del RVE | 69 |
| 5.3 | Distribución de los materiales | 70 |
| 5.4 | Mallado | 72 |
| 5.5 | Condiciones de tracción del RVE | 73 |
| 5.6 | Distribución de casos | 75 |
| 5.7 | Gráficas comparativas de los valores máximos, mínimos y promedios | 76 |
| 6. | CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES | 80 |
| 6.1 | Conclusiones | 80 |
| 6.2 | Recomendaciones | 80 |
| 7. | REFERENCIAS | 82 |
| | ANEXOS | |
| A.1 | Lista de tablas | |
| A.2 | Lista de figuras | |
| A.3 | Glosario de términos | |
| A.4 | Subrutina | |

RESUMEN

Los materiales heterogéneos son de gran uso e importancia en muchos sectores, como lo son la industria aeronáutica, médica, de servicios, etc., debido a la posibilidad de combinar las propiedades de diferentes materiales y ser utilizados de acuerdo a requerimientos específicos. El gran problema de los materiales heterogéneos es su evaluación mecánica. Tradicionalmente, este tipo de evaluaciones se realiza considerando el material como homogéneo, es decir que tiene las mismas propiedades en cualquier punto de la muestra. Si bien es cierto que macroscópicamente un material se puede considerar homogéneo a medida que se varía de escala a micro, meso o nano, se demuestra que esta suposición ya no es tan realista.

Diferentes técnicas para la evaluación mecánica de este tipo de materiales han sido desarrolladas y continúan bajo investigación hasta el día de hoy, siendo una de estas la técnica de homogenización. Esta técnica permite evaluar un material heterogéneo, como si fuera un material homogéneo. Para utilizar la homogenización se ha utilizado un Elemento de Volumen Representativo (RVE) el cual es una muestra estadística del material y propiedades a evaluar.

Durante esta investigación el RVE fue compuesto de dos materiales distintos a los cuales se les pueden dar las características requeridas. El material seleccionado y utilizado fue el concreto, el cual es un material poroso. La creación del RVE se basó en considerar las propiedades del concreto y las propiedades del aire para caracterizar los poros. El RVE, consiste en un cubo con esferas dentro de él, donde el cubo es hecho de concreto y las esferas de aire. Este RVE, fue sometido a diferentes condiciones frontera. Entre estas condiciones están, establecer tres partes fijas, así como diversas condiciones de tensiones y esfuerzos de corte en diferentes direcciones. Y así evaluar los casos de cada uno de los RVE.

Se crearon 100 configuraciones distintas, estas configuraciones varían respecto a la posición de las esferas dentro del cubo, para examinar el comportamiento respecto a la posición dentro de este. Estas esferas, deben de cumplir con la condición que no pueden interceptarse entre ellas mismas ni con las paredes del cubo. Posteriormente se eligieron diferente número de esferas para

analizar esta teoría, aplicando este caso para: 1, 4, 8 y 16 esferas. Como se muestra en la tabla 1. Cada caso fue ejecutado 100 veces en la interface de ABAQUS por medio de subrutinas creadas en el lenguaje de programación Python.

Tabla 1. Muestra los diferentes tipos de distribuciones que se hicieron en el modelo así como cuantas ejecuciones hubo para cada número de esferas.

| Número de esferas | Distribuciones | Ejecuciones |
|--------------------------|-----------------------|--------------------|
| 1 | 100 | 100 |
| 4 | 100 | 100 |
| 8 | 100 | 100 |
| 16 | 100 | 100 |

Al analizar los resultados obtenidos de las 100 configuraciones se obtuvo una matriz promedio para cada configuración, aunado a esto se obtuvo el valor máximo y mínimo en la ϵ_{11} el cual fue dividido entre 7 rangos con la finalidad de obtener una mejor distribución de los casos. Este estudio demostró que la mayoría de los casos se sitúan en el valor medio ($\epsilon_{11max} + \epsilon_{11min}$). Con el cálculo de una matriz promedio para cada número de esferas se hizo una comparación entre las diferentes configuraciones del RVE, donde se observa en las diferentes las regiones de la matriz como los valores máximos y mínimos se van acercando cada vez más conforme se aumenta el número de esferas, a su vez de que los valores no presentan una gran cambio respecto al anterior. Comprobando como el material a cierto número de esferas tiene un comportamiento homogéneo.

NOMENCLATURA

RVE= Elemento de Volumen Representativo

MED= Método de Elemento Discretos

SVE= Elemento de Volumen Estadístico

ε_i = Deformaciones locales

ε_{i-1} =Deformaciones del nivel inmediato superior

E_{i-1} =Tensor elástico del nivel estructural i-1

E_i =Nivel estructural i-ésimo

V_{rve} =Volumen del RVE

σ =Esfuerzo

σ_x =Esfuerzo en el eje “x”

σ_y =Esfuerzo en el eje “y”

σ_z =Esfuerzo en el eje “z”

ε =Deformación

C=Modulo efectivo de elasticidad

S=Complianza (inverso de la rigidez)

E=Módulos efectivos de Young

ν =Razón de Poisson

u =Vector de desplazamiento

$[\sigma]$ =Matriz de esfuerzo

τ =Esfuerzo de corte

τ_{xy} =Esfuerzo de corte en los ejes “x” “y”

τ_{xz} =Esfuerzo de corte en los ejes “x” “z”

τ_{yz} =Esfuerzo de corte en los ejes “y” “z”

u =Componente cartesiano del vector de desplazamiento en “x”

v =Componente cartesiano del vector de desplazamiento en “y”

w =Componente cartesiano del vector de desplazamiento en “z”

Δr =Posición relativa del vector

r =Posición antes del cambio de posición

r' =Posición tras el cambio de posición

Δr_x =Componente de la posición relativa del vector en "x"

Δr_y =Componente de la posición relativa del vector en "y"

Δr_z =Componente de la posición relativa del vector en "z"

e_{ij} =Tensor de deformación

w_{ij} =Tensor de rotación

C_{ijkl} =Tensor de elasticidad de cuarto orden

σ_{ij} =Tensor de esfuerzo

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

Los materiales dependiendo de su uso y propiedades suelen ser clasificados como: metales, cerámicos, polímeros y compuestos. A su vez estos se pueden clasificar en: homogéneos y heterogéneos, esta clasificación esta basada en las fases que se encuentran dentro del material a evaluar.

Los materiales homogéneos son en los que presentan una sola fase en la materia y poseen las mismas propiedades físicas en cualquier punto que sean evaluados, además de que no se observa un cambio en su estructura.

Por otro lado los materiales heterogéneos son aquellos en los que existen diferentes propiedades en su constitución. Algunos materiales heterogéneos son fáciles de identificar, ya que se distinguen a simple vista. Mientras que en otros es necesario el uso de técnicas microscópicas para poder observar esta diferencia. Ya que los materiales heterogéneos poseen diferentes características en cada lugar de su estructura, aunque es probable calcular un promedio de estas propiedades para el material.

Dentro de los materiales heterogéneos se pueden definir a su vez distintos tipos de acuerdo a su origen, fabricación o uso. Los materiales heterogéneos no solo se encuentran en los objetos y artefactos de uso diario sino en el cuerpo humano, como es el caso de la sangre o huesos. Los huesos por ejemplo son considerados materiales heterogéneos dado que es un material poroso. Otro ejemplo de material considerado heterogéneo debido a su porosidad es el concreto.

También los materiales compuestos son considerados heterogéneos son los materiales compuestos. Los materiales compuestos son aquellos que están constituidos por dos o más materiales, mezclando sus propiedades. Por lo que el material obtenido de estos tiene propiedades únicas que no pueden ser obtenidas usando solo uno de los materiales originales, aprovechando así las características de cada uno de éstos. Algunas características que se toman de los materiales originales pueden ser, la resistencia a la temperatura, la deformación o la conductividad. Un ejemplo de materiales compuestos son los materiales que están constituidos por una matriz polimérica y fibras, tales como carbono, vidrio, boro, etc. Estos materiales debido a su bajo peso y excelente resistencia resultado de su combinación, son utilizados para materiales estructurales especialmente en la industria aeronáutica.

Los materiales heterogéneos, pueden brindar muchas ventajas, sin embargo, el inconveniente se presenta a la hora de caracterizarlos, ya que no contienen las mismas características en cada punto, siendo necesario recurrir a diversas técnicas para realizar una evaluación y análisis adecuados.

Entre las técnicas que existen, para evaluar a los materiales heterogéneos esta la técnica de homogenización. La homogenización consiste en un procedimiento matemático en el cual las propiedades microscópicas heterogéneas se relacionan con sus propiedades homogéneas. Es por esto que durante los últimos años se han realizado muchas investigaciones dirigidas al desarrollo de métodos de homogenización para predecir de una forma más efectiva sus propiedades efectivas. Estas investigaciones han contribuido a la creación de una nueva rama de la mecánica de medio continuo, la micromecánica de Materiales Compuestos [1].

Para llevar a cabo la técnica de homogenización, y predecir el comportamiento de un material heterogéneo se puede utilizar en combinación con el método de elemento finito. La técnica de homogenización utilizada en este trabajo de investigación fue la llamada Elemento de Volumen Representativo (RVE), la cual define una muestra estadística de un material heterogéneo que representa al material en general, incluyendo su composición y sus propiedades. El tamaño de un RVE es mayor que el de una celda unidad y contiene los diferentes materiales componentes.

En esta investigación se evaluó un RVE por medio del paquete comercial de elemento finito ABAQUS, mediante el uso de subrutinas escritas en Python. El RVE fue sometido a diferentes condiciones de tracción y de desplazamiento para probar la homogenización, comprobando que el arreglo del material en RVE a partir de cierta distribución es el mismo o con una diferencia despreciable.

1.2 Hipótesis

El número de esferas considerado dentro de un RVE afecta el comportamiento del material. Para un proceso de homogenización por medio de un RVE el cual contiene un número de esferas con diferentes localizaciones sometido a diferentes condiciones de tracción.

1.3 Objetivos

Objetivo general

- Desarrollar por medio del uso del Elemento Finito un modelo micromecánico de homogenización de RVE en el cual se evalúe la distribución, tamaño de esferas consideradas en el RVE y su influencia en el cálculo de las propiedades mecánicas.

Objetivos Específicos:

- Demostrar por medio de RVE la teoría de homogeneización mediante la adición inclusiones esféricas hasta una concentración que aproxime el comportamiento de material heterogéneo como un material homogéneo.
- Generar una distribución aleatoria de esferas dentro del RVE, evitando que las esferas puedan interceptarse entre ellas ni con las paredes del cubo.
- Analizar los datos obtenidos tras las simulaciones, creando una matriz promedio para cada distribución de esferas.
- Evaluar que la matriz promedio cumpla con las características esperadas, que sea simétrica y que los valores de las regiones sean similares entre si.

- Comparar los valores máximos, mínimos y promedio de cada una de las regiones para las diferentes distribuciones. Para comprobar que estos valores tienen un comportamiento asintótico conforme aumenta el número de esferas dentro del modelo.
- Relacionar la técnica de RVE con ejemplos reales de aplicación.

1.4 Esquema de la tesis

A continuación, se detalla cada uno de los capítulos que componen este trabajo de investigación: En el marco teórico, se definen los materiales homogéneos y heterogéneos, así como sus aplicaciones, características y forma de diferenciarlos. También, se definen los conceptos, se habla sobre la homogenización y las diferentes técnicas que hay para probarla o utilizarla, haciendo énfasis en la técnica de RVE, mencionando sus características y condiciones que se deben cumplir para que el RVE sea válido para representar el comportamiento real del material heterogéneo. Además se describe brevemente la teoría elástica utilizada para resolver el objetivo principal de esta investigación.

El Capítulo 3, aborda los pasos que se realizaron para la creación del script utilizado en esta investigación. También, se mencionan y se da una explicación breve sobre el software que se utilizó para la resolución de estos casos, de la misma forma se explica de forma general el lenguaje de programación que acepta el ABAQUS, al igual que las características que deben poseer para su correcta ejecución. Mencionando los obstáculos que se llegaron a tener así como las diversas técnicas utilizadas para llegar a un resultado rápido y más preciso.

Los resultados obtenidos así como la definición de cada uno de estos son descritos en el Capítulo 5. Y la explicación del por qué se comporta de esa forma. Además, se comparan los histogramas obtenidos para la distribución de las esferas, así como influye su posición en los resultados. Las condiciones respecto a la magnitud que se introdujo en el caso de diferentes esfuerzos.

En el Capítulo 6 se discutirán los resultados obtenidos en este trabajo basándose en el marco teórico. También se detallarán las ventajas del RVE, ante otras técnicas de homogenización así como sus limitantes y problemáticas que se encontraron durante el desarrollo del modelo

realizado en este trabajo. Las conclusiones de esta investigación y las recomendaciones para trabajos futuros se describen en el Capítulo 7.

CAPITULO 2. MARCO TEÓRICO

2.1 Introducción

Actualmente son muchos los análisis ingenieriles que consideran a un material homogéneo en su desarrollo, es decir que consideran que tienen las mismas características físicas y químicas en todas sus partes. Sin embargo, este depende de cómo sea examinado el material, por ejemplo la sangre puede parecer un material homogéneo a simple vista, pero al ser observada a nivel microscópico se puede dar cuenta de que se trata de un material heterogéneo.

En este capítulo se presentará la revisión bibliográfica relacionada con la dificultad del comportamiento de los materiales heterogéneos así como sus diferentes formas de análisis.

2.2 Material homogéneo

Se dice que un material es homogéneo cuando las propiedades de este son idénticas en cualquier punto [2]. Estos están constituidos por una sola fase. Un sistema homogéneo presenta continuidad al observarse a simple vista y microscopio.

2.3 Material heterogéneo

Un material heterogéneo es aquel que está compuesto de diferentes materiales (fases), como un compuesto, o del mismo material en diferentes estados, como un policristal. Es importante hacer un énfasis respecto a la escala con la que se observan estas propiedades. Ya que puede existir que en una escala “microscópica” de longitud mucho mayor a las dimensiones moleculares, no se puedan observar características mucho más pequeñas que las escalas tomadas, por lo que puedan ser ignoradas. Por lo que en estas circunstancias el material heterogéneo puede ser visto como continuo en la escala microscópica [3].

Existen diferentes sistemas heterogéneos tanto sintéticos como naturales. Dentro de los sintéticos se pueden encontrar los siguientes ejemplos:

- Compuestos de fibras
- Compuestos de partículas
- Compuestos interpenetrantes multifase
- Sólidos celulares
- Coloides
- Geles
- Espumas
- Microemulsiones
- Copolímeros en bloque
- Concreto

Por otro lado algunos ejemplos de materiales naturales heterogéneos, son:

- Policristales
- Suelos
- Arenisca
- Medios granulares
- Corteza terrestre
- Hielo marino
- Madera
- Huesos
- Pulmones
- Sangre
- Tejido animal y vegetal
- Agregados celulares y tumores [3]

Un ejemplo de materiales heterogéneos no naturales, es el caso de los materiales compuestos.

Los materiales compuestos se han utilizado en diferentes aplicaciones relacionadas con la transferencia de calor en casos de bajas hacia elevadas temperaturas. Diferentes materiales se

basan combinando las propiedades de sus materiales constituyentes. Sin embargo al ser sujetos a temperaturas elevadas, las propiedades dependen del tiempo de respuesta del material, así como también de como varían las propiedades de los materiales constituyentes a esa temperatura [4].

Los materiales aleatorios compuestos constituyen un grupo importante (especialmente en biología) así como los materiales modernos hechos por el hombre. Estos materiales generalmente consisten en fibras, partículas, nanoclusters, o granos distribuidos aleatoriamente en una matriz solida [5].

2.4 Técnicas utilizadas para evaluar materiales heterogéneos

Actualmente son utilizados diferentes métodos para evaluar los materiales heterogéneos. Una de estas técnicas es la *homogenización*, la cual se examinará en esta investigación con la ayuda de un Elemento de Volumen Representativo (RVE, por sus siglas en inglés) o con la ayuda de Método de Elementos Discretos (MED).

2.4.1 Modelos micromecánicos

El concepto común de todos los modelos micromecánicos es proveer propiedades equivalentes homogéneas de los compuestos primeramente simplificando la condición de heterogeneidad y promediando las propiedades de los constituyentes. Es necesario formular modelos micromecánicos que acepten cambios continuos en las propiedades de los constituyentes debido a la mecánica externa y la estimulación térmica [5].

Estos modelos micromecánicos han sido desarrollados para obtener propiedades elásticas de materiales compuestos: Método diferencial (DM), Ensamble concéntrico cilíndrico (CCA), Mori-Tanaka (MT), Método consistente (SCM), y el método de células (MOC), todos estos son basados en aproximaciones de deformación y esfuerzo uniformes [5].

2.4.2 Homogenización

Como se mencionó anteriormente, existen diversos métodos micromecánicos aparte del RVE y el MED. Todos estos tratan de solucionar la dificultad del entendimiento de los efectos de las propiedades de los constituyentes de los materiales compuestos y de su geometría microestructural [5].

La homogenización es un método matemático que permite subir de escala a las ecuaciones diferenciales. Este método no solo ofrece formulas para subir de escala sino que también provee herramientas para producir pruebas rigurosas matematicas de convergencia[6].

La teoría de la homogenización consiste en determinar ecuaciones diferenciales que describen un cierto fenómeno a escala macroscópica, partiendo del nivel microscópico con ecuaciones diferenciales válidas. Esto se refiere a una escala mayor a la escala atómica, debido a que las ecuaciones diferenciales son validas al obtenerse mediante la teoría de medios continuos [4].

La modelación de materiales heterogéneos, tiene un alto grado de complejidad debido a su comportamiento constitutivo, el cual está influenciado por los efectos microestructurales de estos [7]:

1. la respuesta mecánica disímil de cada una las fases constituyentes
2. la forma y distribución espacial que presentan las heterogeneidades
3. la posible variabilidad en sus fracciones volumétricas o proporciones relativas
4. la interacción entre las fases junto con los procesos inelásticos que se desarrollan en la interfaz de contacto (de cohesión, deslizamiento, etc.) entre otros importantes mecanismos [7].

La formulación en múltiples escalas para predecir el comportamiento de materiales heterogéneos en función de la información derivada de un estudio micro-mecánico [4].

La Teoría de homogeneización divide el problema de los materiales compuestos en dos escalas. Una escala macroscópica o global, donde el comportamiento se considera un material homogéneo y otra escala microscópica o local, donde se modela un volumen elemental

representativo del compuesto. Es en esta escala microscópica donde se estudia el comportamiento del material [8].

La idea general de estos métodos consiste en la obtención de un medio homogéneo equivalente al compuesto de estudio y por eso se le denominan Métodos de Homogenización. Solo con este método es posible modelar materiales con un dominio estadísticamente homogéneo que permita determinar este volumen elemental representativo. Un dominio estadísticamente homogéneo es en donde los materiales en los que exista una distribución de refuerzo homogénea o periódica [8]. La Figura 1 nos muestra como es el proceso de homogenización.

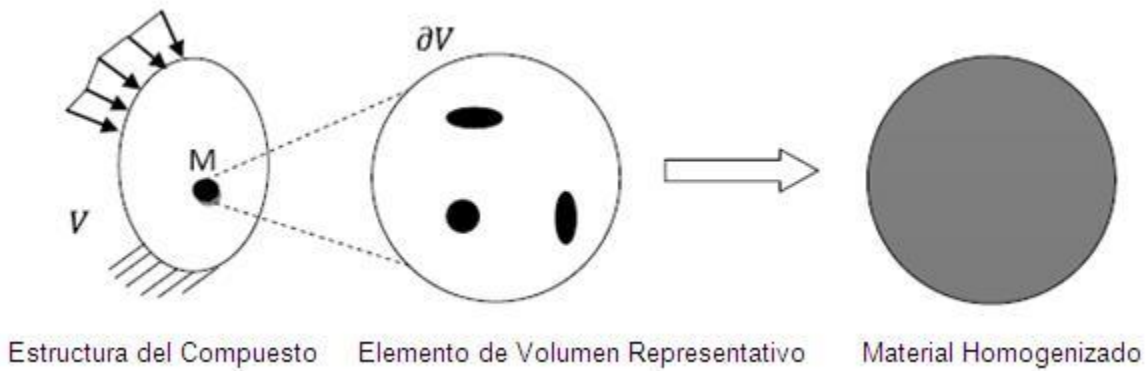


Figura 1. Principio de la homogenización [8].

La Figura 2 muestra el esquema representativo del principio de la homogenización.

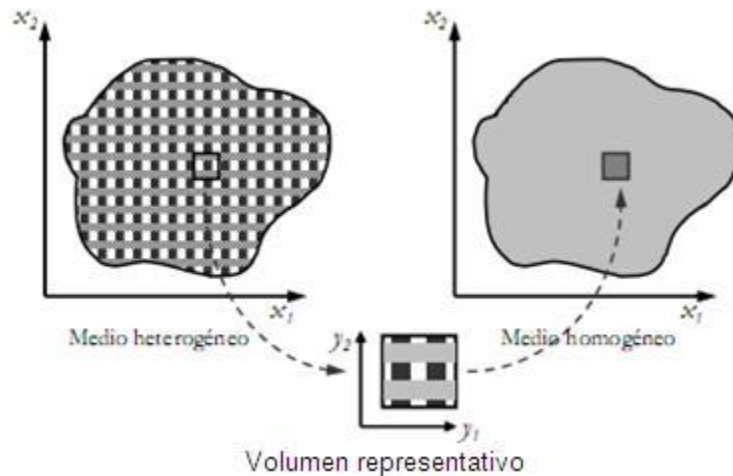


Figura 2 Esquema de la teoría de homogenización, utilización de dos escalas [8].

El objetivo de la técnica de homogenización es lograr un comportamiento homogéneo para un material heterogéneo.

2.4.2.1 Elemento de volumen representativo (RVE)

Los materiales compuestos están siendo utilizados en la reparación de infraestructura civil. Los usos de estos se concentran en la construcción de una nueva infraestructura que debe de operar en condiciones severas, o en la reparación de infraestructura existente [9].

Como ejemplo los materiales compuestos de matriz polimérica reforzados por fibras unidireccionales, los cuales debido a sus propiedades mecánicas son muy adecuados para usarlos como materiales estructurales. Por estas características es que estos materiales han ido desplazando a otros convencionales en aplicaciones donde se necesitan elevadas propiedades específicas, como en el caso de la aeronáutica. Para aprovechar las ventajas de estos materiales y utilizarlos con sus propiedades, se necesita conocer su comportamiento hasta la ruptura, al igual que la relación entre la microestructura y el comportamiento mecánico [10].

Una forma de obtener la respuesta macroscópica deseada de un material es mejorando las propiedades de la matriz mediante agregado partículas de refuerzo o heterogeneidades, en otras palabras (manipulando sus características microestructurales) [11].

El modelado numérico computacional, permite estudiar el problema utilizando descripciones micromecánicas sencillas con significado físico directo. Por otro lado un modelado numérico directo de la respuesta mecánica de un componente o estructura de material microheterogéneo que incorpore los detalles de su microestructura es virtualmente imposible. Aunque fuera posible modelar el problema, la cantidad de información que se procesara sería tan compleja que se dificultaría extraer algún tipo de conclusión sobre el comportamiento macroscópico del material [12].

El modelo se hace sobre una muestra representativa del material, un Elemento de Volumen Representativo (RVE). En la cual los campos internos de las distintas variables son calculados sobre la base de un análisis estadístico sobre una serie de RVE a los que se les someten diferentes cargas. A este proceso se le denomina “homogenización”. Los RVE generalmente tienen un número elevado de heterogeneidades [12].

Basado en el Método de Elementos Finitos el RVE ha sido desarrollado para predecir el comportamiento macroscópico del material desde la base de sus propiedades locales. Un elemento de volumen necesita ser cortado en el tamaño adecuado, lo suficiente mente pequeño para ser macroscópicamente considerado como un punto del material y lo suficiente grande para disminuir las inhomogeneidades [13].

Un tipo de elemento de 3-D puede ser usado para descomponer este elemento de volumen, y también diferentes orientaciones son necesarias para asignar a cada elemento de 3-D el comportamiento de un cristal. En general más de un elemento de 3-D es necesario para dar la misma orientación y así construir un solo cristal para el estudio de la reacción local en este [13].

El RVE se considera usualmente como un volumen suficientemente grande para ser estadísticamente representativo del material, además de incluir una muestra de todas la heterogeneidades microestructurales que ocurren dentro del material [14].

Se debe garantizar que el RVE tenga una precisión determinada de las propiedades globales estimadas obtenidas por el promedio espacial de esfuerzo, deformación y campos de energía [15].

Otra forma de definir el RVE es como el elemento material de volumen estadístico más pequeño de los compuestos para los que la constante usual de espacio (modulo general) macroscópica es suficientemente precisa para representar una respuesta promedio [16].

