

APLICACIÓN DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS DISCRETOS A LA HOMOGENIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES MECÁNICAS DE MATERIALES MICROPOROSOS

Ruben G. Batista^{*}, Adrian Cisilino[†] y Ignacio Iturrioz^{*}

^{*} Grupo de Mecânica Aplicada, (GMAP), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rua Sarmento Leite 425, cidade baixa, Porto Alegre, Brasil. TE: (51) 33163529
e-mail: ruben@vortex.ufrgs.br e ignacio@mecanica.ufrgs.br

[†] División Soldadura y Fractomecánica, INTEMA
Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata – CONICET
Av. Juan B. Justo 4302 (7600) Mar del Plata, Argentina
e-mail: cisilino@fi.mdp.edu.ar

Palabras clave: Método de los elementos discretos, homogenización, caracterización de materiales.

Resumen. *En este trabajo son aplicadas las técnicas de homogenización, para determinar el elemento de volumen representativo, (EVR), de un material microporoso modelado utilizando el método de los elementos discretos, (MED). El estudio se realiza en base a la estructura de una fundición nodular austemperizada (ADI), en la que los nódulos de grafito se asimilan a huecos (poros) dada su muy baja resistencia mecánica relativa comparada con la matriz metálica (ausferrita). El criterio tomado para la determinación del EVR es la convergencia de la respuesta del material con el tamaño de la muestra. La respuesta del material se caracteriza mediante el cálculo de la densidad energía de deformación. Los analisis de convergencia son efectuados para régimen lineal y no lineal siendo que para este ultimo caso es estudiado ademas el comportamiento de la energía de fractura.*

1 INTRODUCCIÓN

La clave del éxito de muchos componentes y estructuras es el comportamiento “a medida” del material para su aplicación. Esto se logra fundamentalmente a partir de la manipulación de su microestructura. Una forma sencilla de obtener la respuesta macroscópica deseada de un material es realzando las propiedades de su matriz mediante el agregado de partículas de refuerzo o heterogeneidades, es decir, manipulando su microestructura. Dependiendo del tipo, geometría y orientación de la fase de refuerzo los materiales se clasifican en particulados, discontinuos o de fibras cortas, y continuos o de fibras largas.

Históricamente, los métodos clásicos para estimar la respuesta macroscópica de un material han tenido una fuerte base fenomenológica, lo que resulta en modelos sin capacidad predictiva. En otras palabras, estos modelos requieren de una extensa etapa experimental para “ajustar” parámetros, los que pierden a menudo su significado físico. La alternativa a los modelos fenomenológicos es el modelado numérico computacional. Este permite estudiar el problema utilizando descripciones micromecánicas sencillas con significado físico directo. Con esta nueva estrategia el peso de los aspectos fenomenológicos del problema se reducen, mientras que el peso del trabajo se transfiere a los algoritmos computacionales.

El modelado numérico directo de la respuesta mecánica de un componente o estructura de material microheterogéneo que incorpore todos los detalles de su microestructura es virtualmente imposible. Modelos de esta naturaleza requieren de discretizaciones espaciales extremadamente finas que conllevan un costo computacional que sobrepasa la capacidad de cómputo normalmente disponible. Al mismo tiempo, y si de todos modos fuese posible modelar el problema, la cantidad de información a procesar tendría tal complejidad que sería difícil extraer algún tipo de conclusión sobre el comportamiento macroscópico del material. En este sentido es importante destacar que la solución de problemas en derivadas parciales, aún para el caso de cuerpos pequeños de materiales lineales elásticos con deformaciones infinitesimales y con un número reducido de heterogeneidades es un problema abierto¹. En vista de la problemática antes mencionada, la práctica común es caracterizar el comportamiento macroscópico del material utilizando modelos regularizados. Esto lleva a resolver ecuaciones en derivadas parciales con coeficientes constantes o que varían suavemente. La forma usual de obtener estos modelos regularizados es mediante el cálculo de “relaciones entre promedios” de las distintas variables involucradas.

La relación entre promedios de las variables debe realizarse sobre una muestra representativa del material, la que es referida en la literatura como Elemento de Volumen Representativo (ERV) (ver Figura 1). Los campos internos de las distintas variables son calculados sobre la base de un análisis estadístico sobre una serie ERV sometidos a cargas de prueba. Esta metodología de regularización recibe los nombres de “homogenización”, “teoría de campos medios”, o “teoría de propiedades efectivas”². Es importante destacar que los ERV usualmente incorporan un número relativamente elevado de heterogeneidades, y en consecuencia el costo computacional de su modelado puede resultar importante. Sin embargo el esfuerzo computacional es reducido si se lo compara con la solución directa del problema.

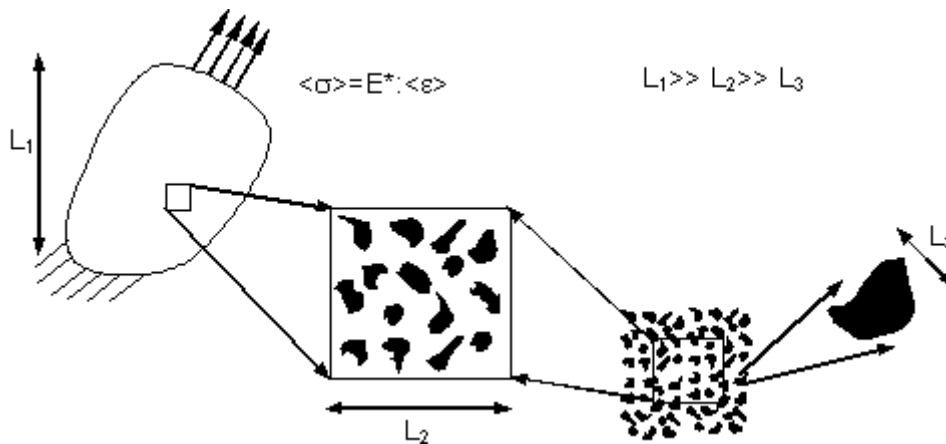


Figura 1: el uso de propiedades efectivas en la práctica ingenieril y requerimientos de tamaño sobre el elemento de volumen representativo.

El presente trabajo tiene por objetivo principal la determinación de un elemento de volumen representativo, (EVR), de un material microporoso utilizando el Método de los Elementos Discretos (DEM). El estudio se realiza sobre la base de la estructura de una fundición nodular austemperizada (ADI), en la que los nódulos de grafito se asimilan a huecos (poros) dada su muy baja resistencia mecánica relativa comparada con la matriz metálica (ausferrita). Estudios preliminares de procesos de fractura fundición nodular aplicando el MED³, demostraron el potencial de este método para este tipo de análisis. El estudio aquí presentado comprende los comportamientos lineal elástico y no lineal del material, incluyendo este último la ocurrencia de microfisuras a partir de los nódulos.

2 EL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS DISCRETOS

El método de los elementos discretos (MED) consiste en representar el continuo utilizando un arreglo de barras de rigidez equivalente al continuo que se quiere representar. Cada nodo posee tres grados de libertad, (desplazamiento en tres direcciones), las masas están ligadas por elementos normales y diagonales de longitud L_c y $\sqrt{3}L_c/2$ respectivamente. Las expresiones, en función del modulo de elasticidad y el coeficiente de poisson, para determinar la rigidez de las barras normales y diagonales del arreglo espacial pueden ser encontradas en Hayashi⁴ e Iturrioz⁵.

Las ecuaciones de movimiento resultante de la discretización espacial son desacopladas (la matriz de masa es diagonal y la de amortiguamiento es proporcional a la matriz de masa), y son integradas en el tiempo utilizando el método de las diferencias finitas centrales. De esta forma en cada paso de integración una ecuación de equilibrio del tipo de la Ec. (2) es resuelta para cada nodo:

$$m \frac{d^2 u_i}{dt^2} + c \frac{du_i}{dt} = f \quad (1)$$

donde:

- m : masa nodal;
- c : coeficiente de amortiguamiento proporcional a la masa;
- u_i : componentes de los vectores nodales respecto a los tres ejes de referencia (X_i);
- f : componentes de las fuerzas externas e internas aplicadas a través de las barras coincidentes en un nodo.

La esencia del método consiste en simular leyes de comportamiento complejas a través de una simple ley constitutiva uniaxial de cada elemento. Para simulación de fractura, Rocha⁶ (1989) propuso una ley constitutiva bilineal para las barras, como la que se ilustra en la Figura 2.