También es definido como un volumen cierto tamaño que la distribución de orientaciones y dureza de cristales no varían significativamente, una sugerencia de una “unidad cúbica” para policristales [17].

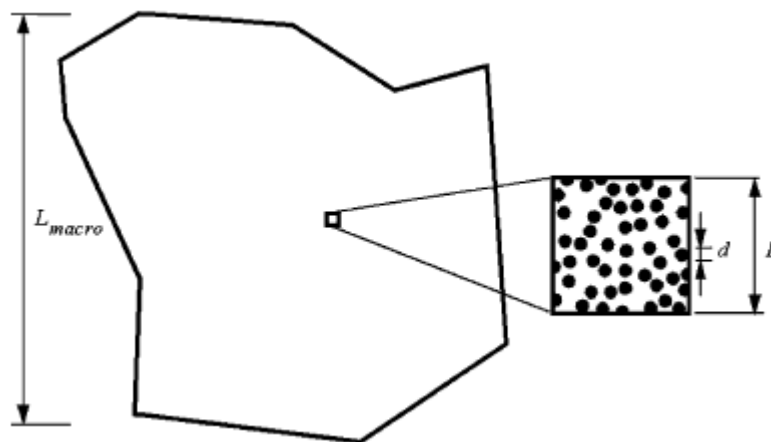
El RVE puede ser definido como aquel donde los fenómenos a estudiar pueden ser promediados a lo largo del volumen [13].

Cuando existen condiciones frontera homogéneas aplicadas a un compuesto macroscópico, la deformación en cada RVE es idéntica y la deformación en cada esquina del RVE es compatible. Consecuentemente la respuesta mecánica del material compuesto se puede obtener aplicando condiciones frontera periódicas a un RVE [18].

Existen dos conceptos muy parecidos el Elemento de Volumen Representativo (RVE) y el Elemento de Volumen Estadístico (SVE).

- RVE: El volumen contiene un gran (matemáticamente infinito) conjunto de elementos microescala.
- SVE: El volumen contiene un conjunto finito de elementos microescala [17].

La Figura 3 muestra las diferentes escalas que existen, así como la distribución aleatoria de un material de dos fases.



[17]

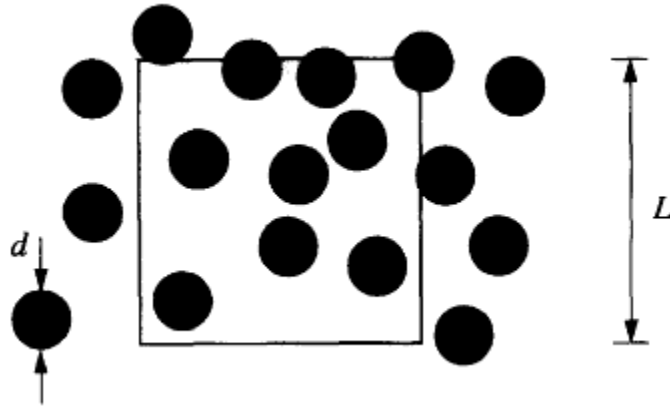


Figura 3. Realización de una microestructura aleatoria de un material de dos fases, disco-matriz compuestos, y del concepto ventana-escala [19].

2.4.2.1.1 Determinación del elemento de volumen representativo

Para determinar las propiedades del material microheterogéneo, se debe calcular la relación entre promedio sobre el volumen de la muestra donde los tensores de esfuerzo y deformación actúan, además de obtener una matriz con las constantes elásticas del material [20].

Se debe tomar en cuenta que el RVE debe ser lo suficientemente pequeño para ser considerado como un punto dominio del material bajo análisis, pero lo suficientemente grande para contener una muestra estadísticamente representativa de la microestructura [20].

El proceso para determinar el RVE consiste en analizar muestras de la microestructura del material con distinto número de microheterogeneidades y ver su comportamiento [20].

Como se ha mencionado anteriormente, la micromecánica es una estrategia para determinar el comportamiento de materiales heterogéneos partiendo de una simulación numérica de las propiedades de un volumen representativo de la microestructura, el cual debe ser suficientemente grande para que las propiedades medias de este sean independientes de su tamaño y posición en el material [20].

Se debe tomar en cuenta que nociones cinemáticas y estáticas, como los tensores de rigidez y complianza son particular relevantes para la determinación del tamaño mínimo del RVE [21].

En el RVE las tensiones y deformaciones no son uniformes ya que el compuesto es material heterogéneo. Sin embargo, el volumen ocupado por el RVE puede ser reemplazado por un material homogéneo equivalente sin afectar el estado de tensiones alrededor del RVE [22].

Se pueden definir tres escalas, no absolutas sino relativas al fenómeno a estudiar, como se muestran en la Figura 4 [20]:

- Microescala: Donde se estudian los mecanismos que provocan la elasticidad, la disminución de rigidez o la plasticidad. La elasticidad se encuentra relacionada con los movimientos de los átomos. La plasticidad en los metales se estudia analizando el movimiento relativo de las distintas dislocaciones entre los cristales del material [20].
- Meso escala: Donde se pueden definir las ecuaciones constitutivas continuas para el análisis mecánico. Aquí se define el elemento representativo de volumen [20].
- Macroescala: es la escala de las estructuras a analizar [20].

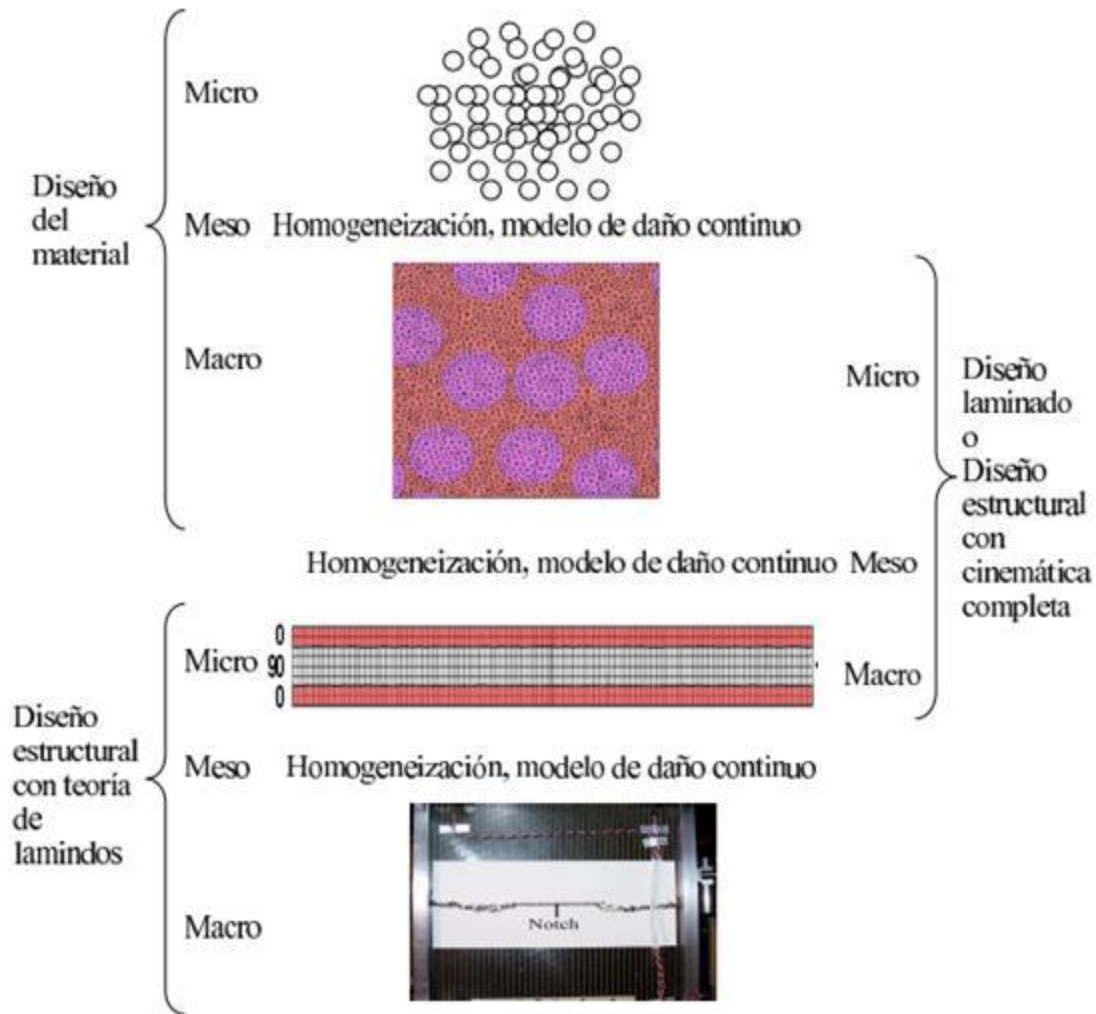


Figura 4. Distintas escalas donde el material puede ser homogenizado [20].

El RVE permite evaluar cada nivel de estructura separadamente. El RVE separa el análisis en dos niveles local y global [20].

En el local se modelan detalles microestructurales para determinar propiedades elásticas efectivas. Estas ayudan a conocer la relación entre deformaciones efectivas o promedio y las deformaciones locales. Al proceso de encontrar las propiedades efectivas se le denomina homogenización. Posteriormente la estructura compuesta es reemplazada por un material homogéneo equivalente que tiene las propiedades efectivas y calculadas. En el análisis de nivel global se calculan las tensiones y deformaciones efectivas o promedio dentro de la estructura [20].

El RVE se puede aplicar para estimar las deformaciones a diferentes niveles estructurales, por ejemplo: el análisis en el nivel estructural i provee una matriz que relaciona los componentes del tensor de deformaciones locales ε_i con las del nivel inmediato superior ε_{i-1} .

$$\{ \varepsilon_i \} = [M_i] \{ \varepsilon_{i-1} \} \quad (2.1)$$

Donde:

El subíndice i indica el nivel estructural que se está analizando.

$i-1$ el nivel inmediato superior (“más macroscópico”).

M_i representa el tensor estructural local o de localización de deformaciones en el nivel i -ésimo.

El tensor de elástico efectivo o promedio puede calcularse luego a partir del tensor estructural local mediante [23].

$$[E_{i-1}] = \frac{1}{V_{rve}} \int [E_i][M_i] dV_{rve} \quad (2.2)$$

Donde:

E_{i-1} es el tensor elástico del nivel estructural $i-1$.

E_i es el del nivel estructural i -ésimo.

V_{rve} es el volumen del elemento de volumen representativo.

M_i es el tensor estructural en el nivel i -ésimo. El siguiente nivel macroscópico puede ser analizado usando las propiedades efectivas calculadas [23].

2.4.2.1.2 Enfoque mecánico tradicional del RVE

Como se ha mencionado anteriormente, las condiciones de contorno in-situ de los RVE se desconocen, los métodos de homogenización solo pueden proveer una estimación de las

propiedades efectivas y de las deformaciones locales. La exactitud de estimaciones depende de las condiciones de contorno supuestas [23].

El enfoque mecánico tradicional del RVE es muy difundido y consiste en aplicar condiciones de tracción o desplazamientos uniformes en el contacto. Hill demostró que la aplicación de condiciones de tracción provee un límite inferior a las propiedades efectivas mientras que las de desplazamiento uniforme proveen un límite superior

Pero no solo las condiciones frontera afectan las estimaciones de las propiedades efectivas, la relación entre el tamaño microestructural y el del RVE también. Para estos casos la definición del RVE involucra un estudio particular. Existen dos formas de definir a un RVE: a) como una muestra estadísticamente representativa de la microestructura, o b) como volumen de menor tamaño que sea suficiente para representar el comportamiento macroscópico de un material [23].

Estas definiciones presentan inconvenientes. La primera de ellas requiere de una muestra estadísticamente representativa, por lo tanto debe contener un número grande de heterogeneidades, en consecuencia los cálculos sobre los RVE resultan computacionalmente tediosos. El problema con la segunda definición está relacionado con consideraciones prácticas ya que si bien un RVE pequeño puede ser adecuado para la evaluación de una variable, puede no serlo para otra o pueden existir fluctuaciones significativas de las mismas en la frontera. Se puede deducir que con la primera definición se obtendrían RVE de mayor tamaño que con la segunda y, que para esta última, el tamaño del RVE depende del comportamiento del material y de la carga aplicada [23].

El tamaño del RVE debe incluir un punto del material frente a las dimensiones del nivel $i-1$ para que la mecánica del medio continuo pueda aplicarse. Al mismo tiempo su tamaño establecerá las relaciones entre las escalas macro-micro, por lo que al definirlo se debe considerar el comportamiento y las características microestructurales para obtener un modelo representativo del material y que sea computacionalmente económico [23].

Un concepto para definir escalas contiguas comúnmente que ha sido aceptado para el cálculo de las propiedades efectivas es la llamada condición de Hill, la cual establece [23]:

$$\langle \sigma \rangle \cdot \langle \varepsilon \rangle = \langle \sigma \cdot \varepsilon \rangle \quad (2.3)$$

Los corchetes de McCauley denotan la operación de promedio de la variable en el volumen sobre el dominio, que en este caso es idéntico al volumen del RVE. Esto es, para una función f .

$$\langle f \rangle = \frac{1}{V_{rve}} \int f \cdot dV_{rve} \quad (2.4)$$

El tamaño del RVE está relacionado con la condición de Hill, ya que esta dice que un RVE estará bien definido si es representativo de la microestructura del material y si la respuesta bajo condiciones de desplazamientos y tracciones de uniformes coincide. Para esto, el material heterogéneo deberá estar perfectamente unido y no tener fuerzas de volumen [23].

Para que esta condición se satisfaga dentro de un cuerpo macroscópico bajo carga externa no uniforme, la muestra debe ser lo suficientemente grande como para poseer pequeñas fluctuaciones de campo relativas a su tamaño. Por lo tanto aplicando las condiciones de contorno de Reuss (condiciones de tracción) o Voigt (desplazamiento uniforme) a una muestra grande es una forma de reproducir aproximadamente lo que está sucediendo en un RVE de material en un cuerpo macroscópico. Este análisis de las condiciones frontera se puede emplear para justificar la necesidad de una muestra suficientemente grande como para tener una pequeña fluctuación de las variables en la frontera y ser suficientemente pequeña respecto de la estructura macroscópica. Así mismo, constituye un elemento de juicio más a favor de la selección de condiciones de contorno uniformes [23].

2.4.2.1.3 Homogenización mediante un enfoque mecánico tradicional

En la homogenización utilizando un enfoque mecánico tradicional se aproximan las condiciones de contorno del RVE mediante tracciones o desplazamientos uniformes. Según sea la aproximación empleada se obtienen tensiones o deformaciones promediadas en el volumen [23].

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{V_{rve}} \int \varepsilon \cdot dV_{rve}, \quad (2.5)$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{V_{rve}} \int \sigma \cdot dV_{rve}$$

Para encontrar las tensiones o deformaciones promedio, se debe conocer sus contrapartes dentro del RVE. Para esto, una vez que se seleccionaron las condiciones frontera, han sido identificadas y definidas, se puede resolver la forma más sencilla de la ecuación de equilibrio usando el MEF para calcular la deformación local dentro del RVE [23].

La forma ortotrópica (punto a punto) de las leyes efectivas esfuerzo-deformación, envuelven solo nueve constantes independientes [24].

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{11} &= C_{11}\bar{\varepsilon}_{11} + C_{12}\bar{\varepsilon}_{22} + C_{13}\bar{\varepsilon}_{33} \\ \bar{\sigma}_{22} &= C_{12}\bar{\varepsilon}_{11} + C_{22}\bar{\varepsilon}_{22} + C_{23}\bar{\varepsilon}_{33} \\ \bar{\sigma}_{33} &= C_{13}\bar{\varepsilon}_{11} + C_{23}\bar{\varepsilon}_{22} + C_{33}\bar{\varepsilon}_{33} \\ \bar{\sigma}_{12} &= 2C_{44}\bar{\varepsilon}_{12} \quad (2.6) \\ \bar{\sigma}_{23} &= C_{55}\bar{\varepsilon}_{23} \\ \bar{\sigma}_{31} &= C_{66}\bar{\varepsilon}_{31} \quad (18) \end{aligned}$$

Las dos subscripciones notacionales para el modulo efectivo de elasticidad están relacionados por:

$$\begin{aligned} C_{11} &= C_{1111}, \quad C_{22} = C_{2222}, \quad C_{33} = C_{3333}, \\ C_{12} &= C_{1122}, \quad C_{23} = C_{2233}, \quad C_{31} = C_{3311}, \quad (2.7) \end{aligned}$$

$$C_{11} = C_{1111}, \quad C_{22} = C_{2222}, \quad C_{33} = C_{3333}, \quad (18)$$

Las ecuaciones inversas para las del esfuerzo, son las siguientes.

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_{11} &= S_{11}\bar{\sigma}_{11} + S_{12}\bar{\sigma}_{22} + S_{13}\bar{\sigma}_{33}, \\ \bar{\varepsilon}_{22} &= S_{12}\bar{\sigma}_{11} + S_{22}\bar{\sigma}_{22} + S_{23}\bar{\sigma}_{33}, \\ \bar{\varepsilon}_{33} &= S_{13}\bar{\sigma}_{11} + S_{23}\bar{\sigma}_{22} + S_{33}\bar{\sigma}_{33}, \\ \bar{\varepsilon}_{12} &= S_{44}\bar{\sigma}_{12}, \quad (2.8) \\ \bar{\varepsilon}_{23} &= S_{55}\bar{\sigma}_{23}, \\ \bar{\varepsilon}_{31} &= S_{66}\bar{\sigma}_{31}, \end{aligned}$$

Donde S_{ij} , están conectadas a S_{ijkl} , por el mismo tipo de relaciones [24].

Las relaciones entre el modulo de corte y las compliance de corte están dadas por:

$$S_{44} = \frac{1}{4C_{44}}, \quad S_{55} = \frac{1}{4C_{55}}, \quad S_{66} = \frac{1}{4C_{66}} \quad (2.9)$$

Es común escribir S_{ij} en la siguiente forma,

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{1}{E_1}, \quad S_{22} = \frac{1}{E_2}, \quad S_{33} = \frac{1}{E_3} \\ S_{12} &= -\frac{\nu_{12}}{E_1} = -\frac{\nu_{21}}{E_2} \\ S_{23} &= -\frac{\nu_{23}}{E_2} = -\frac{\nu_{32}}{E_3} \quad (2.10) \\ S_{31} &= -\frac{\nu_{31}}{E_3} = -\frac{\nu_{13}}{E_1} \end{aligned}$$

donde E_1, E_2 y E_3 , son módulos efectivos de Young asociados con un esfuerzo uniaxial en direcciones cardinales. Un ν_{ij} aparece en las ecuaciones anteriores indica una razón de Poisson

en donde i es la dirección uniaxial del esfuerzo, produciendo una deformación transversal de Poisson en dirección j [24].

El modelaje y simulación de materiales con microestructuras desordenadas están teniendo un impacto creciente en el entendimiento del comportamiento de materiales [24].

Se pueden encontrar estructuras desordenadas en los materiales en diferentes escalas. Por ejemplo, materiales granulares y esponjas metálicas pertenecen a la macroescala, mientras que materiales policristalinos, aleaciones endurecidas por precipitación, compuestos metal-cerámico se definen en la microescala; y por ultimo, aleaciones nano-cristalinas, vidrios y fluidos son considerado en la nano-escala. La Figura 5 muestra algunas configuraciones desordenadas de diferentes materiales de acuerdo a sus escala [24].

Sin embargo, una microestructura nominalmente ordenada, como un cristal, desarrolla una microestructura desordenada, como una dislocación en la microestructura dando como resultado una deformación plástica. El método RVE, es usualmente el único método disponible para entender la relación entre las interacciones de la microestructura y el comportamiento macroscópico, además de ser más económico en términos computacionales. La figura 6 ilustra las condiciones frontera de corte para un RVE [24].

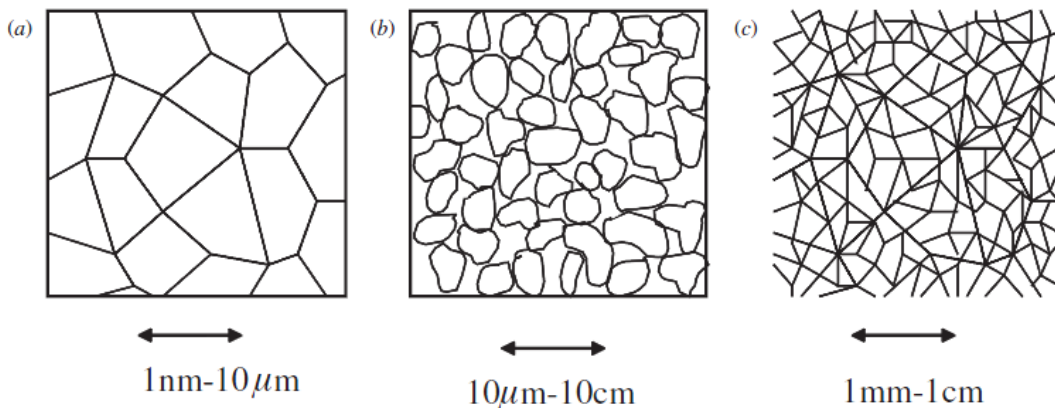


Figura 5. Ejemplos de microestructuras desordenadas. Escalas típicas de longitud: (a) Policristalina (o nanocristalino) material. (b) Materiales Granulares; los granos pueden ser

grandes piedras (concreto) o pequeñas partículas de polvo en polvo metalúrgico. (c) Esponjas metálicas [25].

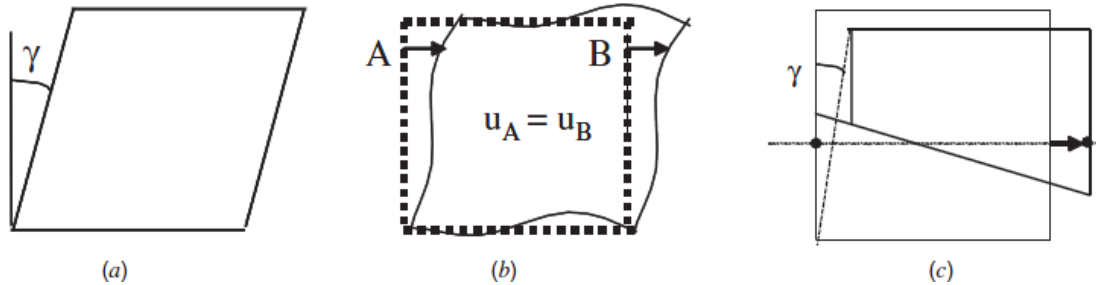


Figura 6. Condiciones frontera común para corte de un RVE. (a) condiciones rígidas frontera. (b) condiciones frontera periódicas. (c) Condiciones frontera rígidas y periódicas previenen la localización del corte; el desplazamiento de los puntos no puede ser satisfecho [25].

El tipo de RVE bajo la consideración es construido a base de bloques: átomos, granos, gránulos, etc. Esto es usualmente asumido que un RVE en un material; para el proceso de simulación. Está sujeto a las condiciones de borde (BC, por sus siglas en ingles) y el comportamiento de un acomodo desordenado es observado, generalmente en los siguientes dos propósitos:

Para entender las interacciones entre la microcomponentes del material; y la manifestación del modelo macroscópico de esas interacciones: por ejemplo, modelaje constitutivo [22].

Las condiciones frontera cinemáticas son condiciones frontera periódicas, relacionadas a los desplazamientos en los lados opuestos del RVE. Para RVE de dos dimensiones [22].

Otro ejemplo común, pero más simple, son las condiciones frontera rígidas, donde los desplazamientos prescritos en la frontera son tales que los planos frontera permanecen planos después de la deformación [25].

Las simulaciones de las microestructuras desordenadas son calculadas por una variedad de métodos. La deformación de policristales puede ser simulada por medio del FEM, mientras el flujo y la deformación en un acomodo granular pueden ser simulados usando un método de

elemento discreto, el cual es esencialmente, una variante del FEM con una dimensión de elementos representando contactos entre los gránulos. La deformación entre las esponjas metálicas puede ser simulada por elemento finito estructural con una viga o capa de elementos [26].

Las condiciones frontera de un problema no local no pueden ser puramente cinemáticas, mientras los problemas dinámicos requieren que, en adición, a los desplazamientos de frontera, velocidades frontera especificadas [27].

2.4.2.2 Método de los elementos discretos

Este método consiste en representar el continuo utilizando arreglo de barras de rigidez representando al continuo. En el que cada nodo tiene tres grados de libertad, las masas son ligadas por elementos normales y diagonales de longitud [28].

El método consiste en simular leyes de comportamiento complejas a través de una simple ley constitutiva uniaxial de cada elemento [28].