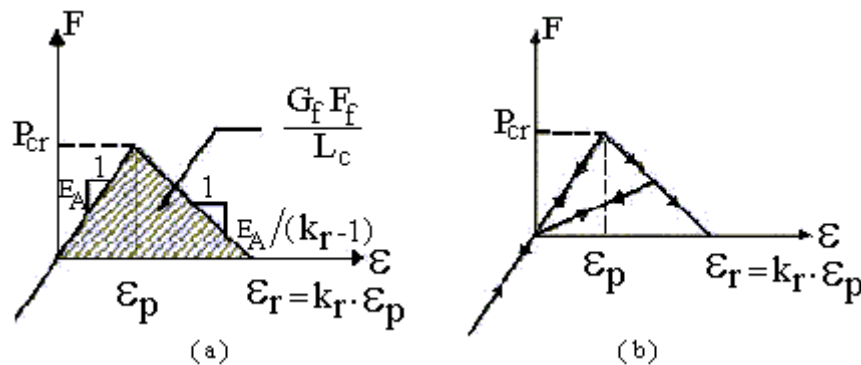


Figura 2. Ley constitutiva bilineal para cada barra del modelo: (a) parámetros de la ley constitutiva, (b) comportamiento de la barra en tracción y compresión, Rocha (1989).

La Figura 1 muestra que la ley constitutiva de cada barra depende de los parámetros G_f , la energía específica de fractura del material, A_f , el área de cada barra, y su longitud L_c . Este último parámetro permite capturar el efecto de escala del problema.

3. CARACTERIZACIÓN DE LA MICROESTRUCTURA

Se realizó un estudio estadístico de la distribución de nódulos de grafito en la microestructura del ADI, para lo cual se desarrollaron una serie de rutinas en Matlab. El estudio se realizó sobre micrografías standard para ADI con un 100% de nodularidad (es decir los nódulos se ven aproximadamente circulares en el plano) y con conteos nodulares de 60, 100, 150 y 600 nódulos por mm^2 . En primer lugar las micrografías fueron analizadas utilizando el software de procesamiento de imágenes ImagePlus, el que proporcionó la información de la posición y área de cada uno de los nódulos. Luego suponiendo a los nódulos como circulares se calcularon sus radios. A modo de ejemplo en la Figura 3 se muestra la micrografía de 150 nodulos/ mm^2 y en la Figura 4 su reconstrucción.

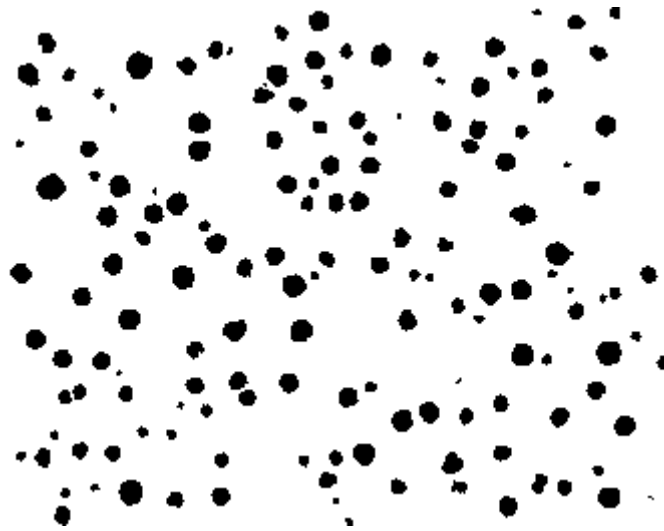


Figura 3: Muestra original (150 nódulos/mm²)

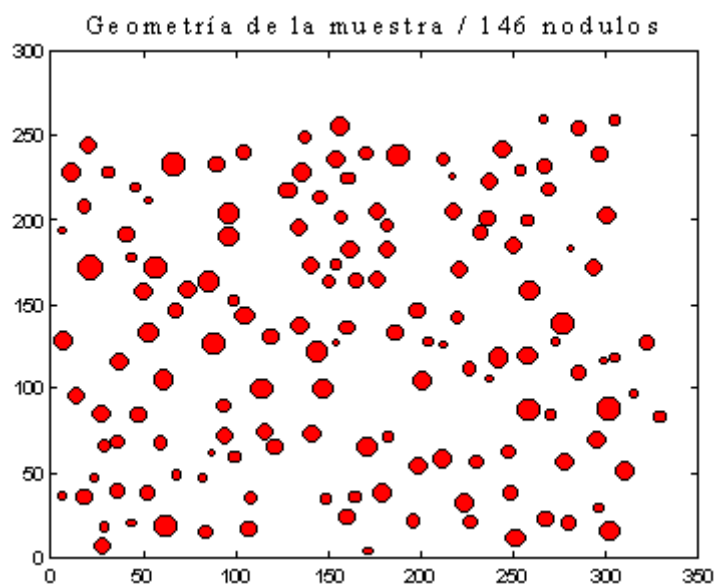


Figura 4: Geometría de la muestra reconstruida a partir del análisis de imágenes

Para caracterizar la geometría de la microestructura fueron analizados los siguientes parámetros:

- a) radio de los nódulos, r
- b) distancia de cada nódulo al nódulo más cercano, d (ver Figura 5)
- c) número de primeros vecinos de cada nódulo
- d) distancia promedio de cada nódulo a sus primeros vecinos

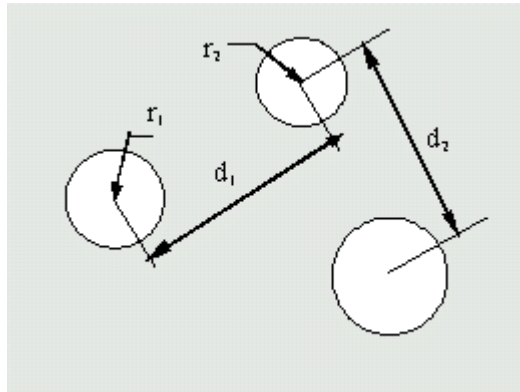


Figura 5: radio y distancia entre nódulos más cercanos

Con la información de las distancias mínimas entre los nódulos d y sus radios r se calculó para cada muestra el parámetro adimensional d/r . En la Figura 6 se muestra a modo de ejemplo los resultados obtenidos para la muestra de 150 nódulos/mm². La información se presenta en cada caso en forma de histogramas con su valor medio y desviación standard.

Para la obtención de los primeros vecinos de cada uno de los nódulos se realizó una triangulación de Delaunay de las posiciones de sus centros, y luego se contó el número de triángulos a los que pertenece cada uno de los nódulos. En la Figura 7 se muestra el gráfico de la triangulación de la muestra. Se indican con cruces azules los nodos que fueron considerados para esta etapa del estudio. Es importante notar que fueron excluidos del análisis los nodos ubicados en la periferia de la muestra, ya que el número de vecinos de estos no es representativo por no encontrarse completamente rodeados por otros nódulos. Con la información del número de primeros vecinos y las distancias de cada nódulo a estos se calculó para cada muestra el parámetro adimensional d/r .