2.5 Elasticidad

Similar a otros campos como mecánica de fluidos, conducción de calor y electro mecánicos, el estudio y aplicación de la teoría elástica requiere de conocimientos de distintas áreas matemáticas aplicadas. La teoría esta formulada en una variedad de variables incluyendo escalares, vectores, campos vectoriales y esto con el uso de notaciones de un tensor a lo largo mediante el uso de notación de tensores con algebra de tensores y cálculo [29].

Por principios de la mecánica del medio continuo, la teoría es desarrollada como un sistema de ecuaciones diferenciales de campo, que deben ser resueltas en una región del espacio que coincida con el espacio del cuerpo bajo el estudio [29].

Las técnicas para resolver estos campos de ecuaciones son: métodos de Fourier, técnicas de variación, integrales transformadas, variables complejas, teoría potencial, diferencias finitas y elementos frontera [29].

2.5.1 Escalares, vectores, matrices y definiciones de tensor

La teoría de elasticidad es formulada en términos de diferentes tipos de propiedades del material que tienen un punto especial en el cuerpo a estudiar. Los ejemplos de estos podrían ser la densidad del material (ρ), modulo de Young y la razón de Poisson (ν). Otras propiedades que pueden ser de interés son las cantidades vectoriales que son expresadas en términos de dos o más dimensiones en un sistema coordenado. Como pueden ser el desplazamiento y la rotación de puntos de un material en el elástico continuo. Las formulaciones de la teoría requieren variables matriciales, que requieren más de tres elementos a cuantificar (esfuerzo y deformación) [29].

Densidad de masa escalar = ρ

$$\text{Vector de desplazamiento} = \mathbf{u} = u_{e_1} + u_{e_2} + u_{e_3} \quad (2.11)$$

$$\text{Stress matrix} = [\sigma] = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

donde e_1, e_2, e_3 son las unidades básicas de vectores en las direcciones coordinadas. Por lo que, escalares, vectores y matrices se especifican por uno, tres o nueve componentes respectivamente [29].

2.5.2 Deformación: desplazamientos y deformaciones

Como resultado de cargas aplicadas; los sólidos elásticos cambian de forma o se deforman, estas deformaciones, pueden ser cuantificadas conociendo el desplazamiento de los puntos del material en el cuerpo. La hipótesis del continuo establece a un campo de desplazamiento como

todos los puntos dentro de un elástico sólido. Usando la correcta geometría, medidas particulares de deformación pueden ser construidas guiándose por el desarrollo del tensor de deformación. Como es de esperarse las componentes de la deformación están relacionadas con el campo de desplazamientos [29].

2.5.2.1 Deformaciones generales

La mayoría de los problemas de los problemas cuentan con una deformación no uniforme, es decir que varía punto a punto a esto se le denomina deformación no homogénea. Se dice que un sólido elástico es deformado cuando el desplazamiento relativo entre los puntos en el cuerpo ha sido cambiado. Por el contrario en un cuerpo rígido la distancia es la misma [29].

Para la teoría de deformación finita o larga, las configuraciones de deformados y no deformados puede ser significativamente diferentes, y una distinción entre estas dos configuraciones. Las Figuras 7 y 8 muestran dos casos de deformaciones de dos dimensiones y de puntos vecinos [29].

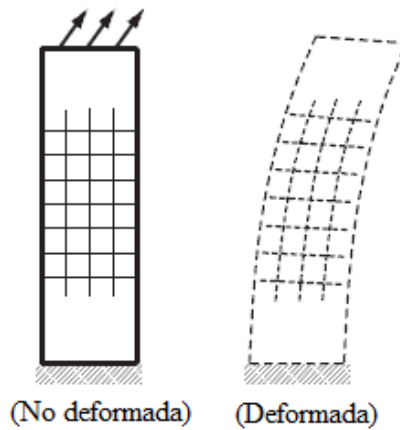


Figura 7. Ejemplo de una deformación 2D [29].

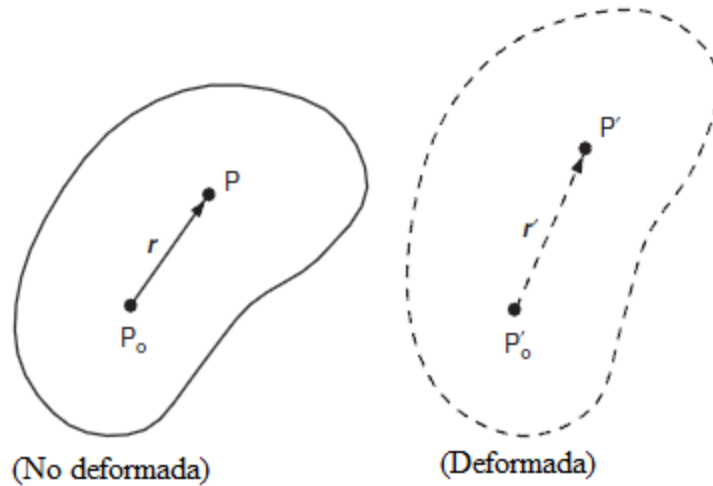


Figura 8. Deformación general entre dos puntos vecinos [29].

Usando las coordenadas cartesianas para definir el vector de desplazamiento de los punto P_0 y P , que serán u^0 y u , respectivamente. Desde que P y P_0 , son puntos vecinos podemos usar las series de expansión de Taylor alrededor del punto P_0 para expresar las componentes como:

$$\begin{aligned}
 u &= u^0 + \frac{\partial u}{\partial x}rx + \frac{\partial u}{\partial y}ry + \frac{\partial u}{\partial z}rz \\
 v &= v^0 + \frac{\partial v}{\partial x}rx + \frac{\partial v}{\partial y}ry + \frac{\partial v}{\partial z}rz \quad (2.13) \\
 w &= w^0 + \frac{\partial w}{\partial x}rx + \frac{\partial w}{\partial y}ry + \frac{\partial w}{\partial z}rz
 \end{aligned}$$

Donde u , v y w son componentes cartesianos del vector de desplazamiento [29].

Nótese que los términos de mayor orden de expansión han sido despreciados desde que los componentes de r son pequeños. El cambio en una posición relativa del vector puede ser escrita como:

$$\Delta r = r' - r = u - u^0 \quad (2.14)$$

Y usando la ecuación (2.14) , da:

$$\begin{aligned}\Delta r_x &= \frac{\partial u}{\partial x}rx + \frac{\partial u}{\partial y}ry + \frac{\partial u}{\partial z}rz \\ \Delta r_y &= \frac{\partial v}{\partial x}rx + \frac{\partial v}{\partial y}ry + \frac{\partial v}{\partial z}rz \\ \Delta r_z &= \frac{\partial w}{\partial x}rx + \frac{\partial w}{\partial y}ry + \frac{\partial w}{\partial z}rz\end{aligned}\quad (2.15)$$

O en notación de índices:

$$\Delta r_i = u_{i,j}r_j \quad (2.16)$$

Donde el tensor u_{ij} , y puede ser escrito como:

$$u_{i,j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

De la relación anterior podemos obtener dos partes una simétrica y otra antisimétrica como:

$$u_{i,j} = e_{ij} + w_{ij} \quad (2.18)$$

Donde ,

$$e_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (2.19)$$

$$w_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} - u_{j,i})$$

El tensor e_{ij} es llamado tensor de deformación y el tensor w_{ij} tensor de rotación. Con estos componentes podemos conocer la relación del tensor de deformación e_{ij} , el cual es relacionado a gradientes de desplazamiento [29].

2.5.3 Construcción geométrica de la teoría de deformación pequeña

Generalmente las variables elásticas y ecuaciones están definidas en cada punto en el continuo. Sin embargo, las ecuaciones de campo particulares están comúnmente desarrolladas primero investigando el comportamiento de elementos infinitesimales, y luego limitando el proceso a donde permita al elemento contraerse a un punto. Esto se considera el comportamiento común de un elemento rectangular [29].

Los movimientos de un cuerpo rígido no contribuyen al campo de deformación, y estos no afectan a los esfuerzos. En la Figura 9 se puede observar las deformaciones típicas de un elemento rectangular.

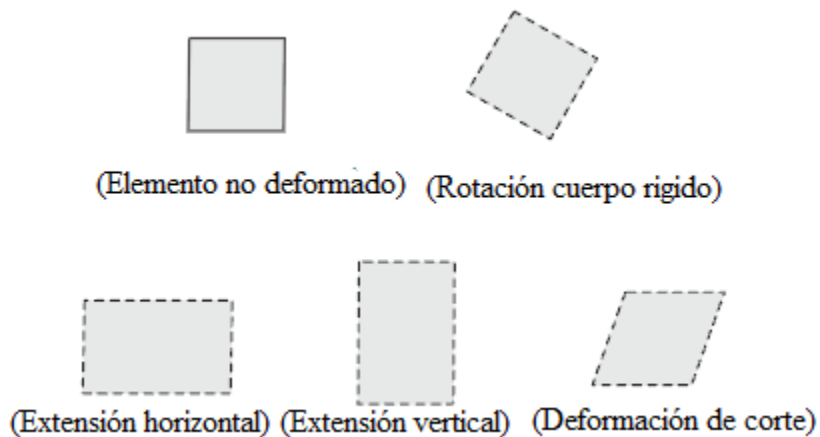


Figura 9. Deformaciones típicas de un elemento rectangular [29].

La normal o el componente extensional de deformación es definido como el cambio de longitud por unidad de longitud de fibras orientadas en una dirección. La normal de deformación es positiva si las fibras crecen en longitud y negativa si disminuyen en tamaño [29].

El esfuerzo de corte es definido como el cambio de ángulos entre dos direcciones ortogonales originales en el material continuo [29].

Aplicaciones de la teoría de elasticidad generalmente usan un tensor que requiere una definición de deformación de corte correspondiente a una mitad de cambio de ángulos entre los ángulos de ejes ortogonales [29].

Medido en radianes, la deformación de corte es positiva si el ángulo derecho entre las direcciones positivas de los dos ejes decrece. Así que el signo de la deformación de corte depende del sistema coordenado [29].

Las relaciones de deformación de desplazamiento, sirven para definir los componentes que describen la teoría de la pequeñas deformaciones [29].

2.5.4 Esfuerzo y equilibrio

El vector de tracción y el tensor de esfuerzo, proveen un método cuantitativo para describir las distribuciones de fuerzas internas y de frontera en un sólido continuo [29].

Cuando una estructura es sujeta a cargas externas aplicadas, fuerzas internas son inducidas dentro del cuerpo. Se categorizan en dos grupos mayores, comúnmente referidos a las fuerzas en cuerpo y superficies.

- Las fuerzas de cuerpo son proporcionales a la masa del cuerpo y son reactivos con un agente fuera del cuerpo. Por ejemplo: fuerzas gravitacionales, fuerzas magnéticas y fuerzas internas.
- Las fuerzas superficiales: siempre actúan en una superficie y resulta del contacto físico con otro cuerpo [29].

2.5.5 Comportamiento del material-sólido elástico lineal

Las relaciones que caracterizan las propiedades físicas del material son llamadas ecuaciones constitutivas. Por la variedad de materiales y cargas, que estudian y desarrollan las ecuaciones constitutivas es quizás que es uno de los campos de la mecánica más interesantes y retadores. Por lo que la mecánica del medio continuo ha establecido algunos principios para el desarrollo sistemático de ecuaciones constitutivas, y muchas leyes constitutivas han sido desarrolladas a través de relaciones empíricas basadas en la evidencia experimental [29].

El comportamiento mecánico de los sólidos es normalmente definido por relaciones constitutivas esfuerzo-deformación, estas expresan el esfuerzo como una función de deformación, razón de deformación, historia de deformación, temperatura y propiedades de los materiales. Tomando un modelo simple llamado sólido elástico.

Se puede describir a este como un deformable continuo que recupera su configuración original cuando las cargas que causan la deformación son sustraídas. Además de restringir la ley constitutiva de esfuerzo-deformación, resultando un sólido elástico lineal. Estas suposiciones simplifican de gran forma el modelo, las predicciones lineares elásticas sólidas muestran un buen acuerdo con los datos experimentales y proveen diferentes métodos útiles para el análisis de esfuerzos. Muchos materiales como los metales, plásticos, cerámicos, maderas, piedras, concretos y otros observan un comportamiento lineal elástico bajo pequeñas deformaciones [29].

2.5.5.1 Materiales elásticos lineales- Ley de Hooke

Para construir una ley constitutiva basándonos en lo anterior para materiales elásticos lineales. Se supone que cada componente de esfuerzo esta linealmente relacionado con cada componente de deformación [29].

$$\begin{aligned}
 \sigma_x &= C_{11}e_x + C_{12}e_y + C_{13}e_z + 2C_{14}e_{xy} + 2C_{15}e_{yz} + 2C_{16}e_{zx} \\
 \sigma_y &= C_{21}e_x + C_{22}e_y + C_{23}e_z + 2C_{24}e_{xy} + 2C_{25}e_{yz} + 2C_{26}e_{zx} \\
 \sigma_z &= C_{31}e_x + C_{32}e_y + C_{33}e_z + 2C_{34}e_{xy} + 2C_{35}e_{yz} + 2C_{36}e_{zx} \quad (2.20) \\
 \tau_{xy} &= C_{41}e_x + C_{42}e_y + C_{43}e_z + 2C_{44}e_{xy} + 2C_{45}e_{yz} + 2C_{46}e_{zx} \\
 \tau_{yz} &= C_{51}e_x + C_{52}e_y + C_{53}e_z + 2C_{54}e_{xy} + 2C_{55}e_{yz} + 2C_{56}e_{zx} \\
 \tau_{zx} &= C_{61}e_x + C_{62}e_y + C_{63}e_z + 2C_{64}e_{xy} + 2C_{65}e_{yz} + 2C_{66}e_{zx}
 \end{aligned}$$

Donde los coeficientes C_{ij} son parámetros del material y los factores de 2 surgen por la simetría de la deformación. Estas relaciones también pueden escribirse en formato matricial [29].

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & C_{16} \\ C_{21} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ C_{61} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \\ 2e_{xy} \\ 2e_{yz} \\ 2e_{zx} \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

A su vez esto puede ser expresado en la notación estándar para tensores.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} \quad (2.22)$$

En donde C_{ijkl} es un tensor de elasticidad de cuarto orden donde sus componentes incluyen todos los parámetros necesarios para caracterizar el material [29].

2.5.6 Microplasticidad

El origen de la plasticidad en los materiales cristalinos es el deslizamiento del cristal. Los metales son usualmente policristalinos; esto es, hechos de muchos cristales en los cuales los átomos están dentro de arreglos regulares. En la Figura 10 se muestra la representación esquemática de una estructura cristalográfica dentro de un grano sometido a desplazamiento [30].

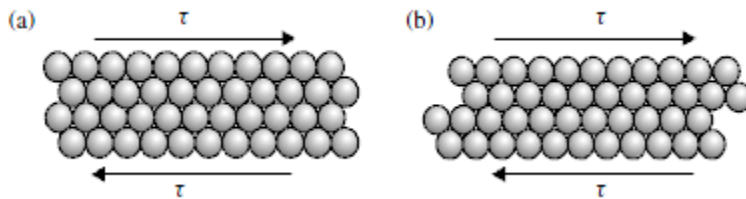


Figura 10. Representación esquemática de una estructura cristalográfica dentro de un grano sometido a desplazamiento [30].

No todos los procesos de deformación plástica son incompresibles. Un metal poroso por ejemplo, bajo una carga compresiva puede sufrir deformación plástica mientras los poros son

reducidos en tamaño. Consecuentemente, hay un cambio de volumen y una dependencia de esfuerzo hidrostático. Sin embargo, el cambio de volumen no es originado por el proceso de deslizamiento, pero por el cierre de los poros [30].

En este trabajo se aplican diferentes condiciones frontera a un RVE, el cual tenía diferentes condiciones. El RVE está constituido por dos materiales elásticos isotrópicos. Estos materiales están distribuidos aleatoriamente y homogéneamente dentro del material en forma de esferas con el mismo diámetro.

Un material isotrópico es aquel en el que todas sus propiedades son idénticas en todas las direcciones. Existen materiales que debido a las diferencias del arreglo atómico en los planos y direcciones dentro de un cristal varían sus propiedades, cuando las propiedades varían por su dirección se denomina material anisotrópico [31].

2. 6 Estudios previos sobre la homogenización de materiales heterogéneos

Existe un estudio previo a este realizado para simular el comportamiento de un material heterogéneo por medio de la técnica de RVE en el cual se evalúa el comportamiento de un material compuesto por fibras cilíndricas. Este estudio fue realizado en la Otto-von-Guericke Universität en Alemania junto con la Universidad de la Habana. Por los siguientes investigadores Sreedhar Kari, Harald Berger, Reinaldo Rodríguez Ramos y Ulrich Gabbert. En este estudio se formó un RVE compuesto de dos materiales diferentes en el que la estructura del cubo es de un material distinto al material que se usó en las fibras.

En este trabajo se evalúan las propiedades efectivas de materiales compuestos por fibras distribuidas aleatoriamente transversalmente unidireccionales para materiales compuestos piezoeléctricos usando las técnicas de homogenización basándose en el elemento finito y en el método de RVE. En este estudio se usan diferentes diámetros de las fibras, en los que en los modelos se evalúa cómo los diámetros y los arreglos de las fibras afectan las propiedades efectivas del material. Todas las propiedades del material distribuidas unidireccionalmente aleatoriamente en fibras piezoeléctricas del material compuesto, estas son evaluadas y comparadas en

arreglos regulares como cuadrados y hexágonos de materiales piezoeléctricos compuestos por fibras. En la Figura 11 se muestran diferentes modelos de RVE con una composición distinta.

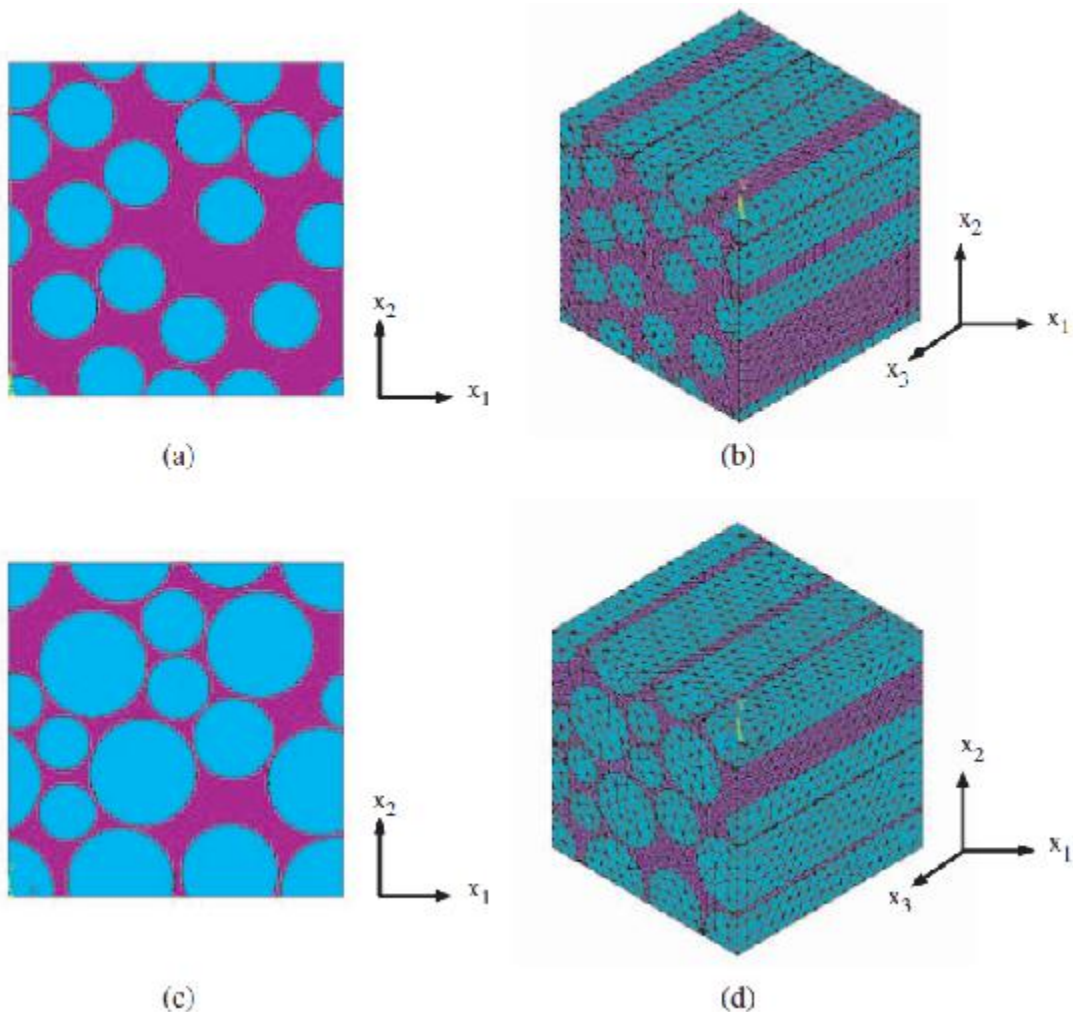


Figura 11. Modelos de RVE de compuestos formados por fibras distribuidos unidireccionalmente transversalmente aleatorios. (a) y (b) tienen el mismo diámetro de fibra en el RVE y su malla, para el caso de una fracción del 50% del volumen, (c) y (d) tienen diferentes diámetros de fibras y su malla es para una fracción del 70% del volumen.

En esta universidad y en este instituto se estudian los materiales pero básicamente se evalúan procesos micromecánicos. A comparación de este trabajo el modelo de este programa es utilizado para un cierto tipo de material heterogéneo que no posee las mismas características que puede contener el material que es posible evaluar con el modelo de esta investigación. Ya que los

materiales que pueden ser evaluados con este modelo, pueden ser materiales porosos o con inclusiones de metal.

Por lo que se puede obtener en este modelo es el comportamiento que se obtendrá en los materiales mencionados anteriormente, que son por su estructura muy distintos a los evaluados en el modelo de la investigación anterior. Por lo que con los resultados obtenidos se puede comprobar la teoría de homogenización para este tipo de materiales, al observar que al aumento de las inclusiones esféricas de otro material siempre conservando el mismo volumen. Se obtiene un comportamiento similar al de un material homogéneo.

CAPITULO 3. EXPERIMENTACIÓN

3.1 Introducción

En este capítulo se definirá la metodología realizada para el desarrollo del RVE, para la determinación del promedio de las propiedades mecánicas de un material heterogéneo.

El material a analizar está compuesto por dos materiales elásticos isotrópicos lineales, donde la matriz contiene inclusiones esféricas del mismo diámetro, distribuidas aleatoriamente y homogéneamente.

La simulación de las condiciones frontera en el RVE, de un material heterogéneo se efectuó en el programa ABAQUS. El material fue, representado por un cubo y un cierto número de esferas determinadas por el usuario del programa. El material del cubo es diferente al de las esferas. Las esferas se encuentran dentro del cubo acomodadas aleatoriamente, como se muestra en la Figura 12.

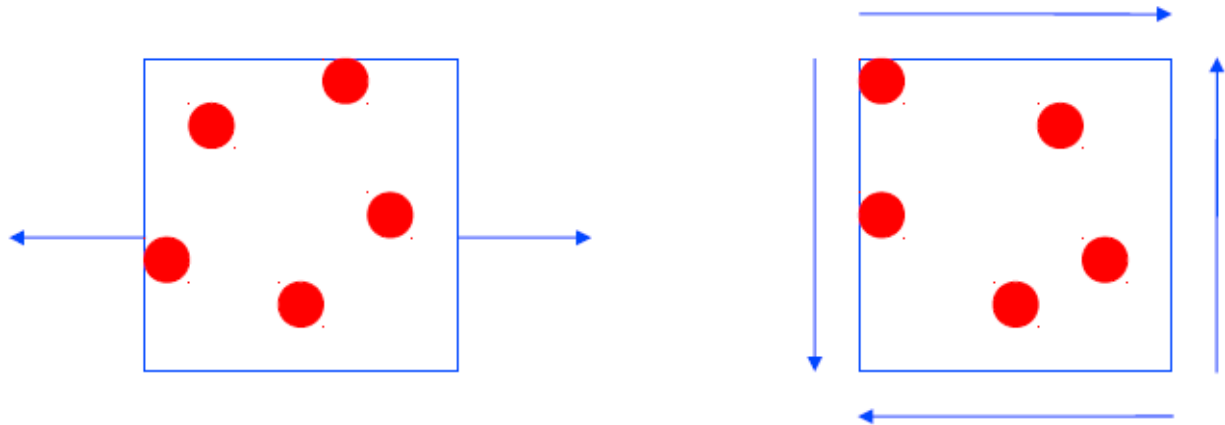


Figura 12. Distribuciones de esferas dentro de un RVE sometido a Tensión y a Corte

3.2 Simulación del material heterogéneo

Los programas comerciales de simulación no cuentan con rutinas determinadas para la simulación de materiales heterogéneos siendo necesario desarrollar subrutinas escritas en algún lenguaje de programación compatible con el software de simulación seleccionado.