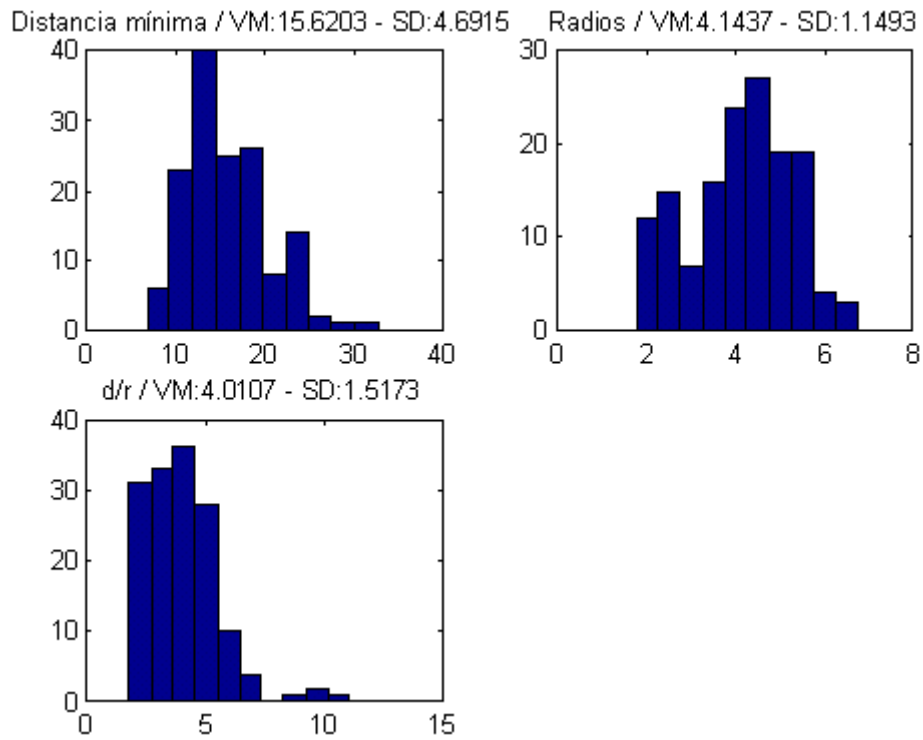


Figura 6: histogramas con las distribuciones de d , r y el parámetro d/r .

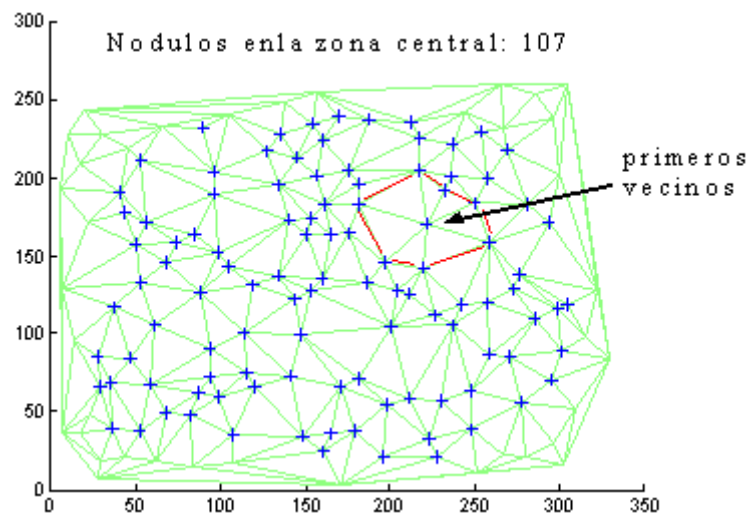


Figura 7: triangulación de las posiciones de los nódulos indicando los nódulos considerados en el análisis de primeros vecinos.

Los resultados obtenidos para todas las muestras analizadas se resumen en la Tabla 1.

Tabla 1: resultados de la caracterización geométrica de la distribución de los nódulos

Muestra		Nódulo más próximo		Primeros vecinos			
N _{area} [Nod/mm ²]	Nodularidad [%]	Promedio <i>d/r</i>		Número de vecinos		Promedio <i>d/r</i>	
		V. Medio	Desviación	V. Medio	Desviación	V. Medio	Desviación
60	100	3.78	1.33 (35%)	5.90	0.82 (14%)	5.61	2.05 (36%)
100	100	4.31	1.99 (46%)	5.85	1.05 (18%)	7.54	4.55 (60%)
150	100	4.01	1.52 (38%)	5.87	1.13 (19%)	6.72	3.39 (50%)
600	100	3.98	1.41 (35%)	5.92	1.16 (20%)	7.16	3.33 (47%)
Valores promedio		4.02	38.5%	5.89	17.8%	6.75	48.3%

Se observa que para un rango amplio de conteos nodulares (de 60 a 600 nódulos/mm²) los parámetros *d/r* para el vecino más próximo y a los primeros vecinos presentan valores promedio de 4 y 6.75. El número de vecinos se mantiene casi constante e igual a 5.89. Estos resultados permiten concluir que la disposición geométrica de los nódulos es casi independiente del conteo nodular de la muestra. Sobre la base de esta información las distribuciones de nódulos para los modelos analizados fueron generadas en forma automática, y con el radio de los nódulos como parámetro.

4. DETERMINACIÓN DEL ELEMENTO DE VOLUMEN REPRESENTATIVO

Explícitamente, para determinar las propiedades del material microheterogéneo, debe calcularse la siguiente relación entre promedios sobre el volumen de la muestra Ω :

$$\langle \sigma \rangle_{\Omega} = E^* \langle \varepsilon \rangle_{\Omega} \quad (2)$$

donde σ y ε son los tensores de tensiones y deformaciones, y E^* es la matriz con las constantes elásticas del material. La muestra con estas propiedades es el elemento de volumen representativo ERV, el que debe ser suficientemente pequeño para ser considerado como un punto material del dominio problema bajo análisis, pero lo suficientemente grande para contener una muestra estadísticamente representativa de la microestructura. Si la respuesta efectiva del material se asume isotrópica, un solo caso de carga de prueba (en lugar de los usuales seis asociados a las componentes representativas a los tensores de tensiones y deformaciones), conteniendo componentes esféricas y desviadoras no nulas es suficiente para caracterizar la respuesta del material⁷.

Las dos condiciones de carga más sencillas que pueden ser utilizadas para este análisis son las que responden a los teoremas de la deformación media y de la tensión media. En el primero de los casos la muestra es sometida a un campo de deformaciones constante, mientras que

para el segundo se aplican tracciones constantes en su contorno. De estas dos opciones se seleccionó para este trabajo la segunda, ya que la misma es válida cuando se forman fisuras o agujeros en el material.

En la Figura 8 se ilustra uno de los modelos utilizados para la determinación del ERV con tracciones en su contorno, (modelo de cinco nodulos). Todos los modelos fueron considerados en estado plano de tensiones. Los elementos en las posiciones de los nódulos son indicados en rojo. A estos elementos le fueron asignadas una resistencia mecánica reducida, lo que permite que sean asimilados a agujeros. Al mismo tiempo a los elementos utilizados en la discretización de la matriz le fueron asignados un módulo de elasticidad de 182000 MPa, un coeficiente de poisson de 0,25, una tensión de fluencia de 320 MPa, una tensión de colapso de 470 MPa, una reducción de área de 13 % y un factor de intensidad de tensión de $39 \text{ MPa m}^{-1/2}$.

La representación correcta del diámetro de los nódulos es fuertemente dependiente del número de elementos utilizados en su discretización. Un estudio de convergencia en este sentido permitió concluir que la utilización de nueve elementos en la dirección del radio del nódulo es suficiente para representar su geometría con un error en el área de aproximadamente 0,5 %.

El proceso para determinar el ERV consiste en analizar muestras de la microestructura del material con distinto número de microheterogeneidades (nódulos en nuestro caso) y observar su comportamiento. En este trabajo el comportamiento del material se caracterizó evaluando la densidad de energía de deformación. El tamaño del ERV estará dado para la muestra conteniendo el mínimo número de partículas para el que la respuesta del material se mantenga constante.

En este trabajo fueron analizadas siete tamaños de muestra conteniendo 2, 5, 10, 20, 40, 60 70 y 80 nódulos. Para cada uno de estos casos fueron a su vez analizados 5 geometrías distintas y evaluada la dispersión de los resultados (densidad de energía) en cada caso. El estudio fue realizado considerando dos comportamientos del material, lineal elástico y no-lineal, incluyendo este último la ocurrencia de microfisuras a partir de los nódulos.

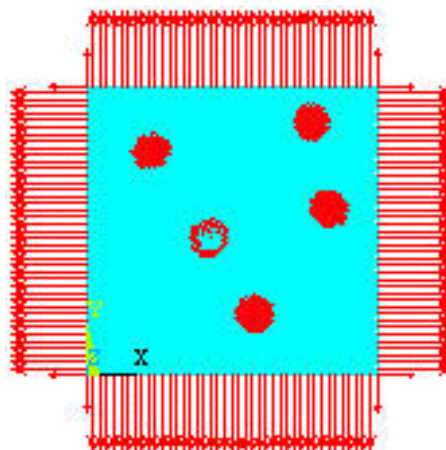


Figura 8: modelo típico de DEM utilizado en este estudio.