Las subrutinas se ejecutan por medio de un programa intermedio llamado intérprete, en lugar de compilar el código a lenguaje máquina que pueda comprender y ejecutar directamente una computadora.

Como se ha mencionado anteriormente, en este trabajo de investigación se utilizó el software de simulación, ABAQUS y la subrutina donde se define el RVE se escribió en el lenguaje de programación Python.

3.2.1 Lenguaje de programación Python

Python es un lenguaje de programación que fue creado por Guido van Rossum, a principios de los años 90. El nombre del lenguaje fue inspirado en el grupo de cómicos ingleses “Monty Python”. Este lenguaje tiene similitudes con el lenguaje Perl [32].

Python es utilizado para la creación de subrutinas, ya que cuenta con las siguientes características: tipado dinámico, fuertemente tipado, multiplataforma y orientado a los objetos. Este lenguaje de script, con tipado dinámico, fuertemente tipado, multiplataforma y orientado a los objetos [32].

El tipado dinámico se refiere a que Python no necesita declarar el tipo de datos que va a contener cada variante. Se define que su tipo se determinará en tiempo de ejecución según el tipo de valor que se le asigne, el tipo de variable puede cambiar si se asigna un valor de otro tipo [26].

La característica de fuertemente tipado se refiere a que no se puede tratar una variable como si fuera de un tipo distinto, se necesita convertir de forma explícita la variable al nuevo tipo.

Python está disponible en multitud de plataformas, por lo que si no se utilizan las librerías específicas de cada plataforma nuestro programa podrá ser usado en diferentes sistemas sin cambios. Además, Python permite programación imperativa, funcional y orientada a aspectos [32].

3.3 Escritura de la subrutina

Como se ha mencionado anteriormente, la escritura de la subrutina fue en Python. ABAQUS/CAE provee una interface gráfica de usuario que le permite al usuario crear un modelo de elemento finito que puede ser analizado en ABAQUS Standard. Para cada acción en CAE, hay un comando correspondiente de subrutina en Python que el programa usa cuando se crea un modelo. Si el lenguaje es suficientemente bien entendido, un modelo entero puede ser creado simplemente corriendo un archivo subrutina [33].

ABAQUS provee varios métodos sencillos para generar automáticamente los comandos Python. Cuando se crea un modelo en CAE, dos archivos son creados en el directorio de trabajo. El archivo rpy (replay file) recolecta cada acción realizada en CAE, incluyendo los movimientos del modelo y los errores resultantes. El archivo rpy graba solo los comandos necesario para recrear el modelo. En el caso que ocurriera un error y CAE se cerrara sin guardar los cambios, el archivo rpy puede ser ejecutado para recrear el modelo. Si el modelo es guardado, CAE usa el rpy para crear un archivo de bitácora (journal file). El journal file es un subrutina que muestra todo el trabajo guardado en el modelo. El rpy y el journal file proveen una alternativa fácil para escribir scripts en Python [33].

Para comenzar a escribir una subrutina en Python lo primero que se debe hacer es llamar a las bibliotecas que se utilizaran durante la creación del modelo en la interface del programa.

En este caso las bibliotecas usadas fueron las siguientes:

```
from part import *
from material import *
from section import *
from assembly import *
from step import *
from interaction import *
from load import *
from mesh import *
from Job import *
from sketch import *
from visualization import *
from connectorBehavior import *
import regionToolset
import random
import math
```

Una vez definidas las bibliotecas necesarias para la ejecución de la subrutina, se creó un archivo de texto en el cual se concentrará la información necesaria para los cálculos del modelo.

#File Output

```
text_file = open("/local/work/gluege/mario/Deformationspheres1.txt", "a")
text_file = open("C:/Users/armando/Documents/Resultados nuevos/1esfera.txt", "a")
```

Para llamar los comandos del ABAQUS se sigue una secuencia parecida a un árbol en la que vemos el comando al cual queremos llegar, como se ilustra en la Figura 13.

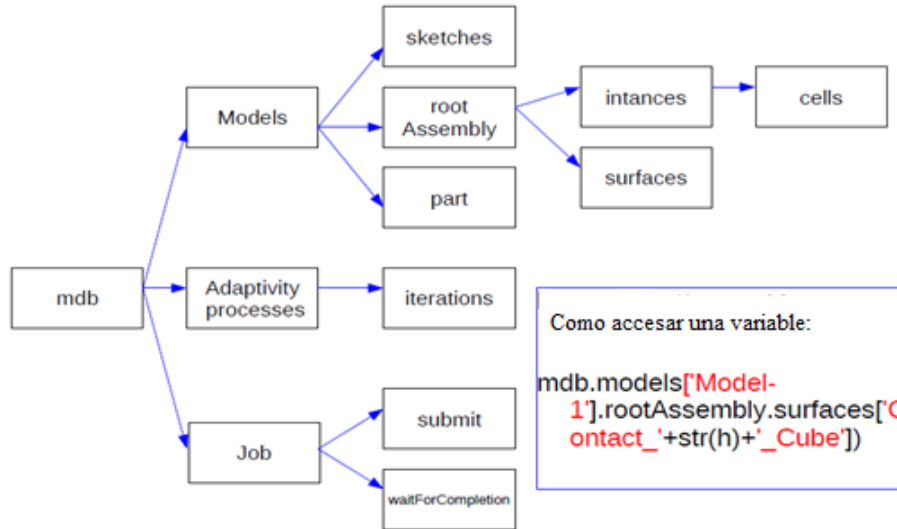


Figura 13. Árbol para llamar una variable en ABAQUS desde la subrutina.

3.3.1 Creación de la geometría y malla.

a) Creación del cubo

A continuación, se enlista los comandos utilizados para la creación de la subrutina que definen el cubo con medidas 1x1x1 empleado para la representación del material heterogéneo. La Figura 14 muestra la geometría resultante de esta subrutina.

`#Create Cube`

```

mdb.models['Model-1'].ConstrainedSketch(name='__profile__', sheetSize=200.0)
mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].rectangle(point1=(0.0, 0.0), point2=(1.0, 1.0))
mdb.models['Model-1'].Part(dimensionality=THREE_D, name='Part-1', type=DEFORMABLE_BODY)
mdb.models['Model-1'].parts['Part-1'].BaseSolidExtrude(depth=1.0, sketch=mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'])
del mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__']
  
```

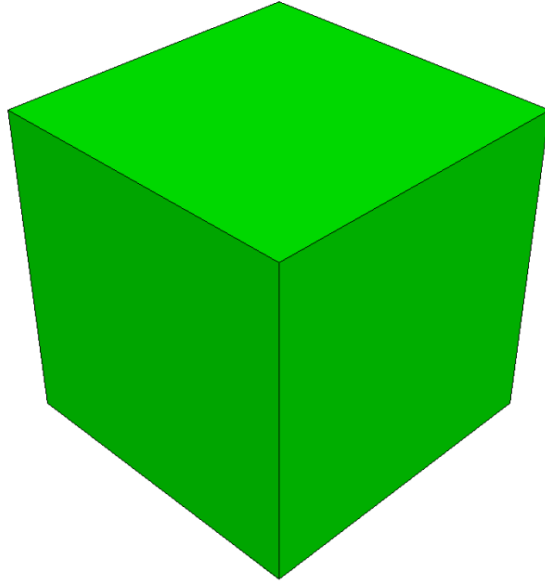



Figura 14. Imagen del cubo creado con dimensiones de 1x1x1

b) Creación de las esferas

Para la creación de las esferas, se toma en consideración que el volumen de las esferas (independientemente del número que estas sean) es el 20% del total del volumen del cubo.

Con esta consideración procedemos a determinar el número de esferas “n” que estarán dentro del cubo. Conociendo el número de esferas el programa calculará el radio de cada esfera. Siguiendo los siguientes comandos, en el que “n” es el número de esferas más uno, por lo que si le asigna el valor de 5 a “n”, las esferas que serán creadas serán 4. Esto es por que Python empieza a contar a partir de cero y de esta forma lo hacemos empezar de uno.

Al obtener el radio y el número de esferas se crearan “n” esferas de igual tamaño. Como la que se observa en la Figura 15.

```
#Number of Spheres + 1  
n = 5  
text_file.write("Number of Spheres: " + str(n-1) + "\n")
```

```
#Radius of one sphere  
r = (3*0.20)/(4*math.pi*(n-1))
```

```
r = r**(1.0/3.0)
print "Sphere Radius is " + str(r)
```

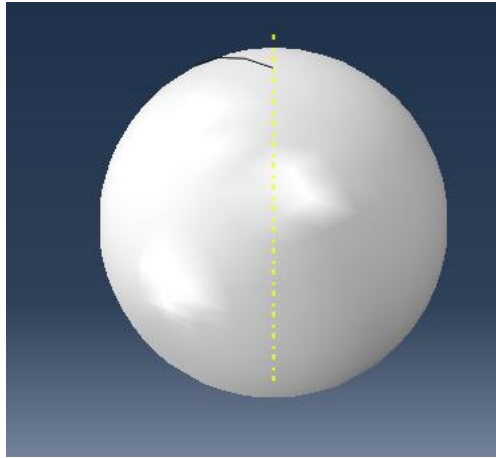


Figura 15. Esfera vista en la interfase de ABAQUS

A continuación se muestran los comandos necesarios para crear las esferas, conociendo el radio de cada una. Como se observa se puede ver que se creó la esfera como un sólido de revolución mediante un arco, donde se usan los valores del radio de las esferas para los dos extremos del arco y posteriormente revolucionarlo 360 grados.

#Create Sphere

```
mdb.models['Model-1'].ConstrainedSketch(name='__profile__', sheetSize=200.0)
mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].ConstructionLine(point1=(0.0, -100.0), point2=(0.0, 100.0))
mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].FixedConstraint(entity=mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].geometry[2])
mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].ArcByCenterEnds(center=(0.0, 0.0), direction=CLOCKWISE, point1=(0.0, -r), point2=(0.0, r))
mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].Line(point1=(0.0, -r), point2=(0.0, r))
mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].VerticalConstraint(entity=mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].geometry[4])
mdb.models['Model-1'].Part(dimensionality=THREE_D, name='Part-2', type=DEFORMABLE_BODY)
mdb.models['Model-1'].parts['Part-2'].BaseSolidRevolve(angle=360.0, flipRevolveDirection=OFF, sketch=mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'])
del mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__']
```

c) Mallado del modelo

El mallado del modelo es por medio de tetraedros, los cuales fueron utilizados para mallar todo el modelo. Se utilizó una malla con tetraedros por que fue la más indicada y fácil de usar para el RVE. Ya que los otros tipos de malla traían complicaciones al momento de hacer coincidir los nodos dentro del cubo con los nodos de las esferas.

A continuación se detallan los comandos utilizados para crear la malla, así como que tan fina será la malla del modelo. También se utilizan ciclos en los que se van mallando cada una de las partes que contiene el modelo. Para obtener una malla como la mostrada en la Figura 16.

```
seeddist=0.071985297
#Seeds
for j in range(1, n):
    mdb.models['Model-1'].rootAssembly.seedPartInstance(deviationFactor=0.1,
    regions=(mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Sphere_' + str(j)], ), size=
    seeddist)
```

Por ejemplo en el caso de las esferas se hace de la siguiente manera en el script, donde “n” representa el número de esferas en el modelo.

```
#Seeds
for j in range(1, n):
    mdb.models['Model-1'].rootAssembly.seedPartInstance(deviation Factor=0.1,
    regions=(mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Sphere_' + str(j)],), size= seeddist)
#Mesh
for k in range(1, n):
    mdb.models['Model-1'].rootAssembly.setMeshControls(allowMapped=TRUE, elemShape=
    TET, regions=mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Sphere_'
    +str(k)].cells.getSequenceFromMask(['#1'], ), ), technique=FREE)
    mdb.models['Model-1'].rootAssembly.generateMesh(regions=(
    mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Sphere_' + str(k)], ))
```

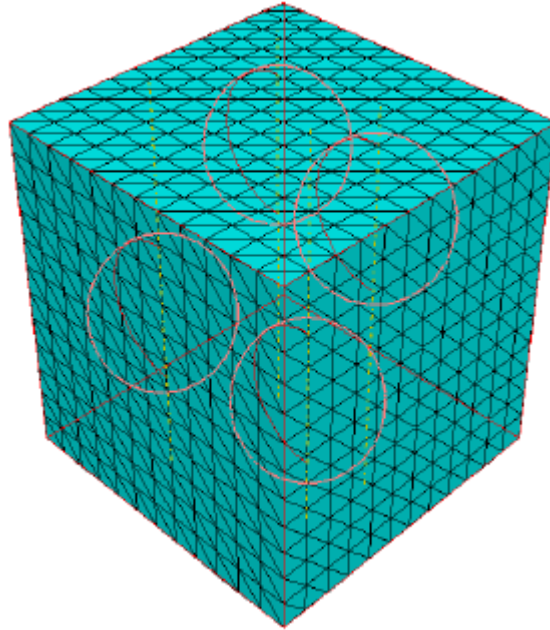


Figura 16. RVE de 4 esferas mallado

3.3.2 Propiedades de los materiales y condiciones fronteras del modelo.

a) Posición de las esferas dentro del RVE

Las esferas deben estar distribuidas de tal forma en la que se toquen entre ellas o con las paredes del cubo pero no pueden ser interceptadas entre ellas así como tampoco con las paredes del cubo. Esto para que se pueda obtener una buena simulación al comportamiento que se tendría en el material heterogéneo.

Por lo que se aplica un ciclo para posicionar cada una de las esferas en un lugar distinto en el cubo, donde cada posición de cada una de las esferas es registrada en el archivo de texto. Dentro de esta parte de la subrutina es aplicada las condiciones de posición, basándose en la medida de los radios, midiendo las posiciones entre ellas en donde debe de existir como minimo entre ellas una distancia de dos veces r .

```

#Create n instances of the sphere
- for i in range(1, n):
  InstanceName = 'Sphere_' + str(i)
  print InstanceName
  text_file.write(InstanceName)
#Maximum tries to distribute sphere
maxTries = 100000
while len(sphereList) < i:
  maxTries -= 1
  if maxTries < 1:
    print "Maximum Distribution tries exceeded. Error! Restart the Script!"
    break;
#Make sure Spheres dont cut cube sides
vecPosition = [r+(random.random()*(1.0-r-r)),r+(random.random()*(1.0-r-r)),r+(random.random()*(1.0-r-
r))]
for pos in sphereList:
  if euclidean_py(pos, vecPosition) < 2.0*r:
    break
else:
  sphereList.append(vecPosition)
  print vecPosition
  text_file.write("\t" + str(vecPosition) + "\n")
#Instantiate Sphere
mdb.models['Model-1'].rootAssembly.Instance(dependent=OFF, name=InstanceName,
part=mdb.models['Model-1'].parts['Part-2'])
#Translate Instance of Sphere
mdb.models['Model-1'].rootAssembly.translate(instanceList=(InstanceName, ),
vector=vecPosition)
sphereInstancesList.append(mdb.models['Model1'].rootAssembly.instances[InstanceName])

```

Al obtener la posición adecuada y no repetida de las esferas, con este vector de posición se hace un corte por cada esfera que contendrá el RVE. Se realiza un corte por cada esfera, y posteriormente se posiciona una esfera del otro material componente en esta posición, como se puede observar en la Figura 17.

```

#Cut all spheres with cube

```

```

mdb.models['Model-1'].rootAssembly.PartFromBooleanCut(cuttingInstances=(
sphereInstancesList ),
instanceToBeCut=mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['tmpCube'],
name='Part-3')
#Intantiate Cut Object
mdb.models['Model-1'].rootAssembly.Instance(dependent=OFF, name='Cube',
part=mdb.models['Model-1'].parts['Part-3'])

```

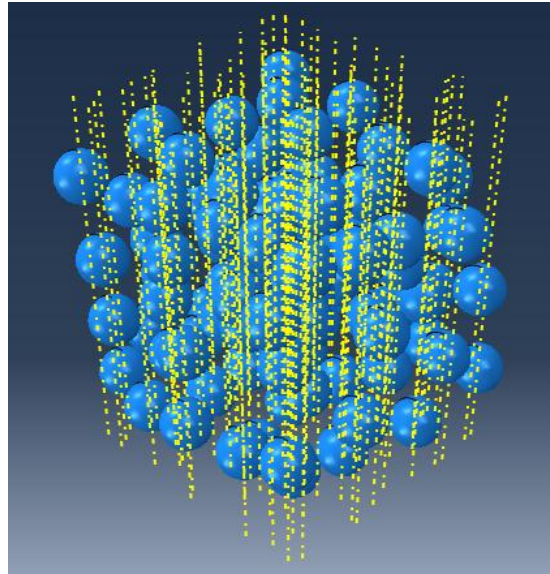


Figura 17. Distribución de las esferas dentro del RVE

b) Definición del material

Una de las partes más importantes de la subrutina es la definición de los materiales constituyentes. Ya que estas características son las que darán el comportamiento del material que estamos examinando. Estas propiedades son definidas individualmente, donde primero son definidas las propiedades del cubo y posteriormente las propiedades de las esferas. Las propiedades que se le asignaron a cada uno de los materiales fueron el modulo de Young y la razón de Poisson.

El modulo de Young (E) se define como la pendiente de la curva esfuerzo-deformación en la zona elástica (ver Figura 18) [34]:

$$\sigma = E\varepsilon. \quad (3.1)$$

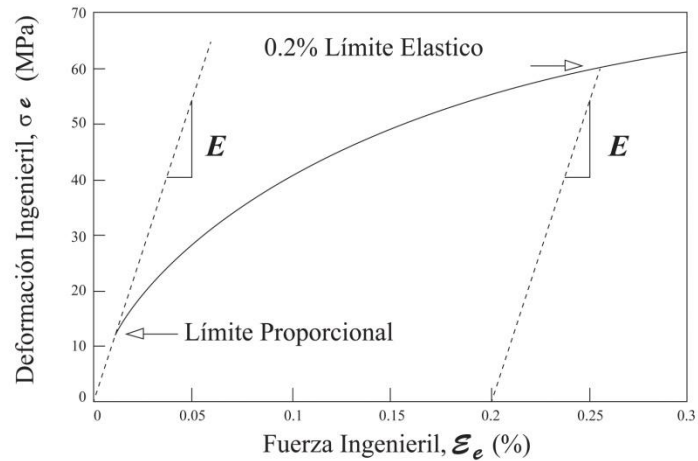


Figura 18. Curva esfuerzo deformación [35].

Mientras que la razón de Poisson se define como la relación de la deformación lateral y la contracción lineal [36]:

$$\nu = - \frac{\epsilon(\text{lateral})}{\epsilon(\text{longitudinal})} \quad (3.2)$$

#Materials

```

mdb.models['Model-1'].Material(name='Cubo')
mdb.models['Model-1'].materiales['Cubo'].Elastic(table=((27000.0, 0.2), ))
mdb.models['Model-1'].Material(name='Esfera')
mdb.models['Model-1'].materiales['Esfera'].Elastic(table=((270.0, 0.1), ))
mdb.models['Model-1'].HomogeneousSolidSection(material='Cubo', name='Cubo',
    thickness=1.0)
mdb.models['Model-1'].HomogeneousSolidSection(material='Esfera', name='Esfera',
    thickness=1.0)
mdb.models['Model-1'].parts['Part-1'].SectionAssignment(offset=0.0, region=Region(
    cells=mdb.models['Model-1'].parts['Part-1'].cells.getSequenceFromMask(mask=('[#1 ]', ), )),
    sectionName='Cubo')
mdb.models['Model-1'].parts['Part-2'].SectionAssignment(offset=0.0, region=Region(
    cells=mdb.models['Model-1'].parts['Part-2'].cells.getSequenceFromMask(mask=('[#1 ]', ), )),
    sectionName='Esfera')
mdb.models['Model-1'].parts['Part-3'].SectionAssignment(offset=0.0, region=Region(

```

```
cells=mdb.models['Model-1'].parts['Part-3'].cells.getSequenceFromMask(mask=('[#1 ]', ), ),
sectionName='Cubo')
```

c) Creación de los contactos entre las superficies

Para asegurar un correcto comportamiento en el modelo del RVE, se crean las superficies entre las esferas y el cubo. Ya que de lo contrario el comportamiento del modelo sería como si existieran dos modelos independientes, por lo que es necesario ejecutar esta acción. La Figura 19 muestra como se define esta acción dentro la interface de ABAQUS.

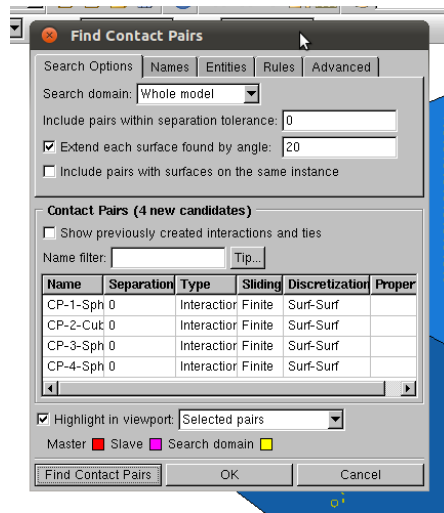


Figura 19. Vista de ABAQUS encontrando los contactos entre las partes

Para crear estas superficies, se deben de encontrar los contactos entre las partes. Para realizar esta acción ABAQUS usa el comando “getSequenceFromMask(...)”. Este método regresa los objetos en un arreglo de celdas identificados usando una máscara específica. Este comando es generado cuando las opciones de bitácora son definidas a COMPRESSESEDINDEX. Este método es muy eficiente, cuando están envueltos un gran número de objetos.

Al escribir el script, se tuvo un problema con este comando ya que pedía la máscara siguiente para poder realizar la acción de encontrar el contacto entre las partes. El problema se debía a que se encontraban las partes de cada una de las esferas, pero en el script estaba por medio de ciclos, los cuales dependían del número de esferas incluidas en el modelo.

Para solucionar este problema con el comando “getSequenceFromMask(...)” se indico el nombre de cada superficie en el modelo así como la posición de cada una en el script.

#Create surfaces

```
mdb.models['Model-1'].rootAssembly.regenerate()
mdb.models['Model-1'].StdContactControl(automaticTolerances=ON, name=
'Contacto')
for h in range(1,n):
    print "Find Contact Surface on " + 'Contact_'+str(h)+'_Sphere_' + str(h)
    mdb.models['Model-1'].rootAssembly.Surface(name='Contact_'+str(h)
+'_Sphere_' + str(h), side1Faces=
mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Sphere_'+str(h)].faces)
    mdb.models['Model-1'].rootAssembly.Surface(name='Contact_'+str(h)
+'_Cube', side1Faces=
mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Cube'].faces)
```

Tras la creación de las superficies, se procede a la atadura de estas superficies para así tener un buen funcionamiento a la hora de realizar la simulación de las condiciones de tracción o de desplazamiento. Así se obtendrán resultados correctos de la simulación ya que las esferas y el cubo se moverán de acuerdo a la reacción apropiada del modelo hacia las condiciones aplicadas al RVE. La Figura 20. Muestra la imagen de la interfase para crear los contactos entre las partes.

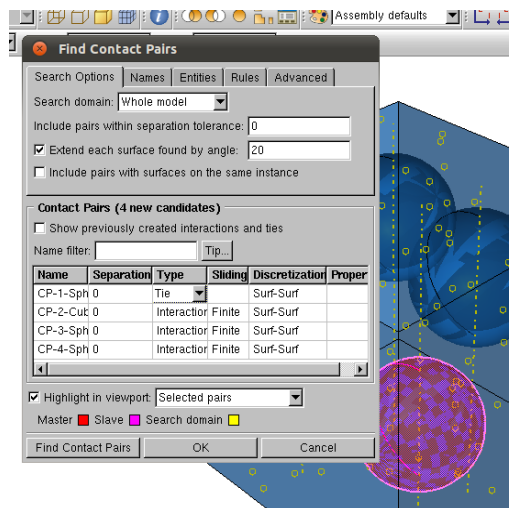


Figura 20. Vista de ABAQUS estableciendo los contactos entre las esferas y el cubo

d) Condiciones de borde del RVE

La siguiente parte del script, consta de las condiciones de borde del RVE. Estas condiciones de borde para el caso de las condiciones de tracción, fueron tres diferentes. El primero fue un encastre y otros dos puntos que fijan al RVE, para que no pueda girar al aplicarles los esfuerzos de corte, estos puntos y el encastre pueden ser observados en la Figura 21.