5 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La Figura 9 ilustra los resultados obtenidos para el estudio realizado en régimen lineal elástico. Puede observarse la convergencia de la respuesta del material (El parámetro utilizado en este caso fué la densidad de energía de deformación U/v) con el incremento del número de nódulos. Al mismo tiempo se nota la disminución en la dispersión de los resultados, los que se indican por medio de barras de error en el gráfico. Estos resultados permiten afirmar que en régimen lineal elástico una muestra con 40 nódulos constituye una muestra representativa de la microestructura, y que por lo tanto su comportamiento macroscópico resulta representativo.

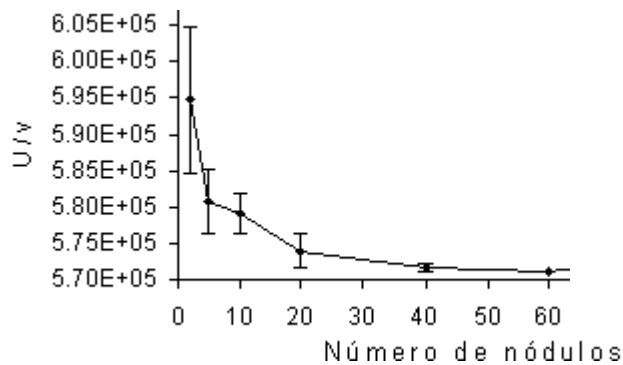


Figura 9. Comportamiento de la densidad de energía de deformación U/v en función del número de nódulos en la muestra, régimen lineal.

La Figura 10 ilustra la evolución del daño (sectores en color naranja) en una de las muestras para el análisis no lineal. El comportamiento de la densidad de energía de deformación con el número de nódulos se representa en la Figura 11. En la misma esta graficado el valor medio máximo de la densidad de energía de deformación elástica para cada caso analizado. Se observa un comportamiento similar al obtenido para régimen lineal con el incremento del número de nodulos en la muestra. Las dispersión de los resultados, a pesar de disminuir con el aumento del número de nódulos, presentan rangos mayores a los obtenidos en el régimen elástico. Este resultado indica que para el caso de régimen no lineal es necesario analizar un número mayor de muestras para conseguir valores medios más consistentes.

Por su parte, el comportamiento de la densidad de energía de fractura, (U_f/v), con el incremento del número de nodulos para régimen no lineal se presenta en la Figura 12. Puede observarse que existe tendencia a la estabilidad con el aumento del número de nodulos, sin embargo, para este caso no puede hablarse de convergencia los tamaños de muestra analizados.

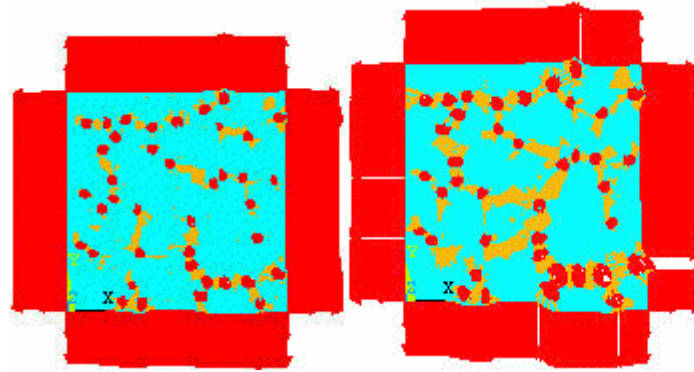


Figura 10. Evolución del daño (sectores en color naranja) en una de las muestras para el análisis no lineal.

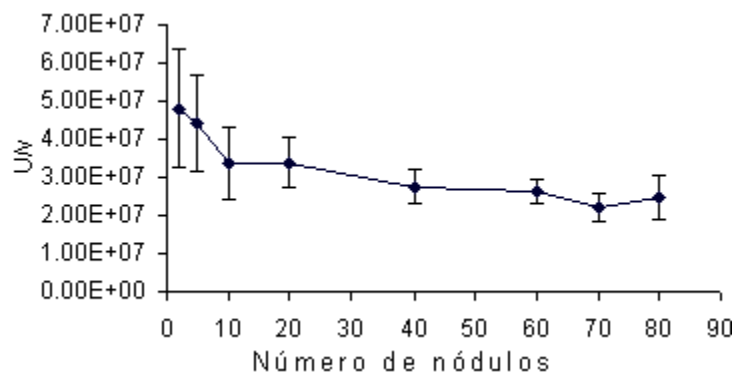


Figura 11. Comportamiento de la densidad de energía de fractura (U/v) con el incremento del número de nodulos de la muestra, régimen no lineal.