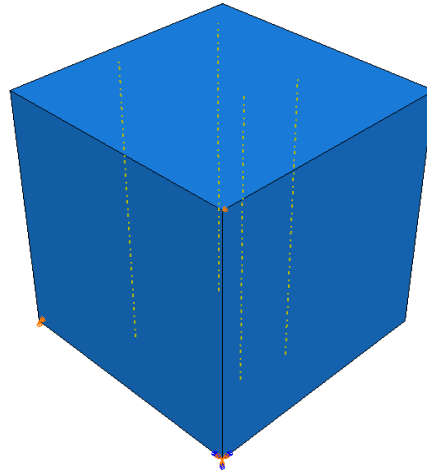


Figura 21. Puntos fijos en los vértices del RVE

Los comandos necesarios para establecer las condiciones frontera en cada una de las partes necesarias en el RVE, son las siguientes:

#Boundary conditions

```
mdb.models['Model-1'].EncastreBC(createStepName='Initial', name='Parte fija',
region=Region(
vertices=mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Cube'].vertices.getSequenceFromMask(
mask=('[#40]', ), ))
a = mdb.models['Model-1'].rootAssembly
v1 = a.instances['Cube'].vertices
verts1 = v1.getSequenceFromMask(mask=('[#1 ]', ), )
region = regionToolset.Region(vertices=verts1)
mdb.models['Model-1'].DisplacementBC(name='BC-2', createStepName='Initial',
region=region, u1=UNSET, u2=SET, u3=SET, ur1=UNSET, ur2=UNSET,
```

```

ur3=UNSET, amplitud=UNSET, distributionType=UNIFORM, fieldName="",
localCsys=None)
a = mdb.models['Model-1'].rootAssembly
v1 = a.instances['Cube'].vertices
verts1 = v1.getSequenceFromMask(mask=('[#10 ]', ), )
region = regionToolset.Region(vertices=verts1)
mdb.models['Model-1'].DisplacementBC(name='BC-3', createStepName='Initial',
region=region, u1=UNSET, u2=UNSET, u3=SET, ur1=UNSET, ur2=UNSET,
ur3=UNSET, amplitud=UNSET, distributionType=UNIFORM, fieldName="",
localCsys=None)

```

Con las condiciones de borde definidas se pueden aplicar las condiciones de tracción. Estas condiciones fueron aplicadas una por una para cada distribución de esferas. De modo que para cada caso de acomodo de esferas es sometida a 6 diferentes casos de esfuerzos. Primero se someten a los esfuerzos de tensión (como lo muestra la Figura 22) y después son aplicados los esfuerzos de corte (como se puede observar en la Figura 23). Posteriormente las cargas son borradas para así poder aplicar las otras cargas y realizar el Job correctamente. Lo cual se puede observar en los siguientes comandos donde es definida cada una de estas partes.

#Load

```

mdb.models['Model-1'].StaticStep(name='Step-1', previous='Initial')
mdb.models['Model-1'].fieldOutputRequests['F-Output-1'].setValues(variables=(
'S', 'PE', 'PEEQ', 'PEMAG', 'LE', 'U', 'RF', 'CF', 'CSTRESS', 'CDISP',
'EVOL'))
mdb.models['Model-1'].Pressure(amplitud=UNSET, createStepName='Step-1',
distributionType=UNIFORM, field="", magnitud=-100.0, name='Tensionx',
region=Region(
side1Faces=mdb.models['Model-
1'].rootAssembly.instances['Cube'].faces.getSequenceFromMask(
mask=('[#4 ]', ), )))
mdb.models['Model-1'].Pressure(amplitud=UNSET, createStepName='Step-1',
distributionType=UNIFORM, field="", magnitud=-100.0, name='Tensionx2',
region=Region(
side1Faces=mdb.models['Model-
1'].rootAssembly.instances['Cube'].faces.getSequenceFromMask(
mask=('[#1 ]', ), )))

```

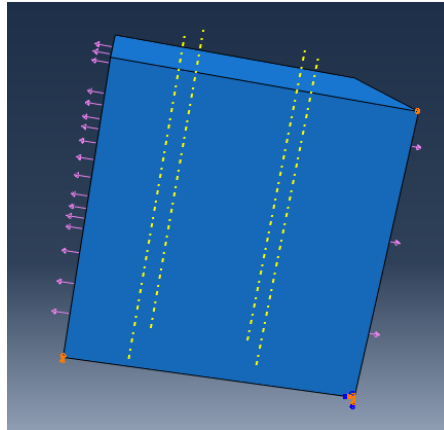


Figura 22. Tensión aplicada en el eje “X”

```

mdb.models['Model-1'].SurfaceTraction(createStepName='Step-1', directionVector=
    ((1.0, 0.0, 0.0), (1.0, 1.0, 0.0)), distributionType=UNIFORM, field="",
    localCsys=None, magnitude=100.0, name='Load-1', region=Region(
    side1Faces=mdb.models['Model-
1'].rootAssembly.instances['Cube'].faces.getSequenceFromMask(
    mask=('[#4 ]', ), )))

```

```

mdb.models['Model-1'].SurfaceTraction(createStepName='Step-1', directionVector=
    ((0.0, 1.0, 0.0), (1.0, 1.0, 0.0)), distributionType=UNIFORM, field="",
    localCsys=None, magnitude=100.0, name='Load-2', region=Region(
    side1Faces=mdb.models['Model- 1'].rootAssembly.instances['Cube'].faces.getSequenceFromMask(
    mask=('[#2 ]', ), )))

```

```

mdb.models['Model-1'].SurfaceTraction(createStepName='Step-1', directionVector=
    ((0.0, 1.0, 0.0), (0.0, 0.0, 0.0)), distributionType=UNIFORM, field="",
    localCsys=None, magnitude=100.0, name='Load-3', region=Region(
    side1Faces=mdb.models['Model- 1'].rootAssembly.instances['Cube'].faces.getSequenceFromMask(
    mask=('[#1 ]', ), )))

```

```

mdb.models['Model-1'].SurfaceTraction(createStepName='Step-1', directionVector=
    ((1.0, 0.0, 0.0), (0.0, 0.0, 0.0)), distributionType=UNIFORM, field="",
    localCsys=None, magnitude=100.0, name='Load-4', region=Region(
    side1Faces=mdb.models['Model- 1'].rootAssembly.instances['Cube'].faces.getSequenceFromMask(
    mask=('[#8 ]', ), )))

```

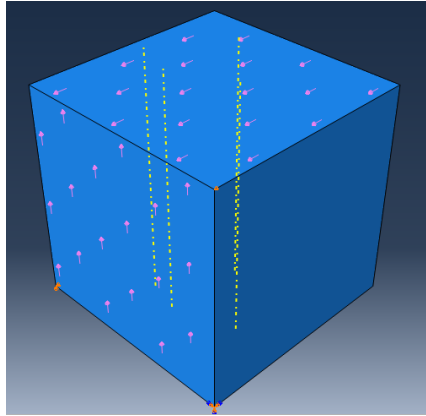


Figura 23. Corte aplicado en el eje “Y” y “Z”

Aquí se indican las instrucciones para borrar las fuerzas aplicadas en el caso del corte.

`#Delete load`

```
del mdb.models['Model-1'].loads['Load-1']
del mdb.models['Model-1'].loads['Load-2']
del mdb.models['Model-1'].loads['Load-3']
del mdb.models['Model-1'].loads['Load-4']
```

3.3.2 Obtención de resultados

a) Almacenamiento de datos

Para manejar los datos fácilmente. Se tomaron los datos de: número de esferas, posición de cada una de las esferas y el valor de S (compliance) en un archivo de texto para el fácil manejo de estos. Y posteriormente realizar los cálculos necesarios.

Estos datos fueron almacenados en una tabla para agilizar su manejo. Además para utilizarlos en Excel para generar las gráficas necesarias para probar la propuesta.

`#Write Table Header`

```
text_file.write("\nTX\tTY \tTZ\tSXY\tSXZ\tSYZ\n")
row_e11 = "e11"
row_e22 = "e22"
row_e33 = "e33"
```

```

row_e12 = "e12"
row_e13 = "e13"
row_e23 = "e23"
row_vol = "\nvol"

```

Esta tabla es creada con todos los datos. Tras cada realización de cada RVE, es agregada una línea con el componente de esfuerzo promedio, por cada carga de tracción aplicada.

b) Ejecutar la subrutina

Para la correcta ejecución de la subrutina, se efectúan las siguientes instrucciones en ella.

```

# Job
mdb.Job(contactPrint=OFF, description="", echoPrint=OFF, explicitPrecision=
    SINGLE, historyPrint=OFF, model='Model-1', modelPrint=OFF,
    multiprocessingMode=DEFAULT, name='Job-4', nodalOutputPrecision=SINGLE,
    numCpus=1, numDomains=1, parallelizationMethodExplicit=DOMAIN, preMemory=
    256.0, scratch="", standardMemory=256.0, standardMemoryPolicy=MODERATE,
    type=ANALYSIS, userSubroutine="")
mdb.jobs['Job-4'].submit(consistencyChecking=OFF)
mdb.jobs['Job-4'].waitForCompletion()

```

En las instrucciones anteriores se especifican las características necesarias para realizarlo correctamente. Así como es muy importante usar la última instrucción “waitForCompletion()”, ya que si no se utiliza esta orden el script continúa sin esperar a que el “Job” sea terminado por lo que al acceder a los resultados de la simulación no serían correctos o no existirían.

```

if str(mdb.jobs['Job-4'].status)!='COMPLETED':
    print("JOB RECONOCIDO COMO ----- NO COMPLETED -----")
if str(mdb.jobs['Job-4'].status)=='COMPLETED':
    print("JOB RECONOCIDO COMO COMPLETED, COMIENZA EVALUACION")

# count elements

nele_cube=len(mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Cube'].elements)

```

```

nele_tot=nele_cube
for k in range(1, n):
    sphere_neleList.append(len(mdb.models['Model-
1'].rootAssembly.instances['Sphere_' + str(k)].elements))
    nele_tot=nele_tot+len(mdb.models['Model-1'].rootAssembly.instances['Sphere_'
+ str(k)].elements)

```

Para evitar errores en la secuencia del script, se usaron los condicionales mostrados anteriormente, en los que se especifica que si el “Job” fue realizado correctamente se continua con la siguiente parte del script, la parte en la que se van aplicando las fuerzas una a una y haciendo la evaluación correspondiente. En el caso de que no se pueda completar correctamente, el script salta hacia una nueva distribución de esferas. De este modo se evita que el script pare y se interrumpa la simulación para las distintas posiciones de las esferas.

También se muestra la parte en la que son contados los elementos que constituyen a nuestro modelo. Y así comprobar su correcta ejecución.

c) Obtención y manejo de datos

Ya que se realizó correctamente la simulación se procede a entrar a los resultados, a estos datos se accede por medio de el archivo “.odb” correspondiente a la ejecución realizada, esto es necesario para llenar la tabla de datos:

```

# open ODB

o1 = session.openOdb(name='/local/work/gluege/mario/Job-4.odb')
session.viewports['Viewport: 1'].setValues(displayedObject=o1)
odb = session.odbs['/local/work/gluege/mario/Job-4.odb']

```

Para un acceso más rápido a la información contenida en el archivo .odb, se tomo la igualdad de o1 así como la de odb. Esto ayuda a disminuir el tiempo de acceso considerablemente. Al

realizar estas igualdades es necesario especificar correctamente la ubicación de los archivos odb en el sistema. Así como indicar bien la secuencia de comandos en cada una de estas.

```
# take the sum
```

```
vol_total=0.0
```

```
e11_avg=0.0
```

```
e22_avg=0.0
```

```
e33_avg=0.0
```

```
e12_avg=0.0
```

```
e13_avg=0.0
```

```
e23_avg=0.0
```

```
acceder_E=odb.steps['Step-1'].frames[1].fieldOutputs['E']
```

```
acceder_vol=odb.steps['Step-1'].frames[1].fieldOutputs['EVOL']
```

```
for k in range(1,nele_tot+1):
```

```
    e11_ele=acceder_E.values[k-1].data[0]
```

```
    e22_ele=acceder_E.values[k-1].data[1]
```

```
    e33_ele=acceder_E.values[k-1].data[2]
```

```
    e12_ele=acceder_E.values[k-1].data[3]
```

```
    e13_ele=acceder_E.values[k-1].data[4]
```

```
    e23_ele=acceder_E.values[k-1].data[5]
```

```
    volele=acceder_vol.values[k-1].data
```

```
    e11_avg=e11_avg+volele*e11_ele
```

```
    e22_avg=e22_avg+volele*e22_ele
```

```
    e33_avg=e33_avg+volele*e33_ele
```

```
    e12_avg=e12_avg+volele*e12_ele
```

```
    e13_avg=e13_avg+volele*e13_ele
```

```
    e23_avg=e23_avg+volele*e23_ele
```

```
    vol_total=vol_total+volele
```

Se declaran las variables de los esfuerzos promedio para después. Declarando variables de los esfuerzo de elementos se acceda a los valores después de la simulación en el archivo odb. Creando un ciclo para el número total de elementos que constituyen el modelo.

Posteriormente se realizan las operaciones necesarias para poder obtener los esfuerzos promedio, donde interviene el volumen del elemento así como los esfuerzos de cada uno de los elementos.

Para corroborar los resultados de las operaciones y simulaciones se agrego también el resultado del volumen total del modelo. Donde este valor del volumen debe ser 1, por las longitudes del cubo y el valor de la suma de las esferas y el cubo.

Así para cada caso de carga distinta se va agregando al archivo de texto y en este caso a la tabla correspondiente a esta distribución, los resultados obtenidos para esta distribución de esferas y para cada caso en que se aplican las diferentes cargas.

```
row_vol += "\t" + str(vol_total)
row_e11 += "\t" + str(e11_avg)
row_e22 += "\t" + str(e22_avg)
row_e33 += "\t" + str(e33_avg)
row_e12 += "\t" + str(e12_avg)
row_e13 += "\t" + str(e13_avg)
row_e23 += "\t" + str(e23_avg)
```

d) Número de ciclos que correrá la subrutina

El número de veces que se va a realizar el script para los 6 diferentes casos de esfuerzos de tensión y corte. El número es definido por el siguiente ciclo:

```
#For Loop for 100 Iteration
```

```
for e in range(1, 101):
    print('Realization '+ str(e))
```

En la instrucción anterior se especifica el número de veces que será realizada la simulación, como la simulación fue corrida 100 veces para cada número de esferas y puede haber errores.

Aunque con ayuda del condicionante la simulación continuara con la siguiente simulación. Por eso se recomienda que se le dé un número mayor de 100. Para así obtener fácilmente y sin problemas las cien simulaciones necesarias para realizar el cálculo con las matrices obtenidas. Además de la obtención de gráficas necesarias.

e) Manejo de resultados

Con la ayuda del software ABAQUS usado para resolver el problema del valor elastoestático de las condiciones de frontera. Se calculo la deformación promedio, teniendo en cuenta las siguientes condiciones. La Figura 24 muestra el esquema de los datos que se tienen asi como la matriz que se obtendrá.

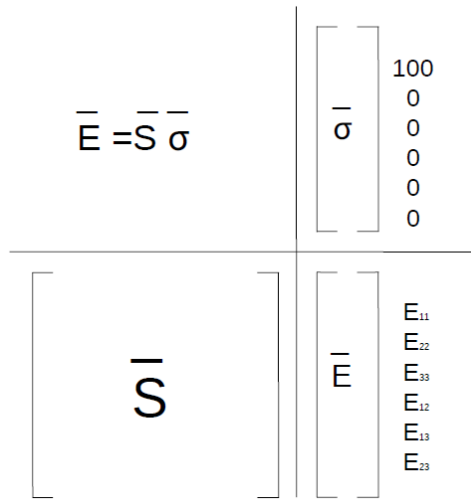


Figura 24. Esquema de la matriz a obtener (\bar{S})

El valor de $\sigma = 100$.

Así que para obtener el valor de S_{1111} , es necesario:

$$S_{1111} = E_{11}/100$$

e) Matriz promedio

Con los datos guardados en el archivo de texto cumpliendo con la condición anterior además de estar separados por matrices en la que hay una distribución específica de las esferas en el cubo

por cada matriz generada. Se calculó una matriz promedio en la que se calculó el promedio de las 100 diferentes posiciones de las esferas en el RVE.

Tabla 1. Datos generados en el archivo de texto del caso particular de 4 esferas, donde se muestra los valores obtenidos en cada matriz, el volumen total del RVE, así como la distribución de cada esfera en el caso.

| | |
|----------|---|
| Sphere_1 | [0.346786169216802, 0.572304636828233, 0.641992674749933] |
| Sphere_2 | [0.73989291808929, 0.74985289372323, 0.424818432947629] |
| Sphere_3 | [0.696267835110756, 0.280362941345803, 0.708930342475122] |
| Sphere_4 | [0.242444524081265, 0.357823648032975, 0.234716596285768] |

Sphere Radius is 0.228539074867

| | Tension X | Tension Y | Tension Z | C12 | C13 | C23 |
|-----|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| e11 | 0.00556144 | -0.00117097 | -0.00114402 | 2.94802e-05 | 4.68099e-05 | 2.61374e-05 |
| e22 | -0.00117066 | 0.0055842 | -0.0011856 | 7.17882e-05 | 3.98269e-05 | 0.00011778 |
| e33 | -0.00114439 | -0.00118574 | 0.00558461 | -5.73354e-05 | -5.58661e-05 | -0.00011574 |
| e12 | 3.004595e-05 | 7.20088e-05 | -5.70212e-05 | 0.01298889 | 0.00011235 | -5.62011e-05 |
| e13 | 4.577120e-05 | 4.03062e-05 | -5.48670e-05 | 0.0001119 | 0.01306885 | -9.98256e-05 |
| e23 | 2.651755e-05 | 0.00011844 | -0.00011602 | -5.69350e-05 | -9.98698e-05 | 0.01315483 |

Vol. 1.00014109 1.00014109 1.00014109 1.00014109 1.00014109 1.00014109

Number of Spheres: 4

| | |
|----------|---|
| Sphere_1 | [0.325726087023519, 0.235089345714786, 0.469199079126906] |
| Sphere_2 | [0.445892379102349, 0.672054500825216, 0.646454448723364] |
| Sphere_3 | [0.688137196942771, 0.436287783782741, 0.25810006492542] |
| Sphere_4 | [0.768271299400736, 0.265037667307359, 0.711423455719125] |

Sphere Radius is 0.228539074867

| | Tension X | Tension Y | Tension Z | C12 | C13 | C23 |
|-----|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| e11 | 0.00558302 | -0.00115885 | -0.00119253 | -6.61455e-05 | -4.72973e-05 | 2.293418e-05 |
| e22 | -0.00115893 | 0.00559262 | -0.00114897 | 1.908068e-05 | 5.456555e-06 | -0.0001205 |
| e33 | -0.00119304 | -0.00114893 | 0.00558233 | 2.828854e-05 | 6.256293e-05 | 9.631172e-05 |
| e12 | -6.62546e-05 | 1.96791e-05 | 2.76943e-05 | 0.01315643 | 6.61713e-05 | 2.47239e-05 |
| e13 | -4.714417e-05 | 5.45027559384e-06 | 6.26584317877e-05 | 6.58725592529e-05 | 0.0131703 | 8.18125121515e-05 |
| e23 | 2.37190645922e-05 | -0.00012098 | 9.68850427219e-05 | 2.42982454523e-05 | 8.20058574528e-05 | 0.01335211 |

Al realizar la matriz promedio se obtuvo una matriz simetría con dos parámetros independientes debidos a la isotropía del material.

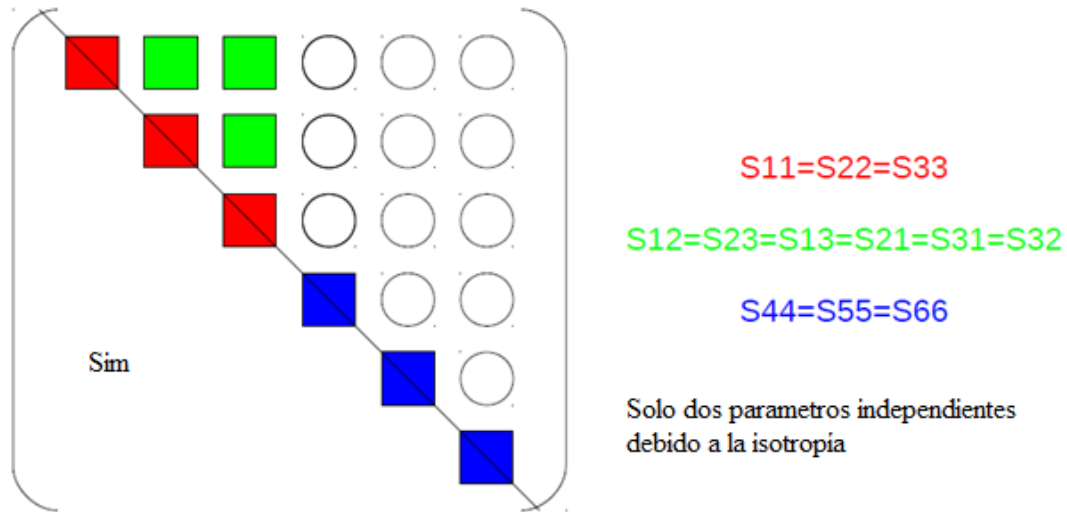


Figura 25. Esquema de la matriz promedio obtenida, tras realizar las 100 evaluaciones con distintas posiciones de las esferas.

| | Tensión X | Tensión Y | Tensión Z | Corte XY | Corte XZ | Corte YZ |
|-----|------------|------------|------------|-----------|-----------|-----------|
| e11 | 0.00531035 | -0.0010658 | -0.0010663 | 1.98E-05 | -4.17E-06 | 7.38E-06 |
| e22 | -0.0010663 | 0.00533089 | -0.0010733 | -1.17E-05 | 2.70E-06 | -4.82E-06 |
| e33 | -0.0010663 | -0.0010735 | 0.00531534 | 5.94E-07 | 1.45E-05 | -2.56E-06 |
| e12 | 1.99E-05 | -1.17E-05 | 6.36E-07 | 1.28E-02 | 3.25E-05 | 1.60E-05 |
| e13 | -3.97E-06 | 2.77E-06 | 1.44E-04 | 3.24E-05 | 1.27E-02 | 3.63E-05 |
| e23 | 7.37E-06 | -4.84E-06 | -2.54E-06 | 1.60E-05 | 3.63E-05 | 1.28E-02 |

Figura 26. Valores obtenidos para una matriz promedio usando cuatro esferas dentro del RVE.

De estos valores calculados, se obtuvieron los valores máximos y mínimos así como su valor promedio, para realizar las graficas correspondientes, además de dividirlos en clases para obtener su distribución.

CAPITULO 4. RESULTADOS

4.1 Introducción

El presente capítulo aborda los resultados obtenidos después de haber sido ejecutados las subrutinas escritas en lenguaje Python y ejecutados en la interfase ABAQUS. Las subrutinas crean un RVE, que representa a un material heterogéneo, compuesto con distintas esferas distribuidas aleatoria y homogenamente dentro de un cubo. En donde las esferas fueron definidas como aire y el cubo como concreto.

4.2 Matriz de esfuerzos y deformaciones promedio

Como se menciona en la sección 3.2.11 se realizaron distribuciones de las esferas presentes (1, 4, 8 y 16) en el modelo. Cada RVE fue sometido a seis diferentes condiciones de tracción. La Figura 27 muestra esquemáticamente las condiciones propuestas.

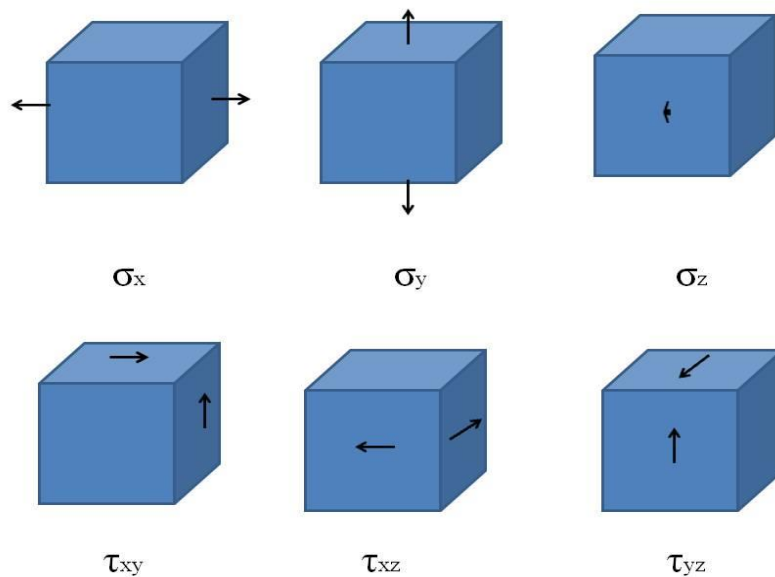


Figura 27. Las seis diferentes cargas de tracción aplicadas a cada RVE.