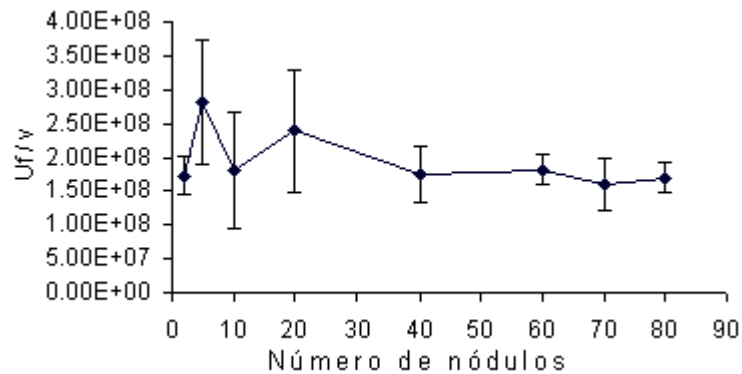


Figura 12. Comportamiento de la densidad de energía de fractura (Uf/v) con el incremento del número de nodulos en el modelo, régimen no lineal.

6. Conclusiones

Se presentó en este trabajo aplicación del Método de los Elementos Discretos (DEM) a la homogenización de las propiedades mecánicas de materiales microporosos. El estudio se realizó sobre la base de la estructura de la fundición nodular austemperizada (ADI), en la que los nódulos de grafito fueron asimilados a huecos dada su reducida resistencia mecánica cuando se los compara con la matriz metálica.

El DEM resultó efectivo para modelar la para modelar el comportamiento lineal y no lineal del material. En este último caso los modelos de DEM reprodujeron el fenómeno de microfisurado a partir de los nódulos.

Los resultados del estudio arrojan las siguientes conclusiones:

- en el régimen lineal elástico la metodología de homogenización utilizada indica que una muestra de 60 nódulos resulta representativa del comportamiento macroscópico del material;
- en el régimen no lineal, el tamaño de la EVR debe ser mayor que en el caso elástico. Al mismo tiempo se encuentra necesario aumentar el número de muestras analizadas ya que la dispersión de los resultados resulta mayor que en el caso elástico.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo fue realizado con el apoyo de CAPES, entidad del Gobierno Brasileño dirigida a la formación de recursos humanos, y la SETCIP de la República Argentina en el marco del convenio institucional CAPES/SETCIP 48/03 “Modelado Numérico de los Micromecanismos de Falla de Materiales Compuestos”.

REFERENCIAS

- [1] Zohdi T.I., *Advanced School on Computational Micromechanics of Materials Science, Course Notes*, International Centre for Mechanical Sciences, Udine, Italia, 2002.
- [2] Nemat-Nasser S., y Hori M., *Micromechanics: overall properties of heterogeneous solids*, 2nd Edition, Elsevier, Amsterdam, 1999.
- [3] A.Cisilino, I. Iturrioz y J.Ortiz, *Modelado de los Mecanismos de Interacción y Coalescencia de Microfisuras en ADI Utilizando los Métodos de los Elementos de Contorno y de los Elementos Discretos*, First South-American Congress on Computational Mechanics, Mecom2002, Santa Fe-Paraná, Octubre 2002.
- [4] Hayashi, N.,1982, *Sobre um Modelo de discretização de estruturas tridimensionais aplicado a dinâmica não linear*.Tese M Sc., CPGEC, Universidade Federal de Rio Grande do Sul, Porto Alegre
- [5] Iturrioz I., 1995, *Aplicação do método dos elementos discretos ao estudo de estruturas laminares de concreto armado*. Tese de Doutorado, CPGEC, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pp. 157.
- [6] Rocha, M.M., 1989, *Ruptura e efeitos de escala em materiais não homogêneos*, *Dissertação de Mestrado*, CPGEC, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto

Alegre, Brazil.

[7] Malvern, L. *Introduction to the mechanics of a continuous médium*, Prentice Hall, 1968.