El resultado obtenido de cada ejecución del modelo RVE fue una columna de la matriz de esfuerzo deformación (ver sección 2.5.5.1). La figura 28, muestra la matriz obtenida en un RVE, que contenía 16 esferas en la que se le aplicaron las seis diferentes condiciones de tracción.

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & C_{16} \\ C_{21} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ C_{61} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \\ 2e_{xy} \\ 2e_{yz} \\ 2e_{zx} \end{bmatrix}$$

| | Tensión X | Tensión Y | Tensión Z | C12 | C13 | C23 |
|-----|------------|------------|------------|------------|------------|-----------|
| e11 | 0.00537428 | -0.0011060 | -0.0010747 | 1.45E-06 | -1.28E-05 | 2.45E-05 |
| e22 | -0.0011058 | 0.00538967 | -0.0011039 | -1.23E-05 | -8.02E-06 | -7.82E-05 |
| e33 | -0.0010747 | -0.0011041 | 0.00537692 | 8.96E-06 | 3.68E-05 | 3.70E-05 |
| e12 | 1.39E-06 | -1.23E-05 | 8.67E-06 | 0.01277433 | 1.68E-05 | 6.78E-06 |
| e13 | -1.25E-05 | -8.19E-06 | 3.66E-05 | 1.67E-05 | 0.01270664 | 6.28E-05 |
| e23 | 2.47E-05 | -7.83E-05 | 3.68E-05 | 6.84E-06 | 6.25E-05 | 0.0128813 |

Figura 28. Matriz esfuerzo-deformación tras una ejecución a un RVE con 16 esferas

Las condiciones coordenadas de las 16 esferas del ejemplo descrito en la Figura 26 se enlistan en la Tabla 2.

Una vez obtenidas las 100 diferentes matrices derivadas de las 100 diferentes distribuciones se calculó una matriz promedio para cada caso de número de esferas (1, 4, 8 y 16)

Para obtener un resultado estándar para cualquier tipo de distribución de esferas, se calculó una matriz promedio con las 100 diferentes ejecuciones realizadas en ABAQUS y con los resultados almacenados en el archivo de texto creado en la subrutina.

En la tabla 3 se puede observar que se cumple con lo esperado, ya que encontramos una matriz promedio simétrica. Además de que los valores coloreados en: rojo, azul y verde; son similares entre sí. También se observa que los valores restantes tienden a cero.

Tabla 2. Coordenadas de las esferas de un RVE con 16 esferas.

| Esfera | [x, y, z] |
|---------------|---|
| 1 | [0.651513840074725, 0.664777123440574, 0.240123719219176] |
| 2 | [0.484604331119333, 0.404218743695363, 0.483793226625894] |
| 3 | [0.168593982025704, 0.401800309361225, 0.323106099191227] |
| 4 | [0.151300691070031, 0.669019622853492, 0.683259312679456] |
| 5 | [0.26736150316327, 0.835017886815826, 0.280854668427475] |
| 6 | [0.674636637610113, 0.24869873890004, 0.648257305439184] |
| 7 | [0.612742978589717, 0.700005882504822, 0.582077469918886] |
| 8 | [0.416439469888278, 0.705443089768032, 0.818973544215565] |
| 9 | [0.842478073178175, 0.209046416404402, 0.403318030484623] |
| 10 | [0.194531565712475, 0.210314165019716, 0.547978669637106] |
| 11 | [0.624614917906628, 0.374630484351342, 0.213165667509562] |
| 12 | [0.372392136539148, 0.328183997494095, 0.796214912322007] |
| 13 | [0.847582462723861, 0.465665857911805, 0.553852466854419] |
| 14 | [0.650218038360112, 0.523870136468224, 0.828993752238144] |
| 15 | [0.382787205866978, 0.575166150602085, 0.16420380620416] |
| 16 | [0.793097309838774, 0.830402250900507, 0.80085563407825] |

Nota: El radio de la esfera es de 0.14397

Tabla 3. Matriz promedio calculada para 1,4, 8 y 16 esferas, tras 100 realizaciones en ABAQUS.

a)

| | TensiónX | TensiónY | TensiónZ | Corte XY | Corte XZ | Corte YZ |
|-----|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| e11 | 0.00570714 | -0.0012328 | -0.0012294 | 4.32E-006 | -4.62E-006 | -8.36E-007 |
| e22 | -0.0012324 | 0.00570065 | -0.0012282 | 2.13E-006 | 1.563E-06 | -1.31E-006 |
| e33 | -0.0012296 | -0.0012286 | 0.00569755 | -2.78E-006 | -2.03E-006 | 2.408E-06 |
| e12 | 4.32E-006 | 2.02E-006 | -2.91E-006 | 0.01355868 | -9.98E-007 | -2.87E-006 |
| e13 | -4.61E-006 | 1.61E-006 | -2.13E-006 | -2.181E-06 | 0.01353642 | 2.35E-005 |
| e23 | -7.17E-007 | -1.986E-06 | 3.24E-006 | -2.972E-06 | 2.36E-005 | 0.01352843 |

b)

| | TensiónX | TensiónY | TensiónZ | Corte XY | Corte XZ | Corte YZ |
|-----|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| e11 | 0.0055675 | -0.0011562 | -0.0011526 | -0.0000122 | 3.1755E-06 | 2.5178E-06 |
| e22 | -0.001155 | 0.00556738 | -0.0011559 | 3.49E-007 | 3.07E-006 | 1.96E-006 |
| e33 | -0.001152 | -0.0011561 | 0.00556801 | 3.045E-06 | -3.52E-006 | 2.65E-006 |
| e12 | -1.225E-05 | 2.75E-07 | 3.05E-006 | 0.01325534 | 1.53E-005 | 1.28E-005 |
| e13 | 3.177E-06 | 3.11E-006 | -3.45E-006 | 1.53E-005 | 0.01323892 | -4.89E-007 |
| e23 | 2.67E-006 | 1.91E-006 | 2.69E-006 | 1.29E-005 | -3.53E-007 | 0.01323765 |

c)

| | TensiónX | TensiónY | TensiónZ | Corte XY | Corte XZ | Corte YZ |
|-----|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| e11 | 0.00542027 | -0.0010981 | -0.0010981 | 8.52E-006 | -1.86E-006 | 1.16E-008 |
| e22 | -0.0010997 | 0.00547272 | -0.0010776 | -3.61E-005 | 5.06E-005 | 7.26E-007 |
| e33 | -0.0010983 | -0.0010964 | 0.00541053 | -4.78E-006 | 6.76E-006 | -2.31E-006 |
| e12 | 8.39E-006 | 6.11E-007 | -4.87E-006 | 0.01299978 | 8.248E-06 | 1.18E-005 |
| e13 | -1.86E-006 | -5.18E-006 | 6.77E-006 | 7.672E-06 | 0.01298355 | 7.89E-006 |
| e23 | 1.43E-008 | 6.02E-006 | -1.89E-006 | 1.18E-005 | 7.77E-006 | 0.01298386 |

d)

| | TensiónX | TensiónY | TensiónZ | Corte XY | Corte XZ | Corte YZ |
|-----|------------|------------|------------|-----------|-----------|-----------|
| e11 | 0.00531035 | -0.0010665 | -0.0010663 | 1.98E-05 | -4.17E-06 | 7.38E-06 |
| e22 | -0.0010663 | 0.00533089 | -0.0010733 | -1.17E-05 | 2.70E-06 | -4.82E-06 |
| e33 | -0.0010663 | -0.0010735 | 0.00531534 | 5.94E-07 | 1.45E-05 | -2.56E-06 |
| e12 | 1.99E-05 | -1.17E-05 | 6.36E-07 | 1.28E-02 | 3.25E-05 | 1.60E-05 |
| e13 | -3.97E-06 | 2.77E-06 | 1.44E-05 | 3.24E-05 | 1.27E-02 | 3.63E-05 |
| e23 | 7.37E-06 | -4.84E-06 | -2.54E-06 | 1.60E-05 | 3.63E-05 | 1.28E-02 |

4.3 Distribución de casos

Con las 100 configuraciones distintas, se tomo el valor de S11, y se dividieron en siete clases distintas observando que la mayoría de los valores se encuentran cerca del valor promedio y va decreciendo su distribución conforme se acercan a los valores máximos y mínimos.

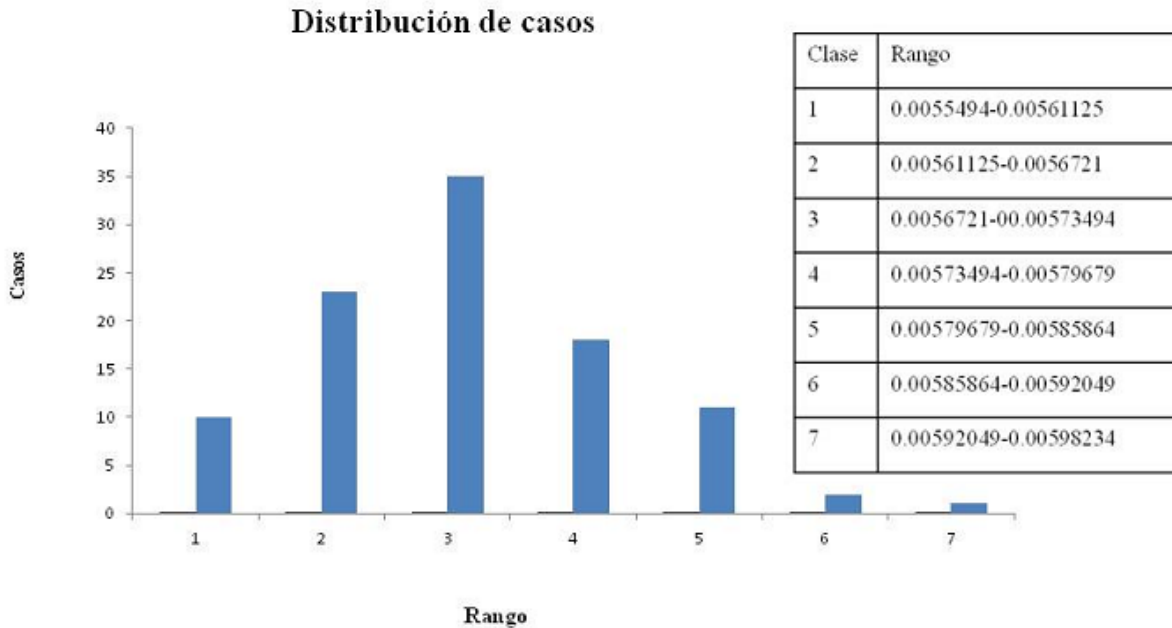


Figura 30. Distribución de los casos para una esfera.

Como se menciona anteriormente se tomaron los valores de S11, y se dividieron en siete clases o rangos lo que nos dio la grafica anterior con la distribución mostrada. En la que se puede observar que la mayoría de los casos se encuentran cerca del valor medio, sin embargo existen casos en el tercer rango.

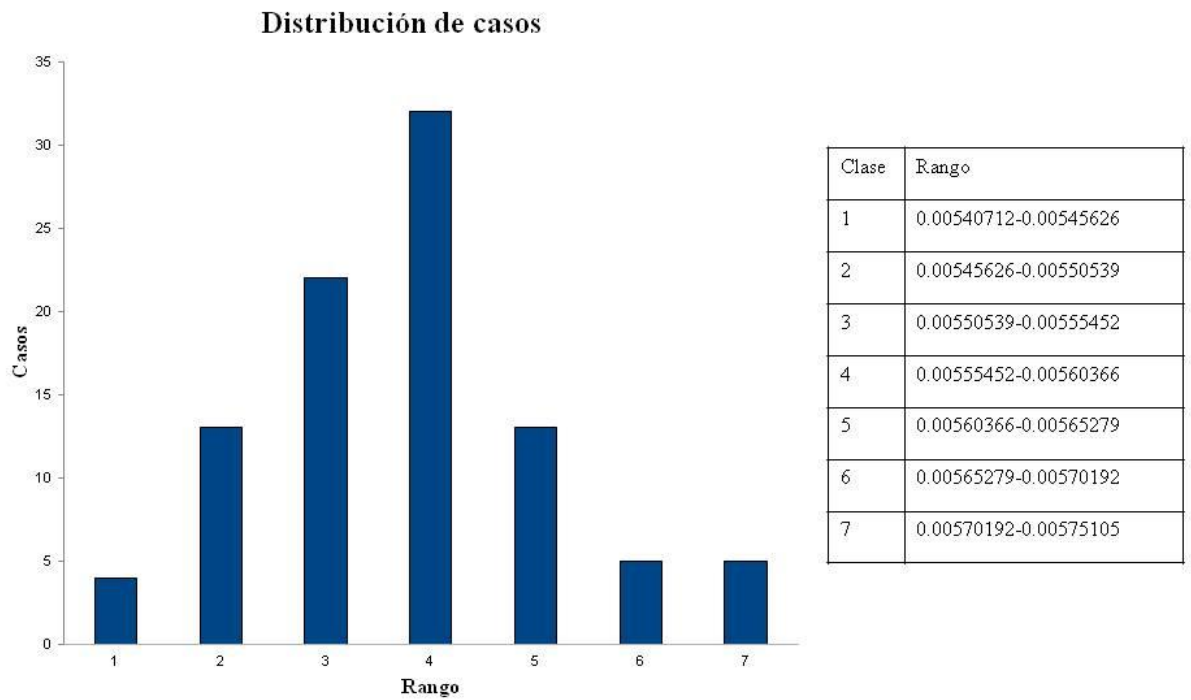


Figura 31. Distribución de los casos para 4 esferas.

En el caso de la distribución para cuatro esferas se puede observar como la mayoría de los valores están en la región del valor medio, en el rango cuatro.

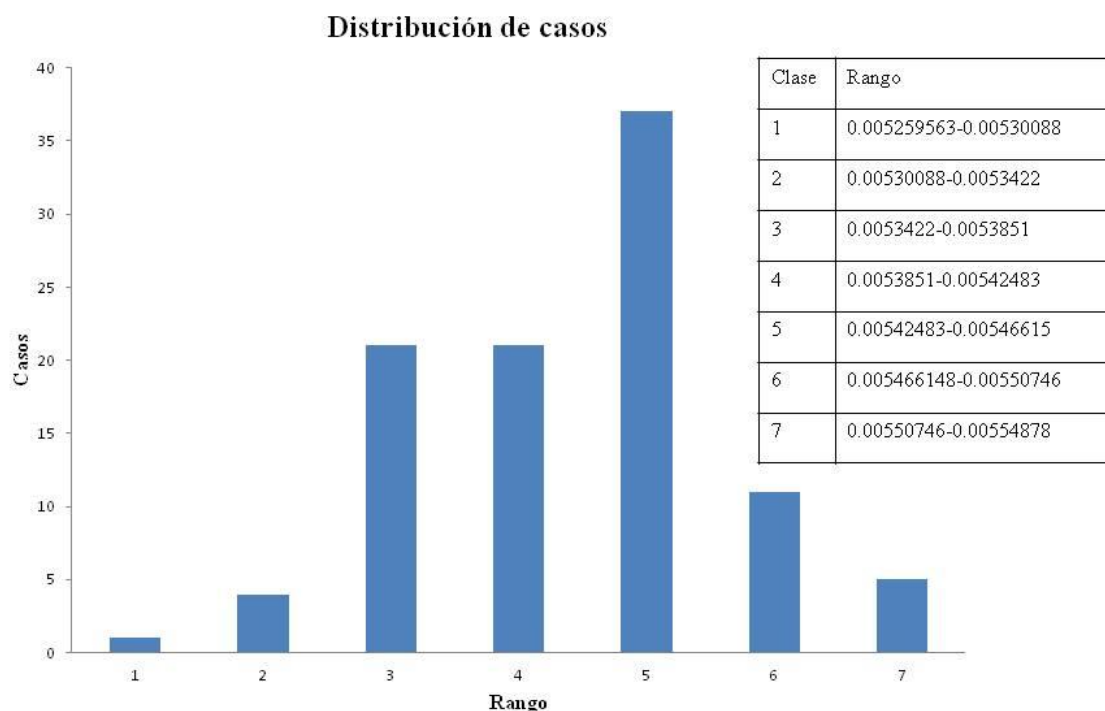


Figura 32. Distribución de los casos para 8 esferas

En el caso de las ocho esferas la mayoría de los casos se encuentran también dentro de los valores medio sin embargo observamos como la mayoría de los casos ahora caen en el rango cinco.

Nota: la distribución de casos para 16 esferas es muy similar a la distribución de ocho por lo que no se creyó necesario incluir la figura.

Como se mencionó los valores en el histograma indican que la mayoría de los casos se encuentran cercanos al valor promedio.

4.4 Deformación y deformación cortante

Las matrices promedio de las diferentes modelos (1, 4, 8 y 16 esferas), enlistados en la Figura 29, se muestra que los valores de deformación ε_{11} , ε_{22} y ε_{33} , son iguales o muy similares por lo que:

$$\varepsilon_{11}=\varepsilon_{22}=\varepsilon_{33} \quad (5.1)$$

Con la finalidad de demostrar que a medida que el número de esferas aumenta los valores de deformación son más constantes no importando su distribución, compararon gráficamente los valores máximos, promedio y mínimos encontrados en cada modelo.

Con la matriz promedio y todos los resultados de las 100 configuraciones distintas, obtenemos los valores máximos, mínimos y el promedio, para cada una de las regiones coloreadas. Por lo que se obtuvieron los valores globales de cada caso y fueron comparados para las distintas configuraciones con diferentes números de esferas.

Las siguientes figuras 33, 34 y 35 muestran como los valores máximos, mínimos y promedios se van acercando conforme aumenta el número de esferas. En la Figura 32 se observa en el eje “X” el número de esferas y en el eje “Y” los valores de $S_{11}=S_{22}=S_{33}$. En la Figura 33 se observa de igual forma en el eje “X” el número de esferas y en el eje “Y” los valores de $S_{12}=S_{13}=S_{23}$ y por último en la Figura 34 el eje “X” representa el número de esferas y el eje “Y” los valores para $S_{12}=S_{13}=S_{23}$.

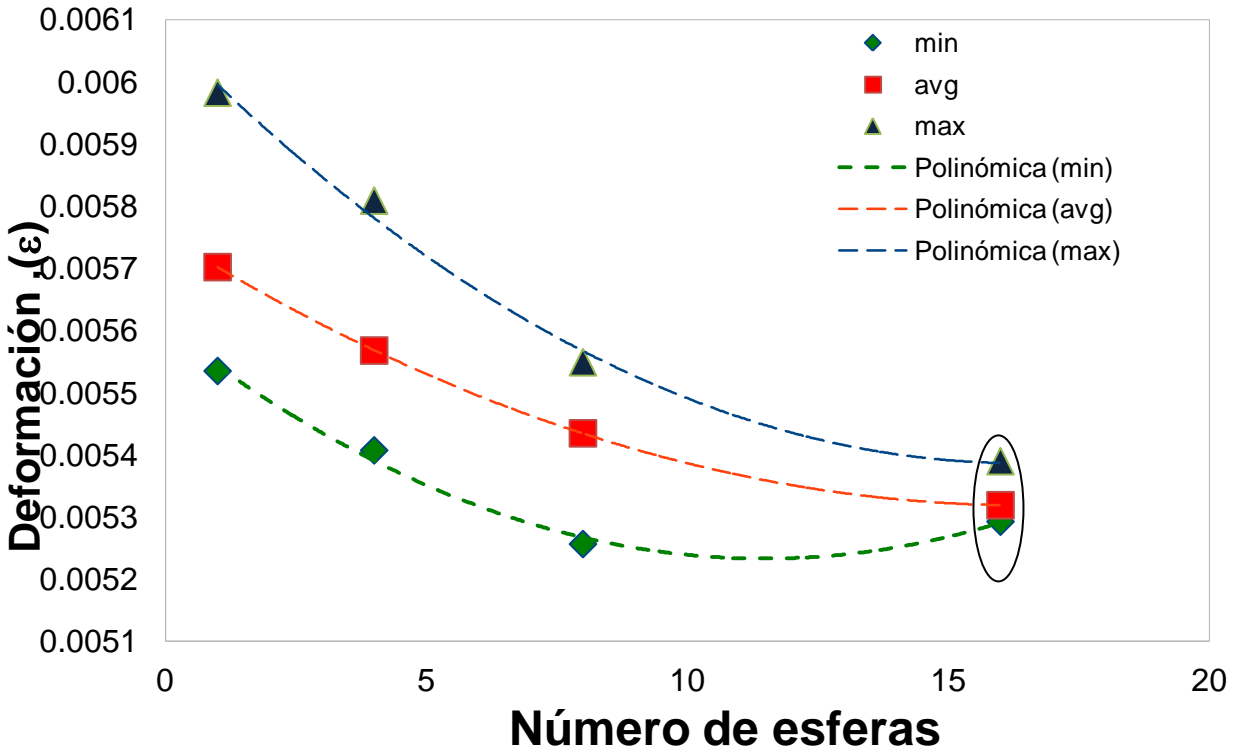


Figura 33. Comparación de valores promedio con los 4 tipos de casos.

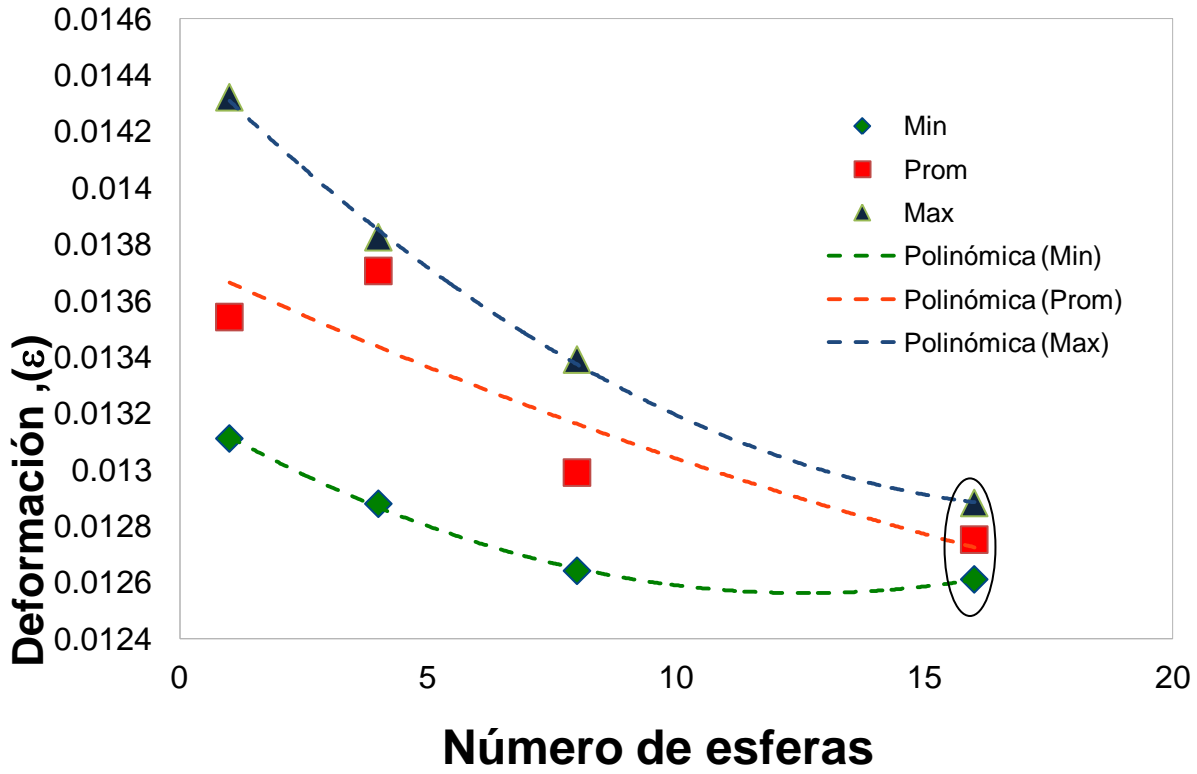


Figura 34. Comparación de valores promedio con los 4 tipos de casos.

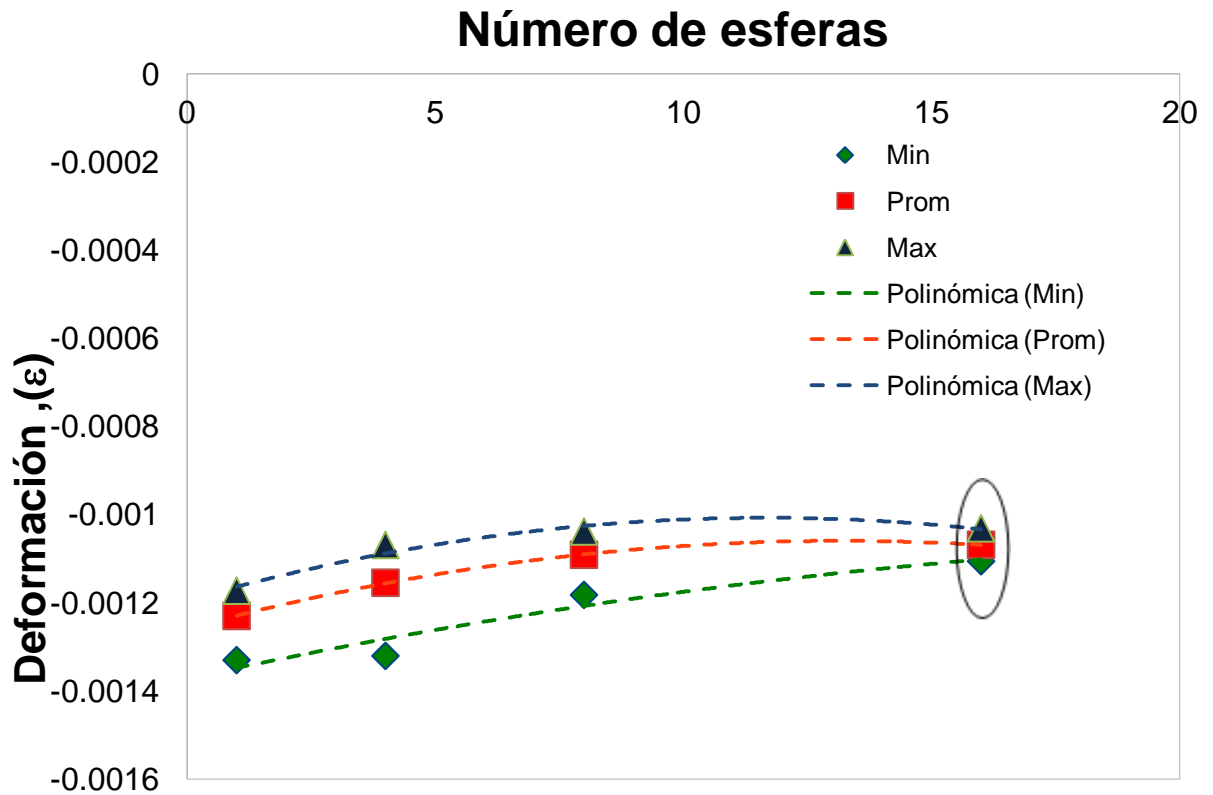


Figura 35. Comparación de los valores promedio para los 4 diferentes casos de distribución de esferas.

Como se puede observar en las figuras 33, 34 y 35 se puede observar el comportamiento de los distintos valores con los diferentes casos, en las cuales se puede observar cómo el rango entre el valor máximo y mínimo va decreciendo conforme el número de esferas se va incrementando. Por lo que la gráfica va teniendo una forma parecida a un embudo. Además se nota cómo los valores máximos y mínimos van variando cada vez menos con respecto al anterior.

Con lo anterior se puede comprobar que efectivamente se cumple la teoría de homogenización, en la cual se indica que a cierto número de inclusiones esféricas en el RVE, el comportamiento

de este es muy parecido tanto que la diferencia puede llegar a ser despreciable y no es necesario hacer pruebas con un mayor número de esferas dentro de el.

CAPITULO 5. DISCUSIÓN.

5.1 Introducción

En este capítulo se discutirán los puntos más relevantes en la definición y desarrollo del modelo RVE realizado en esta investigación. La determinación de factores como la selección del tamaño del RVE, las restricciones del modelo derivadas de la distribución de las partículas de aire en la matriz, así como el análisis del modelo derivadas de la distribución de las partículas de aire en la matriz, así como el análisis de los resultados obtenidos serán parte de esta discusión.

5.2 Tamaño del RVE

El tamaño del RVE es una de las características más importantes que se deben tomar en cuenta en la creación de éste, ya que como se mencionó en el marco teórico este debe de tener el tamaño adecuado para ser lo suficientemente pequeño para ser considerado como un punto dominio bajo el material analizado, pero también lo suficientemente grande para tener un muestra estadística de la microestructura [20].

Otro factor importante acerca del tamaño del RVE es que debe de ser lo suficientemente grande para que las propiedades medias de este sean independientes de su tamaño y posición en el material, para así tener un correcto análisis y que las propiedades del material no se vean afectadas por la cuestión del tamaño del RVE, por ejemplo se sabe que los tensores de rigidez y complianza son relevantes al determinar el tamaño mínimo del RVE [21].

En este trabajo el tamaño del RVE se determinó como una unidad cubica indistinta ya que con este tamaño se puede calcular fácilmente el volumen del RVE tras su evaluación para comprobar el comportamiento correcto después del análisis, como se observa en la Figura 36. El volumen

ocupado por las esferas fue del 20% del volumen del cubo. En la presente se eligió este porcentaje ya que este se encuentra entre los valores que se asemejan a simular un material poroso, que en este caso es el concreto. Ya que si se le da un valor muy pequeño puede ser tomado como un material sin poros, ya que en la evaluación de resultados no existirá una diferencia importante en que si se toma como material homogéneo. Por el contrario al dar un valor muy grande a este porcentaje se comportaría el material como un material hueco por el aire en el interior para este caso. Aunque este porcentaje y las características del material son ajustables para cada tipo de simulación que se desee ejecutar.

Otra de las ventajas de tomar el tamaño del RVE como un volumen cúbico fue que esta unidad se puede adecuar de manera sencilla a diferentes escalas. Además, si se escoge un tamaño más pequeño aumentaría el tiempo computacional debido al número de iteraciones necesarias para obtener el resultado final [37]. Mientras que si el tamaño fuera más grande no representaría efectivamente una unidad dominio resultando en una representación errónea de un material heterogéneo.

Tabla 4. Resultados tras la realización de la simulación en un RVE de cuatro esferas, calculando después de cada ejecución su volumen final.

| | TensiónX | TensiónY | TensiónY | Corte 12 | Corte 13 | Corte 23 |
|-----|--------------|--------------|--------------|------------|-------------|--------------|
| e11 | 0.00547865 | -0.00110527 | -0.00117366 | -4.620e-05 | -4.821e-06 | -3.85630e-05 |
| e22 | -0.00110462 | 0.00552723 | -0.00115994 | 1.2839e-05 | 5.2673e-05 | -6.91211e-05 |
| e33 | -0.00117413 | -0.00116024 | 0.00557905 | 1.1157e-06 | -2.0169e-05 | 6.12592e-05 |
| e12 | -4.78315e-05 | 1.31932e-05 | 1.443237e-06 | 0.01334246 | -0.00010183 | 0.00011393 |
| e13 | -5.21518e-06 | 5.28527e-05 | -1.98644e-05 | -0.0001036 | 0.01315782 | -0.00012204 |
| e23 | -3.8065e-05 | -6.99106e-05 | 6.244482e-05 | 0.00011442 | -0.00012345 | 0.01311691 |
| vol | 1.00011465 | 1.00011465 | 1.00011465 | 1.00011465 | 1.00011465 | 1.00011465 |

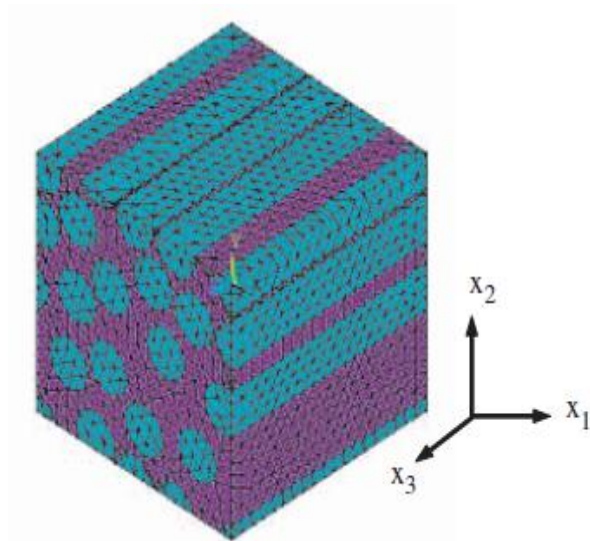
5.3 Distribución de los materiales

Existen diferentes figuras geométricas para representar la diferencia entre los materiales que componen un material heterogéneo y esto depende propiamente de las características

geométricas del material. Algunas investigaciones en compuestos reforzados con fibras utilizan cilindros asemejando las fibras a simular como se muestra en la Figura 37a [38].

Como se menciona anteriormente, el material heterogéneo estudiado en esta investigación es el concreto. El concreto es un material poroso, es decir que durante su proceso de fraguar pequeñas burbujas de aire son atrapadas generando así un material heterogéneo. En esta investigación se utilizó este concepto generando así una unidad cubica de concreto con esferas incrustadas asemejando las burbujas de aire (Figura 37 b).

a)



b)

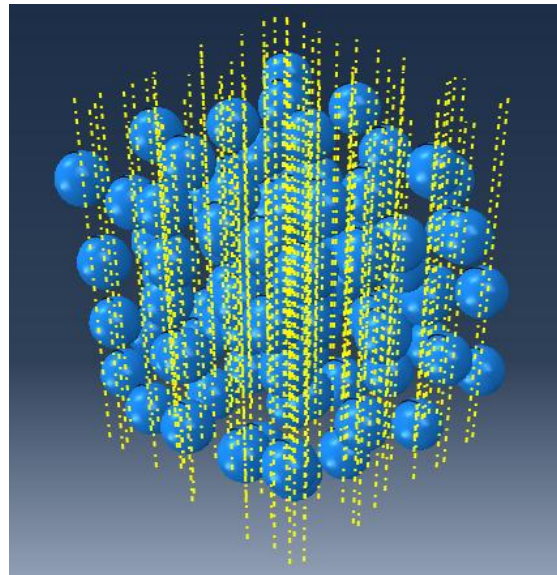


Figura 37. Diferentes tipos de distribución de materiales heterogéneos en un RVE. a) Distribución por medio de fibras cilíndricas, b) Distribución por medio de esferas en RVE.

La distribución de esferas propuesta en esta investigación. Fue restringida por dos condiciones. Primero, las esferas deben ser del mismo tamaño y el volumen de las esferas en el cubo siempre fue de 20%. Esta restricción por otra parte para asegurar que el número de esferas sea responsable de los resultados obtenidos durante la simulación teniendo que el volumen ocupado por las esferas siempre sea el mismo, para este caso.

Otro de los puntos importantes de la distribución de los materiales fue que las esferas no se pueden interceptar unas con otras ni cortarse con las paredes del RVE, ya que esto daría una simulación incorrecta. Esto debido a que al momento de que las esferas se juntarán, se podría mal interpretar el número de esferas así como el tamaño de ellas. A su vez esto haría el cálculo más difícil y el tiempo computacional más largo.

Las esferas son del mismo tamaño, ya que esto facilita la distribución de estas dentro de la unidad cúbica, además de que esto también ayuda a la hora de poder realizar el posicionamiento y el cálculo del volumen de las esferas, cumpliendo que siempre sean el mismo porcentaje del volumen del cubo.

5.4 Mallado

El mallado de este modelo se llevo a cabo teniendo dos puntos clave para una obtención correcta de resultados, en primer lugar la forma que debería de tener la malla del modelo y por otro lado el tamaño que debería de tener la malla.

a) Forma de la malla

La malla que se uso en este modelo fue de tetraedros. Ya que al momento de utilizar otra malla diferente a esta como la cuadrática o hexagonal, los nodos situados entre las esferas y las paredes internas del cubo no coinciden por lo que no se podía ejecutar una simulación correcta, como se puede observar en el esquema de la Figura 38. En la Figura 15 de la sección 3.3.1 se puede observar la forma de la malla para un RVE de cuatro esferas.

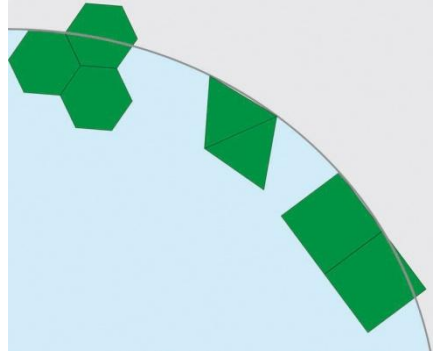


Figura 38. Diferentes figuras probadas en el mallado.

b) Tamaño de la malla

El tamaño de la malla del modelo se hizo proporcional al número de esferas contenidos en cada RVE, por dos motivos: al ser una malla más burda se disminuye considerablemente el tiempo computacional de la obtención de resultados tras cada ejecución. Considerando además de que para cada distribución de esferas se realizan seis diferentes casos de tracción y a su vez son 100 diferentes distribuciones. Por lo que el tiempo computacional es algo muy importante.

El otro motivo por el cual la malla es proporcional al número de esferas es que no se observaron diferencias significativas en los resultados obtenidos entre el uso de una malla proporcional al número de esferas en comparación a la malla más fina que se usó en esta investigación para un modelo que en este caso sería la utilizada en el RVE de 16 esferas. Pero sí existe una diferencia significativa en el tiempo computacional.

5.5 Condiciones de tracción del RVE

El modelo de la investigación fue sometido a diferentes esfuerzos en diferentes posiciones y diferentes tipos. Además fue necesario establecer, condiciones que limitaran su respuesta en algunas situaciones ya que de lo contrario se obtendrán resultados equívocos.

a) Partes fijas del RVE

Para evitar el comportamiento erróneo del RVE al ser sometido a diferentes condiciones de tracción y así mismo una interpretación incorrecta de los resultados tras las ejecuciones. Se

establecieron tres diferentes condiciones restrictivas. Las condiciones que se establecieron se muestran en la Figura 39a.

Los puntos mencionados anteriormente son un encastre y dos puntos fijos que eviten la rotación del RVE.

b) Fuerzas aplicadas

Las esfuerzos aplicados a cada RVE fueron seis distintos en los que se encuentran un esfuerzo de tensión en “x”, “y” y “z”, además de tres diferentes esfuerzos cortantes “xy”, “xz” y “yz”. Esquematizados en la Figura 27. Estos deben ser aplicados a una misma distribución de esferas, lo que quiere decir que se debe tener la misma posición de esferas al aplicar un esfuerzo de tensión en “x” que al aplicar el esfuerzo cortante “xz”. Por lo que el proceso utilizado fue borrar las fuerzas y el archivo .odb de la simulación anterior, para empezar con un RVE sin ninguna alteración pero con la misma distribución de esferas. Las condiciones aplicadas se pueden observar en la figura 39b.

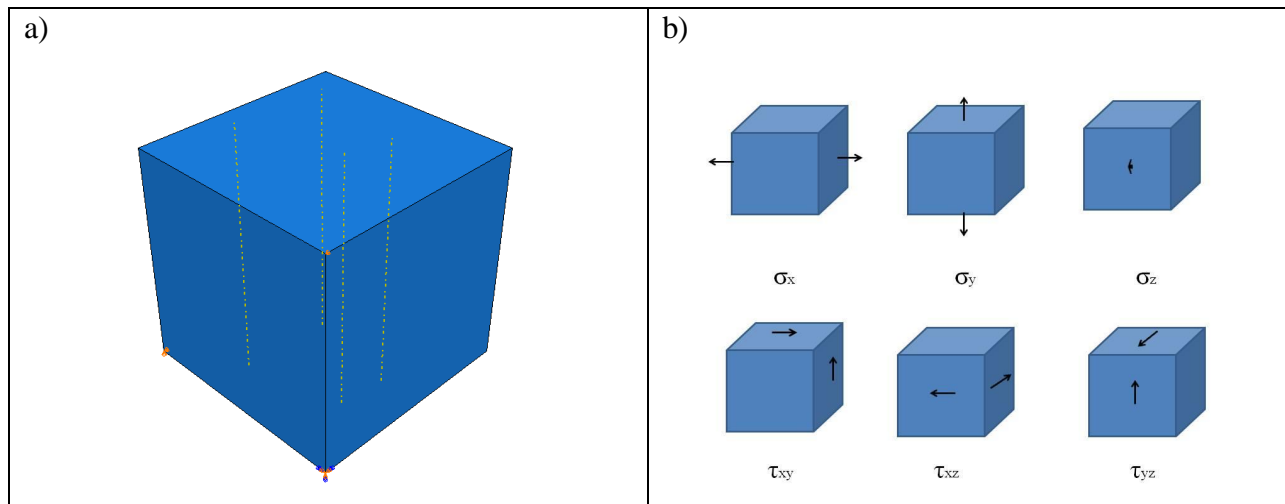


Figura 39. a) Puntos fijos en los vértices del RVE. b) Cargas de tracción aplicadas a cada RVE.

5.6 Distribución de casos

Como se mencionó en el capítulo de resultados se obtuvieron gráficas donde se ilustra cómo se distribuyeron los casos de los valores en S_{11} , para los RVE con diferente números de esferas en estas gráficas es muy fácil distinguir como los valores con mayor número de casos son los valores cercanos al valor promedio de cada una de las distribuciones. Ya que al momento de tomar el valor máximo y el mínimo, calcular una diferencia y dividirlo entre siete para así obtener siete clases distintas. Se observa como las clases de la parte central son las que tienen un mayor número de repeticiones, como se ilustra en las Figuras 31 y 32.

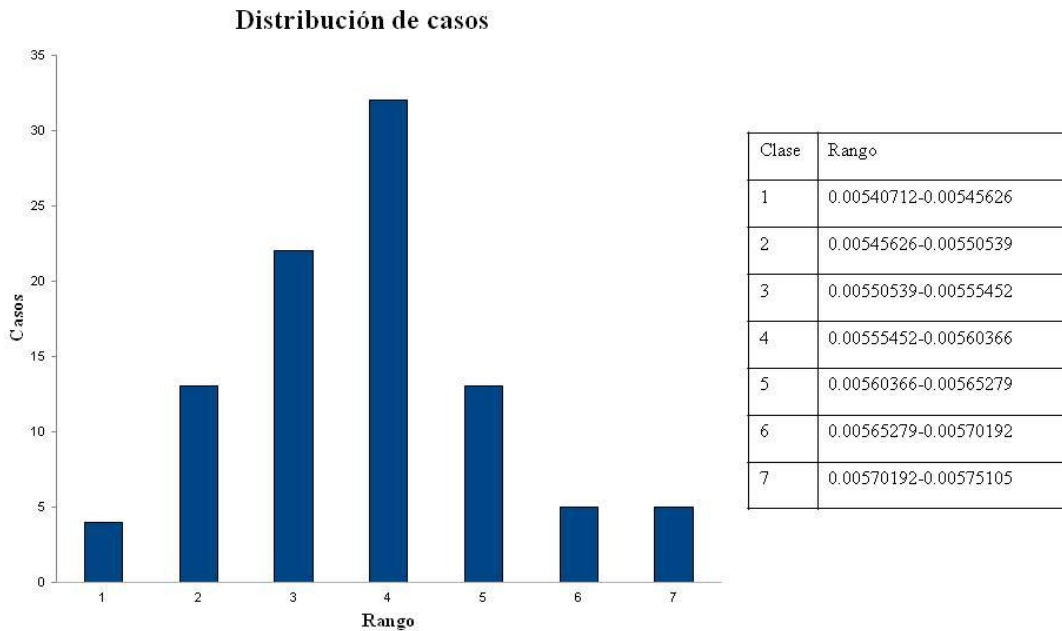


Figura 31. Distribución de los casos para 4 esferas.

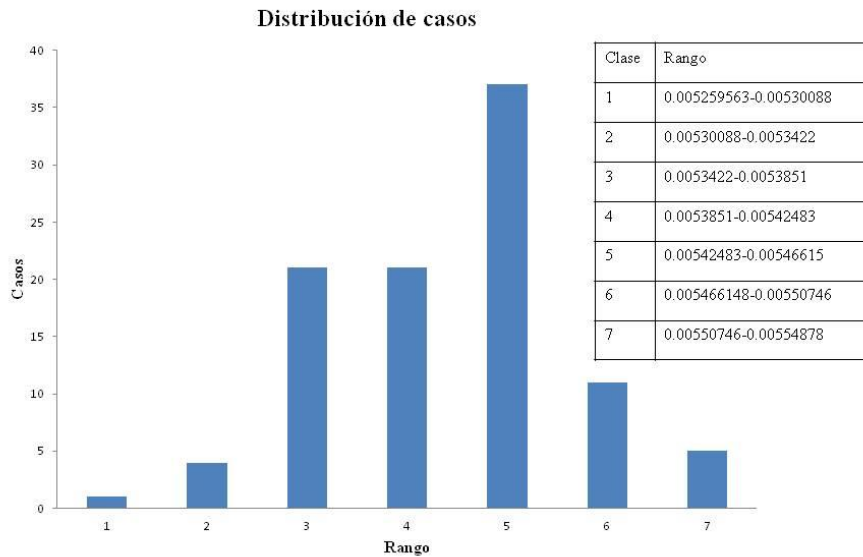


Figura 32. Distribución de los casos para 8 esferas

Es importante resaltar como los valores de los casos va aumentando hacia las clases de la derecha, conforme aumenta el número de esferas contenidas en el RVE.

5.7 Gráficas comparativas de los valores máximos, mínimos y promedios

Por medio de la obtención de la matriz promedio para cada distribución de los diferentes RVE, se obtuvieron figuras comparativas de los valores máximos, mínimos y promedios entre los cuatro casos de numero de esferas para cada una de las tres regiones diferentes de las matrices. En estas figuras se observa claramente como los valores máximos, mínimos y promedios se acercan conforme aumenta el número de inclusiones dentro del RVE, llegando un punto en el que los valores no sufren un cambio significativo entre ese valor y el anterior. Por lo que se muestra en las Figuras 38, 39 y 40 como se comportarían las curvas de las gráficas si se continuaría haciendo simulaciones con un RVE con mayor numero de esferas.

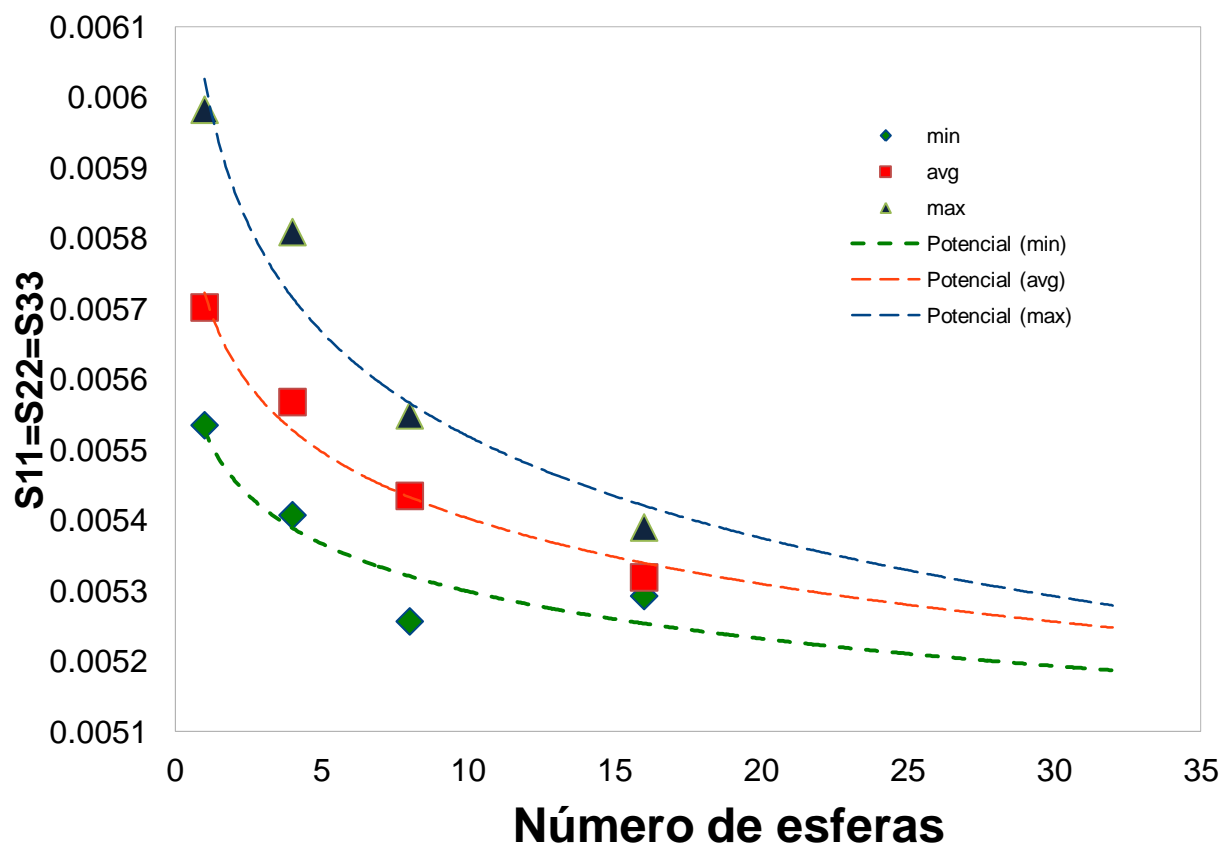


Figura 38. Comparación de los valores promedio para los diferentes tipos de casos extrapolados.

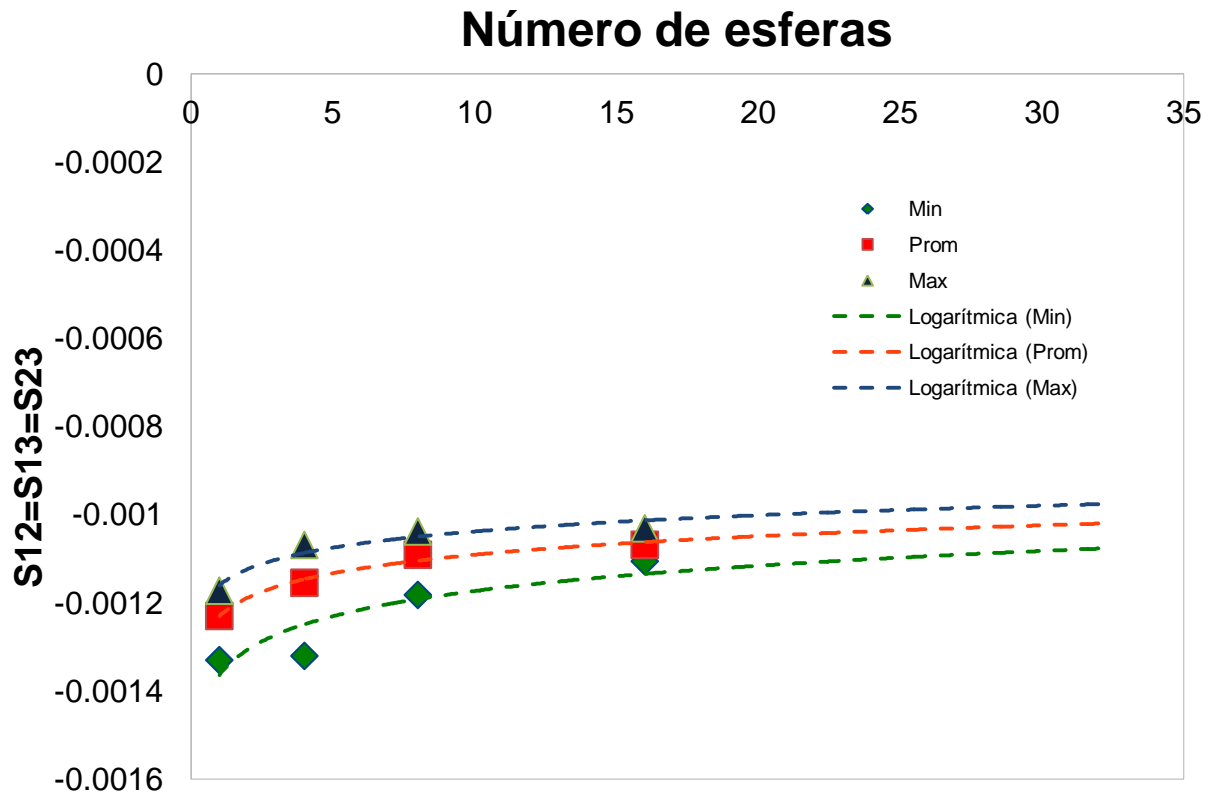


Figura 39. Comparación de los valores promedio para los diferentes tipos de casos extrapolados.

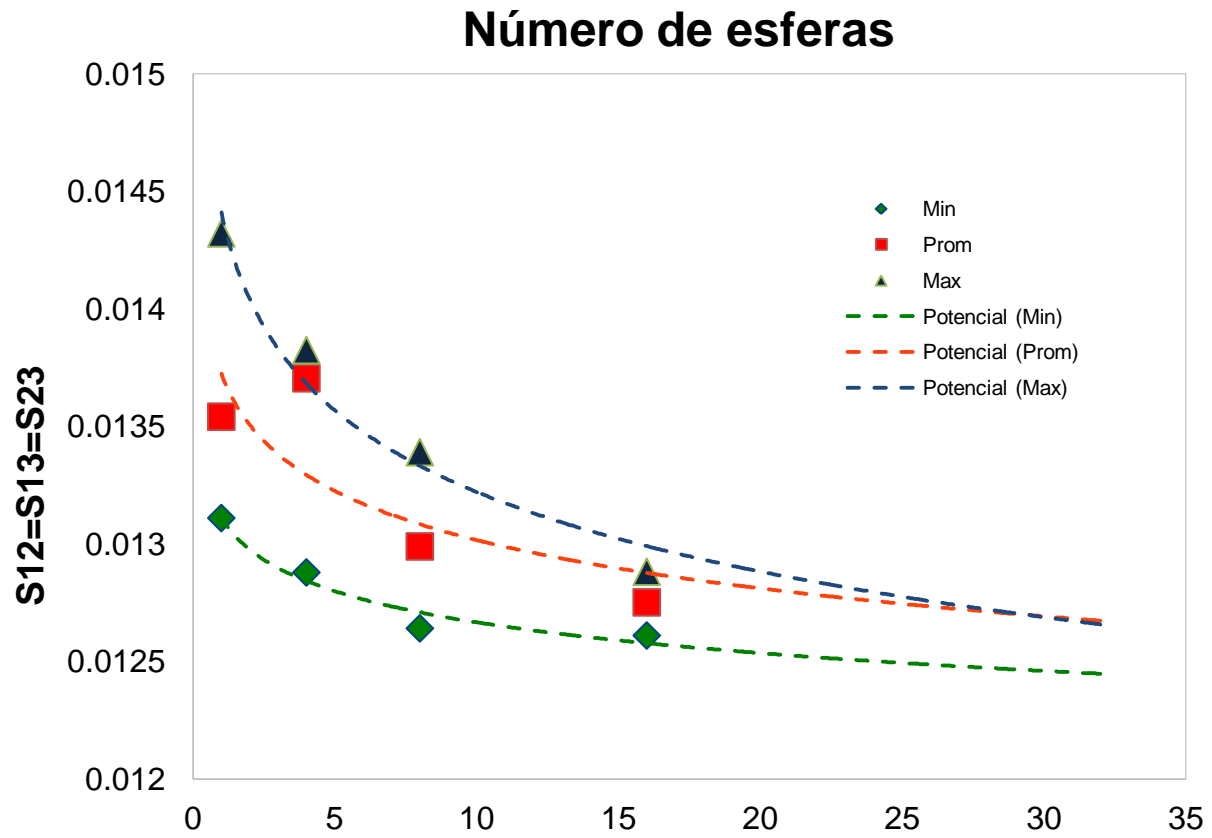


Figura 40. Comparación de los valores promedio para los diferentes tipos de casos extrapolados.

CAPITULO 6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

A continuación se presentan las conclusiones derivadas de esta investigación. También se evalúan una serie de recomendaciones para algún trabajo futuro en esta área del conocimiento.

6.1 Conclusiones

- Se desarrolló un modelo micro-mecánico para la evaluación de un material heterogéneo (concreto) utilizando la técnica de Elemento de Volumen Representativo (RVE).
- Los parámetros utilizados para la creación del modelo RVE propuesto fueron: tamaño de RVE, condiciones frontera, mallado, distribución fueron las optimas para este trabajo.
- Los resultados obtenidos de este modelo demuestran que a medida que el número de esferas consideradas dentro del RVE aumenta los valores de deformación máximo, promedio y mínimo tienden a un mismo valor.
- La teoría RVE es adecuada para determinar el comportamiento mecánico en un material heterogéneo.

Aplicaciones del RVE mediante la técnica de homogenización.

Con la ayuda del RVE se pueden evaluar distintos tipos de materiales como lo son: materiales compuestos y materiales porosos. Y predecir su comportamiento bajo diferentes condiciones[27].

Como es en el caso del estudio realizado para predecir el comportamiento de un nanocomposito/organoarcilla, en el que se usa la micromecanica para observar su comportamiento mecánico. En este trabajo se crearon modelos de RVE, por medio de elemento finito. Para predecir el modulo elástico del nanocompuesto polipropileno/organoarcilla[27].

Se usaron RVE de tres fases incorporando la fase entre la arcilla y la matriz de polipropileno. En este trabajo se observa como las propiedades de la interfase tienen menos impacto en el modulo de los nanocompuestos exfoliados mientras que los que están intercalados son independientes de los patrones de dispersión de la arcilla[27].

Otra aplicación que se le da al RVE en otra investigación es para hallar los coeficientes elásticos para geometrías idealizadas de trabéculas en dos y tres dimensiones. Para realizar una estimación del comportamiento elásticos efectivo del tejido óseo trabecular usando un enfoque mecánico tradicional[24].

En el trabajo, relaciona el tensor de deformaciones locales con el de deformaciones promedio en el RVE. Para que finalmente el tensor se emplee para hallar los coeficientes de la matriz de constantes elásticas para el material macroscópico equivalente[24].

6.2 Recomendaciones

- Comprobar el modelo con condiciones inversas, usando esta vez una deformación fija (ϵ) en vez de un esfuerzo fijo (σ). Para comprobar los resultados de esta investigación.

- Llevar el modelo de la micro escala a una escala macro. Para observar el comportamiento del modelo en un caso real. Como se ha llevado en los modelos de la célula automática y el modelo de Montecarlo.
- Aplicar el modelo del RVE a un caso de un material constituido por una matriz metálica e inclusiones de un metal distinto. Tratando de predecir su comportamiento bajo a diferentes condiciones de tracción.
- Evaluación por medio de RVE para la simulación de un mismo material con diferentes condiciones morfológicas, como lo son modos de fractura.

CAPITULO 7. REFERENCIAS

- [1] Mondragón Maca María Victoria, Modelos de la micromecánica de materiales compuestos considerando degradación higrotérmica, Tesis M. C. en Ingeniería Civil, Universidad de Puerto Rico, 2008.
- [2] Boresi Arthur P, Schmidt Richard J., Advanced Mechanics of Materials, John Wiley & Sons, Inc., Estados Unidos de America, 2003.
- [3] Salvatore Torquato, Random Heterogeneous Materials, Springer-Verlag New Yourk, Inc., Estados Unidos de América, 2002.
- [5] Khisaeva Z. F., Ostoja-Starzewski M., On the size of RVE in finite elasticity of random composites, J Elasticity (2006) 85: 153-173, 2006.
- [6] Hornung Ulrich, Homogenization and Porous Media, Springer-Verlag New York, Estados Unidos de América, 1997.
- [7] Khan Kamran A., Muliana Anastasia H., Effective termal properties of viscoelastic composites having field-dependent constituent properties, Acta Mech 209, 153-178 (2010), 2009.
- [8] Toro S., Sánchez P. J., Huespe A. E., Giusti S. M., Blanco P. J., Feijóo R., Formulación multi-escala para materiales cuasi-frágiles heterogéneos considerando generación y propagación de fisuras en la celda unitaria. Fundamentos cinemáticos-variacionales, 1999.
- [9] Narváez Carlos A., Roa Máximo A., Garzón Diego A., Efecto de la fracción volumétrica, el número de elemento y el exponente de penalización en optimización topológica estructural, 8° Congreso Iberoamericano de Ingeniería Mecánica, 2007.
- [10] Bamba Broulaye, Comportamiento de los materiales compuestos con fibra de carbono, Thesis M. C., Universidad de la Habana.
- [11] Barbero Ever J., Finite Element Analysis of Composite Materials, CRC Press, Estados Unidos de América, 2007.
- [12] Ma Anxin, Implicit scheme of RVE calculation for FCC polycrystals, Computational Materialals Science 27 (2003), 471-479, 2003.

- [13] Canal L. P., Segurado J., LLorca J., Modelización numérica del daño en materiales compuestos de matriz polimérica, *Anales de la Mecánica de Fractura*, Vol. 1, 151-156, 2007.
- [14] Kanit T., Forest S., Galliet I., Manoury V., Jeulin D., Deformation of the size of the representative volumen element for random composites statistical and numerical approach. *Int. J. Solid Structures* AO, 40, 3647-3679, 2003.
- [15] Kanit T., Notion of representative volumen element for heterogeneous materials statistical and numerical approach, Tesis PhD, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2003.
- [16] Drugan W., Willis J., A micromechanics based of representative volumen element size for elastic composites, *J. Mech. Phys. Solids* 44(4), 497-524, 1996.
- [17] Ostoja-Starzewski, M., Micromechanics as a basis of continuum random fields, *Applied Mechanics Review (Special Issue: Micromechanics of Random Media)* 47 (1, Pt. 2), 221-230, 1994.
- [18] Tyrus J. M., Gosz M., DeSantiago E., A local finite element implementation for imposing periodic boundary conditions on composite micromechanical models, *International Journal of Solids and Structures* 44(2007), 2972-2989, 2006.
- [19] Ostoja-Starzewski, M., Random field models of heterogeneous materials, *Int. J. Solids Structures* Vol. 35 No. 19, 2429-2455, 1998.
- [20] Moraleda Palmero Joaquín, *Micromecánica de elastómeros porosos y reforzados con fibras*, Tesis PhD, Universidad Politécnica de Madrid, 2009.
- [21] Pensée V., He Q.-C., Generalized self-consistent estimation of the apparent isotropic elastic moduli and minimum representative volumen element size of heterogeneous media, *International Journal of Solids and Structures* 44 (2007), 2225-2243, 2006.
- [22] Sachtler M., Zhao Z., Raabe D., Experimental investigation of plastic grain interaction, *Materials Science and Engineering*, A336, 81-87, 2002.
- [23] Ibarra Pino Ariel A., Cisilino Adrian P., Estimación del comportamiento elástico efectivo del tejido óseo trabecular usando un enfoque mecánico tradicional, *Mecánica Computacional*, Vol. XXVIII, 2039-2052, 2009.
- [24] Rodriguez-Ramos R., Bravo-Castillero J., Guinovart-Diaz R., Lectures notes on Select Analytical methods in homogenization, University of Havana, 2010.

- [25] Mesarovic Sinisa DJ., Padbidri Jagan, Minimal kinematic boundary conditions for simulations of disordered microstructures, *Philosophical Magazine*, Vol. 85, No. 1, 65-78, 2005.
- [26] Madi Kamel, Forest Samuel, Jeulin Dominique, Boussuge Michel, Estimating RVE sizes for 2D/3D viscoplastic composite materials,
- [27] Dong Yu, Bhattacharyya Debes, A simple micromechanical approach to predict mechanical behaviour of polypropylene/organoclay nanocomposites based on representative volumen element (RVE), *Computational Materials Science* 49 (2010), 1-8, 2010.
- [28] Batista Ruben G., Cisilino Adrian, Iturrioz Ignacio, Aplicación del método de los elementos discretos a la homogenización de las propiedades mecánicas de materiales microporosos, *Mecánica Computacional*, Vol. XXII, 1878-1890, 2003.
- [29] Sadd Martin H., *Elasticity. Theory, Applications, and Numerics*, Elsevier Inc., Estados Unidos de América, 2009.
- [30] Dunne Fionn, Petrinic Nik, *Introduction to Computational Plasticity*, Oxford University Press, Estados Unidos de América, 2005.
- [31] Askeland Donald R., *Ciencia e ingeniería de los materiales*, International Thomson Editores, México, 1998.
- [32] González Duque Raul, *Python para todos*, Creative Commons Reconocimiento 2.5 España, España, 2008.
- [33] *Scripting Reference Manual Abaqus 6.10*, Dassault Systemes, Estados Unidos de América, 2010.
- [34] Shackelford James F., *Introducción a la ciencia de materiales para ingenieros*, Pearson Prentice Hall, España, 2007.
- [35] Smith William F., Hashemi Javad, *Fundamentos de la ciencia e ingeniería de los materiales*, Mc Graw Hill Interamericana, México, 2006.
- [36] Roylonce David, *Stress-Strain curves*, Massachusetts Institute of Technology, Estados Unidos de América, 2001.
- [37] Pelissou C., Baccaou J., Monerie Y., Perales F., Determination of the size of the representative volumen element for random quasi-brittle composites, *International Journal of Solids and Structures*, 46 (2009) 2842-2855, 2009.

[38] Kari Sreedhar, berger Harald, Rodriguez-Ramos Reinaldo, Gabbert Ulrich, Numerical evaluation of effective material properties of transversely randomly distributed Unidirectional Piezoelectric Fiber Composites, Journal of Intelligent Material Systems and Structures 2007, 18, 361, 2006.

A.1 LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Datos generados en el archivo de texto, manejados con Excel, donde se muestra los valores obtenidos en cada matriz, el volumen total del RVE, así como la distribución de cada esfera

Tabla 2. Coordenadas de las esferas de un RVE con 16 esferas

A.2 LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Principio de la homogenización

Figura 2. Esquema de la teoría de homogenización, utilización de dos escalas

Figura 3. Realización de una microestructura aleatoria de un material de dos fases, disco-matriz compuestos y del concepto ventana-escala.

Figura 4. Distintas escalas donde el material puede ser homogenizado

Figura 5. Ejemplos de microestructuras desordenadas. Escalas típicas de longitud: (a) Policristalina (o nanocristalino) material. (b) Materiales Granulares; los granos pueden ser grandes piedras (concreto) o pequeñas partículas de polvo en polvo metalúrgico. (c) Esponjas metálicas

Figura 6. Condiciones frontera común para corte de un RVE. (a) condiciones rígidas frontera. (b) condiciones frontera periódicas. (c) Condiciones frontera rígidas y periódicas previenen la localización del corte; el desplazamiento de los puntos no puede ser satisfecho

Figura 7. Ejemplo de una deformación de dos dimensiones.

Figura 8. Deformación general entre dos puntos vecinos

Figura 9. Deformaciones típicas de un elemento rectangular.

Figura 10. Representación esquemática de una estructura cristalográfica dentro de un grano sometidos a desplazamiento

Figura 11. Modelos de RVE de compuestos formados por fibras distribuidos unidireccionalmente transversalmente aleatorios. (a) y (b) tienen el mismo diámetro de fibra en el RVE y su malla, para el caso de una fracción del 50% del volumen, (c) y (d) tienen diferentes diámetros de fibras y su malla es para una fracción del 70% del volumen.

Figura 12. Distribuciones de esferas dentro de un RVE sometido a Tensión y a Corte

Figura 12. Árbol para llamar una variable en ABAQUS desde la subrutina.

Figura 14. Imagen del cubo creado con dimensiones de 1x1x1

Figura 15. Esfera vista en la interfase de ABAQUS

Figura 16. RVE de 4 esferas mallado

Figura 17. Distribución de las esferas dentro del RVE

Figura 18. Curva esfuerzo deformación

Figura 19. Vista de ABAQUS encontrando los contactos entre las partes

Figura 20. Vista de ABAQUS estableciendo los contactos entre las esferas y el cubo

Figura 21. Puntos fijos en los vértices del RVE

Figura 22. Tensión aplicada en el eje “X”

Figura 23. Corte aplicado en el eje “Y” y “Z”

Figura 24. Esquema de la matriz a obtener (\bar{S})

Figura 25. Esquema de la matriz promedio obtenida, tras realizar las 100 evaluaciones con distintas posiciones de las esferas

Figura 26. Valores obtenidos para una matriz promedio usando cuatro esferas dentro del RVE

Figura 27. Las seis diferentes cargas de tracción aplicadas a cada RVE.

Figura 28. Matriz esfuerzo-deformación tras una ejecución a un RVE con 16 esferas

Figura 29. Matriz promedio calculada para 1,4, 8 y 16 esferas, tras 100 realizaciones en ABAQUS.

Figura 30. Distribución de los casos para una esfera

Figura 31. Distribución de los casos para cuatro esferas

Figura 32. Distribución de los casos para ocho esferas

Figura 33. Comparación de valores promedio, máximos y mínimos para los 4 tipos de casos de distribución de esferas.

Figura 34. Comparación de valores promedio, máximos y mínimos para los 4 tipos de casos de distribución de esferas.

Figura 35. Comparación de valores promedio, máximos y mínimos para los 4 tipos de casos de distribución de esferas.

Figura 36. Resultados tras la realización de la simulación en un RVE de cuatro esferas, calculando después de cada ejecución su volumen final.

Figura 37. Diferentes tipos de distribución de materiales heterogéneos en un RVE. a) Distribución por medio de fibras cilíndricas, b) Distribución por medio de esferas en RVE.

Figura 38. Diferentes figuras probadas en el mallado.

Figura 39. a Puntos fijos en los vértices del RVE. b Cargas de tracción aplicadas a cada RVE.

Figura 40. Comparación de los valores promedio para los diferentes tipos de casos extrapolados.

A.3 GLOSARIO DE COMANDOS

from part import: llama a la biblioteca parte

from material import: llama a la biblioteca material

from section import: llama a la biblioteca sección

from assembly import: llama a la biblioteca ensamble

from step import: llama a la biblioteca step

from interaction import: llama a la biblioteca interacción

from load import: llama a la biblioteca carga

from mesh import: llama a la biblioteca malla

from Job import: llama a la biblioteca corrida (Job)

from sketch import: llama a la biblioteca sketch

from visualization import: llama a la biblioteca visualización

from connectorBehavior import: llama a la biblioteca comportamiento conector

import regionToolset: llama a la biblioteca region

import random: llama a la biblioteca aleatoria

import math: llama a la biblioteca matematica

if: condicionante

text_file = open text_file = open("C:/Users/armando/Documents/Resultados nuevos/1esfera.txt", "a"): crea un archivo de texto al que se van a ir añadiendo datos cada ciclo

for: ciclo

print: imprime en pantalla

Instance(...): este método crea un objeto parteinstancia y lo pone en el deposito de instancias

ConstrainedSketch(...): este método crea un objeto ConstrainedSketch

Line(...): este método crea una línea ente dos puntos dados

VerticalConstraint(...): este método crea una restricción vertical. Esta restricción se aplica a una línea y la restringe verticalmente

BaseSolidRevolve(...): este método crea un solido por medio de un objeto que es revolucionado dando el angulo al objeto creado. Debe ser especificado el eje donde revolucionara el objeto

Material(...): este método crea el material de un objeto

HomogeneousSolidSection(...): define las propiedades de una sección sólida

SectionAssignment(...): este método es usado para asignar una sección a una región en una instancia. Solo las secciones conectoras pueden ser asignadas en el nivel de ensamblaje

getSequenceFromMask(...): este método devuelve el objeto o los objetos en el arreglo de celdas identificados por máscara (mask). Este comando es generado cuando las JournalOptions (opciones de diario) son ajustadas a COMPRESSEDINDEX (índices comprimidos). Cuando un número grande de objetos están envueltos, este método es muy eficiente.

regenerate(): este método regenera el ensamblaje y brinda este con los últimos valores de los parámetros de ensamblaje

Surface(...): este método crea una superficie de una secuencia de objetos en una base de datos de modelos. La superficie será aplicada a los lados especificados por los argumentos

StdContactControl(...): este método crea un objeto StdContactControl (Objeto estándar de control)

setMeshControls(...): este método asigna los parámetros de control de la malla para las regiones específicas

makeindependent(...): este método convierte las partes específicas de las instancias de dependientes a independientes

seedPartInstance(...): este método asigna las semillas de las esquinas globales a las partes de las instancias dadas

setElementType(): este método define los tipos de elemento para las regiones especificadas

generateMesh(...): este método genera una malla en la parte de la instancia o región dada

EncastreBC(...): este método crea una parte fija del tipo de condición frontera

DisplacementBC(...): este método crea un objeto de desplazamiento de condición frontera

Region(...): este comando crea una superficie como región

Part(...): este método crea una parte de un objeto y la sitúa en el almacén de partes

StaticStep(...): este método crea un objeto Static Step

Pressure(...): este método crea un objeto de presión

Job(...): este método crea una ejecución de análisis un modelo en la base de datos de modelos (MDB) para la definición del modelo

submit(...): este método una ejecución para su análisis

`waitForCompletion()`: este método interrumpe la ejecución de la subrutina hasta el final del análisis

`openOdb(...)`: este método abre un archivo de la base de datos de salida existente (.odb) y crea un objeto Odb nuevo

`delete(...)`: este método permite borrar las cargas aplicadas anteriormente

`close()`: este método cierra un objeto Mdb, pero no lo guarda en el disco. Después de cerrar el objeto Mdb, este método crea un objeto Mdb vacío nuevo sin nombre.

`Mdb(...)`: este constructor crea un objeto Mdb vacío